

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2025

Cifra proiectului 25.80013.7007.39ROMD

Denumirea Proiectului Materiale compozite cu proprietăți ajustabile având aplicații în fotocataliză și supercapacitori (MatPhotSCs)

Rezumat în limba română pentru anul 2025 1 pagină

În anul 2025, activitățile realizate în cadrul proiectului au vizat dezvoltarea structurilor carbonice avansate și modelarea computațională a suprafețelor de cărbune activ, reprezentând o etapă esențială în direcția obținerii nanocompozitelor cu proprietăți funcționale pentru aplicații catalitice și electrochimice.

A fost colectată o cantitate suficientă de materie primă vegetală (sâmburi de piersici), materia primă fiind caracterizată prin compoziție lignocelulozică tipică (hemiceluloză 20–28%, celuloză 22–30%, lignină 0,2–1,0%). Analiza termică a permis descrierea etapelor de piroliză și stabilirea comportamentului termic necesar modelării proceselor de carbonizare și activare. Pe baza datelor termoanalitice, au fost determinate etapele de degradare: hemiceluloza (180–320 °C), celuloza (300–400 °C) și lignina (200–500 °C), precum și formarea scheletului carbonic în intervalul 500–1000 °C. Au fost stabilite condițiile optime de carbonizare, obținându-se un randament de aproximativ 40% pentru mangalul din sâmburi de piersici. Ulterior, au fost determinate condițiile optime de activare a mangalului prin două metode: (1) activare cu vapori de apă în strat fluidizat (cuptor/reactor vertical) — condiții optime: 1000 °C, 30 minute; (2) activare clasică cu vapori de apă (cuptor/reactor orizontal) — condiții optime: 950 °C, 1 oră.

Cărbunii activi astfel obținuți au fost ulterior supuși primelor analize morfo-structurale prin FTIR, XRD și SEM-EDX, vizând identificarea grupelor funcționale, caracteristicilor structurale și distribuției elementare. În paralel, au fost inițiate primele încercări de decorare a structurilor carbonice cu nanotuburi de TiO₂, în vederea obținerii unor compozite hibride cu potențial fotocatalitic și electrochimic. Caracterizarea morfo-structurală și optică a nanocompozitelor este în desfășurare, iar selecția materialelor promițătoare continuă.

Pe direcția teoretică, a fost inițiat studiul computațional al suprafețelor de cărbune activ, utilizând metode semiempirice (PM6) și DFT (B3LYP) pentru optimizarea configurațiilor atomice și evaluarea stabilității energetice a suprafețelor funcționalizate (CA-OH, CA-CHO, CA-COOH). Modelele obținute constituie baza pentru studiul viitor al proceselor de adsorbție la nivel molecular.

Activitățile realizate în 2025 au asigurat fundamentul experimental și teoretic necesar pentru dezvoltarea materialelor compozite avansate și pentru continuarea cercetărilor în etapele următoare ale proiectului.

In 2025, the activities carried out within the project focused on the development of advanced carbon structures and the computational modeling of activated carbon surfaces, representing a key stage toward obtaining nanocomposites with functional properties for catalytic and electrochemical applications.

A sufficient amount of vegetal raw material (peach pits) was collected, the material being characterized by a typical lignocellulosic composition (hemicellulose 20–28%, cellulose 22–30%, lignin 0.2–1.0%). Thermal analysis enabled the description of the pyrolysis stages and the identification of the thermal behavior required to model the carbonization and activation processes. Based on thermoanalytical data, the degradation stages were determined: hemicellulose (180–320 °C), cellulose (300–400 °C), and lignin (200–500 °C), as well as the formation of the carbon framework in the 500–1000 °C interval. Optimal carbonization conditions were established, yielding approximately 40% char from peach pits. Subsequently, the optimal conditions for char activation were determined using two methods: (1) steam activation in a fluidized bed (vertical furnace/reactor) — optimal conditions: 1000 °C for 30 minutes; and (2) classical steam activation (horizontal furnace/reactor) — optimal conditions: 950 °C for 1 hour.

The activated carbons obtained were subjected to initial morpho-structural analyses using FTIR, XRD, and SEM-EDX to identify functional groups, structural characteristics, and elemental distribution. In parallel, preliminary attempts were initiated to decorate the carbon structures with TiO₂ nanotubes, aiming to obtain hybrid composites with potential photocatalytic and electrochemical applications. The morpho-structural and optical characterization of the nanocomposites is ongoing, and the selection of the most promising materials continues.

On the theoretical side, computational modeling of activated carbon surfaces was initiated using semiempirical (PM6) and DFT (B3LYP) methods to optimize atomic configurations and evaluate the energetic stability of functionalized surfaces (CA-OH, CA-CHO, CA-COOH). The resulting models provide the basis for future studies on adsorption mechanisms at the molecular level.

The activities carried out in 2025 have established the experimental and theoretical foundations necessary for the development of advanced composite materials and for the continuation of research in the subsequent stages of the project.



Conducătorul proiectului

Nastas

/ dr., conf. cerc. Raisa NASTAS

Data:

08.12.2025

ES