

# SINTEZA ȘI CARACTERIZAREA UNOR NOI PARTICULE MAGNETICE: PARTICULE DE FIER ACOPERITE CU DIOXID DE TITAN ȘI FUNCȚIONALIZATE CU CLORURĂ DE CIANURIL THE SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NEW MAGNETIC PARTICLES: IRON PARTICLES COVERED WITH TITANIUM DIOXIDE AND FUNCTIONALIZED WITH CYANURIC CHLORIDE

VLAD IONUȚ LUNTRARU<sup>1\*</sup>, CRISTINA MIHAELA BAICEA<sup>1</sup>, CORNELIU TRIȘCĂ-RUSU<sup>1,2</sup>,  
AURELIA CRISTINA NECHIFOR<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Universitatea POLITEHNICA București, str. Ghe. Polizu, nr. 1, Sector 1, 011061, București, România

<sup>2</sup>Institutul National de Microtehnologie, Str. Erou Iancu Nicolae nr. 126A, 077190 București, România

*În această lucrare este prezentată sinteza și caracterizarea unor particule coloidale de fier, care au fost acoperite cu dioxid de titan și apoi funcționalizate cu clorură de cianuril. Materialele obținute au fost analizate prin SEM, spectroscopie FT-IR și EDAX.*

*This paper presents the synthesis and characterization of iron particles covered with colloidal titanium dioxide and the functionalization of the TiO<sub>2</sub> coated surface with cyanuric chloride. The synthesized materials were structurally characterized using Scanning Electron Microscopy, FT-IR spectroscopy and Energy-Dispersive X-ray spectroscopy.*

**Keywords:** magnetic particles, titanium dioxide, cyanuric chloride

## 1. Introducere

În ultimii 30 de ani particulele magnetice au fost folosite într-o gamă foarte mare de aplicații ca: transportul medicamentelor, ferrofluide, medii magnetice de înregistrare și stocare a datelor, rezonanța magnetică imagistică cu agenți de contrast și în tratamentul cancerului prin hipertermie [1-12]. Cea mai importantă proprietate a particulelor magnetice este bineînțeles magnetizația. Cele mai studiate particulele magnetice, la nivel mondial, sunt oxizii fierului. Scopul celor mai mulți cercetători este de a obține particule cu o magnetizație ridicată, pentru ca în procesul de separare magnetică în care vor fi folosite, consumul de energie să fie minim. După cum se știe fierul posedă o magnetizație mai mare decât cea a oxizilor de fier, și deci răspunsul acestuia la un câmp magnetic este de asemenea mai mare. Principalul dezavantaj al particulelor de fier este stabilitatea scăzută la coroziune. Această problemă ar putea fi rezolvată prin acoperirea sau funcționalizarea acestora cu un compus anorganic sau organic cu rezistență chimică crescută. În literatură sunt descrise unele tehnici de acoperire cu diferiți compuși: acoperirea cu un polimer obținut prin polimerizare cu plasmă de microunde [13], și acoperirea cu dioxid de siliciu printr-o metodă de tip sol-gel [14]. Dioxidul de titan este unul din cele mai

## 1. Introduction

In the last 30 years the magnetic particles have been used in a wide range of applications such as: targeted drug delivery, ferrofluids, magnetic recording media and data storage, magnetic resonance imaging (MRI) contrast enhancement and hyperthermia treatment of cancer [1-12]. The most important property of the magnetic particles is of course the magnetization. The most studied magnetic particles across the world are the iron oxides (Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>). The goal of many researchers is to obtain magnetic particles with high magnetization so that in a magnetic separation process the energy consumption will be minimum. As known iron particles have higher magnetization than that of the iron oxides and as a consequence the particles response to a magnetic field is higher than that of the iron oxide particles. The main disadvantage of the iron particles is the low stability to corrosion. This problem could be solved if the iron particles are covered or functionalized with a chemically resistant inorganic or organic layer. Some techniques of covering with different substances are described in the literature: the coating of the iron particles with a polymer by a microwave plasma polymerization method [13], and the coating with silica by sol-gel method [14]. Titanium dioxide (TiO<sub>2</sub>) is one of the most important

\* Autor corespondent/Corresponding author,  
Tel.: +4021 402 38 02 e-mail: [vladionut999@yahoo.com](mailto:vladionut999@yahoo.com)

importante materiale anorganice care posedă excelente proprietăți optice, fotocatalitice și de conversie a energiei. Datorită inerției biologice și chimice, a puterii de oxidare, prețului scăzut și a stabilității ridicate la coroziune chimică și fotochimică [15], dioxidul de titan ar putea fi un material bun de acoperire a particulelor de fier. Clorura de cianuril este un compus foarte utilizat în sinteza organică datorită reactivității sale ridicate, aceasta putând fi controlată, primul atom de clor putând fi substituit la 0°C, al doilea la 25°C și al treilea la 60°C. Prin acoperirea particulelor de fier cu dioxid de titan și funcționalizarea cu clorură de cianuril se obțin noi particule magnetice de care se pot lega diferite molecule organice. Prin legarea covalentă a unui colorant de clorura de cianuril se obțin particule magnetice care ar putea fi folosite la separarea ionilor metalelor grele, în cerneluri magnetice, senzori optici și celulele fotovoltaice. Particulele obținute au fost caracterizate prin analiză SEM, spectroscopie IR și EDAX.

## 2. Parte experimentală

Sinteza acestui material se face în trei etape: activarea particulelor de fier, acoperirea cu dioxid de titan a particulelor activate și funcționalizarea cu clorură de cianuril.

### 2.1. Reactivi

Fier coloidal (dimensiunea medie a particulelor este de 60 μm) de la Fluka, hidroxid de potasiu (KOH, Fluka), tetrabutoxid de titan (Ti(OBu)<sub>4</sub>, Fluka), 5,5-dimetil-1,3-ciclohexandionă (Dimedonă, Fluka), clorură de cianuril (C<sub>3</sub>Cl<sub>3</sub>N<sub>3</sub>, Sigma-Aldrich). Etanol, clorură de metilen, alcool izopropilic și dimetilacetamida (DMAc) au fost cumpărate de la Merk.

### 2.2. Activarea particulelor de fier

4 grame de fier coloidal au fost introduse în 50 mL soluție obținută prin dizolvarea a 30 grame KOH în 100 mL alcool etilic. Amestecul obținut a fost agitat timp de 72 de ore. Această activare duce la formarea unui strat subțire de oxizi de fier (FeO(OH), Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, FeO) pe suprafața particulelor de fier, strat care mărește reactivitatea și deci dispersibilitatea dioxidului de titan pe suprafața particulelor (fig. 1).

### 2.3. Acoperirea particulelor cu dioxid de titan

Este foarte cunoscut că o cale simplă de a obține dioxid de titan este printr-o metodă sol-gel

inorganic materials because of its optical, photocatalytic and energy conversion properties. Due to its biological and chemical inertness, strong oxidizing power, low cost, and long-term stability against photo and chemical corrosion [15], TiO<sub>2</sub> could be a good covering material for the iron particles. Cyanuric chloride is a compound that has many uses in organic synthesis because of its high and controllable reactivity, the first chlorine atom could be substituted at 0°C, the second at 25°C and the third at 60°C. By covering the iron particles with titanium dioxide and by functionalization of TiO<sub>2</sub> with cyanuric chloride we obtained new particles with the capacity to bind new organic molecules. By grafting a convenient dye (covalent bond) onto these particles a new material is obtained with potential applications in heavy ion separation, magnetic inks, optical sensors and photovoltaic cells. The obtained materials were structurally characterized using Scanning Electron Microscopy (SEM), FT-IR spectroscopy and Energy-Dispersive X-ray spectroscopy (EDAX).

## 2. Experimental

The synthesis of this material consists of 3 steps: the activation of iron particles, the coating of the activated iron particles with titanium dioxide and the functionalization of the obtained particles with cyanuric chloride.

### 2.1. Materials

Colloidal iron (medium particle size 60 μm) from Fluka, potassium hydroxide (KOH, Fluka), titanium tetrabutoxide (Ti(OBu)<sub>4</sub>, Fluka), 5,5-Dimethyl-1,3-cyclohexanedione (Dimedone, Fluka), cyanuric chloride (C<sub>3</sub>Cl<sub>3</sub>N<sub>3</sub>, Sigma-Aldrich). Ethanol, dichloromethane, isopropyl alcohol and dimethylacetamide (DMAc) were purchased from Merk.

### 2.2. Iron particles activation

4 grams of colloidal iron particles were immersed in 50 mL potassium hydroxide in ethanol solution (30 grams KOH in 100 mL ethanol) and stirred for 72 hours. This activation leads to the formation of a thin layer of iron oxides (FeO(OH), Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, FeO) on the surface of the iron particles. This step is necessary to improve the dispersibility (by increasing the reactivity of iron) of titanium dioxide on the surface of the iron particles (Fig. 1).

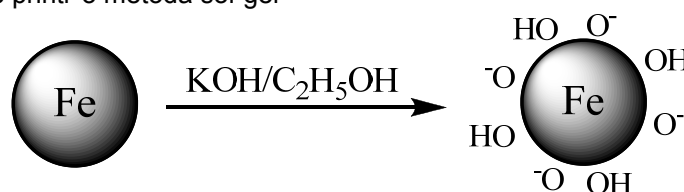


Fig. 1 - Activarea particulelor de fier/Iron particles activation.

din tetrabutoxid de titan în prezența ionilor hidroxil. Totuși dacă se urmărește obținerea unui strat uniform de  $\text{TiO}_2$  pe o suprafață prin această metodă nu se obțin rezultate satisfăcătoare.

Prin modificarea acestei metode prin adăugarea unei mici cantități de 5,5-dimetil-1,3-ciclohexandionă, care este un agent de chelatare, rezultatele obținute sunt cu mult mai bune. Acest agent de chelatare stabilizează alcoxizii din reacție, ceea ce duce la controlarea într-o mică măsură a reacțiilor sol-gel.

Procedura experimentală este următoarea: 4 grame de particule de fier activate se dispersează în 100 mL etanol, într-o moară Retch la 250 rpm, împreună cu 1 gram KOH și 20 grame de bile de sticlă. După 1 oră se adaugă un sol obținut prin amestecarea a 1,11 mmoli de tetrabutoxid de titan și a 2,4 moli de dimedonă în 4 mL dimetilacetamidă la  $0^\circ\text{C}$ , și se amestecă la temperatura camerei timp de 4 ore la 250 rpm. Particulele magnetice obținute au fost separate în câmp magnetic, uscate și spălate cu etanol. Aceste particule au fost analizate IR, SEM și EDAX. Schema de reacție este prezentată în figura 2.

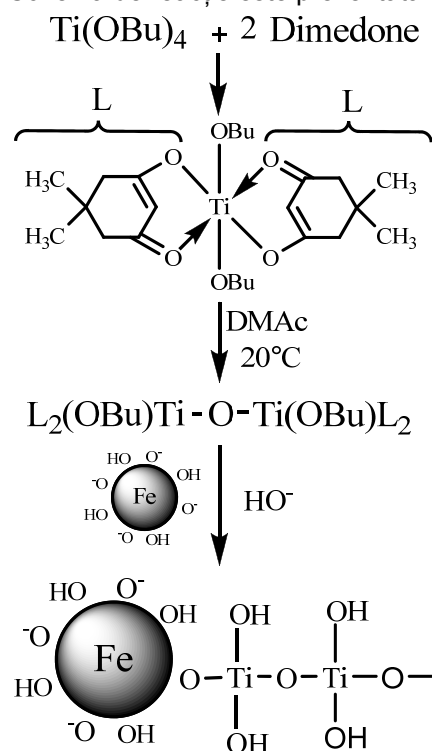


Fig. 2 - Schema reacției de acoperire a particulelor cu dioxid de titan/Reaction scheme for the coating of iron particles with titanium dioxide.

#### 2.4. Funcționarea compozitului fier/dioxid de titan cu clorură de cianuril

Pentru funcționarea particulelor magnetice, particulele acoperite cu dioxid de titan au fost introduse într-o soluție saturată de clorură de cianuril în diclorometan (60 mL) și agitate puternic timp de 4 ore, la temperatura camerei. Particulele funcționalizate au fost separate în câmp

#### 2.3. Preparation of iron particles coated with titanium dioxide

It is well known that a way to synthesize titanium dioxide by a very simple and accessible method, is the sol-gel one using titanium tetrabutoxide in the presence of hydroxyl ions. However, if you are trying to obtain a uniform layer of  $\text{TiO}_2$  on a surface this method does not produce the best results. If this method is modified by adding small amounts of a chelating agent such as 5,5-Dimethyl-1,3-cyclohexanedione (dimedone) better results can be obtained in covering the iron particles. This chelating agent stabilizes the alkoxide and allows one to control in a higher manner the sol-gel reactions.

The experimental procedure is as follows: 4 grams of activated iron particles dispersed in 100 mL ethanol are mixed, in a Retch mill at 250 rpm, with 1 gram of KOH and 20 grams of glass spheres. After 1 hour a sol, obtained by mixing  $\text{Ti}(\text{OBu})_4$  (1.11 mmol, 0.33 mL) and dimedone (2.4 mmol, 0.22 mL) in 4 mL dimethylacetamide (DMAC) at  $0^\circ\text{C}$ , is added and the mixture is milled at room temperature for 4 hours at 250 rpm. The obtained particles were separated in magnetic field, dried and washed with ethanol. These particles were analyzed using FT-IR, SEM and EDAX. The reaction scheme is presented in Figure 2.

#### 2.4. Functionalization of iron/titanium dioxide composite with cyanuric chloride

For the functionalization of the magnetic particles a saturated solution of cyanuric chloride in dichloromethane (60 mL) was prepared. The  $\text{Fe}/\text{TiO}_2$  particles were mixed with the cyanuric chloride solution and stirred at room temperature for 4 hours. The functionalized particles were separated in magnetic field, washed with ethanol and dried. The reaction was carried out at room temperature and not at  $0^\circ\text{C}$  (only one chlorine atom is substituted) to ensure that the covalent functionalization takes place (there are no studies about  $\text{TiO}_2$ -cyanuric chloride reaction). Figure 3 presents the possible reaction that can occur at this temperature.

### 3. Results and discussions

#### 3.1. Scanning Electron Microscopy

The Scanning Electron Microscopy, performed with a FEI Instpect F, instrument, equipped with Energy-dispersive X-ray Detector reveals the formation of numerous aggregates of  $\text{TiO}_2$  on the surface of the iron particle (Fig. 4a) (the first SEM image reveals only a part (5.97  $\mu\text{m}$ ) from the total iron particle size of 60  $\mu\text{m}$ ), with a relative good dispersibility, thing which was expected due to the fact that the activation process didn't produced a uniform and continuous layer of iron oxides on the particles surface. By increasing

magnetic, spălate cu etanol și uscate. Reacția a fost efectuată la temperatura camerei și nu la 0°C (când se înlocuiește doar un atom de clor), pentru a fi siguri că reacția covalentă are loc (nu există studii despre reacția dintre clorura de cianuril și dioxidul de titan). În figura 3 sunt prezentate posibilele reacții care pot avea loc la această temperatură.

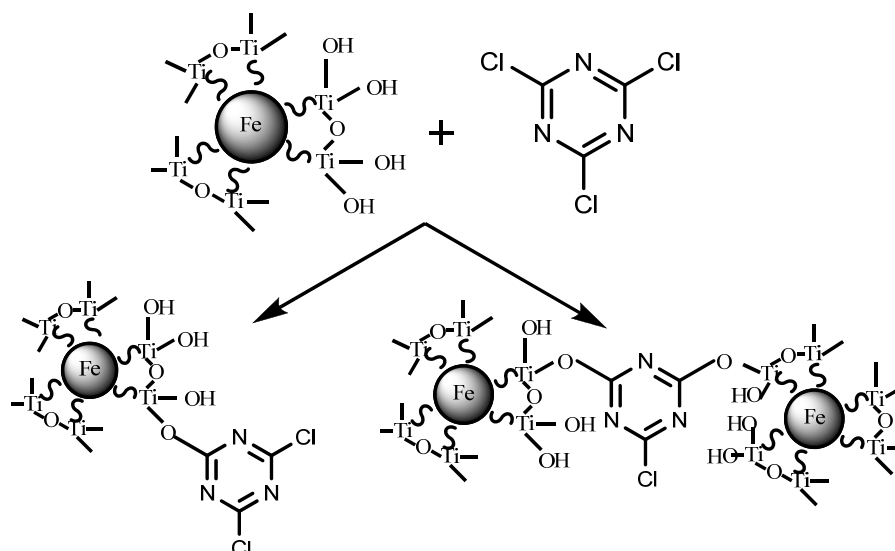
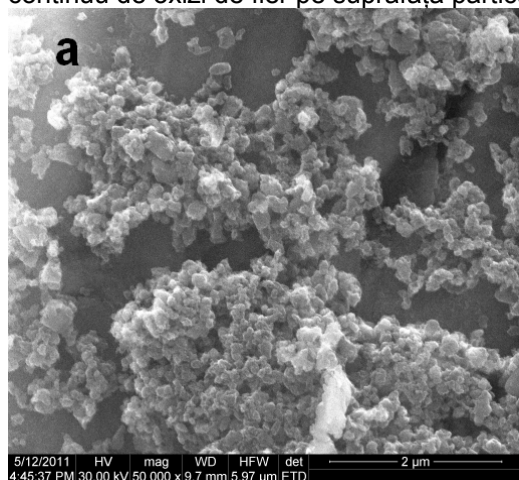


Fig. 3 - Reacții posibile între Fe/TiO<sub>2</sub> și clorura de cianuril la 25°C/Possible reactions between Fe/TiO<sub>2</sub> and cyanuric chloride at 25°C.

### 3. Rezultate și discuții

#### 3.1 Analiza SEM

Imaginile SEM, făcute cu un instrument FEI Inspect F, care este echipat cu un detector de raze X dispersiv în energie, arată formarea a numeroase agregate de TiO<sub>2</sub> pe suprafața particulelor de fier (fig. 4a) (prima imagine SEM prezintă doar o parte (5,97 μm) din dimensiunea totală de 60 μm a unei particule de fier), care au o dispersibilitate relativ bună, lucru care era de așteptat datorită faptului că prin activarea particulelor de fier nu s-a obținut un strat uniform și continuu de oxizi de fier pe suprafața particulelor.



the magnification (Fig. 4b) to 200000x the titanium dioxide particles can be observed. The diameter of TiO<sub>2</sub> particles varies between 20 and 80 nm.

#### 3.2 Energy-Dispersive X-ray spectroscopy

The EDAX analysis (Figure 5) shows the component elements of the Fe/TiO<sub>2</sub> particles. As it

can be seen along with the expected elements, iron, titanium and oxygen it was also found potassium, which comes either from the first step, the activation of the iron particles, or from the second step when needed potassium hydroxide to obtain titanium dioxide from alcoxid-dimedone complex.

#### 3.3 FT-IR analysis

The FT-IR analysis was conducted using a Bruker Tensor 27 instrument with diamond ATR annex. In Figure 6 we can observe the spectrum of iron-titanium dioxide (a) and iron-titanium dioxide functionalized with cyanuric chloride (b). As it can

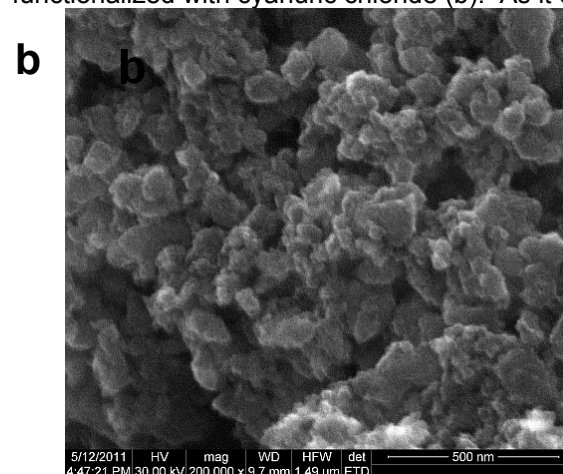


Fig. 4 - Imagini SEM ale compozitului Fe/TiO<sub>2</sub> la mărirea de 50000x (a) și de 200000x (b)/SEM images of Fe/TiO<sub>2</sub> composite at 50000x (a) and 200000x (b).

Prin mărirea magnificației la 200000x (fig. 4b) pot fi observate particulele de  $\text{TiO}_2$ . Diametrul acestor particule variază între 20 și 80 nm.

### 3.2 Analiza EDAX

Analiza EDAX (fig. 5) arată compoziția elementală a particulelor  $\text{Fe/TiO}_2$ . După cum se observă alături de elementele așteptate apare și potasiul, care poate proveni fie de la prima etapă, activarea particulelor de fier, fie de la etapa a 2-a când dioxidul de titan se obține din complexul dimedonă-tetrabutoxid de titan în prezența hidroxidului de potasiu.

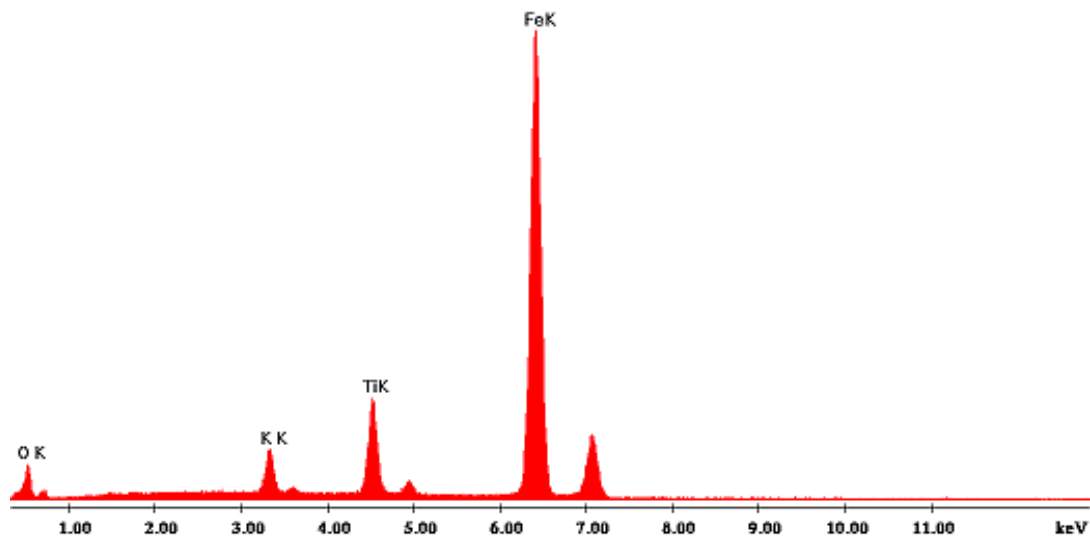


Fig. 5 - Compoziția elementală a particulelor  $\text{Fe/TiO}_2$ /EDAX elemental composition of  $\text{Fe/TiO}_2$  particles.

### 3.3 Analiza FT-IR

Analiza FT-IR a fost efectuată cu un instrument Bruker Tensor 27, prevăzut cu dispozitiv din diamant pentru atenuarea reflexiei totale (ATR). În figura 6 putem observa spectrul particulelor  $\text{Fe/TiO}_2$  (a) și  $\text{Fe/TiO}_2$  funcționalizate cu clorură de cianuril (b). După cum se poate observa între cele 2 spectre sunt multe diferențe. O primă diferență ar fi intensitatea celor 2 spectre, cel de-al doilea spectru având o intensitate mai mare datorită reacției cu clorura de cianuril. O altă diferență importantă este apariția unor noi picuri: 1400, 1415, 1457, 1697, 3069, 3200  $\text{cm}^{-1}$ , picuri care sunt caracteristice vibrațiilor de întindere C-N din inelul heterociclic, și picul de la 789  $\text{cm}^{-1}$ , care este atribuit legăturii C-Cl care a rămas nesubstituit din clorura de cianuril. Picul de la 1062  $\text{cm}^{-1}$  a fost atribuit vibrației de întindere a legăturii C-O dintre dioxidul de titan și clorura de cianuril (Ti-O-C). În spectrul clorurii de cianuril picurile pentru cele 3 legături C-Cl sunt la 790, 846 și 880  $\text{cm}^{-1}$ . Cum în spectrul b găsim numai un pic la 789  $\text{cm}^{-1}$  putem trage concluzia că ceilalți 2 atomi de clor au fost substituiți.

be seen there is a big difference between the two spectra.

The first difference is in the spectra's intensities, the second spectrum having a higher intensity due to the reaction with cyanuric chloride. Another important difference is the appearance of some new peaks: 1400, 1415, 1457, 1697, 3069, 3200  $\text{cm}^{-1}$ , peaks that are specific to C-N stretch vibration from heterocyclic ring and 789  $\text{cm}^{-1}$  peak which is attributed to one of the remaining C-Cl bond. The peak at 1062  $\text{cm}^{-1}$  was attributed to C-O stretching vibration from the new created bond Ti-O-C. In cyanuric chloride the peaks for the 3 C-Cl

bonds are at 790, 846 and 880  $\text{cm}^{-1}$ . In the second spectrum it was found only the peak at 789  $\text{cm}^{-1}$ , thing that leads to the conclusion that the reaction took place at 2 C-Cl bonds.

## 4. Conclusion

In present paper we obtained new magnetic particles which can be used in many applications. The iron particles covered with titanium dioxide and functionalized with cyanuric chloride were obtained by a simple and accessible technique. The reaction of the obtained particles with an organic compound is very facile and leads to the synthesis of new magnetic particles with potential applications in heavy metal separation, magnetic inks, optical sensors and photovoltaic cells.

### Acknowledgments

The work has been funded by the Sectoral Operational Program Human Resources Development 2007-2013 of the Romanian Ministry of Labor, Family and Social Protection through the Financial Agreement POSDRU/88/1.5/S/61178 (project which financed Luntraru Vlad Ionu), POSDRU/88/1.5/S/60203 (project which financed Baicea Cristina Mihaela) and European Social Fund through project POSDRU/89/1.5/S/63700, 2010-2013, 'Human Resource Development by Postdoctoral Research on Micro and Nanotechnologies' (project which financed Nechifor Aurelia Cristina).

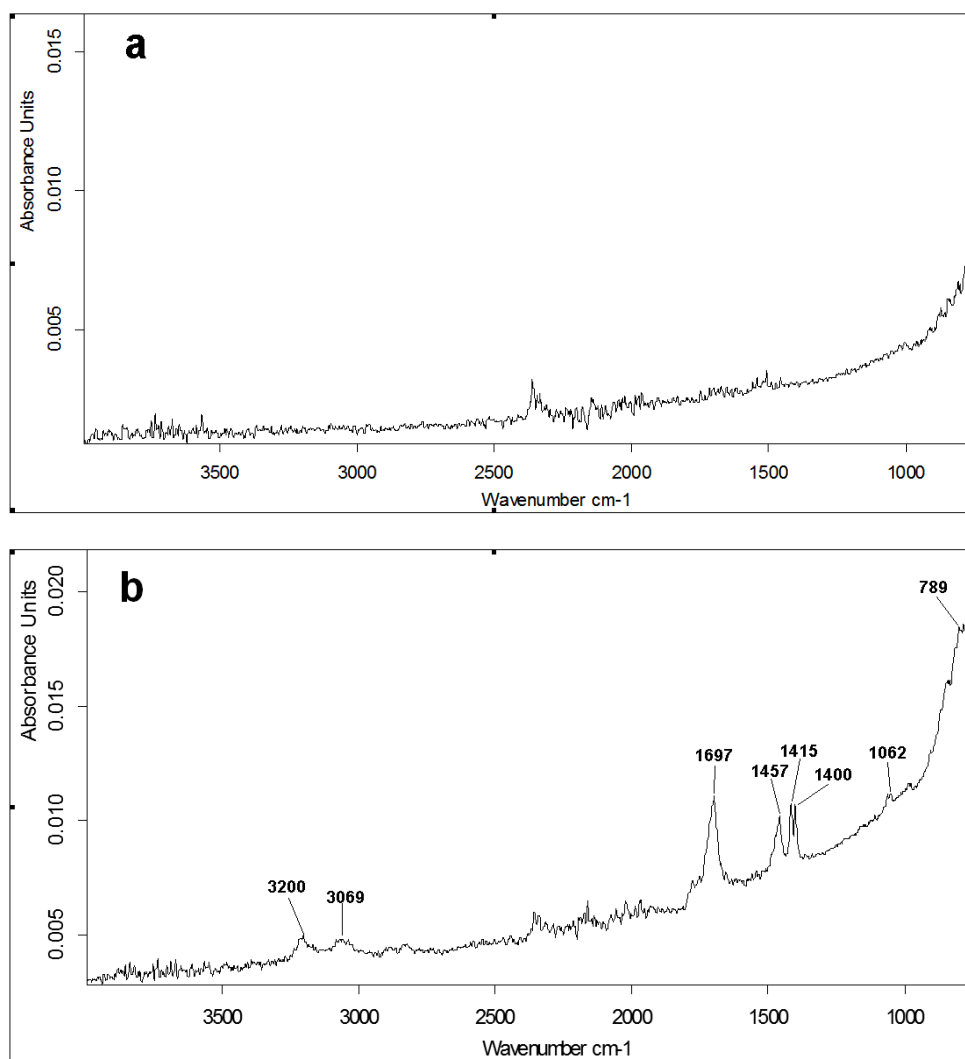


Fig. 6 - Spectrele IR ale Fe/TiO<sub>2</sub> (a) și Fe/TiO<sub>2</sub>/clorură de cianuril (b) / IR spectra of Fe/TiO<sub>2</sub> (a) and Fe/TiO<sub>2</sub>/Cyanuric chloride.

#### 4. Concluzii

În această lucrare am prezentat obținerea unor noi particule magnetice care pot fi folosite în multe aplicații. Particulele de fier acoperite cu dioxid de titan și funcționalizate cu clorură de cianuril au fost obținute printr-o metodă simplă și accesibilă. Reacția ulterioară a particulelor obținute cu un compus organic este ușor de realizat, iar prin aceasta s-ar obține noi particule magnetice cu aplicații potențiale în separarea ionilor metalelor grele, cerneluri magnetice, senzori optici și celule fotovoltaice.

#### Mulțumiri

Rezultatele prezentate în acest articol au fost obținute cu sprijinul Ministerului Muncii, Familiei și Protecției Sociale prin Programul Operațional Sectorial Dezvoltarea Resurselor Umane 2007-2013, POSDRU/88/1.5/S/61178 (proiect prin care s-a finanțat cercetarea lui Luntraru Vlad Ionuț), POSDRU/88/1.5/S/60203 (proiect prin care s-a finanțat cercetarea lui Baicea Cristina Mihaela) și Fondul Social European, prin proiectul POSDRU/89/1.5/S/63700, 2010-2013, 'Dezvoltarea Resurselor Umane prin Cercetare Postdoctorală în Domeniul Micro și Nanotehnologiilor' (proiect prin care s-a finanțat cercetarea lui Nechifor Aurelia Cristina).

#### REFERENCES

1. M. A. Willard, L. K. Kurihara, E. E. Carpenter, S. Calvin and V. G. Harris, Chemically prepared magnetic nanoparticles, *International Materials Reviews*, 2004, **49** (3), 125.
2. Yu. V. Kulvelisa, V. A. Trounova, V. T. Lebedeva, D. N. Orlova, and M. L. Gelfond, Synthesis and structural investigation of ferrofluids with porphyrins and prospects of their application in photodynamic therapy, *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2009, **3** (3), 379.
3. Pedro Tartaj, Maria del Puerto Morales, Sabino Veintemillas-Verdaguer, Teresita Gonzalez-Carreno and Carlos J Serna, The preparation of magnetic nanoparticles for applications in biomedicine, *J. Phys. D:Appl. Phys.*, 2003, **36**, R182.
4. Q. A. Pankhurst, J. Connolly, S. K. Jones and J. Dobson, Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine, *J.Phys.D:Appl. Phys.*, 2003, **36**, R167.
5. K. Gupta and M. Gupta, Synthesis and surface engineering of iron oxide nanoparticles for biomedical applications, *Biomaterials*, 2005, **26** (18), 3995.
6. N. Nitin, L. E. W. LaConte, O. Zurkiya, X. Hu and G. Bao, Functionalization and peptide-based delivery of magnetic nanoparticles as an intracellular MRI contrast agent, *J. Bio. Inorg. Chem.*, 2004, **9** (6), 706.
7. R. Muller, R. Hergt, M. Zeisberger and W. Gawalek, Preparation of magnetic nanoparticles with large specific loss power for heating applications, *J. Magn. Mater.*, 2005, **289**, 13.

8. A. Jordan, R. Scholz, P. Wust, H. Fahling and R. Felix, Magnetic fluid hyperthermia (MFH): cancer treatment with AC magnetic field induced excitation of biocompatible superparamagnetic nanoparticles, J.Magn. Magn. Mater., 1999, **201**, 413.
9. A.C. Nechifor, M.G. Stoian, S.I. Voicu, G. Nechifor, Modified Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> colloidal dispersed magnetic particles as carrier in liquid membranes, Optoelectronics and Advanced Materials – Rapid Communications, 2010, **4** (8), 1118.
10. F.D. Balacianu, A.C. Nechifor, R. Bartos, S.I. Voicu, G. Nechifor, Synthesis and characterization of Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> magnetic particles-multiwalled carbon nanotubes by covalent functionalization, Optoelectronics and Advanced Materials – Rapid Communications, 2009, **3** (3), 219.
11. G. Nechifor, S.I. Voicu, A.C. Nechifor, S. Garea, Nanostructure hybrid membrane polysulfone-carbon nanotubes for hemodialysis, Desalination, 2009, **241**, 342.
12. V.I. Luntraru, O. Gales, L. Iarca, E. Vasile, S.I. Voicu, A.C. Nechifor, Synthesis and characterization of magnetite - titanium dioxide-4-Benzene-azo-alpha-naphthylamine and methylene blue composites, Optoelectronics and Advanced Materials – Rapid Communications, 2011, **5** (11), 1229.
13. H. Srikanth, R. Hajndl, C. Chirinos, J. Sanders, A. Sampath and T. S. Sudarshan, Magnetic studies of polymer-coated Fe nanoparticles synthesized by microwave plasma polymerization, Appl. Phys. Lett., 2001, **79**, 3503.
14. G. Wang and A. Harrison, Preparation of Iron Particles Coated with Silica, J. Colloid Interface Sci., 1999, **217**, 203.
15. Sittinun Tawkaew and Sitthisunporn Supothina, Preparation of agglomerated particles of TiO<sub>2</sub> and silica-coated magnetic particle, Materials Chemistry and Physics, 2008, **108**, 147.

\*\*\*\*\*

## RECENZIE / REVIEW

### **Modele structurale ale materialelor vitroase**

**Autori: Dorel Radu, Zeno Ghizdăveț**

Manual publicat la Editura Politehnica Press

Modelarea sistemelor vitroase este un domeniu de aplicabilitate al unui număr considerabil de modele și metode matematice. Aceasta se datorează diversității compoziționale a materialelor vitroase, dependenței de condițiile de procesare și, consecutiv, particularităților structurale la scale diferite de observație.

În prezent, studiile de acest tip se apropie din ce în ce mai mult de obiectivul ultim către care converg eforturile de modelare, și anume corelația eficientă dintre compoziție, structură și proprietățile de material. Pentru aceasta, este necesară utilizarea conjugată, în cele mai multe cazuri, a mai multor modele și metode matematice performante, moderne, aflate în general în zona de intersecție dintre o serie de discipline științifice.

Pornind de la aceste considerente, autorii Dorel RADU și Zeno GHIZDĂVEȚ, cadre didactice la Departamentul Știința și Ingineria Materialelor Oxidice și Nanomateriale a Facultății de Chimie Aplicată și Știința Materialelor, Universitatea POLITEHNICA București, au elaborat manualul **Modele structurale ale materialelor vitroase**, destinat studenților masteranzi, dar care poate fi util și doctoranzilor și cercetătorilor. Sunt prezentate și explicate într-un mod coerent și pe larg informații de literatură și contribuții proprii ale autorilor, structurate în două părți: *Baza teoretică* și *Aplicații*. Pentru a crește gradul de accesibilitate și a facilita lecturarea, dar și deoarece în unele cazuri

componenta matematică prezintă un anumit nivel de dificultate, centrul de greutate al acestei lucrări a fost deplasat către conceptualizare, algoritmizare și aplicabilitate. Nu a fost însă neglijată nici descrierea matematică dar a fost redusă la un minim necesar înțelegerii modelului matematic, privit ca o construcție mult mai complexă decât relațiile matematice care se află la baza sa. În consecință, modelele și metode matematice prezentate în carte, deși se referă la un domeniu oarecum limitat – al sistemelor vitroase – pot fi aplicate, cu adaptările necesare, și pentru modelarea și simularea altor materiale oxidice și nu numai.

\*\*\*\*\*

