

**PROIECTE DE CERCETARE PENTRU STIMULAREA REVENIRII IN  
TARA A CERCETATORILOR - TIP RP FINALIZATE  
METODOLOGIE PENTRU EVALUAREA REZULTATELOR**

<b>Programul:</b>	Resurse Umane
<b>Tipul proiectului:</b>	Proiecte de cercetare pentru stimularea revenirii in tara a cercetatorilor
<b>Cod proiect:</b>	RP-12
<b>Nume director:</b>	Dr.Ing. Mariana IONITA
<b>Institutia gazda:</b>	UNIVERSITATEA POLITEHNICA DIN BUCURESTI
<b>Titlu proiect:</b>	Modelare Moleculara la Multiscala Combinata cu Determinari Experimentale pentru Proiectarea si Caracterizarea Materialelor Compozite Polimer Conductor-Nanotuburi de Carbon
<b>Durata proiectului (ani):</b>	24 luni
<b>Valoarea totala aprobata pentru finantarea proiectului:</b>	460000 Lei

### **Indicator 1**

#### **Rezultate stiintifice obtinute (0-60 %)**

*Nota: prin acumularea unui punctaj  $\geq 50$  puncte, indicatorul se considera indeplinit 100%*

A. Numar articole de tip "regular" sau "review" publicate in jurnale indexate WoS, cu factor de influenta relativ (AISr)  $\geq 0.5$ , ca autor principal (prim autor sau corespondent); **30 p/articol**

3 articole tip "regular"

1. Polypyrrole / Carbon Nanotube Composites: Molecular Modeling and Experimental Investigation as Anti-corrosive Coating, M. Ionita, A. Pruna, Progress in Organic Coatings, 2011, disponibil online

<http://sciencedirect.dogsoso.com/science/article/pii/S0300944011002256>, **AISr-1.55**

2. Multiscale Molecular Modeling and Experimental Validation of Polyaniline-CNTs Composite Coatings for Corrosion Protecting, M. Ionita, I.V. Branzoi, L. Pilan, Surface and Interface Analysis, Volumul 42 (6-7), Paginile 987-990, 2010. **AISr-0.74**

3. Synthesis, physicochemical characterization, and preliminary molecular modeling studies of SnO<sub>2</sub> nanoparticles, M. Ionita, I.V. Branzoi, L. Popa, Surface and Interface Analysis, Volumul 42 (6-7), Paginile 983-986, 2010. **AISr-0.74**

B. Numar articole de tip “regular” sau “review” publicate in jurnale indexate WoS, cu factor de influenta relativ (AISr)  $\geq 0.5$ , in colaborare (co-autor); **15 p/articol**

-

C. Numar articole de tip “regular” sau “review” publicate in jurnale indexate WoS, cu factor de influenta relativ (AISr)  $< 0.5$ , ca autor principal (prim autor sau corespondent); **10 p/articol**

1 articol tip “regular”

Multiscale molecular modeling and laboratory investigation of polypyrrole-polyaniline composite, M. Ionita, I.V. Branzoi, Materiale Plastice, Paginile 184-188, 2010 **AISr-0**

D. Numar articole de tip “regular” sau “review” publicate in jurnale indexate WoS, cu factor de influenta relativ (AISr)  $< 0.5$ , in colaborare (co-autor); **5p/articol**

Articolele publicate pe parcursul desfasurarii proiectului se indica astfel: titlul, autorii, jurnalul, volumul, paginile, anul publicarii, factorul de influenta relativ (AISr). Pentru a fi luate in considerare, articolele trebuie sa contina:

- a) Mentiunea clara a contributiei finantatorului (CNCSIS/UEFISCDI) la sectiunea “acknowledgement” si a grantului RP. In cazul in care exista mai multe granturi acordate de institutii din Romania, care au sustinut financiar desfasurarea cercetarii publicate in articol si sunt mentionate ca atare la sectiunea “acknowledgement”, punctajul articolului se imparte la numarul de granturi. Aceasta prevedere nu se aplica in cazul colaboratorilor externi, sustinuti financiar de propriile granturi.
- b) Afilierea directorului de proiect la institutia din Romania unde s-a desfasurat proiectul.

*Nota: se vor atasa/prezenta copii (PDF) pentru fiecare articol publicat*

## **Total indicator 1: 90p**

### **Indicator 2**

**Modul de utilizare a resurselor financiare (0-40 %).**

*Nota: prin acumularea unui punctaj  $\geq 40$  puncte, indicatorul se considera indeplinit 100%*

A. Utilizare a fondurilor pentru achizitia de echipamente si a primei de instalare (daca este cazul). Se va urmari daca:

- a) Echipamentele prevazute in proiect au fost achizitionate si sunt functionale; **10 p**

Echipamentele prevazute in proiect (echipamente IT (statie de lucru, computere monitoare), software de modelare moleculara, baie cu ultrasunete, etc. ) au fost achizitionate si sunt functionale.

- b) Echipamentele achizitionate au fost folosite pentru desfasurarea activitatilor proiectului; **10 p**

Echipamentele prevazute in proiect (echipamente IT (statie de lucru, computere monoitare) software de modelare moleculara, baie cu ultrasunete, etc. ) au fost achizitionate si au fost folosite pentru desfasurarea activitatilor proiectului.

B. Utilizarea fondurilor pentru mobilitati. Se vor indica manifestarile stiintifice/conferinte/congrese astfel: denumire, locatie, perioada desfasurarii. Pentru a fi luate in considerare, manifestarile stiintifice unde s-a facut deplasarea trebuie sa aiba legatura directa cu domeniul de studiu al proiectului. De asemenea, deplasarea trebuie sa se fi concretizat cu prezentare:

a) poster; **10 puncte**

1. Conferința: 13<sup>th</sup> ECASIA 2009, Antalya, Turcia, 18-23 Octombrie 2009 – SnO<sub>2</sub> Nanoparticles Characterization Using Molecular Modeling and Laboratory Investigations, M. Ionita, I.V. Branzoi, L. Popa.
2. Conferinta: 1<sup>st</sup> NANOCOATINGS 2010, Dresda, Germania, 28-31 Martie 2010 - Multiscale Molecular Modeling and Experimental Investigation of Polypyrrole-Carbon Nanotubes Composite Coatings for Corrosion Protecting, M Ionitã, A. Prună.
3. TEME 2001, Galati, Romania, 18-20 Mai 2011, Morphology of polyaniline/SWCNTs composites materials predicted by molecular dynamics and dissipative particle dynamics simulations. M. Ionita
4. Conferinta: 12<sup>th</sup> IBWAP-2011, Constanta, Romania, 6-8 Iulie 2011, Influence of different carbon nanotubes on the mechanical properties of polyaniline nanocomposite – multiscale molecular modelling, M Ionitã, V. Ciupina, E. Vasile

b) prezentare orala; **20 puncte**

1. Conferință: 13<sup>th</sup> ECASIA 2009, Antalya, Turcia, 18-23 Octombrie 2009 - Multiscale Molecular Modeling and Experimental Validation of Polyaniline-CNTs Composite Coatings for Corrosion Protecting, M. Ionita, I.V. Branzoi, L. Pila.
2. Conferinta: 10<sup>th</sup> ESDA, 2010, Istanbul, Turcia, 12-14 Iulie 2010, Molecular Modeling for Calculation of Mechanical Properties of Polyaniline-Carbon Nanotubes, M. Ionita.
3. Conferinta: 4<sup>th</sup> BiomMedD 2010, Sinaia, Romania, 23-25 Septembrie 2010 - Computer-Aided Molecular Design of Biosynthetic Membranes, M. Raicopol, M. Ionita, H. Iovu.
4. Conferinta: CPA 2010, Cluj-Napoca, Romania, 29-31 Octombrie 2010, Acoperiri compozite pe baza de polipirol / nanotuburi de carbon simple pentru protectia anticoroziva; modelare moleculara si investigatii experimentale, M Ionitã, I.V. Branzoi, A. Prună.
5. 19<sup>th</sup> ICCE 2011, Shanghai, China, 24-31 Iulie 2011, Impact of chemical functionalization of SWCNTs on PPY nanocomposites: multiscale molecular modeling and experimental investigations, M. Ionita, A. Pruna.

*In cazul in care nu s-au prevazut si nu s-au efectuat mobilitati in cadrul proiectului, indicatorul se considera indeplinit 100% prin acumularea unui punctaj de 20 puncte.*

**Total indicator 2: 160p**

*Nota: se vor atasa/prezenta copii (PDF) dupa abstractele publicate in volumele manifestarilor stiintifice*

---

**Total Indicator 1 + Indicator 2 = 100%**