

## Documente justificative (selectate) pentru obținerea gradăției de merit

### Secțiunea 2b)



## Institute of High Energy Physics

Chinese Academy of Sciences

Address: 19B Yuquanlu Road, Shijingshan District, Beijing 100049, CHINA

Tel: +86-10-88235980 ext 3 Fax: +86-10-88235294 E-mail: jzhang@ihep.ac.cn Web: www.ihep.cas.cn

### Invitation letter

Jun 24, 2019

Rada Simona, Dehelean Adriana, Cuius Denisa and Macavei Sergiu  
National Institute for Research and Development  
for Isotopic and Molecular Technologies  
Donat Street 67-103, P. O. Box 700  
400293 Cluj-Napoca, Romania

**Dear Dr. Rada Simona, Dehelean Adriana, Cuius Denisa and Macavei Sergiu,**

According to the China-Romania inter-governmental scientific & technological cooperation proposal, I would like to invite you visit Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF), Institute of High Energy Physics (IHEP), Chinese Academy of Sciences from Nov 3 to 16, 2019.

During your visit, we will carry out our bilateral cooperative researches, including experimental data collection on the Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF) and a seminar. The experimental research refers to the optimization of recycled lead for the applications on the automobile battery. The seminar focuses on the application methods based on synchrotron radiation facility for the recycled lead analysis. We hope that your visit will promote all the proposed activities in the framework of our project collaboration with success.

The accommodation and daily allowance during your stay at BSRF will be supported by our institute in accord with China-Romania inter-governmental scientific & technological cooperation proposal.

Please do not hesitate to contact with me if you have any questions.  
I am looking forward to meeting you in Beijing.

Best regards.

Sincerely yours,

Prof. Jing Zhang  
Beijing Synchrotron Radiation Facility  
Institute of High Energy Physics  
Chinese Academy of Sciences

**Dr. Simona Rada,**  
Institutul National de Cercetare-Dezvoltare  
pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare Cluj-Napoca,  
INCDTIM, Donat, nr. 67-103, 400293, Cluj-Napoca, ROMANIA

October 12, 2018

Dear Dr. Simona Rada,

It is our pleasure to invite you for a scientific visit in our Laboratory during the period 15.11.2018 – 25.11.2018, for discussions regarding the scientific data obtained at the neutron spectrometers at the IBR-2 pulsed reactor, within the framework collaboration between National Institute for Research and Development of Isotopic and Molecular Technologies INCDTIM Cluj-Napoca and Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, protocol number 4776-4-18/20.

The accommodation, travel expenses and daily allowance will be covered by the sending Romanian institution side.

Sincerely yours,  
Director of FLNP

:tsov



# Institute of High Energy Physics

Chinese Academy of Sciences

Address: 19B Yuquanlu Road, Shijingshan District, Beijing 100049, CHINA  
Tel: +86-10-88235980 ext 1 Fax: +86-10-88233201 E-mail: [hutd@ihep.ac.cn](mailto:hutd@ihep.ac.cn) Web: [www.ihep.cas.cn](http://www.ihep.cas.cn)

## Invitation Letter

Jan 19, 2018

Dr. Rada Simona  
Gender: "female" Birth date: 29 of January 1972  
National Institute for Research and Development  
for Isotopic and Molecular Technologies  
Donath Street 67-103 P. O. Box 700  
400293 Cluj-Napoca Romania  
E-mail: [simona.rada@itim-cj.ro](mailto:simona.rada@itim-cj.ro)

Dear Dr. Rada Simona,

According to the China-Romania inter-governmental scientific & technological cooperation proposal, I would like to invite you visit Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF), Institute of High Energy Physics (IHEP), Chinese Academy of Sciences from March 5 to 18, 2018.

During your visit, we will carry out our bilateral cooperative researches, including experimental data collections on the Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF) and a seminar. The experimental research refers to the zirconia ceramic samples.

The seminar focuses on the application of the methods based on synchrotron radiation facility for the zirconia ceramics. We hope that your visit will promote all the proposed activities in the framework of our project collaboration with success.

The accommodation and daily allowance during your stay at BSRF will be supported by the Romanian researcher mobility project with the No. PN-III-P1-1.1-MC-2017-1008 and by our institutes in accord with China-Romania inter-governmental scientific & technological cooperation proposal.

Please do not hesitate to contact with me if you have any questions.

I am looking forward to meeting you in Beijing.

Best regards

Sincerely

Prof. Hu Tiand  
Director of Beijing  
Institute of High  
Chinese Academ



# Institute of High Energy Physics

Chinese Academy of Sciences

Address: 19B Yuquanlu Road, Shijingshan District, Beijing 100049, CHINA

Tel: +86-10-88235980 ext 1 Fax: +86-10-88233201 E-mail: hutd@ihep.ac.cn Web: www.ihep.cas.cn

## Invitation letter

Oct 12, 2016

Dr. Rada Simona

Gender: female; Birth date :29<sup>th</sup> of January, 1972

National Institute for Research and Development  
for Isotopic and Molecular Technologies

Donat Street 67-103, P. O. Box 700

400293 Cluj-Napoca, Romania

E-mail: simona.rada@itim-cj.ro

**Dear Dr. Rada Simona,**

According to the China-Romania inter-governmental scientific & technological cooperation proposal, I would like to invite you visit Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF), Institute of High Energy Physics (IHEP), Chinese Academy of Sciences from Nov 9 to 20, 2016.

During your visit, we will carry out our bilateral cooperative researches, including experimental data collection on the Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF) and a seminar. The experimental research refers to the rechargeable batteries with electrodes vitroceraamics obtained by recycling the lead-acid battery. The seminar focuses on the application methods based on synchrotron radiation facility for the rechargeable batteries. We hope that your visit will promote all the proposed activities in the framework of our project collaboration with success.

The accommodation and daily allowance during your stay at BSRF will be supported by our institute in accord with China-Romania inter-governmental scientific & technological cooperation proposal.

The accommodation and daily allowance during your stay at BSRF will be supported by our institute in accord with China-Romania inter-governmental scientific & technological cooperation proposal.

Please do not hesitate to contact with me if you have any questions.

I am looking forward to meeting you in Beijing.

Best regards,

Sincerely yours

Prof. Hu Ti

Director of Beijing Synchrotron Radiation Facility

Institute of High Energy Physics

Chinese Academy of Sciences





Noiembrie 2018, Oral Presentation: Zirconia ceramics for dental applications, S. Rada,  
 Joint Institute of Nuclear Research, Frank Laboratory of Neutron Physics,  
 22 noiembrie 2018, DNICM conference hall, bld. 42a (Dubna, Dr. V. Bodnarchuk).

### Secțiunea 2d) și 2e)

#### CHELTUIELI PRIVIND STOCURILE

Etapa de executie nr. 1 / 2016

MATERII PRIME, MATERIALE CONSUMABILE, PIESE DE SCHIMB,  
 MATERIALE NESTOCATE, ORGANISME VII, PLANTE SAU ANIMALE

Stocuri-Materiale-Etapa-1-Anul-2016 [Compatibility Mode] - Microsoft Excel

Nr.Crt.	Participan	Denumire Document	Document	Document	UM	Cantitate	Valoare Tr	Valoare D	Valoare D	Valoare D	Valoare Totala	
1	UNIVERSITATEA	Creuzet al	FF	5025	2016-11-2	buc	11	2146.19	2146.19	0.00	0.00	2146.19
2	UNIVERSITATEA	Creuzet al	FF	5025	2016-11-2	buc	6	1636.42	1636.42	0.00	0.00	1636.42
3	UNIVERSITATEA	Suport rol	FF	14088	2016-11-2	buc	2	291.00	291.00	0.00	0.00	291.00
4	UNIVERSITATEA	SCA-Role	FF	14088	2016-11-2	set	2	280.80	280.80	0.00	0.00	280.80
5	INSTITUTUL	TONER LH	FF	528	2016-11-1	buc	1	120.00	120.00	0.00	0.00	120.00
6	INSTITUTUL	OXID DE Z	FF	509	2016-11-2	g	25	1110.00	1110.00	0.00	0.00	1110.00
7	INSTITUTUL	OXID DE Y	FF	509	2016-11-2	g	25	1782.00	1782.00	0.00	0.00	1782.00

### CHELTUIELI PRIVIND STOCURILE

Etapa de executie nr. 1 / 2016

#### OBIECTE DE INVENTAR

Export XLS

Nr. crt.	Participant	Denumire	Document justificativ Denumire / Nr / Data	UM	Cantitate	Valoare totala (lei)	Valoare decontata de la buget (lei)
1	Coordonator (CO) - UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Lampa UV UVP XX-15M, 365nm, 15 W	Denumire: FF Nr.: 5556 Data: 24/11/2016	buc	1	1.233,47	suma buget: 1.233,47 total: 1.233,47
2	Coordonator (CO) - UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Mojar si pistol agat diam 125mm	Denumire: FF Nr.: 5025 Data: 28/11/2016	buc	1	2.430,81	suma buget: 2.430,81 total: 2.430,81
<b>TOTAL CHELTUIELI STOCURI - OBIECTE DE INVENTAR</b>						<b>3.664,28</b>	suma buget: 3.664,28 total: 3.664,28

### CHELTUIELI PRIVIND STOCURILE

Etapa de executie nr. 2 / 2017

#### MATERII PRIME, MATERIALE CONSUMABILE, PIESE DE SCHIMB, MATERIALE NESTOcate, ORGANISME VII, PLANTE SAU ANIMALE

Stocuri-Materiale-Etapa-2-Anul-2017 [Compatibility Mode] - Microsoft Excel

Nr.Crt.	Participant	Denumire	Document	Document	Document	UM	Cantitate	Valoare T	Valoare D	Valoare D	Valoare D	Valoare C
5	UNIVERSITATEA	Etuva de laborator	FF	0024413	2017-12-01	buc	1	2499.00	2499.00	0.00	0.00	2499.00
6	UNIVERSITATEA	Memory stick	FF	0024413	2017-12-01	buc	1	39.87	39.87	0.00	0.00	39.87
7	UNIVERSITATEA	Scaun Tau	FF	610051455	2017-12-01	buc.	8	643.76	643.76	0.00	0.00	643.76
8	UNIVERSITATEA	mobiler p	FF	610051455	2017-12-01	buc.	1	1498.96	1498.96	0.00	0.00	1498.96
9	UNIVERSITATEA	Scaun Riv	FF	018723	2017-12-01	buc.	1	380.16	380.16	0.00	0.00	380.16
10	UNIVERSITATEA	Scaun Riv	FF	018724	2017-12-01	buc.	5	1900.79	1900.79	0.00	0.00	1900.79
11	UNIVERSITATEA	Cartus ma	FF	14363	2017-12-01	buc.	1	459.22	459.22	0.00	0.00	459.22
12	UNIVERSITATEA	Cartus Cy	FF	14363	2017-12-01	buc.	1	459.22	459.22	0.00	0.00	459.22
13	UNIVERSITATEA	Cartus ye	FF	14363	2017-12-01	buc.	1	459.22	459.22	0.00	0.00	459.22
14	UNIVERSITATEA	Cartus bla	FF	14363	2017-12-01	buc.	1	424.59	424.59	0.00	0.00	424.59
15	UNIVERSITATEA	Set dual p	FF	14363	2017-12-01	buc.	1	1397.54	1397.54	0.00	0.00	1397.54
16	UNIVERSITATEA	Multifunc	FF	14363	2017-12-01	buc.	1	1141.69	1141.69	0.00	0.00	1141.69
17	UNIVERSITATEA	Presa star	FF	35	2017-12-01	buc.	1	2177.70	2177.70	0.00	0.00	2177.70
18	UNIVERSITATEA	Yttrium(III)	FF	173085	2017-12-11	buc.	1	422.45	422.45	0.00	0.00	422.45
19	UNIVERSITATEA	Nickel(II)	FF	173085	2017-12-11	buc.	1	367.71	367.71	0.00	0.00	367.71
20	UNIVERSITATEA	Cobalt na	FF	173085	2017-12-11	buc.	1	843.71	843.71	0.00	0.00	843.71
21	UNIVERSITATEA	Holmium	FF	173085	2017-12-11	buc.	1	1586.27	1586.27	0.00	0.00	1586.27
22	UNIVERSITATEA	Molybden	FF	173085	2017-12-11	buc.	1	152.32	152.32	0.00	0.00	152.32
23	UNIVERSITATEA	Zirconium	FF	173085	2017-12-11	buc.	1	408.17	408.17	0.00	0.00	408.17
24	UNIVERSITATEA	Clorura de	FF	173082	2017-12-01	buc.	1	45.22	45.22	0.00	0.00	45.22
25	UNIVERSITATEA	Densimet	FF	173082	2017-12-01	buc.	1	130.90	130.90	0.00	0.00	130.90
26	UNIVERSITATEA	Densimet	FF	173082	2017-12-01	buc.	1	130.90	130.90	0.00	0.00	130.90
27	UNIVERSITATEA	Densimet	FF	173082	2017-12-01	buc.	1	130.90	130.90	0.00	0.00	130.90

## CHELTUIELI PRIVIND STOCURILE

Etapa de executie nr. 2 / 2017

### OBIECTE DE INVENTAR

Stocuri-Materiale-Etapa-2-Anul-2017 [Compatibility Mode] - Microsoft Excel

Nr.Crt.	Participant	Denumire	Document	Document	Document	UM	Cantitate	Valoare Tr	Valoare D	Valoare D	Valoare D	Valoare Total
1	INSTITUTUL SCAUN DII	FF	2347	2017-08-1	buc.	3	2232.00	2232.00	0.00	0.00	2232.00	
2	UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Scanner E	123602	2017-12-1	buc.	1	614.00	614.00	0.00	0.00	614.00	
3	UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Impriman	189903952	2017-12-1	buc.	1	250.00	250.00	0.00	0.00	250.00	
4	UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Router Wi	189903952	2017-12-1	buc.	1	447.99	447.99	0.00	0.00	447.99	
5	UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Aparat aei	189903952	2017-12-1	buc.	1	2300.00	2300.00	0.00	0.00	2300.00	
6	UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Switch D-I	189903952	2017-12-0	buc.	1	64.99	64.99	0.00	0.00	64.99	
7	UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Refractor	1563	2017-12-1	buc.	1	2497.81	2497.81	0.00	0.00	2497.81	
8	UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Videoproj	513966	2017-12-1	buc.	1	2141.99	2141.99	0.00	0.00	2141.99	
9	UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	S1628 Con	23339	2017-12-1	buc.	1	2008.72	2008.72	0.00	0.00	2008.72	

## CHELTUIELI PRIVIND STOCURILE

Etapa de executie nr. 3 / 2018

### OBIECTE DE INVENTAR

Export XLS

Nr. crt.	Participant	Denumire	Document justificativ Denumire / Nr / Data	UM	Cantitate	Valoare totala (lei)	Valoare decontata de la buget (lei)
1	Coordonator (CO) - UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Vas de titrare pentru probe cu 20-90mL, Capac cu 5 orificii si suport de sustinere	Denumire: FF Nr.: 255-501362 Data: 30/07/2018	buc.	1	1.848,00	suma buget: 1.848,00 total: 1.848,00
2	Coordonator (CO) - UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Clesti de culoare neagra si rosie tip Alligator	Denumire: FF Nr.: 255-501362 Data: 30/07/2018	buc.	20	224,87	suma buget: 224,87 total: 224,87
3	Coordonator (CO) - UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Matrita pentru pastilarea probelor pentru IR tip SPECAC 13 mm pellet die	Denumire: FF Nr.: 0115 Data: 30/07/2018	buc.	1	1.880,20	suma buget: 1.880,20 total: 1.880,20
4	Coordonator (CO) - UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Imprimanta multifunctionala Multifunctional laser monocrom Brother MFC-L2712DW, A4, Duplex	Denumire: FF Nr.: 199901829471 Data: 16/07/2018	buc.	1	649,99	suma buget: 649,99 total: 649,99
5	Coordonator (CO) - UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Celula electrochimica termostatabila cu capac pentru 5 orificii cu slif	Denumire: FF Nr.: ALS-153-18 Data: 11/09/2018	buc.	1	2.499,00	suma buget: 2.499,00 total: 2.499,00
6	Coordonator (CO) - UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Stand suport tip EDI	Denumire: FF Nr.: ALS-153-18 Data:	buc.	1	2.499,00	suma buget: 2.499,00 total: 2.499,00



## CHELTUIELI PRIVIND STOCURILE

Etapa de execuție nr. 3 / 2018

MATERII PRIME, MATERIALE CONSUMABILE, PIESE DE SCHIMB,  
MATERIALE NESTOCATE, ORGANISME VII, PLANTE SAU ANIMALE

Export XLS

Nr. crt.	Participant	Denumire	Document justificativ Denumire / Nr / Data	UM	Cantitate	Valoare totala (lei)	Valoare decontata de la buget (lei)
1	Coordonator (CO) - UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Oxid de disprosium(III) 99,9 %	Denumire: FF Nr.: 181462 Data: 12/07/2018	g.	25	1.301,86	suma buget: 1.301,86 total: 1.301,86
2	Coordonator (CO) - UNIVERSITATEA TEHNICA DIN CLUJ - NAPOCA	Oxid de samariu(III) 99,9%	Denumire: FF Nr.: 10308 Data: 06/09/2018	g.	10	731,85	suma buget: 731,85 total: 731,85
TOTAL CHELTUIELI STOCURI - MATERIALE						2.033,71	suma buget: 2.033,71 total: 2.033,71

## Secțiunea 2e)

### Studiul structurii și proprietățile moleculelor prin metode teoretice

#### Notiuni introductive

Modelarea computațională este un domeniu nou, care a fost dezvoltat mai mult în ultimii zece ani. Întrucât valorile proprietăților moleculare calculate se apropie foarte mult de rezultatele experimentale, acest domeniu joacă un rol tot mai important în cercetarea experimentală.

Din punct de vedere teoretic, urmăm studii în care să determinăm funcționalele de schimb și corelare optime care să fie folosite în calculul diferitelor proprietăți moleculare prin metode DFT. De asemenea, ne interesează determinarea unor seturi de bază care să se comporte cât mai bine atât din punct de vedere al acurateții cu care sunt calculate proprietățile moleculare cât și din punct de vedere al resurselor de calcul necesare. În sfârșit, suntem interesați de dezvoltarea unor metode hibride de calcul a structurii și proprietăților moleculare, combinații de metode semiempirice (rapide) și non-empirice (de mare acuratețe) care să ofere un bun compromis în studii teoretice ale moleculelor cu un număr mare de atomi.

Mecanica moleculară este un model mecanic clasic care reprezintă molecula ca un grup de atomi și care se păstrează împreună prin arcuri elastice. Structura este optimizată minimizând energia de deformare.

De obicei, metodele de mecanică moleculară determină geometriile moleculare și entalpiile de formare. Pentru studiul geometriei și proprietăților moleculelor se folosesc metodele mecanico-cuantice divizate în două categorii: metode ab initio și semiempirice. Metodele ab initio sunt legate de metodele cuanto-chimice în care toate integralele sunt exact evaluate în decursul calculului. Metodele ab initio includ metoda Hartree-Fock (HF), teoria interacțiunii configuraționale (CI), teoria perturbațiilor (PT). Metodele ab initio care includ corelații post-Hartree-Fock pot avea o precizie comparabilă cu experimental în prezicerea structurii și energiei.

Metodele semiempirice există ca o graniță între metodele ab initio și mecanica moleculară, deoarece folosesc ca și mecanica moleculară parametri derivați din

Lucrare de laborator

experiment care tind spre acuratețe și este o metodă de natură mecanico-cuantică, ca metoda ab initio. Metodele semiempirice neglijează multe integrale cu un grad de dificultate mai ridicat. Eroarea introdusă este compensată prin parametri folosiți. Apoi, procedurile semiempirice pot conduce pentru sisteme cu număr mare de atomi la o mai mare precizie decât calculele ab initio.

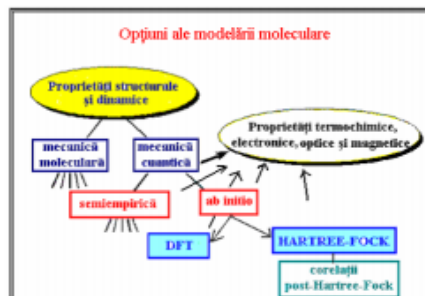


Fig. 1. Opțiuni de modelare moleculară.

Mecanica moleculară este ușor de înțeles, se programează repede, lucrează fără electroni și din acest motiv interpretarea este limitată. Metodele semiempirice sunt metode cuantice, care folosesc numai electronii de valență și au o precizie limitată. Metodele ab initio sunt metode cuantice complete (inclusiv toate interacțiunile), precizie foarte înaltă, necesită mult timp, posibile îmbunătățiri sistematice. Teoria DFT este o metodă cuantică, în principiu exactă, mai solidă decât tradiționala ab initio, precizie variabilă, perfecționări nesistematice.

Metodele semiempirice tratează numai electronii de valență, neglijează toate integralele bielectronice și folosește seturi de bază minimale (orbitale de tip Slater). Rezolvă ecuațiile seculare corect ca în teoria Hartree-Fock. Experiența indică că metodele semiempirice nu pot rezolva probleme ce implică legături de hidrogen, stări de tranziție,



[70]. Dacă dorim o precizie mai mare a rezolvării problemei metodele ab initio sunt cele indicate.

La nivel Hartree-Fock problema este evaluată folosind un număr mare de integrale, proporționale cu puterea a patra a numărului de funcții de bază. În practică, numărul integralelor se poate reduce aproape de puterea a treia pentru moleculele mari, deoarece integralele pentru orbitalii localizați pe atomii îndepărtați nu este necesar să fie calculate deoarece ele sunt oricum foarte aproape de zero.

Folosirea unui model mecanico-cuantic în studiul structurii electronice a unei molecule implică rezolvarea ecuației Schrödinger:

$$H\Psi = E\Psi \text{ sau } H\Psi(r) = E\Psi(r),$$

Operatorul Hamiltonian,  $H$ , depinde de energiile cinetice ( $T$ ) și potențiale ( $V$ ) ale electronilor și nucleului atomului sau moleculei:

$$H = T + V$$

Funcția de undă,  $\Psi$ , oferă informații despre probabilitatea de a găsi electronii în spațiul moleculei și este soluția ecuației de valori proprii.

Rezolvarea ecuației Schrödinger este o problemă dificilă și nu poate fi realizată fără a face unele aproximații. Sunt considerate două aproximații comune:

- aproximația Born-Oppenheimer; separă mișcarea nucleului de cea a electronilor;
- aproximația electronului independent (aproximația Hartree-Fock) unde electronii sunt limitați într-o anumită regiune din spațiu.

În aproximația Born-Oppenheimer, pozițiile nucleelor se consideră fixe în așa fel încât distanțele internucleare sunt constante. Aceasta este o aproximație sensibilă deoarece nucleele masive sunt imobile în comparație cu electronii ușori. Algoritmul de rezolvare este simplu: se modifică ușor geometria (cu fixarea distanțelor internucleare) moleculei și apoi se rezolvă ecuația Schrödinger pentru acea moleculă. Acest algoritim se continuă până găsim o geometrie optimă cu energia cea mai joasă. Funcția de undă totală devine produsul celor două funcții nucleare și electronice:

$$\Psi(e, n) = \Psi(e) \Psi(n)$$

Motivația acestei aproximații este că electronii sunt atât de ușori comparativ cu nucleul încât mișcarea lor poate fi ușor urmărită prin mișcarea nucleului. În practică, această aproximație este de obicei validă. Din acest punct poate fi privită funcția de undă

electronică  $\Psi(e)$  obținută prin rezolvarea ecuației electronice Schrödinger în următoarea variantă:

$$H_e(R_n) \Psi(r_e) = E_e(R_n) \Psi(r_e)$$

Hamiltonianul electronic conține trei termeni: energia cinetică, interacțiunile electrostatice dintre electroni și nucleu, repulsiile electrostatice dintre electroni.

Din acest motiv, rezolvarea ecuației Schrödinger se poate realiza dacă se aproximează energia potențială care ia în considerare interacțiunea medie dintre electronii considerați, iar Hamiltonianul se scrie ca o sumă de funcții monoelectronice.

Pentru calcule moleculare, ecuația SCF Hartree-Fock nu poate fi rezolvată mai departe fără aproximații. Pe parcursul rezolvării ecuațiilor, fiecare orbital SCF,  $\Phi_i$ , este scris ca o combinație liniară de orbitali atomici. De exemplu, pentru molecula de hidrogen, aproximația cea mai simplă este să scriem fiecare orbital spațial SCF ca o combinație de orbitali atomici  $1s$ , fiecare centrați pe unul dintre protoni:

$$\Psi_{1, spatial} = c_1 1s_A + c_2 1s_B$$

Această ipoteză conduce la rezolvarea problemei prin determinarea coeficienților  $c_1$  și  $c_2$ , deoarece cei doi orbitali atomici nu se modifică. Acești orbitali atomici aleși ca să reprezinte orbitalii SCF sunt numiți *seturi de bază sau funcții de bază*.

Seturile de bază cuprind funcții atomice prin a căror combinație liniară se obțin orbitali moleculari. Pentru atomii polielectronici, la care nu se cunosc funcțiile matematice pentru orbitalii atomici, de obicei substituția folosită este fie cea a orbitalilor de tip Slater (STO), fie cea a orbitalilor de tip Gaussian (GTO). Orbitalii de tip Slater oferă o bună reprezentare a orbitalilor atomici deoarece funcția prin care sunt descriși este dependentă de o funcție armonică sferică, constanta de normalizare și o funcție exponențială a distanței nucleu-electron, dar implică mult calcul matematic complicat.

Cele mai utilizate seturi de bază sunt cele de tip STO- $nG$ , formate din orbitali Slater ( $s, p, d$ ) descriși prin câte  $n$  funcții gaussiene. Un set de bază minimal prezintă dezavantajul că fiind rigid nu redă corect contracția sau expansiunea orbitalilor de valență, deoarece exponenții funcțiilor Gauss sunt fixe.

## 2. Partea experimentală

Pentru investigații experimentale sunt folosite spectroscopiile FT-IR, Raman, UV-VIS, RMN și RES. Tehnicile teoretice se bazează pe calcule de tip Ab Initio, teoria funcționalelor de densitate (metode DFT - Density Functional Theory) și metode semiempirice. Din astfel de studii combinate se obține structura geometrică a moleculelor sau a unor clusteri moleculari dar și proprietățile acestora precum: momente de dipol, cuadripol, etc., contante de rotație, sarcini atomice parțiale, energiile și formele orbitalilor moleculari, energii de ionizare și bineînțeles spectre vibraționale, UV-VIS, IR, RES, RMN. Pot fi analizați diferiți conformeri ai unor molecule, pot fi studiate interacțiunile intermoleculare, interacțiunile solut-solvent sau interacțiuni moleculă-strat adsorbant. Studiul legăturilor de hidrogen intra- și intermoleculare reprezintă de asemenea unul dintre obiectivele principale ale unor astfel de studii.

Calculul prin metode teoretice a spectrelor experimentale permite asignarea completă a acestor spectre, atribuirea corectă a benzilor și în final deducerea de informații cantitative și calitative referitoare la interacțiunile intra sau intermoleculare. În plus, metodele teoretice permit analiza unor molecule de viață scurtă, pentru care posibilitățile de analiză experimentală sunt limitate. Pot fi analizate de asemenea molecule de interes biologic (aminoacizi, acizi nucleici: glicină, tirozină, mercaptopurină, acid orotic, radicalii OH, H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>, HO<sub>2</sub>, etc) sau farmacologic (medicamente precum: aspirina, indometacin, piroxicam, metoclopramidă, dofetilide, aripiprazole, complexul mercaptopurina-riboză, pirazinamidă, etc.). De asemenea, sunt studiate molecule de interes din punct de vedere al calității mediului (pesticide precum dinitrofenol, dinitrofenilhidrazină, hexaclorociclohexan, etc).

#### Mod de lucru:

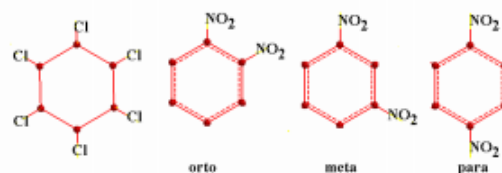
Folosind un program de modelare moleculară (Spartan sau HyperChem) se vor modela structurile a doi compuși care se găsesc în compoziția pesticidelor:

A) Hexaclorociclohexan

B) Dinitrobenzen orto, meta și para.

Se face mai întâi o prooptimizare a moleculei folosind o metoda de mecanica moleculară (MMFF) apoi se continuă optimizarea printr-o metoda semiempirică (PM3 sau AM1).

Se determină geometria optimizată a moleculei – se citește entalpia de formare, energia HOMO (energia corespunzătoare ultimului orbital ocupat cu electroni) și LUMO (energia corespunzătoare primului orbital liber cu electroni).



Se determină distribuțiile orbitalilor HOMO, Homo-1, Homo-2, LUMO, LUMO-1 și LUMO-2 pentru moleculele studiate.

Se determină spectrul teoretic IR pentru geometriile optimizate.

#### Prelucrarea datelor

1. Se completează tabelul:

Compus	Entalpia de formare (kcal/mol)	Energia Homo (eV)	Energia Lumo (eV)	Energia gap (eV)	Moment de dipol (debye)
1					
2					
3					
4					

2. Se determină ordinea de creștere a stabilității termodinamice și cinetice a compusilor din tabel. Se interpretează rezultatele obținute.

3. Se salvează datele obținute pentru distribuțiile orbitalilor homo, homo-1, homo-2, lumo, lumo-1 și lumo-2 într-un document word. Se interpretează rezultatele.

4. Se transferă spectrul IR teoretic obținut într-un document word. Se atribuie benzile de vibrație diferitelor grupări din structura compusilor.



### FISA DISCIPLINEI

#### 1. Date despre program

1.1	Instituția de învățămînt superior	Universitatea Tehnică din Cluj-Napoca
1.2	Facultatea	Facultatea de Ingineria Materialelor și a Mediului
1.3	Departamentul	Ingineria Mediului și Antreprenoriatul Dezvoltării Durabile
1.4	Domeniul de studii	Ingineria și Protecția Mediului în Industrie
1.5	Ciclul de studii	Licența
1.6	Programul de studii/Calificarea	Inginer
1.7	Forma de învățămînt	IF-învățămînt cu frecvență
1.8	Codul disciplinei	21051305

#### 2. Date despre disciplina

2.1	Denumirea disciplinei	<b>Analiză Instrumentală</b>
2.2	Titularul disciplinei	<b>Conf. abil. dr. chim. Simona RADA</b> simona.rada@phys.utcluj.ro
2.3	Responsabil de laborator	<b>Conf. abil. dr. chim. Simona RADA</b> simona.rada@phys.utcluj.ro
2.4	Anul de studii	III
2.5	Semestrul	1
2.6	Evaluarea	Colocviu
2.7	Regimul disciplinei	O/DD

#### 3. Timpul total estimat

An/ Sem	Denumirea disciplinei	Nr. sapt.	Curs			Aplicații			Stud. Ind.	TOTAL	Credit
			[ore/săpt.]			[ore/sem.]					
			S	L	P	S	L	P			
II	<b>Analiză Instrumentală</b>	14	2	1		28	14		42	104	4

3.1	Numar de ore pe saptamina	3	3.2	din care curs	2	3.3	aplicatii	1
3.4	Total ore din planul de inv.	42	3.5	din care curs	28	3.6	aplicatii	14
Studiul individual								Ore

8.2. Aplicații – lucrări de laborator		Metode de predare	Observatii
1	Prezentarea lucrărilor. Protecția muncii. Titrarea acido-bazică	Expunere, conversații, aplicații	On-line
2	Analiza spectralor în infraroșu pentru compusi organici		
3	Studiul structurii și a proprietăților moleculare prin modelare moleculară		
4	Determinarea teoretică a spectrului RMN direct din structura substanței		
5	Complexare		
6	Gravimetria și volumetria cuprului		
7	Titrare potentiometrică		
<b>Bibliografie</b> <b>In biblioteca UTC-N și UBB</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>M. Culea, E. Culea, <i>Metode fizice de analiză</i>, Ed. Risoprint, Cluj-Napoca, 2004.</li> <li>H. Nascu, <i>Metode și Tehnici de Analiză Instrumentală</i>, UT. Press, Cluj-Napoca, 2003.</li> <li>C. Luca, Al. Duca, Al. Crisan, <i>Chimie Analitică și Analiză Instrumentală</i>, EDP, București, 1983.</li> <li>E. Cordoș, <i>Analiză Instrumentală</i>, Univ. Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca, 1988.</li> <li>T. Hodișan, I. Haiduc, C. Cimpoiu, <i>Chimie Analitică</i>, Cartimpex, Cluj-Napoca, 1999.</li> <li>L. Jantschi, S. Bolboacă, <i>Analiză Chimică și Instrumentală Aplicată</i>, Ed. Academic Direct,</li> </ol>			

## Secțiunea 2g)

### CHELTUIELI DE PERSONAL

Etapa de execuție nr. 2 / 2017

Nr. crt.	Structura salariilor care au participat la realizarea etapei de execuție nr. 2 / 2017	Numarul
1	Numarul cercetatorilor	8
2	Numarul cercetatorilor postdoctoranzi	0
3	Numarul doctoranzilor	1
4	Numarul tehnicienilor	0
5	Alți membri	1

Nr. crt.	Persoana	Explicații sume	Luna												
			dec An 2016	ian An 2017	feb An 2017	mar An 2017	apr An 2017	mai An 2017	iun An 2017	iul An 2017	aug An 2017	sep An 2017	oct An 2017	noi An 2017	dec An 2017
6	[Cercetător științific - Studii Superioare] (cercetator) [Coordonator (CO)]		(cod:98781)	(cod:98784)	(cod:98787)	(cod:98790)	(cod:98793)	(cod:98796)	(cod:98799)	(cod:98802)	(cod:98805)	(cod:98808)	(cod:98811)	(cod:98814)	(cod:98817)
		buget:	0,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	0,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00
		norma [%]:	0,00 %	14,20 %	12,52 %	10,89 %	12,52 %	10,89 %	0,00 %	11,92 %	10,89 %	12,14 %	11,38 %	11,38 %	11,38 %
		total:	0,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	0,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00
7	[Doctorand] (doctorand) [Coordonator (CO)]		(cod:98927)	(cod:98930)	(cod:98933)	(cod:98936)	(cod:98939)	(cod:98942)	(cod:98945)	(cod:98948)	(cod:98951)	(cod:98954)	(cod:98957)	(cod:98960)	(cod:98963)
		buget:	0,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	0,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00
		norma [%]:	0,00 %	14,20 %	12,52 %	10,89 %	12,52 %	10,89 %	0,00 %	11,92 %	10,89 %	12,14 %	11,38 %	11,38 %	11,38 %
		total:	0,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	0,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00	1.532,00

### CHELTUIELI DE PERSONAL

Etapa de execuție nr. 3 / 2018

Nr. crt.	Structura salariilor care au participat la realizarea etapei de execuție nr. 3 / 2018	Numarul
	Numarul cercetatorilor	7
	Numarul cercetatorilor postdoctoranzi	0
	Numarul doctoranzilor	1
	Numarul tehnicienilor	0
	Alți membri	1

Nr. crt.	Persoana	Explicații sume	Luna												
			dec An 2017	ian An 2018	feb An 2018	mar An 2018	apr An 2018	mai An 2018	iun An 2018	iul An 2018	aug An 2018	sep An 2018	oct An 2018	noi An 2018	dec An 2018
3	[Cercetător științific - Studii Superioare] (cercetator) [Coordonator (CO)]		(cod:425911)	(cod:425914)	(cod:425917)	(cod:425920)	(cod:425923)	(cod:425926)	(cod:425929)	(cod:425932)	(cod:425935)	(cod:425938)			
		buget:	0,00	1.246,00	1.246,00	1.251,00	1.251,00	1.251,00	1.248,00	1.248,00	1.248,00	1.215,00		11.204,00	
		norma [%]:	0,00 %	14,30 %	14,30 %	10,54 %	10,54 %	10,54 %	10,54 %	10,54 %	10,54 %	10,54 %	10,54 %		
		total:	0,00	1.246,00	1.246,00	1.251,00	1.251,00	1.251,00	1.248,00	1.248,00	1.248,00	1.215,00		11.204,00	
4	[Doctorand] (doctorand) [Coordonator (CO)]		(cod:425941)	(cod:425944)	(cod:425947)	(cod:425950)	(cod:425953)	(cod:425956)	(cod:425959)	(cod:425962)	(cod:425965)	(cod:425968)			
		buget:	0,00	1.246,00	1.246,00	1.278,00	1.251,00	1.251,00	1.248,00	0,00	0,00	0,00		7.520,00	
		norma [%]:	0,00 %	14,30 %	14,30 %	10,58 %	10,54 %	10,54 %	10,54 %	0,00 %	0,00 %	0,00 %			
		total:	0,00	1.246,00	1.246,00	1.278,00	1.251,00	1.251,00	1.248,00	0,00	0,00	0,00		7.520,00	



## Secțiunea 2h)

**SIMTECH**  
Sesiunea de Comunicări Științifice  
a studenților 25 mai 2017

**UNIVERSITATEA TEHNICĂ DIN CLUJ-NAPOCA**  
Facultatea de Ingineria Materialelor și a Mediului

**OSSIMM**  
ORGANIZAREA ȘTIINȚIFICĂ A STUDENȚILOR  
DE INGINERIE MATERIALI ȘI A MEDIULUI

### Locul I

Se acordă studentei/ studentului **CUIBUS DENISA** pentru lucrarea  
*Creșterea primară nuclearea electroni provenit de la o tubul  
auto uscat și depozita acestora cu ajutorul magnet*  
prezentată în cadrul Sesiunii de Comunicări Științifice a Studenților, SIMTECH, ediția  
a VII-a, 25 mai 2017, Cluj- Napoca.

Decan  
Prof.dr.ing.fiz. Ionel Chicinaș

Președinte comisie jurizare  
Conf.dr.ing. Horațiu Vermeșan

**SIMTECH**  
Sesiunea de Comunicări Științifice  
a studenților 31 mai 2018

**UNIVERSITATEA TEHNICĂ DIN CLUJ-NAPOCA**  
Facultatea de Ingineria Materialelor și a Mediului

**OSSIMM**  
ORGANIZAREA ȘTIINȚIFICĂ A STUDENȚILOR  
DE INGINERIE MATERIALI ȘI A MEDIULUI

### Locul I

Se acordă studentei/ studentului **MIHĂILĂ FLORINA** pentru lucrarea  
**RECUPERAREA ELECTROZILOR  
DATERILOR DE PLUMB**  
prezentată în cadrul Sesiunii de Comunicări Științifice a Studenților, SIMTECH,  
Secțiunea **INGINERIA MEDIULUI**....., ediția a IX-a, 31 mai 2018, Cluj- Napoca.

Decan  
Prof.dr.ing.fiz. Ionel Chicinaș

Președinte comisie jurizare  
Prof.dr.ing. Valer Micle

Activator Windows

**SIMTECH**

Sesiunea de Comunicări Științifice  
a studenților 31 mai 2018



Universitatea Tehnică din Cluj- Napoca Facultatea de Ingineria Materialelor și a Mediului

## Premiu special „VIOREL CÂNDEA”

- cel mai bun comunicator -

Se acordă studentei/ studentului **MIHĂILĂ FLORINA LARISA**  
Participanț la Sesiunea de Comunicări Științifice a Studenților, SIMTECH,  
Secțiunea **INGINERIA MEDIULUI**, ediția a IX-a, 31 mai 2018, Cluj- Napoca.

Decan  
Prof.dr.ing.fiz. Ionel Chicinaș



Președinte comisie jurizare  
Prof.dr.ing. Valer Micle



**SIMTECH**

Sesiunea de Comunicări Științifice  
a studenților 17 mai 2019



## Mențiune

Se acordă studentei/ studentului **Cuibus Denisa - Corina** pentru lucrarea

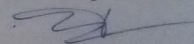
" Electrozi vitroceramici obținuți din reactivi versus electrozi  
reciclați de la bateria auto",

prezentată în cadrul Sesiunii de Comunicări Științifice a Studenților,  
SIMTECH, Secțiunea Ingineria Mediului , ediția a IX - a 17 mai 2019 ,  
Cluj – Napoca.

Decan  
Prof.dr.ing.fiz. Ionel Chicinaș



Președinte comisie jurizare  
Prof.Univ.dr.ing. Valer Micle



# Locul III

Se acordă studentei/ studentului **Pisoiu Delia – Niculina** pentru lucrarea

**"Reciclarea și reutilizarea electrozilor proveniți de la bateriile auto",**

prezentată în cadrul Sesiunii de Comunicări Științifice a Studenților,  
SIMTECH, Secțiunea Ingineria Mediului, ediția a IX - a 17 mai 2019,  
Cluj – Napoca.

Decan  
Prof.dr.ing. fiz. Iănel Chicișan

Președinte comisie jurizare  
Prof.Univ.dr.ing. Valer Miclă

## Cercetări privind reciclarea electrozilor proveniți de la o baterie auto uzată și doparea acestora cu dioxid de mangan

D. Cuișus<sup>1,2</sup>, S. Rada<sup>1,3</sup>, H. Vermeșan<sup>1</sup>, P. Păicuță<sup>1</sup>, E. Culea<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>Dept. de Fizică și Chimie, Universitatea Tehnică din Cluj-Napoca, Romania  
<sup>2</sup>Dept. Ingineria Mediului și Ingineria Sistemelor Dezvoltate Durabile, Universitatea Tehnică din Cluj-Napoca, Romania

\*Correspondent author: simona.rada@phys.utcn.ro, denisa.cuibus@yahoo.com

Keywords: baterie auto uzată, reciclare, difracție de raze X, voltmetrie ciclică

### REZUMAT

Astăzi, sute de milioane de baterii sunt produse în lumea dezvoltată și în cea în dezvoltare – 980 milioane în anul 2009, 1.015 milioane în 2010, 2.000 milioane în 2020 – ceea ce înseamnă o cantitate de plumb (bateriile auto) să fie aurul de pe secolul XXI de succes al tuturor timpurilor. Metodele de reciclare ale plumbului din masele active sulfatate și oxidate ale bateriilor auto sunt sofisticate, costisitoare și poluante. Din acest motiv necesitatea reciclării bateriilor auto utilizând metode nepoluante, cu cost scăzut și consum de energie redus rămâne o problemă a lumii moderne. Dezvoltarea unei soluții tehnologice cu cost redus pentru reciclarea masei active din plăcile electrozilor bateriei auto a fost propusă recent în Ref. 1 prin metoda submicronizării. Scopul prezentei lucrări constă în: reciclarea prin tehnologia eco-inovativă propusă în Ref. 1 a masei active din plăcile electrozilor bateriei auto uzate și încorporarea de dioxid de mangan în sistemul de electrozilor și în compoziția lor pentru obținerea unui produs de calitate superioară.

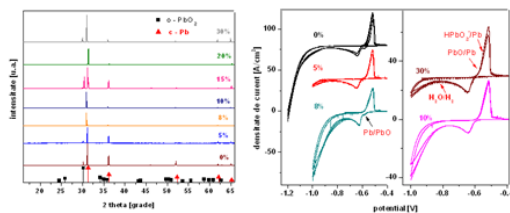


Fig. 1a) Difragtoamele de împrăștiere cu raze X pentru sistemul vitros cu compoziția  $x\text{MnO}_2 \cdot (100-x)[4\text{PbO} \cdot \text{Pb}]$ .  
Fig. 1b) Voltamogramele ciclice pentru sistemul vitros cu compoziția  $x\text{MnO}_2 \cdot (100-x)[4\text{PbO} \cdot \text{Pb}]$ .

Analiza difragtoamelor de împrăștiere cu raze X prezentată în Fig. 1a) indică prezența a două faze cristaline dominante în probele obținute, și anume: plumb metallic și PbO, cu structuri cristaline diferite și în proporții diferite. Probleme rezolvate au fost: folosirea ca electrozi de lucru în măsurătorile de voltmetrie ciclică, iar ca electrolit: a) soluția de acid sulfuric de concentrație 38%. Voltamogramele ciclice prezentate în Fig. 1b) demonstrează performanțe electrochimice bune ale materialelor electrozilor folosite. De asemenea, o reversibilitate bună a voltamogramelor s-a obținut în cazul probei cu  $x=5\%$  moli  $\text{MnO}_2$ , motiv pentru care propunem ideea încorporării de  $\text{MnO}_2$  în reciclarea electrozilor bateriei auto.

### Referințe bibliografice

[1] S. Rada et al., Journal of Electroanalytical Chemistry 780, 187, (2016).

## Recuperarea electrozilor din bateriile de plumb

L. Mihailă<sup>1</sup>, H. Vermeșan<sup>1</sup>, S. Rada<sup>2,3</sup>, S. Macavei<sup>1</sup>, M. Rada<sup>2</sup>  
<sup>1</sup>Dept. Ingineria Mediului și Ingineria Sistemelor Dezvoltate Durabile, Universitatea Tehnică din Cluj-Napoca, Romania  
<sup>2</sup>Dept. de Fizică și Chimie, Universitatea Tehnică din Cluj-Napoca, Romania  
<sup>3</sup>Institutul Național de Cercetare Dezvoltare pentru Tehnologii Izotopice și Moleculare, Cluj-Napoca, Romania

\*Correspondent author: larisa.mihaila@yahoo.com, horatiu.vermesan@amad.utcn.ro, simona.rada@phys.utcn.ro

Keywords: baterie auto uzată, acumulatori plumb-acid, reciclare, voltmetrie ciclică, spectrometrie IR.

### REZUMAT

În anul 2014 s-a estimat că aproximativ 2.46 milioane de tone de plumb secundar au fost generate sub formă de baterii de plumb, cu plumb uzat. Problema care apare în cazul recuperării plumbului și a altor substanțe chimice, din masele active sulfatate și oxidate ale plăcilor bateriilor cu plumb uzate constă în găsirea unui procedeu de reciclare ecologic, mai puțin complex și cât mai economic din punct de vedere al consumurilor materiale și energetice, care să permită realizarea unui randament de circa 95%, simultan cu o puritate corespunzătoare a substanțelor recuperate. Apoi, energia și timpul folosit pentru a converti oxizii și sulfurați de plumb în metal, care ulterior este reconverți în oxizi, constituie de departe obiectivul esențial vizat de îmbunătățirea practicii prezente. Dezvoltarea unei soluții ecologice și cu cost redus pentru reciclarea masei active din plăcile electrozilor bateriei auto a fost propusă recent în Ref. 1 prin metoda submicronizării. Într-un articol publicat recent în Ref. 2 autorii au demonstrat că prin doparea cu un conținut potrivit de  $\text{MnO}_2$  a plumbului reciclat nu au loc reacții de evoluție ale hidrogenului, sunt îmbunătățite proprietățile electrochimice și voltamograma ciclică prezintă reversibilitate bună.

Scopul prezentei lucrări constă în: compararea structurii și a proprietăților electrochimice ale materialelor provenite de la electrozii reciclați de la două tipuri de baterii auto și dopate atât cu dioxid de mangan cât și cu oxid de cupru în vederea îmbunătățirii performanțelor conductive și în reîncăzarea noilor produși obținuți ca electrozi la baterie auto.

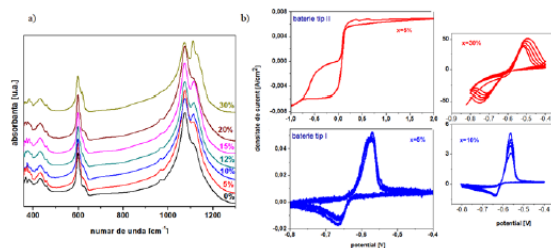


Figura 1 a) Spectrele IR ale sistemului vitros cu compoziția  $x\text{CuO} \cdot 5\text{MnO}_2 \cdot (95-x)[4\text{PbO} \cdot \text{Pb}]$  unde  $x=0, 5, 10, 12, 15, 20$  și  $30\%$  moli  $\text{CuO}$  provenite de la baterie de tip II.  
b) Voltamogramele ciclice ale sistemului vitros cu compoziția  $x\text{CuO} \cdot 5\text{MnO}_2 \cdot (95-x)[4\text{PbO} \cdot \text{Pb}]$  unde  $x=5, 10$  și  $30\%$  moli  $\text{CuO}$  provenite de la baterie de tip I sau II. Probele reciclate au fost utilizate ca electrozi de lucru în măsurătorile de voltmetrie ciclică.

O reversibilitate bună a voltamogramelor ciclice s-a obținut în cazul probei cu  $x=5\%$  moli  $\text{CuO}$  indiferent de tipul bateriei, motiv pentru care propunem ideea încorporării de  $\text{CuO}$  în reciclarea electrozilor bateriei auto.

### Referințe bibliografice

[1] S. Rada et al., Journal of Electroanalytical Chemistry 780, 187, (2016).  
[2] S. Rada et al., Electrochimica Acta 268, 332, (2018).



## Electrozii vitroceramici obținuți din reactivi versus electrozii reciclați de la bateria auto

D. Cuișus<sup>1\*</sup>, H. Vermeșan<sup>1</sup>, E. Culea<sup>2</sup>, S. Rada<sup>3, 4</sup>

<sup>1</sup>Departamentul de Inginerie Medicină și Antropometrie, Dezvoltării Durabile, Universitatea Tehnică din Cluj-Napoca, România

<sup>2</sup>Departamentul de Fizică și Chimie, Universitatea Tehnică din Cluj-Napoca, România

<sup>3</sup>Institutul Național de Cercetare Dezvoltare pentru Tehnologii Izotopice și Moleculare, Cluj-Napoca, România

\*Autor corespondent: denisa.cuibus@yahoo.com, simona.rada@phys.utcluj.ro

Cuvinte cheie: Pb, PbO<sub>2</sub>, MnO<sub>2</sub>, electrozi, reciclare, difracție de raze X, voltametrie ciclică

### REZUMAT

Bateriile consumate nu mai sunt ceea ce au fost la început deoarece prin folosire se schimbă atât din punct de vedere fizic, cât și chimic. Electrozii de la bateria auto (anodul din Pb și catodul din PbO<sub>2</sub>), de exemplu, se pot deforma și coroda astfel încât un circuit electric nu mai poate avea loc, iar reacțiile chimice pot să nu fie complet reversibile după reîncărcare. Ambii electrozi sunt baterii regenerabile care pot fi reîncărcate de mai multe ori, astfel că reacțiile chimice trebuie să fie reversibile prin debitarea unui curent în sens invers. În consecință, componentele bateriei reciclate au nevoie de tratamente speciale pentru a fi transformate în electrozi cu performanțe electrochimice optimizate pentru baterii reîncărcabile.

Scopul acestei lucrări este de a compara structura și performanțele electrochimice ale unor materiale obținute 1) din reactivii din laborator, respectiv PbO<sub>2</sub>, Pb și MnO<sub>2</sub> (folosiți pentru îmbunătățirea proprietăților conductive) și 2) din masa activă a plăcilor uzate de la o baterie auto dezasamblată și adăos de diferite conținuturi de MnO<sub>2</sub>, în vederea unor aplicații ca electrozi la baterii auto. Un astfel de studiu comparativ este obligatoriu pentru o descriere corectă a proceselor de la anod și pentru alegerea trăsăturilor optime de proiectare ale electrozilor în domeniul acumulatorului de plumb. Probele vor fi preparate în ambele cazuri prin metoda subțirii topiturii descrisă în Ref. [1, 2].

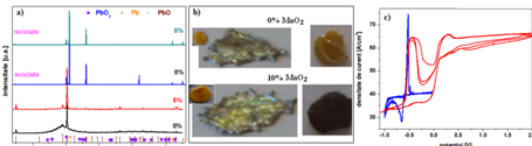


Fig. 1 a) Difracțograme cu raze X, b) Pore FujiFilm, c) Voltamograma ciclică înregistrată în soluție de 5M acid sulfuric ale materialelor pe bază de PbO<sub>2</sub>-Pb-MnO<sub>2</sub>, preparate folosind ca sursă de PbO<sub>2</sub> și Pb reactivii din laborator sau electrozii uzati de la bateria auto.

Analiza comparativă a rezultatelor obținute din diferite tehnici de investigare pentru cele două tipuri de materiale preparate indică rolul important al MnO<sub>2</sub> în performanțele electrochimice ale electrozilor. Un conținut potrivit de MnO<sub>2</sub> în matricea pe bază de PbO<sub>2</sub>-Pb poate înlătura procesele de evoluție ale hidrogenului și minimizează fenomenul de pasivare a electrozilor anodici prin implicarea ionilor de mangan în procese redox, care cresc intensitatea curentului rezidual în domeniul de potențial 0 și 2V.

### Referințe bibliografice

- [1] S. Rada, D. Cuișus, H. Vermeșan, M. Rada, E. Culea, *Electrochimica Acta* 268, 332, (2018).
- [2] S. Rada, M. Zagari, M. Rada, E. Culea, L. Bolundur, M. Ungureșan, M. Pica, *Ceramics International* 42(6), 3921, (2016).

## Reciclarea și reutilizarea electrozilor proveniți de la bateriile auto

D. Piscoiu<sup>1\*</sup>, S. Rada<sup>2,3</sup>, A. Popa<sup>1</sup>, H. Vermeșan<sup>1</sup>, M. Rada<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Dept. Ingineria Mediului și Antreprenoriatul Dezvoltării Durabile, Universitatea Tehnică din Cluj-Napoca, România

<sup>2</sup>Departamentul de Fizică și Chimie, Universitatea Tehnică din Cluj-Napoca, România

<sup>3</sup>Institutul Național de Cercetare Dezvoltare pentru Tehnologii Izotopice și Moleculare, Cluj-Napoca, România

\*Autor corespondent: delapiscoiu95@gmail.com, simona.rada@phys.utcluj.ro

Cuvinte cheie: baterie auto uzată, reciclare, voltametrie ciclică, spectroscopie IR

### REZUMAT

Colectarea selectivă, reciclarea bateriilor auto și refolosirea lor sunt soluții cu efecte imediate asupra vieții cotidiene. Prin colectare și reciclare se reduce consumul de resurse naturale și se protejează natura, iar prin reutilizarea electrozilor, se reduce poluarea solului, apei și aerului. Bateria ideală este cea care este reciclabilă ușor, poate fi manevrată în siguranță și are un nivel superior de performanță pentru aplicația ei specifică. Reciclarea electrozilor de la acumulatorul de plumb poate fi realizată printr-o metodă eco-inovativă, cu costuri mici și prietenoasă pentru mediu [1, 2].

Accesul lucrare are ca scop recuperarea masei active din plăcile electrozilor acumulatorilor auto uzati, optimizarea lor și reutilizarea înapoi în mediul de unde au provenit. În acest sens, reciclarea electrozilor se realizează prin metoda subțirii topiturii iar în vederea îmbunătățirii performanțelor acestea sunt dopate cu trioxid de stibiu (pentru îmbunătățirea proprietăților mecanice) și oxid de cupru (pentru proprietăți conductive). Principalele obiective ale lucrării sunt: i. investigarea structurii materialelor reciclate de la electrozii unei baterii auto uzate și dopate cu trioxid de stibiu și oxid de cupru (II) prin metode spectroscopice de analiză și ii. reutilizarea noilor materiale obținute ca electrozi la baterii reîncărcabile.

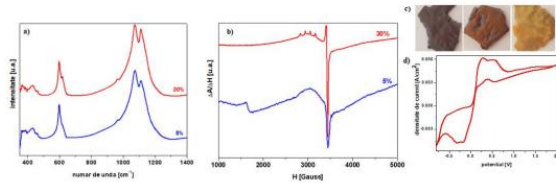


Figura 1 a) Spectrele FTIR, b) spectrele RES, c) Pore Fuji-Film, d) Voltamograma ciclică ale sistemului reciclat și dopat având compoziția xCuO-10Sb<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-(90-x)(4PbO<sub>2</sub>-Pb) unde x=0-30 % moli CuO.

Performanțele electrochimice ale materialelor reciclate și dopate cu ioni de cupru și stibiu au fost demonstrate prin măsurători de voltametrie ciclică și voltametrie liniară. Aceste investigații au fost efectuate cu un Potentiostat / Galvanostat Autolab PGSTAT 302N controlat și interfațat prin intermediul softului NOVA 2.1. și conectat la o celulă electrochimică în care electrozii de lucru au fost materialele preparate, contra-electrod s-a utilizat un electrod de platină iar ca electrod de referință s-a folosit un electrod de calomel de tipul Hg/Hg<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/KCl.

Analiza comparativă a rezultatelor din diferite tehnici de investigare indică faptul că un conținut de x=5% CuO și 10% Sb<sub>2</sub>O<sub>3</sub> adăugat în compoziția materialelor reciclate îmbunătățește performanțele electrochimice ale acestora și le recomandă pentru aplicații ca noi electrozi anodici la bateria auto.

### Referințe bibliografice

- [1] S. Rada et al, *Journal of Electroanalytical Chemistry* 780, 187, (2016).
- [2] S. Rada et al, *Electrochimica Acta* 268, 332, (2018).





**NATIONAL INSTITUTE FOR RESEARCH AND  
DEVELOPMENT OF ISOTOPIC AND MOLECULAR  
TECHNOLOGIES**

67-103, Donat St., 400293, Cluj-Napoca, ROMANIA  
Tel.: +40-264-584037; Fax: +40-264-420042; GSM: +40-731-030060  
e-mail: [itim@itim-cj.ro](mailto:itim@itim-cj.ro), web: <http://www.itim-cj.ro>



Nr. 3038 / 02.10.2017

INVITATION LETTER

Professor Dr. Jing ZHANG

Gender: female

Beijing Synchrotron Radiation Facility, Institute of High Energy Physics  
Chinese Academy of Sciences, 19B Yuquan Road, Shijingshan District, Beijing 100049,  
China

Dear Professor Dr. Jing ZHANG,

Based on the Romanian - Chinese Scientific Cooperation Agreement, the National Institute for Research and Development of Isotopic and Molecular Technologies - INCDTIM Cluj-Napoca has the pleasure to invite you to visit our Institute from 10<sup>th</sup> to 24<sup>th</sup> November 2017.

During your visit, research activities will be carried out in the framework of PN3-P3-239 / 26.09.2016 Project - **Rechargeable batteries with electrodes vitrocereamics obtained by the recycling of the lead-acid battery**, and seminars, regarding the analysis of experimental data measured at Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF) - Institute of High Energy Physics of the Chinese Academy.

During your stay in Romania, costs will be supported by our Institute on the basis of Romania - China Scientific Collaboration Agreement and according to the research project PN3-P3-239 / 26.09.2016.

For any further details and information, please feel free to contact us.  
We look forward to meet you in Cluj-Napoca.

Sincerely yours,

General Manager,  
Dr. Ing. Adrian B



67-103, Donat St., 400293, Cluj-Napoca, ROMANIA  
Tel.: +40-264-584037; Fax: +40-264-420042; GSM: +40-731-030060  
e-mail: [itim@itim-cj.ro](mailto:itim@itim-cj.ro), web: <http://www.itim-cj.ro>



Nr. 3039 / 02.10.2017

## INVITATION LETTER

Professor Dr. Kurash IBRAHIM

Gender: male

Beijing Synchrotron Radiation Facility, Institute of High Energy Physics  
Chinese Academy of Sciences, 19B Yuquan Road, Shijingshan District, Beijing 100049,  
China

Dear Professor Dr. Kurash IBRAHIM,

Based on the Romanian - Chinese Scientific Cooperation Agreement, the National Institute for Research and Development of Isotopic and Molecular Technologies - INCDTIM Cluj-Napoca has the pleasure to invite you to visit our Institute from 10<sup>th</sup> to 24<sup>th</sup> November 2017.

During your visit, research activities will be carried out in the framework of PN3-P3-239 / 26.09.2016 Project - **Rechargeable batteries with electrodes vitrocereamics obtained by the recycling of the lead-acid battery**, and seminars, regarding the analysis of experimental data measured at Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF) - Institute of High Energy Physics of the Chinese Academy.

During your stay in Romania, costs will be supported by our Institute on the basis of Romania - China Scientific Collaboration Agreement and according to the research project PN3-P3-239 / 26.09.2016.

For any further details and information, please feel free to contact us.

We look forward to meet you in Cluj-Napoca.

Sincerely yours,

General Manager,



**NATIONAL INSTITUTE FOR RESEARCH AND  
DEVELOPMENT OF ISOTOPIC AND MOLECULAR  
TECHNOLOGIES**

67-103, Donat St., 400293, Cluj-Napoca, ROMANIA  
Tel.: +40-264-584037; Fax: +40-264-420042; GSM: +40-731-030060  
e-mail: [itim@itim-cj.ro](mailto:itim@itim-cj.ro), web: <http://www.itim-cj.ro>



Nr. 2036 / 02.10.2017

INVITATION LETTER

Dr. Pengfei An

Gender: male birth date: 27.09.1985

Beijing Synchrotron Radiation Facility, Institute of High Energy Physics  
Chinese Academy of Sciences, 19B Yuquan Road, Shijingshan District, Beijing 100049,  
China

Dear Dr. Pengfei An,

Based on the Romanian - Chinese Scientific Cooperation Agreement, the National Institute for Research and Development of Isotopic and Molecular Technologies - INCDTIM Cluj-Napoca has the pleasure to invite you to visit our Institute from 10<sup>th</sup> to 24<sup>th</sup> November 2017.

During your visit, research activities will be carried out in the framework of PN3-P3-239 / 26.09.2016 Project - **Rechargeable batteries with electrodes vitroceraamics obtained by the recycling of the lead-acid battery**, and seminars, regarding the analysis of experimental data measured at Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF) - Institute of High Energy Physics of the Chinese Academy.

During your stay in Romania, costs will be supported by our Institute on the basis of Romania - China Scientific Collaboration Agreement and according to the research project PN3-P3-239 / 26.09.2016.

For any further details and information, please feel free to contact us.

We look forward to meet you in Cluj-Napoca.

Sincerely yours,

General Manager,  
Dr. Ing. Adrian BO





Noiembrie 2017 – Laboratorul C410, B-dul Muncii: prof. dr. Jing Zhang, prof. dr. Ibrahim Kurash, Dr. Pengfei An.  
Seminar – Glasses and Vitroceramics: Spectroscopic Characterization, Molecular Modeling Simulations and  
Cyclic Voltammetry (S. Rada).



Noiembrie 2017 – Laboratorul C418, B-dul Muncii: prof. dr. Jing Zhang, prof. dr. Ibrahim Kurash, Dr. Pengfei An.  
Determinarea spectrelor IR (S. Rada).





Nr. 180 / 18.06.2019

### INVITATION LETTER

**Professor Dr. Shengqi CHU**

Gender: male  
Institute of High Energy Physics, Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF),  
Chinese Academy of Sciences, 19B Yuquan Road, Shijingshan District, Beijing 100049, China

Dear **Professor Dr. Shengqi CHU**,

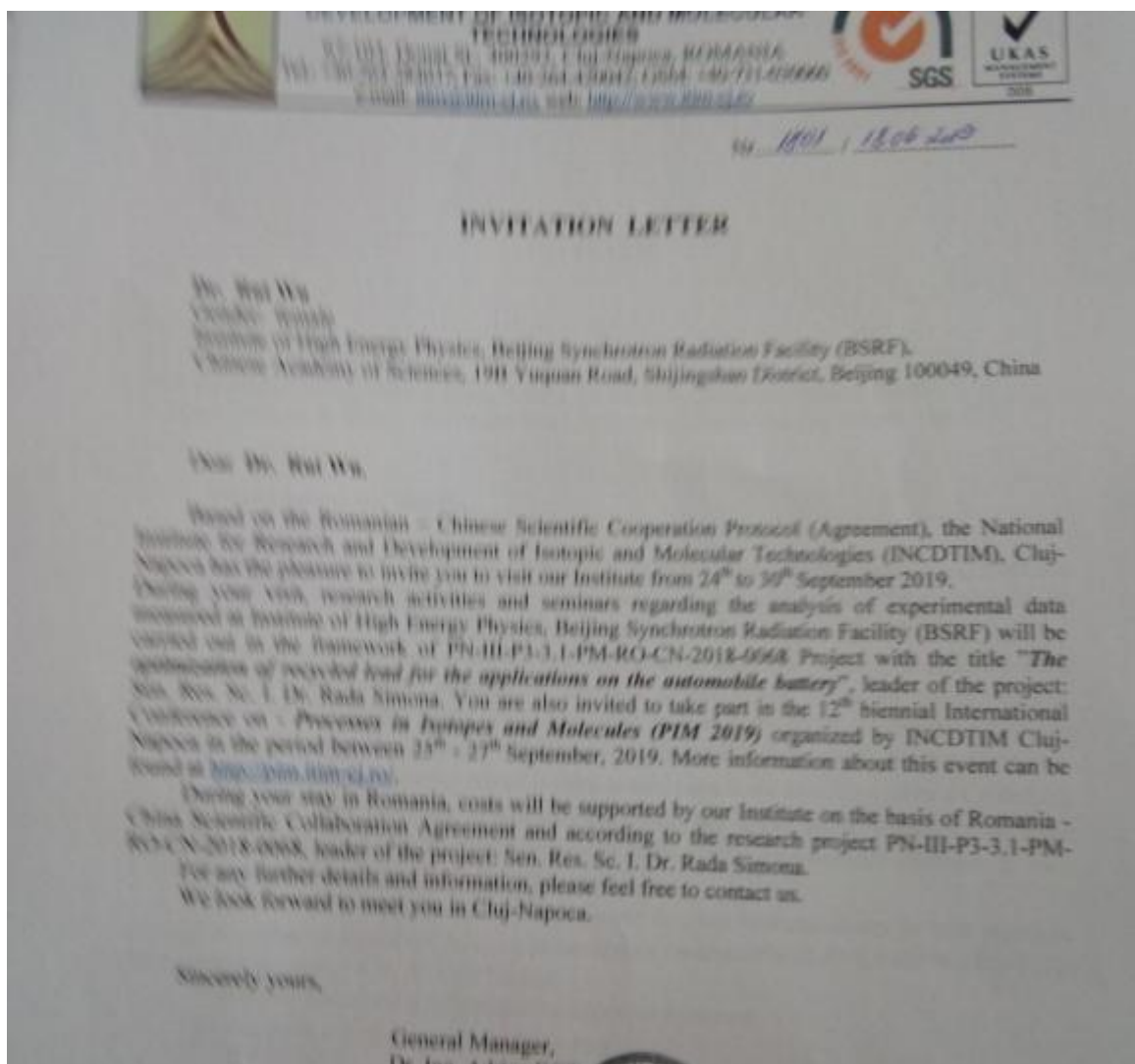
Based on the Romanian – Chinese Scientific Cooperation Protocol (Agreement), the National Institute for Research and Development of Isotopic and Molecular Technologies (INCDTIM), Cluj-Napoca has the pleasure to invite you to visit our Institute from 24<sup>th</sup> to 30<sup>th</sup> September 2019. During your visit, research activities and seminars regarding the analysis of experimental data measured at Institute of High Energy Physics, Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF) will be carried out in the framework of PN-III-P3-3.1-PM-RO-CN-2018-0068 Project with the title "*The optimization of recycled lead for the applications on the automobile battery*", leader of the project: Sen. Res. Sc. I. Dr. Rada Simona. You are also invited to take part in the 12<sup>th</sup> biennial International Conference on - *Processes in Isotopes and Molecules (PIM 2019)* organized by INCDTIM Cluj-Napoca in the period between 25<sup>th</sup> - 27<sup>th</sup> September, 2019. More information about this event can be found at <http://pim.itim-cj.ro/>.

During your stay in Romania, costs will be supported by our Institute on the basis of Romania - China Scientific Collaboration Agreement and according to the research project PN-III-P3-3.1-PM-RO-CN-2018-0068, leader of the project: Sen. Res. Sc. I. Dr. Rada Simona.

For any further details and information, please feel free to contact us.  
We look forward to meet you in Cluj-Napoca.

Sincerely yours,

General Manager,  
Dr. Ing. Adrian BOY



Noiembrie 2019 – Dr. Wu Rui și Dr. Shengqi Chu în vizită la UTCN.

## Secțiunea 4h)

2016

" "

2016



JOINT RESEARCH PROTOCOL No. 4587-4-16/17

The Joint Institute for Nuclear Research Laboratory of Neutron Physics, Dubna, Russian Federation and Technical University of Cluj-Napoca, Romania have signed this protocol with the purpose of integrating their efforts and reducing the time of obtaining results in mathematical and experimental background for studies of the unconventional glasses, vitroceraamics, alloys, nanostructures in accordance with the topical plans for research of collaborating organizations.

1. The parties commit themselves to perform the joint investigations and developments according to an agreed programme within the framework of the theme(s):

Theme: 04-4-1121-2015/2017

Investigation of Condensed Matter by Modern Neutron Scattering Methods

2. Location of the research and developments:

FLNP- JINR Dubna and Technical University of Cluj-Napoca (UTC-N)

3. Schedule of performing joint research

No.	Title of research work and stages	Period of work (year, quarter)		Performing institutions
		From	To	
1	Preparation of samples	II quarter 2016	IV quarter 2016	JINR, UTC-N and third parties
2	Experimental studies at IBR-2 pulsed reactor	IV quarter 2016	II quarter 2017	JINR, UTC-N and third parties
3	Preparation of scientific reports and papers	I quarter 2017	IV quarter 2017	JINR, UTC-N and third parties



5. In the course of conducting joint research under the present protocol, the institutions plan to achieve the following specific results: Obtaining information about the structure of modern materials, such as unconventional glasses, vitroceraamics, alloys, nanostructures using by neutron diffraction, Fourier-diffractometry, polarized and small-angle neutron scattering techniques at the IBR-2 pulsed reactor.
6. The information on the joint research work and its results is confidential. The parties are obliged not to disclose it to a third party or persons without a mutual agreement.
7. The publication of the results of the research carried out under this protocol shall be performed jointly through additional coordination between the collaborating institutions. Registration of applications on the inventions and discoveries resulting from the joint research shall be entrusted by the parties to the patent service of **JINR** and **Cluj-Napoca (UTC-N)** which coordinates the order of registration, volume of patent protection, countries of patenting and the condition of using the inventions with the patent service of the other party, and informs it on the results of consideration of applications within a two-month period of time beginning from the date of obtaining a decision of the invention department.
8. Experimental facilities (equipment, techniques, technologies), created in the course of conducting research work under the present protocol, shall be the property of the participating parties.
9. The obtained results are supposed to be used at Joint institute for Nuclear Research (JINR, Dubna) and at Technical University of Cluj-Napoca (UTC-N) with the purpose of achieving a better understanding about the structure of modern materials, such as unconventional glasses, vitroceraamics, alloys and nanostructures.
10. In case of possibility of using the results of the research work for commercial purposes, the parties shall formulate the conditions of such use by an additional agreement.
11. The employees of the institutions, who are sent on visits for conducting the research work under the present protocol, shall be obliged to strictly observe the routine of work, labor protection rules and safety precautions as well as other regulations in force in the receiving institution.
12. The present protocol shall be effective from the date of its approval by the collaborating institutions until **31. 12. 2017**.
13. The present protocol can be extended, amended or terminated by mutual consent of the parties. All changes shall be formalized by a new protocol or by a corresponding exchange of letters. The party wishing to terminate the protocol shall give at least three months' notice to the other party.
14. The period of validity of the protocol is extended till " \_\_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_\_  
on the basis of

15. The following persons are appointed to be responsible for solving organizational, scientific and technical questions related to the fulfillment of this protocol, for the duly informing of the patent services about the inventions as well as for conducting the prescribed instruction of visiting specialists:

<p><b>from JINR</b> (name, position)</p>	<p><b>D. P. Kozlenko, head of department</b> <b>V. I. Bodnarchuk, group leader</b> <b>R. V. Erhan, researcher</b></p>
<p><b>From UTC-N</b> (name, position)</p>	<p><b>E. Culea, head of department</b> <b>S. Rada, associate professor</b></p>





UNIVERSITATEA TEHNICĂ DIN CLUJ-NAPOCA	
INTRĂRI NR.	25915
IESIRE	
DATA	14.10.2016

ANEXA VII/ la contractul de finantare nr.....

Nr. Inregistrare Coordonator

Nr. Inregistrare P 1

Nr. Inregistrare Agent Economic P2  
24.5/12.10.2016

28/12.10.2016

### ACORD FERM DE COLABORARE

(Conditii minime<sup>1</sup>)

Încheiat în cadrul competiției Bridge Grant 2016

Domeniu 5- Sanatate (inclusiv stiinta medicamentului)

1. DENUMIREA PROIECTULUI: Expertizarea oxidului de zirconiu stabilizat parțial cu alți oxizi pentru aplicații în domeniul stomatologic- PN-III-P2-2.1-BG-2016-0077 – acronim proiect (ZirOxStoma)

### 2. ORGANIZAȚIILE PARTENERE ÎN PROIECT

Denumirea organizației participante în proiect	Acronim organizație	Tip organizație	Rolul organizației în proiect (Coordonator/partener)
UNIVERSITATEA TEHNICĂ- CLUJ NAPOCA	UTCN	UNIVERSITATE	COORDONATOR
INSTITUTUL NATIONAL DE CERCETARE-DEZVOLTARE PENTRU TEHNOLOGII IZOTOPICE SI MOLECULARE – CLUJ NAPOCA	INCDTIM	INSTITUT NATIONAL DE CERCETARE-DEZVOLTARE	PARTENER 1
ZIRCON DENT SRL	ZIRCONDENT	AGENT ECONOMIC	PARTENER 2

### 3. DATE DESPRE PARTENERI

**CO** – Universitatea Tehnică , cu sediul în Cluj Napoca, Cod 400114, tel: +4 0264 401 200, fax: +4 0264 592 055, e-mail: <http://www.utcluj.ro>, înregistrata la Registrul Comerțului nr. J12/4014/2008, cod fiscal 4288306, cont bancar IBAN: RO75TREZ21620F332000XXXX, Trezoreria TREZORERIA Cluj-Napoca , reprezentata prin RECTOR- Prof.univ.dr.ing. Vasile Topa, Director economic- Ec. Adriana OCHIS si Director de proiect- Conf.univ.dr.abil. Simona RADA, tel. 0743170972, Fax: +4 0264 592 055, email: [radasimona@yahoo.com](mailto:radasimona@yahoo.com) ,

**PI** – Institutul National de Cercetare pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare, cu sediul în Cluj Napoca, Cod 400293, tel: +40 264 58 40 37, fax: +40 264 42 00 42, e-mail: [itim@itim-cj.ro](mailto:itim@itim-cj.ro).

<sup>1</sup> În funcție de necesități, membrii consorțiului pot adăuga și alte prevederi, care nu contravin contractului de finanțare și legislației în vigoare

înregistrată la Registrul Comerțului nr. J12/773/2000, cod fiscal 13221445, cont bancar IBAN: RO74TREZ2165069XXX009829, Trezoreria TREZORERIA Cluj-Napoca, reprezentată prin DIRECTOR GENERAL- Dr. Ing. Adrian BOT, Director economic- Dr. Diana NICOARA și Responsabil de proiect Dr. Ing. Marius RADA, tel. 0758757308, Fax: +40 264 42 00 42, email: radamarius@yahoo.com,

Agent Economic ZIRCON DENT SRL, cu sediul în Cluj Napoca, Cod 400690, tel: +40264436624, fax: +40727859842, e-mail: zircondent@gmail.com, înregistrată la Registrul Comerțului nr. J12/1943/2007, cod fiscal 21647108, cont bancar IBAN: 21647108, Trezoreria Banca Transilvania SA- Cluj Napoca, reprezentată prin DIRECTOR – Dr. Radu HENDEA, Contabil sef- Ec. Bianca OLARI, Responsabil de proiect- Dr. Marius MANOLE, tel. 0741040077, Fax: +40727859842, email: mnoie22@yahoo.com,

#### 4. OBIECTIVELE SPECIFICE ALE PARTENERIATULUI

Obiectivele proiectului ZirOxStoma sunt:

- Sinteza și caracterizarea unor oxizi de zirconiu tetragonal stabilizați parțial cu alți oxizi biocompatibili, care îl transformă în material ideal în lucrările stomatologice;
- Caracterizarea efectelor oxizilor stabilizatori asupra proprietăților și a modificărilor de culoare ale materialelor obținute;
- Integrarea produșilor cu caracteristici superioare în domeniul stomatologic.

#### 5. PERIOADA DE PARTENERIAT ÎN CADRUL PROIECTULUI

31.09.2016-30.09.2018

#### 6. RESPONSABILITĂȚILE ÎN CADRUL PROIECTULUI

##### 6.1. Responsabilitățile tehnice ale partenerilor în cadrul proiectului

**Universitatea Tehnică din Cluj Napoca** - coordonatorul proiectului: conduce proiectul cu titlul „*Expertizarea oxidului de zirconiu stabilizat parțial cu alți oxizi pentru aplicații în domeniul stomatologic- PN-III-P2-2.1-BG-2016-0077 – acronim proiect (ZirOxStoma)*”

Unitatea coordonatoare de proiect a numit în calitate de **Director de proiect** pe Conf. univ.dr.abil.

**Simona RADA** care:

- asigură conducerea proiectului;
- are dreptul de semnătură privind contractul de finanțare;
- urmărește, asigură și dispune comunicarea eficientă și operativă a problemelor tehnice, atât în interiorul grupului de parteneri, precum și între Coordonatorul proiectului și Autoritatea Contractantă;
- întocmește documente specifice etapelor de fază anuală precum și cea finală, astfel: rapoarte de cercetare, raport de etapă, raport anual și raport final;
- își asumă responsabilitatea tehnică și supravegherea generală a executării proiectului, asigurând comunicarea eficientă și operativă a problemelor tehnice în interiorul grupului de parteneri, cât și între Conducătorul de proiect și Autoritatea Contractantă;

**Institutul National de Cercetare pentru Tehnologii Izotopice și Moleculare – Cluj Napoca-partener P1**

- realizează obiectivele specifice conform Planului de realizare ale proiectului, prevăzute la punctul 4 al prezentului Acord ferm de colaborare;