



Către  
**Consiliul Științific al Universității Babeș-Bolyai**

Prin prezenta solicităm actualizarea în Platforma r-UBB<sup>1</sup> (Infrastructura Strategică de Cercetare a UBB) a următorului element de infrastructură:

**Denumirea elementului de infrastructură**

[RO] Difractometru de raze X Shimadzu

[EN] X-ray diffractometer Shimadzu XRD –6000

[HU] Shimadzu XRD –6000 röntgen diffraktométer

[DE] Röntgendiffraktometer Shimadzu XRD –6000

Nr.	Criteriu	Răspuns
1	Numele unității de cercetare care gestionează elementul de infrastructură	Istituto de Cercetări Interdisciplinare în Bio- Nano-Științe, Centrul de materiale nanostructurate și bio-nano-interfețe
2	Responsabil(i)/Date de contact	CSIII dr. Marieta Muresan-Pop marieta.muresan@ubbcluj.ro
3	Locație	ICI-BNS, Treboniu Laurian, 42, sala 2012, etaj 2, 400271, Cluj-Napoca
4	Pagina web (EN)	<a href="http://icibns.institute.ubbcluj.ro/wp-content/uploads/2023/02/7.-XRD.pdf">http://icibns.institute.ubbcluj.ro/wp-content/uploads/2023/02/7.-XRD.pdf</a>
5	Unicitate (în UBB, regional, național, internațional?)	Sistemul poate fi folosit la identificarea și cuantificarea fazelor cristaline sau amorfe prezente într-un material solid, analiză structurală cantitativă și calitativă. Modul de operare se realizează în geometria Bragg-Brentano, $\Theta$ sau $2\Theta$ , iar măsurătorile pot fi realizate în reflexie sau în transmisie
6	Valoare aproximativă de achiziție (inclusiv accesorii)	418.639,4 Lei + 149.630,31 Lei (anexe), Total: 568.270 Lei (aprox. 114.20 EUR -4.98 lei/1euro)
7	Caracteristicile tehnice care prin unicitate/complexitate/actualitate justifică includerea în rUBB	Caracteristici tehnice: 1. Generator de raze X cu putere maximă de 3kW 2. Tuburi de raze X - două tuburi de raze X cu anod de Cu la 2.0 kW și la 2.7 kW și un tub de raze X cu anod de Cr la 2.7 kW - focus 1x10 mm (2.0 kW), 2x12 mm (2.7 kW - setarea tensiunii între 20-60 kV (pas de 1kV) - setarea curentului între 2.0-80 mA (pas de 1mA) 3. Goniometru tip vertical - pas minim $2\Theta$ : 0.002°, -

<sup>1</sup>În conformitate cu Hotărârea Consiliului de Administrație nr. 11134/13.06.2016.

		<p>domeniu de scanare: 6°-163°, - viteza de scanare: 0.1-50°/min, filtru Ni pentru tub de Cu, - monocromator de grafit 2d=6.708 Å</p> <p>4. Unitate de detecție și control</p> <p>5. Soft care include:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- control integral a sistemului XRD, a tubului de raze X, a goniometrului,..etc.</li> <li>- convertizor fisiere in format ASCII, TXT</li> <li>- procesări de difractograme</li> <li>- baza de date JCPDS</li> <li>- determinarea cristalinității</li> </ul>
8	Caracteristici generale (ex., după caz: domeniu de temperatură, tipuri de atomi/molecule/celule/țesuturi care se pot analiza, stare de agregare a probelor, cantități/volume de probe, ani de publicare/colectare a volumelor/înregistrărilor din bibliotecă/arhivă)	<p>Probele trebuie să fie sub formă solidă sau pulberi, iar măsurătorile se realizează la temperatura ambiantă. Cantitatea de probă necesară unei măsurători este mică, în general 10-20 mg de probă, iar timpul minim de măsurare se poate varia în funcție de parametri aleși. (pas, domeniu de scanare, viteza de scanare)</p>
9	Acces gratuit pentru membrii comunității UBB?	Nu. Se va percepe un tarif care sa acopere consumabilele folosite
10	Domenii de utilitate	<p>-Domenii de interes: știința materialelor, probe organice și anorganice -Caracterizarea materialelor solide cristaline organice și anorganice: compuși bioactivi naturali și de sinteză, sisteme (bio)moleculare care pot fi cristalizate, structuri metal-organice, minerale</p>
11	Unitățile/grupurile de cercetare (din UBB și externe) și/sau numărul de utilizatori activi care au folosit elementul rUBB în ultimii doi ani	<p>-Caracterizarea materialelor solide amorfe: polimeri, biopolimeri și compozite polimerice, grafene și compozite pe bază de grafene, sticle, materiale ceramice și compozite ale acestora</p> <p>-Analiza calitativă de faze cristaline: fiecare fază cristalină are o difractogramă specifică -Analiza de faze cantitative: dacă proba conține mai multe faze, în funcție de numărul și intensitatea liniilor de difracție, se poate stabili valoarea procentuală a fiecărei faze.</p> <p>-Analiza microstructurală cu determinarea dimensiunilor cristalitelor.</p> <p>-Determinarea gradului de cristalinitate</p>
12	Alți potențiali utilizatori anticipați în viitorul apropiat	<p>A. Institutul de Cercetări Interdisciplinare în Nano-Bio-Științe:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>-Centrul de materiale nanostructurate și biointerfețe</li> <li>-Centrul de Nanobiofonică și Microspectroscopie Laser</li> </ul> <p>B. Facultatea de Fizică</p>
13	Număr de publicații în care elementul rUBB a fost folosit în ultimii 2 ani (lista completă în Anexa 1; se furnizează explicații acolo unde elementul rUBB a fost folosit, dar nu este menționat explicit în publicație).	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Aproximativ 23 de publicații cotate ISI</li> </ul>

14	Lista activităților didactice în care este/a fost implicat în ultimii 2 ani, detaliind: nume disciplină, nivel (licență/master/doctorat), secție, facultate. Se listează pe categorii (selectând cea mai mare valoare aplicabilă): (1) prezentat studenților, (2a) operat/folosit în prezența studenților, (2b) operat/folosit cu probele studenților, (3) operat/folosit în prezența studenților cu probele studenților, (4) operat/folosit inclusiv de către studenți	Utilizare în activități de cercetare și didactice: în activitatea experimentală a studenților la nivel de: <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Doctorat (școală doctorală fizică)</li> <li>▪ Masterat: Practica master, realizarea de teze de dizertație</li> <li>▪ Licența (Fizica medicală și tehnologică)</li> </ul>
15	Personal de specialitate/operator(i) (numele și statutul)	CSIII dr. Marieta Muresan-Pop CSII dr. Klara Magyari CSII dr. Adriana (Vulpoi) Lazar
16	Condiții pentru acces/utilizare/servicii (intern UBB/extern UBB)	Aparatul este disponibil pe bază de programare pentru servicii interne UBB/ externe UBB, Se va stabili o pre-evaluare a complexității probelor și estimarea timpului de lucru solicitat operatorilor. Element de infrastructură implicată în activități didactice.cercetare nivel licență, master și doctorat
17	Orar de funcționare	Sistemul este funcțional în orarul de lucru al operatorilor, fiind disponibil pentru servicii interne/externe UBB pe bază de program
18	Grad mediu de utilizare în ultimii doi ani calculat după 3 criterii: (1) raportat la orarul de funcționare, (2) raportat la un program de lucru de 40 de ore săptămânal pe parcursul anului academic, (3) opțional – raportat la alt criteriu	(1) 75% (2) 75%
19	Lista cheltuielilor anuale pentru susținerea bunei funcționări a elementului de infrastructură	Consumabile: etanol și șervețele pentru curățarea suportului de probe, suporturi de probe, înlocuire monocromator și sursă de raze X după expirarea termenului de viață, aliniere sistem, update software de măsurare și analiză, etc.
20	Alte aspecte utile	

Responsabil infrastructură,  
Prof.dr. Simion Simon

**Anexa 1: lista numerotată a publicațiilor din ultimii 2 ani în care s-a folosit elementul rUBB (format liber)**

1. I.-C. Poplăcean, M. Mureșan-Pop, M. Vasilescu, A. Simion, S. Simon, Synthesis and structural characterization of new chitosan-thiamine hydrochloride molecular complexes, *Journal of Molecular Structure*, Volume 1321, Part 4, **2025**, 140094, DOI: 10.1016/j.molstruc.2024.140094, WOS:001320629500001.
2. Sakhkhane, B.E.; Mureșan-Pop, M.; Barbu-Tudoran, L.; Lovász, T.; Bizo, L. Effect of Silver Vanadate Nanowires Addition on Structural and Morphological Properties of Dental Porcelain Prepared from Economic Raw Materials. *Crystals* **2024**, *14*, 616, DOI: 10.3390/cryst14070616, WOS:001276535300001.
3. Marieta Mureșan-Pop, Simion Simon, Ede Bodoki, Viorica Simon, Alexandru Turza, Milica Todea, Adriana Vulpoi, Klara Magyari, Bogdan C. Iacob, Alexandra Iulia Băraian, Mateusz Gołdyn, Clara S. B. Gomes, Margarida Susana, M. Teresa Duarte, and Vânia André, Mechanochemical Synthesis of New Praziquantel Cocrystals: Solid-State Characterization and Solubility, *Crystal Growth & Design* **2024**, *24* (11), 4668-4681, DOI: 10.1021/acs.cgd.4c00296, WOS:001225240000001.
4. Fort, C.I.; Rusu, M.M.; Cotet, L.C.; Vulpoi, A.; Todea, M.; Baia, M.; Baia, L. The Impact of Ar or N<sub>2</sub> Atmosphere on the Structure of Bi-Fe-Carbon Xerogel Based Composites as Electrode Material for Detection of Pb<sup>2+</sup> and H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. *Gels* **2024**, *10*, 230. DOI: 10.3390/gels10040230, WOS:001211353800001.
5. S. Simon, M. Muresan-Pop, V. Simon, D. Eniu, Influence of partial replacing of CaO by SrO on structure and bioactivity of calcium-phospho-silicate glasses, *Journal of Molecular Structure*, 1301, **2024**, 137334, DOI: 10.1016/j.molstruc.2023.137334, WOS:001142018200001.
6. Mihis, A.G., Cotet, L.C., Cadar, C. *et al.* Structural and flame retardancy properties of GO-DOPO-HAK composite. *J Mater Sci* **58**, 7025–7047 (**2023**). DOI: 10.1007/s10853-023-08456-w, WOS:000970927100002.
7. Cojan, CA, Barabás, R, Muresan-Pop, M, Bizo, L, COMPARATIVE PHASE EVOLUTION, MORPHOLOGICAL AND OPTICAL ANALYSIS OF PARTIALLY

STABILIZED ZIRCONIA CERAMICS, STUDIA UNIVERSITATIS BABES-BOLYAI CHEMIA,, 69(2), 2024, DOI:10.24193/subbchem.2024.2.01, WOS:001302787200001.

8. Feraru, A.; Tóth, Z.-R.; Mureşan-Pop, M.; Baia, M.; Gyulavári, T.; Páll, E.; Turcu, R.V.F.; Magyari, K.; Baia, L. Anionic Polysaccharide Cryogels: Interaction and In Vitro Behavior of Alginate–Gum Arabic Composites. *Polymers* **2023**, *15*, 1844. DOI:10.3390/polym15081844, WOS:000977426100001.

9. Bizo, L.; Mureşan-Pop, M.; Barabás, R.; Barbu-Tudoran, L.; Berar, A. In Vitro Degradation of Mg-Doped ZrO<sub>2</sub> Bioceramics at the Interface with Xerostom® Saliva Substitute Gel. *Materials* **2023**, *16*, 2680. DOI: 10.3390/ma16072680, WOS:000970048800001.

10. A. Simion, S. Simon, C. Filip, M. Mureşan-Pop, A. Vulpoi, D.M. Petrişor, G. Damian, M. Vasilescu, M. Todea, Local structural effects of Gd<sup>3+</sup> ions incorporation in shell of nanostructured silica core – alumina rich shell microspheres, *Journal of Molecular Structure*, 1284, **2023**, 135381, DOI:10.1016/j.molstruc.2023.135381, WOS:000973665100001.

11. Tóth, Z.-R.; Debreczeni, D.; Gyulavári, T.; Székely, I.; Todea, M.; Kovács, G.; Focşan, M.; Magyari, K.; Baia, L.; Pap, Z.; et al. Rapid Synthesis Method of Ag<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> as Reusable Photocatalytically Active Semiconductor. *Nanomaterials* **2023**, *13*, 89. DOI: 10.3390/nano13010089, WOS:000908959100001.

12. Székely, I.; Kovács, Z.; Rusu, M.; Gyulavári, T.; Todea, M.; Focşan, M.; Baia, M.; Pap, Z. Tungsten Oxide Morphology-Dependent Au/TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub> Heterostructures with Applications in Heterogenous Photocatalysis and Surface-Enhanced Raman Spectroscopy. *Catalysts* **2023**, *13*, 1015, DOI: 10.3390/catal13061015, WOS:001014275400001.

13. Rusu M.M., Fort C.I., Vulpoi A., Barbu-Tudoran L., Baia M., Cotet L.C., Baia L. Ultrasensitive Electroanalytical Detection of Pb<sup>2+</sup> and H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> Using Bi and Fe–Based Nanoparticles Embedded into Porous Carbon Xerogel—The Influence of Nanocomposite Pyrolysis Temperatures (2023) *Gels*, 9 (11), art. no. 868, Cited 0 times. DOI: 10.3390/gels9110868, WOS:001114456300001.

14. Simon S., Muresan-Pop M., Simon V., Eniu D. Structural changes induced by long term storage of sodium phosphate glasses embedding uranium and thorium, (2022) *Optical Materials*, 124, art. no. 112022, DOI: 10.1016/j.optmat.2022.112022, WOS:000768119000004.

15. Magyari, K., Dreancă, A., Székely, I. *et al.* How does the structure of pullulan alginate composites change in the biological environment?. *J Mater Sci* 57, 19050–19067 (2022). DOI: 10.1007/s10853-022-07775-8, WOS:000870933100003.
16. Marieta Muresan-Pop, Adriana Vulpoi, Viorica Simon, Milica Todea, Klara Magyari, Zsolt Pap, Andrea Simion, Claudiu Filip, Simion Simon, Co-Crystals of Etravirine by Mechanochemical Activation, *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 111(4), 2022, 1178-1186, DOI: 10.1016/j.xphs.2021.09.023, WOS:000820824100007.
17. A.S. Farcasanu, M. Todea, M. Muresan-Pop, D.M. Petrisor, A. Simion, A. Vulpoi, S. Simon, Synthesis and structural characterization of silica particles doped with Dy and Gd paramagnetic ions as MRI contrast agents, *Results in Chemistry*, 4, 2022, 100520, DOI: 10.1016/j.rechem.2022.100520, WOS:000889733300002.
18. Boga B., Steinfeldt N., Moustakas N.G., Peppel T., Lund H., Rabeah J., Pap Z., Cristea V.-M., Strunk J., Role of SrCO<sub>3</sub> on Photocatalytic Performance of SrTiO<sub>3</sub>-SrCO<sub>3</sub> Composites (2022) *Catalysts*, 12 (9), 978, DOI: 10.3390/catal12090978, WOS:000858188700001.
19. Zoltán Kovács, Csanád Molnár, Tamás Gyulavári, Klára Magyari, Zsejke-Réka Tóth, Lucian Baia, Zsolt Pap, Klara Hernádi, Solvothermal synthesis of ZnO spheres: Tuning the structure and morphology from nano- to micro-meter range and its impact on their photocatalytic activity, *Catalysis Today*, 397–399, 2022, 16-27, DOI: 10.1016/j.cattod.2022.03.004, WOS:000810422100008.
20. Zsejke-Réka Tóth, Alexandra Feraru, Diána Debreczeni, Milica Todea, Radu A. Popescu, Tamás Gyulavári, Alina Sesarman, Giorgiana Negrea, Dan C. Vodnar, Klara Hernadi, Zsolt Pap, Lucian Baia, Klara Magyari, Influence of different silver species on the structure of bioactive silicate glasses, *Journal of Non-Crystalline Solids*, 583, 2022, 121498, DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2022.121498, WOS:000789665700001.
21. Costinas C., Salagean C.A., Cotet L.C., Baia M., Todea M., Magyari K., Baia L. Insights into the Stability of Graphene Oxide Aqueous Dispersions. (2022) *Nanomaterials*, 12 (24), art. no. 4489, DOI: 10.3390/nano12244489

22. Pop L.C., Barta G., Cotet L.C., Magyari K., Baia M., Tudoran L.B., Ungur R., Vodnar D., Baia L., Danciu V. *ANTIMICROBIAL ACTIVITY OF GRAPHENE OXIDE-COATED POLYPROPYLENE SURFACES*, *Studia Universitatis Babes-Bolyai Chemia*, (2022), 67 (1), pp. 281 - 296, DOI: 10.24193/subbchem.2022.1.18.

23. Rusu M.M., Vulpoi A., Vilau C., Dudescu C.M., Pășcuță P., Ardelean I. Analyzing the Effects of Calcium Nitrate over White Portland Cement: A Multi-Scale Approach. (2023) *Materials*, 16 (1), art. no. 371, DOI: 10.3390/ma16010371