

Conducător doctorat: Prof. dr. Vasile CHIȘ

Nr. locuri la doctorat: 1

Loc 1/1 – buget cu bursă, români de pretutindeni (sesiunea iulie)

Membrii comisiei de admitere:

1. Prof.dr. Vasile Chiș
2. Prof. dr. Simona Pînzaru
3. Conf. dr. Dana Maniu

Tematica pentru examen:

1. Metode de calcul a structurii și proprietăților moleculelor (Hartree-Fock, post-Hartree-Fock și DFT)
2. Structuri cu rețea periodică (celulă unitară, rețele Bravais, spațiu-k). Teorema Bloch. Structura benzilor electronice. Densitatea stărilor electronice.
3. Determinarea proprietăților optice ale metalelor. Simularea câmpurilor electromagnetice prin metode FDTD.

Tematica interviu:

1. Proprietăți fizico-chimice ale compușilor per- sau polyfluoroalchil (PFAS).
2. Metode de simulare a fenomenelor de adsorbție a compușilor PFAS pe substraturi metalice.
3. Metode de detecție și cuantificare a compușilor PFAS existente în prezent și limitări ale acestora

Bibliografie

1. T. S. Vo, T. T. B. C. Vo, and K. Kim, "SERS-enabled nanomaterials for PFAS detection: a review toward smart and sustainable micro/nano sensing systems," *Micro and Nano Systems Letters*, vol. 14, no. 1, p. 1, Jan. 2026, doi: 10.1186/s40486-025-00254-0.
2. M. S. Mohamed, B. P. Chaplin, and A. A. Abokifa, "Screening of transition metals for PFAS adsorption: A comparative DFT investigation," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 307, p. 121363, Mar. 2025, doi: 10.1016/j.ces.2025.121363.
3. W. Liu, A. Tkatchenko, and M. Scheffler, "Modeling Adsorption and Reactions of Organic Molecules at Metal Surfaces," *Acc. Chem. Res.*, vol. 47, no. 11, pp. 3369–3377, Nov. 2014, doi: 10.1021/ar500118y.
4. A. Leach, *Molecular Modelling: Principles and Applications*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, 2001.

Data, ora și locul examenului:

21.07.2026, ora 10.00, sala 209, clădirea centralăUBB

Membrii comisiei de îndrumare și integritate academică

1. Prof. dr. Simona Pînzaru (UBB)
2. Prof. dr. Dana Maniu (UBB)
3. CS II dr. Nicoleta Dina (INCDTIM)