



HABILITATION THESIS

**Processes and materials in electrochemical
energy systems**

Assoc. Prof. Dr. Andrea Kellenberger

**Politehnica University Timisoara
Faculty of Industrial Chemistry and Environmental Engineering**

2017

Rezumat

Teza de abilitare intitulată „Procese și materiale în sisteme electrochimice de energie” reprezintă sinteza activităților de cercetare desfășurate de candidată după obținerea titlului științific de Doctor în Inginerie Chimică, în anul 2004. Principala tematică de cercetare o reprezintă electrocataliza reacției de degajare a hidrogenului și sinteza electrochimică a polimerilor conductori și studiul mecanismului de transport de sarcină în filmele de polimeri conductori.

Teza este structurată pe două părți, în prima parte fiind prezentate principalele realizări științifice, profesionale și academice, iar în partea a doua fiind prezentate planurile de evoluție și dezvoltare ulterioară a carierei de cercetare și universitare.

Partea I este împărțită în două secțiuni, dintre care **Secțiunea I** prezintă principalele realizări științifice în domeniile de cercetare abordate, bazate pe rezultatele originale publicate în cele 14 lucrări ISI selectate, iar Secțiunea II prezintă principalele realizări profesionale și academice în perioada 2004 – prezent. Acestea includ publicarea a 25 de articole în reviste indexate ISI (*h*-index 11) și 2 cărți, 1 brevet de invenție, 3 proiecte de cercetare în calitate de director, participarea ca membru în echipa de cercetare la 10 proiecte, dintre care unul internațional, respectiv ca membru în grupul țintă în 3 proiecte POSDRU. **Secțiunea II** prezintă succint principalele realizări profesionale și academice după obținerea titlului de doctor. Evoluția profesională a implicat avansarea din poziția de asistent pe poziția de șef de lucrări în anul 2005 respectiv conferențiar în anul 2008. Din această poziție am câștigat două granturi pentru dotarea și modernizarea laboratoarelor de Electrochimie și Chimie generală. De asemenea, am fost implicată în 3 proiecte POSDRU: Elaborarea și implementarea programelor de master în domeniul micro- și nanomaterialelor (MASTERMAT), Creșterea atractivității și performanței programelor de formare doctorală și post-doctorală pentru cercetători în științe inginerești (ATTRACTING) și Școala doctorală în sprijinul cercetării în context european, dintre care ultimul proiect a fost în mod special dedicat cadrelor didactice și cercetătorilor potențiali conducători de doctorat și care a contribuit la formarea mea ca viitor conducător de doctorat prin implicarea activă în coordonarea unui student doctorand.

Principalele realizări științifice sînt prezentate sub forma a 3 capitole corespunzătoare direcțiilor de cercetare abordate, și anume Contribuții la electrocataliza reacției de degajare a hidrogenului, Contribuții la sinteza electrochimică a polianilinei nanostructurate, respectiv Contribuții la studiul mecanismului de transport de sarcină în polimeri conductori.

Capitolul 1 prezintă o continuare a cercetărilor întreprinse în cadrul tezei de doctorat, fiind una din direcțiile de cercetare inițiate în Laboratorul de electrochimie, Coroziune

și Industriei electrochimice, care a dus la elaborarea a două teze de doctorat și publicarea a 4 articole în reviste cotate ISI, la care candidata este co-autor. Cercetările efectuate au avut drept scop accelerarea reacției de degajare a hidrogenului prin utilizarea unor electrocatalizatori sub formă de adaosuri în soluție. Acești catalizatori, denumiți și vectori de protoni, au capacitatea de a crește concentrația protonilor în dublul strat electric de la interfața metal-soluție prin transportul protonilor din masa soluției la interfață. Rezultatele obținute au demonstrat că efectul catalitic al vectorilor de protoni se manifestă atât în cazul materialelor de electrod pe care suprapotențialul de degajare al hidrogenului este crescut, cum ar fi cupru, dar, cu mult mai important din punct de vedere practic, chiar și în cazul metalelor pe care suprapotențialul de degajare a hidrogenului este scăzut, și anume aur și platină. Drept vectori de protoni au fost alese diverse amine aromatice sau alifaticе, având în vedere că abilitatea de a transporta protoni este dată de perechea de electroni neparticipanți ai azotului. Rezultatele obținute au arătat că efectul catalitic al aminelor asupra reacției de degajare a hidrogenului poate fi explicat pe baza parametrilor moleculari obținuți prin modelare, cei mai importanți fiind momentul dipol și suprafața de acoperire. Astfel, efectul catalitic cel mai pronunțat a fost obținut în cazul aminelor cu o suprafață de acoperire cât mai redusă, ceea ce echivalează cu un număr mai mare de molecule prezente la interfață, deci o concentrație crescută de protoni, respectiv pentru un moment dipol cât mai ridicat, care indică o orientare favorabilă a moleculelor la interfață, și anume cu atomul de azot și protonul atașat orientate înspre metal, poziție în care transferul de sarcină este mult facilitat.

Capitolul 2 descrie una din direcțiile de cercetare inițiate de candidată în colaborare cu Institutul de Chimie Timișoara la Academiei Române, care a dus la elaborarea unei teze de doctorat și 5 articole în reviste cotate ISI la care candidata este autor principal sau co-autor, o parte a rezultatelor fiind obținute în cadrul unui proiect de cercetare de tip Parteneriate, coordonat de către candidată în calitate de responsabil partener. Cercetările efectuate au urmărit influența condițiilor de lucru asupra sintezei electrochimice a nanofirelor de polianilină, și anume influența concentrației de acid și a raportului molar monomer/acid, precum și influența vitezei de scanare, a temperaturii și a substratului. Rezultatele obținute au demonstrat că nanofirele de polianilină pot fi obținute prin metode electrochimice de sinteză, pe diferite materiale de electrod, în condiții de lucru specifice fiecărui substrat. S-a constatat de asemenea, că valorile capacității, care indică abilitatea filmelor de polianilină de a stoca sarcini electrice, sînt mult mai ridicate în cazul filmelor cu o structură nanofibrilară comparativ cu cele cu structură granulară. De asemenea, s-a demonstrat posibilitatea utilizării filmelor de polimeri conductori în diverse aplicații, cum ar fi dezvoltarea unor biosenzori pentru dopamină, respectiv pentru adsorbția unor poluanți de tipul coloranților azoici.

Capitolul 3 face referire la rezultatele obținute în colaborare cu Centrul de Spectroelectrochimie al Institutului de cercetare a stării solide și materialelor din Dresda, Germania, de-a lungul a 5 stajii de cercetare post-doctorală și care fac obiectul a 5 lucrări publicate în reviste indexate ISI la care candidata este autor principal sau co-autor. Cercetările efectuate au urmărit studiul mecanismului de transport de sarcină în polimeri conductori de tipul polianilinei și politiofenului. În acest scop au fost utilizate metode spectroelectrochimice *in situ*, care permit înregistrarea simultană a spectrelor în timpul unei voltamograme ciclice, ceea ce echivalează cu obținerea în timp real a spectrelor pentru diverși intermediari rezultați în timpul oxidării electrochimice a polimerilor conductori. Aplicarea combinată a mai multor astfel de tehnici, cum sînt spectroscopia în infraroșu, spectroscopia de rezonanță electronică de spin, respectiv spectroscopia în ultraviolet și vizibil permite diferențierea speciilor paramagnetice și diamagnetice și atribuirea univocă a benzilor de adsorbție diverșilor purtători de sarcină ce pot fi polaroni, bipolaroni sau perechi de polaroni. Rezultatele obținute au demonstrat că în cazul polianilinei nucleele de tip fenazină joacă un rol important în formarea și stabilizarea purtătorilor de sarcină. În cazul derivaților substituiți ai politiofenului a fost pusă în evidență existența simultană a polaronilor și perechilor de polaroni, respectiv a bipolaronilor și perechilor de polaroni în funcție de creșterea gradului de oxidare/dopare.

Partea a II-a a tezei de abilitare cuprinde planurile pentru evoluția și dezvoltarea carierei. Sînt prezentate principalele direcții viitoare de cercetare, ca o continuare a direcțiilor actuale. Astfel, ca urmare a cercetărilor și expertizei în electrocataliza reacției de degajare a hidrogenului, grupul nostru de cercetare este partener într-o propunere HORIZON 2020 depusă în 2017: *Novel modular stack design for high pressure PEM water electrolyzer technology with wide operation range and reduced cost – PRETZEL*. Tendințele de viitor abordate în munca de cercetare vor fi concentrate în principal pe: (i) dezvoltarea de noi materiale electrocatalitice pentru reacția de degajare a hidrogenului; (ii) dezvoltarea de noi biosenzori folosind materiale pe bază de carbon cum ar fi polimerii conductori și nanotuburile de carbon și (iii) dezvoltarea de supercapacitori pentru stocarea energiei electrochimice utilizând polimeri conductori.