



ROMÂNIA  
UNIVERSITATEA BABEŞ-BOLYAI CLUJ-NAPOCA

Str. Mihail Kogălniceanu, nr. 1, 400084 Cluj-Napoca  
Tel. (00) 40 - 264 - 40.53.00\*; 40.53.01; 40.53.02 ; 40.53.22  
Fax: 40 - 264 - 59.19.06  
E-mail: [staff@staff.ubbcluj.ro](mailto:staff@staff.ubbcluj.ro)

RECTORATUL

## Universitatea Babeş-Bolyai Competiția Excelenței 2010

### Dosar individual

**Notă: Toate datele se referă la perioada 2005-2009**

Nume, prenume, grad did.	KUN ATTILA-ZSOLT, LECTOR
Facultatea, Catedra	Facultatea de Chimie si Inginerie Chimica, Catedra de Chimie Anorganica
Domeniul științific	Chimie
Adresa paginii web personale	<a href="http://chem.ubbcluj.ro/pagini/anorganica/isi.html">http://chem.ubbcluj.ro/pagini/anorganica/isi.html</a>
Adresa e-mail	<a href="mailto:zak@chem.ubbcluj.ro">zak@chem.ubbcluj.ro</a>

### Criteriaul I – Output

**1. Articole științifice publicate în reviste indexate ISI (cu menționare factorului de impact în cazul celor cotate)**

**1.1. (Diethylenetriamine)bis(theophyllinato)zinc(II) dihydrate**, B. Mihaly, E. Forizs; A. Kun, I. Silaghi-Dumitrescu. *Acta Cryst. Sect. E – Structure Reports Online*, **2009**, 65, m579 (0.367)

**1.2. The shapes of hypoelectronic six-vertex anionic bare boron clusters: effects of the counteractions**, King, R. B.; Silaghi-Dumitrescu, I.; Lupan, A.; Kun, A., *Main Group Chemistry*, **2005**, 4(4), 291-302 (0.116)

**2. Articole științifice publicate în ISI proceedings**

**3. Articole științifice indexate în BDI (din lista CNCSIS)**

**3.1. A quantum chemical conformational analysis of p-tert-butyl/pentyl/octyl-calix[8]arenes**. Lupan, A.; Saponar, A.; Silaghi-Dumitrescu, I.; Kun, A.; Silaghi-Dumitrescu, L.; Popovici, E., *Studia Universitatis Babeş-Bolyai, Chemia*, **2006**, 51(2), 27-34.

**4. Alte articole științifice/capitole publicate în reviste/volume cu referenți (peer-reviewed)**

**4.1. Germanium cluster polyhedra: a density functional theory study**, Silaghi-Dumitrescu, I.; Kun, A.; Lupan, A.; King, R. B., *Lecture Series on Computer and Computational Sciences*, **2005**, 4A, 804-806.

**5. Cărți științifice publicate în edituri internaționale**

**6. Cărți științifice publicate în edituri naționale acreditate**

**7. Editor de volume publicate în edituri naționale și internaționale**

**8. Brevete internaționale**

**9. Brevete naționale**

**10. Impact tehnologic al brevetelor: resurse financiare extrabugetare atrase în relație cu economia**

**11. Realizări artistice naționale și internaționale (Domeniul Arte)**

(Expoziții, spectacole, concerte, publicații, filme, înregistrări)

## Criteria II – Prestigiu profesional

### 1. Citări ale articolelor ISI listate la Criteriul I

### 2. Alte citări ale lucrărilor listate mai sus

### 3. Citări în perioada 2005-2009 ale articolelor anterioare anului 2005

Title: A density functional theory study of distortions from octahedral symmetry in hypoelectronic six-vertex polyhedral clusters of the group 13 elements boron, indium, and thallium

Author(s): King, RB; Silaghi-Dumitrescu, I; Kun, A

Conference Information: Symposium on Group 13 Chemistry Element held at the 221st American-Chemical-Society Meeting, Date: 2001 SAN DIEGO CA

Source: **GROUP 13 CHEMISTRY: FROM FUNDAMENTALS TO APPLICATIONS** Volume: **822**  
Pages: **208-225** Published: **2002**

Citari dupa 2005: **2**

Title: Density functional theory study of 10-atom germanium clusters: Effect of electron count on cluster geometry  
Author(s): King RB, Silaghi-Dumitrescu I, Uta MMSource: **INORGANIC CHEMISTRY** Volume: **45** Issue: **13** Pages: **4974-4981** Published: **JUN 26 2006**

Title: Density functional theory study of 11-atom germanium clusters: Effect of electron count on cluster geometry  
Author(s): King RB, Silaghi-Dumitrescu I, Lupan ASource: **INORGANIC CHEMISTRY** Volume: **44** Issue: **10** Pages: **3579-3588** Published: **MAY 16 2005**

Title: A density functional theory study of five-, six- and seven-atom germanium clusters: distortions from ideal bipyramidal deltahedra in hypoelectronic structures

Author(s): King, RB; Silaghi-Dumitrescu, I; Kun, A

Source: **JOURNAL OF THE CHEMICAL SOCIETY-DALTON TRANSACTIONS** Issue: **21** Pages: **3999-4004** Published: **2002**

Citari dupa 2005: **11**

Title: GERMANIUM CLUSTER POLYHEDRA  
Author(s): Silaghi-Dumitrescu I, King BSource: **STUDIA UNIVERSITATIS BABES-BOLYAI CHEMIA** Volume: **53** Issue: **2** Pages: **83-88** Published: **2008**

Title: The role of "external" lone pairs in the chemical bonding of bare post-transition element clusters: the Wade-Mingos rules versus the jellium model

Author(s): King RB, Silaghi-Dumitrescu ISource: **DALTON TRANSACTIONS** Issue: **44** Pages: **6083-6088** Published: **2008**

Title: Singly bonded catenated germanes: Eighty years of progress  
Author(s): Amadoruge ML, Weinert CSSource: **CHEMICAL REVIEWS** Volume: **108** Issue: **10** Pages: **4253-4294** Published: **OCT 2008**

Title: Beyond the icosahedron: A density functional theory study of 14-atom germanium clusters  
Author(s): King RB, Silaghi-Dumitrescu I, Uta MMSource: **EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY** Issue: **25** Pages: **3996-4003** Published: **SEP 2008**

Title: Beyond the Wade-Mingos rules in bare 10- and 12-vertex germanium clusters: Transition states for symmetry breaking processes

Author(s): King RB, Silaghi-Dumitrescu I, Uta MMSource: **JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION** Volume: **4** Issue: **1** Pages: **209-215** Published: **JAN 2008**

Title: Density functional theory study of twelve-atom germanium clusters: conflict between the Wade-Mingos rules and optimum vertex degrees  
Author(s): King RB, Silaghi-Dumitrescu I, Uta MMSource: **DALTON TRANSACTIONS** Issue: **3** Pages: **364-372** Published: **2007**

Title: Ge-5(2-) Zintl anions: synthesis and crystal structures of [K([2.2.2]-crypt)(2)Ge-5 center dot 4NH(3)] and [Rb([2.2.2]-crypt)(2)Ge-5 center dot 4NH(3)]

Author(s): Suchentrunk C, Korber NSource: **NEW JOURNAL OF CHEMISTRY** Volume: **30** Issue: **12** Pages: **1737-1739** Published: **DEC 2006**

Title: Metalloid cluster compounds of germanium: A novel class of germanium cluster compounds of formulae  $Ge_nR_m$  ( $n > m$ )  
Author(s): Schnepf A  
Source: **COORDINATION CHEMISTRY REVIEWS** Volume: **250** Issue: **21-22** Special Issue: **Sp. Iss. SI** Pages: **2758-2770** Published: **NOV 2006**

Title: Density functional study of 8-and 11-vertex polyhedral borane structures: Comparison with bare germanium clusters  
Author(s): King RB, Silaghi-Dumitrescu I, Lupan A  
Source: **INORGANIC CHEMISTRY** Volume: **44** Issue: **22** Pages: **7819-7824** Published: **OCT 31 2005**

Title: Density functional theory study of 11-atom germanium clusters: Effect of electron count on cluster geometry  
Author(s): King RB, Silaghi-Dumitrescu I, Lupan A  
Source: **INORGANIC CHEMISTRY** Volume: **44** Issue: **10** Pages: **3579-3588** Published: **MAY 16 2005**

Title: Density functional theory study of eight-atom germanium clusters: effect of electron count on cluster geometry  
Author(s): King RB, Silaghi-Dumitrescu I, Lupan A  
Source: **DALTON TRANSACTIONS** Issue: **10** Pages: **1858-1864** Published: **2005**

Title: Solvent effects in infrared spectra and ab initio calculations of 2-bromopropane

Author(s): Grecu, R; Kun, A; Silaghi-Dumitrescu, I

Conference Information: XXVth European Congress on Molecular Spectroscopy, Date: AUG 27-SEP 01, 2000 COIMBRA PORTUGAL

Source: **JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE** Volume: **565** Pages: **39-42** Published: **2001**

Citari dupa 2005:1

Title: New thermochemical parameter for describing solvent effects on IR stretching vibration frequencies - Communication 1. Assessment of van der Waals interactions  
Author(s): Solomonov BN, Varfolomeev MA, Novikov VB, et al.  
Source: **SPECTROCHIMICA ACTA PART A-MOLECULAR AND BIOMOLECULAR SPECTROSCOPY** Volume: **64** Issue: **2** Pages: **397-404** Published: **MAY 15 2006**

Title: Distortions from octahedral symmetry in hypoelectronic six-vertex polyhedral clusters of the group 13 elements boron, indium, and thallium as studied by density functional theory

Author(s): King, RB; Silaghi-Dumitrescu, I; Kun, A

Source: **INORGANIC CHEMISTRY** Volume: **40** Issue: **10** Pages: **2450-+** Published: **2001**

Citari dupa 2005:8

Title: Group theoretical treatment of Jahn-Teller versus spin-orbit effects on geometries, rovibronic levels and nuclear spin species of bismuth and antimony clusters  
Author(s): Balasubramanian K  
Source: **MOLECULAR PHYSICS** Volume: **107** Issue: **8-12** Special Issue: **Sp. Iss. SI** Pages: **797-807** Published: **2009**

Title: The role of "external" lone pairs in the chemical bonding of bare post-transition element clusters: the Wade-Mingos rules versus the jellium model

Author(s): King RB, Silaghi-Dumitrescu I  
Source: **DALTON TRANSACTIONS** Issue: **44** Pages: **6083-6088** Published: **2008**

Title: Germanium cluster polyhedra: A density functional theory study  
Author(s): Silaghi-Dumitrescu I, Kun A, Lupan A, et al.  
Conference Information: International Conference on Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2005), OCT 21-26, 2005 Corinth, GREECE  
Source: **Advances in Computational Methods in Sciences and Engineering 2005, Vols 4 A & 4 B** Book Series: **LECTURE SERIES ON COMPUTER AND COMPUTATIONAL SCIENCES** Volume: **4A-4B** Pages: **804-806** Published: **2005**

Title: All-boron aromatic clusters as potential new inorganic ligands and building blocks in chemistry  
Author(s): Alexandrova AN, Boldyrev AI, Zhai HJ, et al.  
Source: **COORDINATION CHEMISTRY REVIEWS** Volume: **250** Issue: **21-22** Special Issue: **Sp. Iss. SI** Pages: **2811-2866** Published: **NOV 2006**

Title: Density functional theory study of 10-atom germanium clusters: Effect of electron count on cluster geometry  
Author(s): King RB, Silaghi-Dumitrescu I, Uta M  
Source: **INORGANIC CHEMISTRY** Volume: **45** Issue: **13** Pages: **4974-4981** Published: **JUN 26 2006**

Title: Density functional study of 8-and 11-vertex polyhedral borane structures: Comparison with bare germanium clusters  
Author(s): King RB, Silaghi-Dumitrescu I, Lupan A  
Source: **INORGANIC CHEMISTRY** Volume: **44** Issue: **22** Pages: **7819-7824** Published: **OCT 31 2005**

Title: Density functional theory study of 11-atom germanium clusters: Effect of electron count on cluster geometry  
Author(s): King RB, Silaghi-Dumitrescu I, Lupan A  
Source: **INORGANIC CHEMISTRY** Volume: **44** Issue: **10** Pages: **3579-3588** Published: **MAY 16 2005**

Title: Density functional theory study of eight-atom germanium clusters: effect of electron count on cluster geometry  
Author(s): King RB, Silaghi-Dumitrescu I, Lupan A  
Source: **DALTON TRANSACTIONS** Issue: **10** Pages: **1858-1864** Published: **2005**

#### **4. Distincții, premii și alte recunoașteri naționale și internaționale**

#### **5. Studenți naționali atrași (activități de coordonare științifică și didactică)**

- *Îndrumare lucrări de licență (număr lucrări susținute) :5*
- *Îndrumare lucrări de disertație (număr lucrări susținute) : 2*
- Doctoranzi (lista nominală a doctoranzilor înmatriculați resp. lista nominală a tezelor susținute)
- Post-doctoranzi (lista nominală)

#### **6. Studenți internaționali atrași (activități de coordonare științifică și didactică)**

- Îndrumare lucrări de licență (număr lucrări susținute)
- Îndrumare lucrări de disertație (număr lucrări susținute)
- Doctoranzi (lista nominală a doctoranzilor înmatriculați resp. lista nominală a tezelor susținute)
- Post-doctoranzi (lista nominală)

#### **7. Membru în comitetul de redacție la reviste ISI**

#### **8. Membru în comitetul de redacție la reviste BDI**

#### **9. Participări la programe/granturi de cercetare finanțate din sursă internațională (se menționează și valoarea)**

#### **10. Participări la programe/granturi finanțate din sursă națională (se menționează și valoarea)**

10.1. Proiect de cooperare bilaterală Capacități Modul III, *Studiul conformațiilor controlate cinetic ale moleculelor gazdă sensibile și selective cu aplicații în farmacie și chimie alimentară*, 2008-2009, (dir. Ioan Silaghi-Dumitrescu), valoare 160443 RON.

10.2. CEEEX- SUPRACOM, *Chimie organometalica supramoleculara : De la design prin sinteză și structură la aplicații*, 2006-2008, (dir. Ionel Haiduc), valoare 1000000 RON.

10.3. CEEEX-CALIXCOM, *Materiale compozite pe bază de calixarene cu proprietăți magnetice și/sau de complexare selectivă a unor ioni de metale de interes tehnologic*, 2005-2008, (director UBB. Ioan Silaghi-Dumitrescu), valoare 1500000 RON.

10.4. CEEEX-Modul III, *Modelare moleculara în chimie și biochimie-MOLMOD*, 2006-2008, (dir. Ioan Silaghi-Dumitrescu), valoare 200000 RON.

10.5. CEEEX-RIOSIN, *Reactivi și intermediari organometalici în sinteze stereocontrolate de compusi cu relevanță biologică*, 2006-2008 (dir. Luminita Silaghi-Dumitrescu), valoare 1150000 RON.

10.6. *Centru de Modelare Moleculara și Chimie Cuantică computațională*, PNII, Capacități I, contract 130,2007, CCMMCCC, (Coordonator, Ioan Silaghi-Dumitrescu), valoare 1305000 RON

#### **11. Coordonări de programe/granturi finanțate din sursă internațională (se menționează și valoarea)**

#### **12. Coordonări de programe/granturi finanțate din sursă națională (se menționează și valoarea)**

**13. Profesor invitat la universitati de prestigiu, cu titlu oficial**

**14. Membru în comisii profesionale relevante, cu titlu oficial**

**15. Conferințe invitate internaționale**

**16. Membru în comitete de organizare sau științifice ale unor conferințe internaționale**

### **III. Realizare remarcabilă**

(Descrieți într-o manieră cât mai accesibilă (în maximum 1 pagină) cea mai importantă realizare științifică/tehnică/artistică din ultimii 5 ani și impactul acesteia.)

Data:

17.03.2010

Semnătura:

**Certific validitatea datelor prezentate**

Sef de catedră,