

Fundamental Field:
Chemical engineering
Habilitation Thesis

Non-Covalent Interactions
and Self-Organization in
Advanced Materials.
From Supramolecular
Principles to Functional
Nanocomposites

Candidate

Associate Professor Marius Bumbac, PhD

2026

Rezumat

Teza de abilitare intitulată „*Non-Covalent Interactions and Self-Organization in Advanced Materials. From Supramolecular Principles to Functional Nanocomposites*” sintetizează principalele direcții de cercetare, realizările profesionale și contribuțiile științifice ale candidatului, integrându-le într-o viziune unitară asupra rolului interacțiilor necovalente în proiectarea, ficționalizarea și înțelegerea materialelor avansate.

Prima secțiune prezintă motivația elaborării tezei de abilitare și principalele realizări profesionale și științifice ale candidatului. Aceasta evidențiază evoluția activității academice și de cercetare, participarea la proiecte științifice, publicarea de articole în domeniul materialelor polimerice, nanocompozitelor, senzorilor, biodegradării și valorificării resurselor bio-based, precum și contribuțiile prin cărți, comunicări științifice, conferințe, activități educaționale și de popularizare a științei. Activitatea profesională este prezentată ca o dezvoltare progresivă de la chimia analitică și studiul compușilor funcționali către materiale polimerice complexe, sisteme hibride, nanomateriale carbonice și aplicații relevante pentru economia circulară, și monitorizarea mediului.

Motivația tezei derivă din necesitatea de a interpreta comportamentul materialelor moderne nu doar prin compoziția lor chimică, ci și prin modul în care componentele acestora interacționează la nivel molecular, supramolecular și interfacial. În compozitele polimerice, materialele bio-based, sistemele elastomerice, nanocompozitele cu carbon și straturile active pentru senzori, proprietățile finale sunt adesea determinate de interfețe. Aceste interfețe funcționează ca zone active în care au loc interacții prin legături de hidrogen, interacții π - π , forțe van der Waals, interacții dipol-dipol, interacții electrostatice, efecte hidrofobe sau procese de adsorbție. Chiar dacă aceste interacții sunt individual mai slabe decât legăturile covalente, efectul lor cooperativ poate conduce la modificări importante ale stabilității, degradării, morfologiei, conductivității, sensibilității la umiditate sau răspunsului mecanic al materialelor.

A doua secțiune reprezintă partea centrală a tezei și construiește o narațiune științifică bazată pe lucrările publicate ale autorului. Această secțiune este organizată în șase capitole care urmăresc trecerea de la conceptele fundamentale ale chimiei supramoleculare la aplicații concrete în materiale funcționale.

Primul capitol introduce **interacțiile necovalente ca fundament al chimiei supramoleculare**, subliniind importanța recunoașterii moleculare, a organizării interfaciale și a fenomenelor de tip host-guest în înțelegerea materialelor complexe. Aceste principii oferă cadrul conceptual pentru interpretarea comportamentului aditivilor, fillerilor, polimerilor și nanomaterialelor în sisteme multicomponente.

Capitolul al doilea discută **auto-asamblarea și auto-organizarea**, făcând distincția între procesele determinate termodinamic și cele controlate cinetic. În cazul polimerilor și compozitelor, auto-organizarea nu apare doar la nivel molecular, ci și la nivelul domeniilor de fază, rețelelor de filler, agregatelor de biomasă sau structurilor

conductoare formate de nanocarbon. Această perspectivă este relevantă pentru interpretarea copolimerilor bloc stirenici, unde domeniile de polistiren pot acționa ca joncțiuni fizice, iar segmentele elastomerice asigură flexibilitatea și procesabilitatea materialului.

Capitolul al treilea analizează **rolul interacțiilor necovalente în stabilizarea și degradarea polimerilor**. Lucrările candidatului privind oxidarea, iradierea, potențialul de reciclare și comportamentul termic al polimerilor evidențiază faptul că degradarea nu este un proces determinat exclusiv de structura covalentă a lanțului macromolecular. Ea este influențată de arhitectura moleculară, de organizarea fazelor, de prezența aditivilor, de mobilitatea lanțurilor și de interacțiile dintre componente. Astfel, aditivii și fillerii pot fi interpretați ca modificatori supramoleculari care influențează cinetica oxidării, stabilitatea termică și răspunsul la procesare sau îmbătrânire.

Capitolul al patrulea este dedicat **sistemelor bio-based și interacțiilor de la interfața bio-polimer**. Cercetările privind compozitele polimerice cu biomasă, microalge, cianobacterii, materiale bogate în celuloză sau filler mineral biogenic arată că biomasa nu este un simplu adaos inert. Datorită conținutului de proteine, polizaharide, lipide, pigmenti, grupări hidroxil, carboxil, aminice sau carbonilice, biomasa poate interacționa cu matricea polimerică și poate influența dispersia, rigiditatea, comportamentul termic, absorbția apei, biodegradarea și stabilitatea materialului. În această perspectivă, interfața bio-polimer devine o zonă activă, în care chimia naturală a biomasei este transpusă în funcționalitate materială.

Capitolul al cincilea tratează **sistemele nanostructurate carbonice și chimia interfeței în nanocompozite polimerice**. Studiile asupra nanohornurilor carbonice oxidate, nanocepei de carbon, oxidului de grafenă și compozitelor acestora cu polimeri precum PVP sau PVA demonstrează că proprietățile electrice și senzoriale sunt guvernate de auto-organizarea rețelelor conductoare, de chimia suprafeței nanocarbonului și de interacțiile cu moleculele de apă, alcoolii sau alți analiți. În special în apropierea pragului de percolație, mici modificări ale distanței dintre particulele conductive pot genera variații mari ale rezistenței electrice, ceea ce explică eficiența acestor materiale în aplicații de tip senzor rezistiv.

Capitolul al șaselea oferă o **discuție integrativă asupra conceptelor supramoleculare la diferite scale**, de la interacții moleculare discrete la arhitecturi interfaciale și proprietăți emergente. Teza subliniază că proprietățile funcționale ale materialelor avansate apar prin cooperarea dintre structura chimică, morfologie, interfață, mobilitatea componentelor și condițiile externe de procesare sau utilizare. Astfel, interfețele sunt prezentate ca zone funcționale în care chimia se transformă în proprietate de material.

În partea finală, **Concluziile și perspectivele viitoare** evidențiază faptul că interacțiile necovalente și auto-organizarea constituie principii esențiale pentru dezvoltarea materialelor avansate. Direcțiile viitoare vizează proiectarea de compozite polimerice mai sustenabile, sisteme bio-nano-hibride, senzori cu sensibilitate și selectivitate îmbunătățite, materiale adaptive, sisteme cu răspuns dinamic și evaluări

integrate privind ciclul de viață, siguranța și impactul ecotoxicologic. O atenție specială este acordată posibilității de a corela datele experimentale obținute prin spectroscopie, analiză termică, microscopie, măsurători electrice, teste mecanice, studii de degradare și evaluări de mediu, pentru a construi modele predictive și pentru a accelera dezvoltarea materialelor funcționale.

În ansamblu, teza de abilitare propune o viziune coerentă asupra materialelor avansate, în care chimia supramoleculară devine un limbaj comun pentru interpretarea stabilizării, degradării, compatibilizării, dispersiei, auto-organizării și funcționalității. Prin integrarea rezultatelor publicate în domeniul polimerilor, compozitelor bio-based, nanomaterialelor carbonice și senzorilor, lucrarea demonstrează că interacțiile necovalente nu reprezintă doar fenomene secundare, ci mecanisme fundamentale prin care componentele materiale se organizează și generează proprietăți emergente. Teza constituie astfel atât o sinteză a activității științifice desfășurate, cât și o platformă pentru dezvoltarea viitoare a unor materiale funcționale, sustenabile și inteligente.