Fundamental Field: Chemical Engineering, Medical Engineering, Materials Science, And Nanotechnology

HABILITATION THESIS

Advanced Nanomaterials: Engineering, Surface Functionalization, and Applications in Environmental, Biomedical Fields

Candidate
Lecturer Narcisa Vrinceanu, PhD
2025

Rezumat

Teza de abilitare intitulată "Nanomateriale avansate: ingineria, functionalizarea suprafetei si aplicatii in domeniul mediului si biomedical"/ "Advanced Nanomaterials: Engineering, Surface Functionalization, and Applications in Environmental, Biomedical Fields" prezintă evoluția coerentă a activității științifice și profesionale desfășurate de-a lungul a peste două decenii de cercetare, evidențiind contribuții originale în ingineria chimică, știința materialelor, nanotehnologie, textile funcționale și aplicații biomedicale. Lucrarea reflectă un parcurs complex, și structurat în care fiecare etapă de cercetare a consolidat competențe esențiale pentru dezvoltarea materialelor avansate cu funcționalități orientate spre protecția mediului, sănătate și industrie.

1. Evoluția cercetării (2001–2025): de la stabilizarea suporturilor celulozice la nanomateriale avansate

Activitatea de cercetare începe în perioada **2001–2009**, în cadrul studiilor doctorale, cu focus pe stabilizarea chimică a materialelor celulozice supuse degradării naturale. Această etapă a inclus investigarea mecanismelor de degradare, dezvoltarea de tratamente chimice inovative și evaluarea eficienței metodelor neconvenționale de pretratare. Rezultatele au constituit fundamentul expertizei ulterioare în **modificarea suprafețelor, stabilitatea materialelor și ingineria interfețelor**.

Perioada **2010–2013**, corespunzătoare stagiului postdoctoral, marchează diversificarea și aprofundarea direcțiilor de cercetare, structurată în patru axe majore:

(A) Nanomateriale pentru siguranță farmaceutică și protecția mediului

Această direcție a vizat dezvoltarea de catalizatori nano-structurați pentru:

- degradarea fotocatalitică a poluanților farmaceutici,
- modelarea stabilității și degradării medicamentelor supuse iradierii,
- obținerea de materiale fotocatalitice pentru aplicații nucleare,
- sinteza nanocompozitelor pentru remedierea efluenților radioactivi.

Prin aceste contribuții, cercetarea a abordat direct provocările legate de poluarea emergentă, comportamentul compușilor activi în mediu și găsirea unor soluții eficiente pentru decontaminarea apei.

(B) Nanomateriale funcționale pentru eliberare controlată

Au fost proiectate și testate:

- sisteme de eliberare controlată pe bază de silice mezoporoasă,
- nanotransportori analizați prin corelarea morfologiei cu stabilitatea terapeutică.

Aceste rezultate au stabilit baza pentru cercetări ulterioare în biomateriale, contribuind la optimizarea sistemelor avansate de transport medicamentos.

(C) Textile inteligente și funcționalitate prin nanotehnologie

Cercetarea a abordat dezvoltarea textilelor avansate prin:

- aplicarea nanoparticulelor de ZnO pentru protecție termică și efecte antimicrobiene,
- obținerea de textile compozite cu proprietăți adsorbtive,
- ingineria suprafeței pentru conferirea hidrofobicității și confortului,
- funcționalizarea țesăturilor cu biopolimeri și tratamente cu plasmă.

Acest domeniu a consolidat expertiza în **proprietăți textile avansate, nano-acoperiri durabile și design de suprafețe funcționale**.

(D) Materiale nanoporoase biocompatibile

Au fost dezvoltate structuri poroase dopate cu nano-oxizi bioactivi (silice, argint, ZnO) pentru:

- eliberare controlată de substanțe active,
- acoperiri antibacteriene,
- suporturi pentru regenerare tisulară.

Această direcție este esențială pentru cercetările ulterioare în **hidrogeluri, biomateriale hibride și sisteme terapeutice**.

În perioada **2013–2020**, în calitate de lector, cercetarea se concentrează pe nanomateriale aplicate în textile inteligente, bioremediere și degradarea compușilor toxici, cu accent pe transferul tehnologic și aplicabilitatea industrială. Această etapă marchează consolidarea rolului didactic și științific, prin extinderea colaborărilor și prin publicarea unor rezultate cu relevanță practică.

În perioada **2020–2025**, direcțiile de cercetare se diversifică prin integrarea nanofluidelor și modelării matematice:

- dezvoltarea de nanofluide pentru aplicații biomedicale,
- modelarea curgerii nanofluidelor și optimizarea transferului de căldură,
- aplicarea conceptelor moderne de bioinginerie și bioremediere.

Această etapă marchează maturizarea unui profil interdisciplinar complet, în care nanomaterialele, procesele fizico-chimice și modelele predictive sunt integrate într-o abordare holistică.

2. Context științific și motivație. Provocări moderne și rolul nanomaterialelor

Teza analizează impactul poluării emergente, al contaminanților farmaceutici și al limitărilor tehnologiilor convenționale de epurare, reliefând necesitatea unor materiale avansate capabile să răspundă acestor provocări. Prin proprietățile lor unice — suprafață mare, reactivitate controlată, capacitate de ficționalizate — nanomaterialele oferă soluții eficiente pentru probleme complexe de mediu, textile și biomedicale.

Prezenta lucrare accentuează contribuțiile științifice, profesionale și academice ale candidatei în perioada recentă, evidențiind un portofoliu solid și coerent de cercetare în domeniile ingineriei chimice, nanomaterialelor avansate, protecției mediului, textilelor funcționale și biomedicinei. Se reflecta o viziune interdisciplinară, unde concepte fundamentale din știința materialelor, chimie, inginerie, fizică și bioinginerie sunt integrate pentru a genera soluții inovative pentru provocări contemporane majore, cu identificarea de soluții alternative viabile.

Motivația tezei derivă din necesitatea dezvoltării unor materiale avansate, cu performanțe ridicate și funcționalități multiple, adaptate nevoilor actuale ale societății: reducerea poluării mediului, tratarea contaminanților emergenți, producerea textilelor inteligente, îmbunătățirea terapiilor biomedicale și modelarea proceselor fizico-chimice complexe. Teza este structurată astfel încât să evidențieze atât contribuțiile originale ale candidatei, cât și coerența tematică a cercetărilor sale, care converg spre o direcție clară: proiectarea și funcționali zarea materialelor la scară nano pentru aplicații avansate.

Nanomaterialele sunt prezentate ca o clasă de materiale cu proprietăți remarcabile — activitate catalitică ridicată, suprafață specifică mare, reactivitate controlată, posibilitatea funcționali zării — care le face ideale pentru procese precum fotodegradarea, adsorbția, sau filtrarea avansată, sau imobilizarea unor compuși activi. Teza subliniază modul în care ingineria suprafeței și structura nanomaterialelor pot fi adaptate pentru a reduce concentrațiile compușilor farmaceutici și pentru a îmbunătăți siguranța mediului.

3. Nanomateriale pentru remedierea mediului și siguranța farmaceutică

Un nucleu important al tezei îl constituie cercetările dedicate **fotocatalizei avansate**. Sunt detaliate proiectarea și caracterizarea unor catalizatori nano-structurați utilizați în degradarea compușilor farmaceutici. Au fost analizate procesele de stabilitate și mecanismele de degradare pentru diverse medicamente expuse la radiații UV sau vizibile, cu scopul de a identifica rutele de descompunere, produșii intermediari și eficiența proceselor avansate de oxidare. Abordarea este deosebit de relevantă, având în vedere necesitatea unor tehnologii fiabile pentru infrastructura de tratare a apelor uzate.

Un alt domeniu investigat îl reprezintă materialele destinate **remedierii efluenților radioactivi**. Nanocompozitele proiectate au demonstrat capacitatea de imobilizare a ionilor radioactivi prin mecanisme de adsorbție, schimb ionic sau precipitare, oferind alternative viabile pentru managementul deșeurilor nucleare cu activitate scăzută. Această secțiune evidențiază contribuții teoretice și experimentale importante, inclusiv corelarea parametrilor de sinteză cu morfologia, stabilitatea și performanța materialelor obținute.

4. Nanomateriale pentru eliberare controlată de medicamente

Teza explorează și domeniul biomedical prin dezvoltarea sistemelor de **eliberare controlată bazate pe silice mezoporoasă** și alți purtători nano-structurați. Sunt discutate aspecte privind

capacitatea de încărcare, stabilitatea termică și structurală, mecanismele de difuzie și influența funcționalizării asupra profilului de eliberare. Aceste sisteme prezintă un potențial ridicat pentru administrarea controlată a substanțelor active, în special în tratarea infecțiilor sau a afecțiunilor cronice.

Un subiect de interes central îl reprezintă corelația dintre **morfologia nanotransportorilor** (mărime, porozitate, distribuție granulometrică) și stabilitatea lor fizico-chimică. Aceste informații sunt esențiale pentru proiectarea sistemelor avansate de transport medicamentos, capabile să mențină potența și biodisponibilitatea substanțelor active.

5. Textile funcționale și nanomateriale inteligente

O contribuție semnificativă a candidatei se regăsește în domeniul **textilelor funcționalizate**, unde nanomaterialele sunt utilizate pentru a conferi proprietăți superioare materialelor textile convenționale. Sunt prezentate studii privind aplicarea nanoparticulelor de ZnO pe suporturi textile, evidențiind dublul rol al acestora: protecție termică și ficționalizare antimicrobiană. Teza analizează detaliat procesele de depunere, stabilitatea filmelor nano-structurate, comportamentul termic și rezistența la radiație UV.

Au fost investigate, de asemenea, textilele compozite cu proprietăți adsorbtive și comportamentul lor în condiții reale de utilizare. Prin ingineria suprafeței, materialele textile au fost transformate în componente active pentru confort, protecție și sustenabilitate.

O contribuție originală o constituie studiile dedicate **hidrofobizării textilelor** prin tratamente cu plasmă și agenți hibrizi, demonstrând cum modificările la nivel molecular pot îmbunătăți semnificativ permeabilitatea la aer, respingerea apei și confortul purtătorului.

6. Materiale hibride și biopolimerice pentru aplicații biomedicale și textile

Lucrarea include și dezvoltarea unor **hidrogeluri antimicrobiene** pe bază de PVA/agar încărcate cu uleiuri esențiale, destinate aplicațiilor biomedicale. Acestea au fost analizate din punct de vedere al proprietăților fizice (reologie, porozitate, umflare), al stabilității, cât și al activității antimicrobiene testate prin metode standardizate (Kirby–Bauer, time-kill). Rezultatele demonstrează fezabilitatea utilizării acestor materiale în tratamente terapeutice, pansamente sau dispozitive de eliberare controlată.

În plus, sunt prezentate **microcapsule biopolimerice depuse pe țesături din bambus**, activate prin tratament cu plasmă atmosferică, cu aplicabilitate în textile parfumate, antimicrobiene sau terapeutice. Această abordare combină sustenabilitatea materialelor naturale cu performanța nanostructurilor chimice.

Tot în această secțiune sunt incluse studii de **modelare predictivă** pentru optimizarea nano-straturilor aplicate pe suporturi polimerice. Modelele matematice elaborate permit anticiparea performanțelor materialelor și reduc numărul de experimente necesare.

8. Modelare matematică în ingineria chimică și știința materialelor

O dimensiune complementară și inovativă a tezei o constituie dezvoltarea de modele matematice aplicate în ingineria chimică, bioinginerie și nanofluide. Sunt analizate:

- comportamentul reologic al **fluidului sinovial**, prin modele avansate care simulează comportamentul fluidelor non-Newtoniene relevante pentru biomecanică și ortopedie;
- **modelarea curgerii nanofluidelor**, cu aplicații în bio-termică, transfer de căldură, chimie și micro-sisteme.

Această abordare demonstrează capacitatea candidatei de a integra instrumente computaționale și analitice în cercetarea experimentală, consolidând caracterul interdisciplinar al lucrărilor.

9. Integrarea contribuțiilor științifice și direcții viitoare

Sintetizând perioada 2021–2025, teza demonstrează evoluția coerentă a unei cariere dedicate nanomaterialelor și aplicațiilor lor multidisciplinare. Activitatea științifică include articole în reviste

Q1–Q2, colaborări internaționale, participări la proiecte de cercetare și rezultate aplicabile în industrie, medicină și protecția mediului.

Direcțiile viitoare de cercetare propuse includ:

- dezvoltarea de **nanotehnologii pentru purificarea aerului și apei**,
- platforme de **livrare țintită a medicamentelor pe bază de biopolimeri**,
- îmbunătățirea modelelor de curgere pentru **nanofluide avansate**,
- extinderea colaborărilor internaționale și crearea unei **echipe de cercetare doctorale** competitive.

Planul de carieră este orientat spre consolidarea unei direcții independente de cercetare, coordonarea proiectelor naționale și europene, dezvoltarea programelor doctorale și susținerea unui cadru academic modern.

Concluzie

Prin contribuțiile sale originale și prin coerența tematică, teza demonstrează capacitatea candidatei de a dezvolta și coordona cercetări avansate în domenii convergente ale nanomaterialelor, ingineriei chimice, textilelor funcționale și biomedicinei. Activitatea prezentată reflectă un nivel ridicat de maturitate științifică, fundamentul necesar pentru obținerea calității de conducător de doctorat și pentru dezvoltarea unei cariere academice autonome și competitive.

Abstract

The habilitation thesis entitled “Advanced Nanomaterials: Engineering, Surface Functionalization, and Applications in Environmental and Biomedical Fields” presents the coherent evolution of the scientific and professional activity carried out over more than two decades of research, highlighting original contributions in chemical engineering, materials science, nanotechnology, functional textiles, and biomedical applications. The work reflects a complex and well-structured career trajectory, in which each research stage has strengthened essential competencies for the development of advanced materials with functionalities oriented toward environmental protection, healthcare, and industry.

1. **Research Evolution (2001–2025): From Stabilization of Cellulosic Supports to Advanced Nanomaterials**

The research activity begins in the period 2001–2009, during the doctoral studies, focusing on the chemical stabilization of cellulosic materials subjected to natural degradation. This stage included the investigation of degradation mechanisms, the development of innovative chemical stabilization treatments, and the evaluation of non-conventional pretreatment methods. The results formed the foundation for later expertise in surface modification, material stability, and interface engineering.

The period **2010–2013**, corresponding to the postdoctoral stage, marks the diversification and deepening of research directions, structured into four major axes:

(A) Nanomaterials for Pharmaceutical Safety and Environmental Protection

This direction aimed at the development of nano-structured catalysts for:

• the photocatalytic degradation of pharmaceutical pollutants;
• modeling the stability and degradation of irradiated drugs;
• obtaining photocatalytic materials for nuclear applications;
• synthesizing nanocomposites for remediation of radioactive effluents.

These contributions addressed major challenges related to emerging pollution, environmental behavior of active compounds, and the development of efficient water decontamination solutions.

(B) Functional Nanomaterials for Controlled Drug Delivery

This research axis involved the design and testing of:

• controlled release systems based on mesoporous silica;
• nanocarriers analyzed through morphology–stability correlations.

These results laid the groundwork for later biomaterials research, contributing to the optimization of advanced drug delivery systems.

(C) Smart Textiles and Functionality Through Nanotechnology

Research in this field covered the development of advanced textiles via:

• application of ZnO nanoparticles for thermal protection and antimicrobial activity;
• fabrication of composite textiles with adsorptive properties;
• surface engineering for hydrophobicity and comfort;
• textile functionalization using biopolymers and plasma treatments.

This domain consolidated expertise in **advanced textile properties, durable nano-coatings, and functional surface design.**

(D) Biocompatible Nanoporous Materials

Porous structures doped with bioactive nano-oxides (silica, silver, ZnO) were developed for:

• controlled release of active compounds;
• antibacterial coatings;
• scaffolds for tissue regeneration.

This direction proved essential for subsequent studies on hydrogels, hybrid biomaterials, and therapeutic systems.

During **2013–2020**, as a Lecturer, the research concentrated on nanomaterials applied to smart textiles, bioremediation, and toxic compound degradation, with emphasis on technology transfer and industrial applicability. This period marks the consolidation of both scientific and teaching roles, supported by extended collaborations and the publication of practically relevant results.

In the period **2020–2025**, the research portfolio expands through the integration of nanofluids and mathematical modeling:
• development of nanofluids for biomedical applications;
• modeling of nanofluid flow and thermal transfer optimization;
• application of modern concepts in bioengineering and bioremediation.
This stage marks the maturation of a fully interdisciplinary profile, integrating nanomaterials, physicochemical processes, and predictive modeling within a holistic approach.

2. Scientific Context and Motivation: Modern Challenges and the Role of Nanomaterials

The thesis analyzes the impact of emerging pollution, pharmaceutical contaminants, and the limitations of conventional treatment technologies, emphasizing the need for advanced materials capable of addressing present-day challenges. Due to their unique properties—high specific surface area, controlled reactivity, tunability through functionalization—nanomaterials offer efficient solutions for complex environmental, textile, and biomedical problems.
The work highlights the scientific, professional, and academic contributions of the candidate in recent years, presenting a solid and coherent portfolio in chemical engineering, advanced nanomaterials, environmental protection, functional textiles, and biomedicine. It reflects an interdisciplinary vision, integrating fundamental concepts from materials science, chemistry, engineering, physics, and bioengineering to generate innovative solutions to contemporary challenges, identifying viable alternative pathways.
The motivation of the thesis derives from the need to develop advanced materials with high performance and multiple functionalities, aligned with societal demands: environmental pollution reduction, treatment of emerging contaminants, production of smart textiles, improvement of biomedical therapies, and modeling of complex physicochemical processes. The thesis is structured to highlight both the candidate's original contributions and the thematic coherence of the research, converging toward a clear trajectory: the design and surface functionalization of nanoscale materials for advanced applications.
Nanomaterials are presented as a class of materials with remarkable properties—high catalytic activity, large specific surface area, controlled reactivity, and functionalization capability—that make them ideal for processes such as photocatalysis, adsorption, advanced filtration, or immobilization of active compounds. The thesis emphasizes how surface engineering and nanomaterial structure can be tailored to reduce pharmaceutical pollutants and improve environmental safety.

3. Nanomaterials for Environmental Remediation and Pharmaceutical Safety

A core component of the thesis concerns **advanced photocatalysis** research. The design and characterization of nano-structured catalysts used for the degradation of pharmaceutical compounds are presented in detail. Stability processes and degradation mechanisms of various drugs exposed to UV or visible radiation were analyzed to identify decomposition routes, intermediates, and the efficiency of advanced oxidation processes.
Another domain investigated relates to materials designed for the **remediation of radioactive effluents**. The nanocomposites developed demonstrated the capacity to immobilize radioactive ions through adsorption, ion exchange, or precipitation, offering viable alternatives for the management of low-level nuclear waste. This section highlights important theoretical and experimental contributions, including correlations between synthesis parameters, morphology, stability, and material performance.

4. Nanomaterials for Controlled Drug Delivery

The thesis explores the biomedical field through the development of **controlled release** systems based on **mesoporous silic**a and other nano-structured carriers. Key aspects discussed include loading capacity, thermal and structural stability, diffusion mechanisms, and the influence of functionalization on the release profile. These systems exhibit high potential for controlled administration of active substances, especially in treating infections and chronic diseases.

A central topic is the correlation between the **morphology of nanocarriers** (size, porosity, particle distribution) and their physicochemical stability, providing essential information for designing advanced drug delivery systems capable of maintaining the potency and bioavailability of active compounds.

5. Functional Textiles and Intelligent Nanomaterials

A significant contribution of the candidate lies in the domain of functionalized textiles, where nanomaterials are used to impart superior properties into conventional textile substrates. Studies on ZnO nanoparticle coatings are presented, demonstrating their dual function: thermal protection and antimicrobial activity. The thesis analyzes deposition processes, stability of nano-structured films, thermal behavior, and UV resistance.

Composite textiles with adsorptive properties were also investigated, including their behavior under real usage conditions. Through surface engineering, textile materials were transformed into active components for comfort, protection, and sustainability.

An original contribution concerns **hydrophobization studies of textiles** via plasma treatments and hybrid agents, demonstrating how molecular-level surface modifications can significantly enhance air permeability, water repellency, and wearer comfort.

7. Hybrid and Biopolymeric Materials for Biomedical and Textile Applications

The thesis includes the development of antimicrobial hydrogels based on PVA/agar loaded with essential oils, intended for biomedical applications. These were analyzed in terms of physical properties (rheology, porosity, swelling), stability, and antimicrobial activity assessed with standardized methods (Kirby–Bauer, time-kill). The results demonstrate the feasibility of using such materials in therapeutic treatments, wound dressings, or controlled release devices.

The work also presents **biopolymeric microcapsules deposited on bamboo fabrics** and activated through atmospheric plasma treatment, with potential use in scented, antimicrobial, or therapeutic textiles—combining the sustainability of natural fibers with the performance of chemical nanostructures.

Predictive modeling studies for optimizing nano-coatings applied to polymeric substrates are also presented. Mathematical models developed enable performance prediction and reduction of experimental effort.

8. Mathematical Modeling in Chemical Engineering and Materials Science

An innovative and complementary dimension of the thesis consists of developing mathematical models applied to chemical engineering, bioengineering, and nanofluids. The analyses include:

• rheological behavior of **synovial fluid**, modeled through advanced non-Newtonian formulations relevant for biomechanics and orthopedics;

• **modeling nanofluid flow** with applications in biothermics, heat transfer, chemistry, and microsystems.

This approach demonstrates the candidate's ability to integrate computational and analytical tools into experimental research, reinforcing the interdisciplinary character of the work.

9. Integration of Scientific Contributions and Future Directions

Synthesizing the period 2021–2025, the thesis demonstrates the coherent evolution of a career dedicated to nanomaterials and their multidisciplinary applications. The scientific activity includes publications in Q1–Q2 journals, international collaborations, participation in research projects, and results with industrial, medical, and environmental applicability.

The proposed future research directions include:

• development of **nanotechnologies for air and water purification**;

• **polymer-based platforms for targeted drug delivery**;

• improvement of flow models for **advanced nanofluids**;

• expansion of international collaborations and establishment of a competitive doctoral research team.

The career plan is oriented toward consolidating independent research direction, coordinating national and European projects, strengthening doctoral programs, and supporting a modern academic framework.

Conclusion

Through its original contributions and thematic coherence, the thesis demonstrates the candidate's capacity to develop and coordinate advanced research in convergent fields such as nanomaterials, chemical engineering, functional textiles, and biomedicine. The work reflects a high level of scientific maturity, providing the necessary foundation for obtaining the qualification of PhD supervisor and for developing an autonomous and competitive academic career**.**