



ROMÂNIA  
UNIVERSITATEA BABEȘ-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 Babeș-Bolyai Competiția Excelenței 2010

### Dosar individual

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

Nume, prenume, grad did.	SABOU, DANA-MARIA, ASISTENT DRD.
Facultatea, Catedra	Chimie și Inginerie Chimică, Chimie Fizică
Domeniul științific	Chimie
Adresa paginii web personale	-
Adresa e-mail	dsabou@chem.ubbcluj.ro

### Criteriaul I – Output

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

1. **“Oxidation of 2-mercaptopropionic acid by hexacyanoferrate(III). Mechanistic interpretation on the basis of one-plus rate equation”**

Baldea, I., Sabou, D. M., Csavdari, A.  
*Revue Roumaine de Chimie*, **2009**, 54(10), 791-798.  
(factor impact 0,284)

2. **“Oxidation of DL-Methionine (2-Amino-4-ethylthiobutanoic Acid) by Chromate. Mechanistic Interpretation on the Base of an One-Plus Rate Equation”**

Csavdari, A., Baldea, I., Sabou, D.-M.  
*Studia Universitatis Babeș-Bolyai, Ser. Chem.*, **2007**, 52(3), 113-120.

3. **“One-Plus Rate Equation, an Useful Tool to Elucidate the Reaction Mechanism”**

Baldea, I., Sabou, D.-M., Csavdari, A.  
*Studia Universitatis Babeș-Bolyai, Ser. Chem.*, **2007**, 52(1), 19-34.

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

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

1. **“Kinetics of Thiolactic Acid Oxidation by Hexacyanoferrate(III) in Acidic Medium. Lack of reproducibility with various sources of p.a. chemicals”**

Baldea, I., Sabou, D.-M.  
*Analele Universitatii din Oradea, Fascicula Chimie, XII*, **2005**, 3-14; I.S.S.N. 1224-7626.

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

**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)

## **Criteriul II – Prestigiu profesional**

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

1. **“Oxidation of DL-Methionine (2-Amino-4-ethylthiobutanoic Acid) by Chromate. Mechanistic Interpretation on the Base of an One-Plus Rate Equation”**

Csavidari, A., Baldea, I., Sabou, D.-M.

*Studia Universitatis Babeş-Bolyai, Ser. Chem.*, **2007**, 52(3), 113-120.

**(1 citare):**

1) articolul care citează nu este în baza de date abonată

Sursă:

[http://apps.isiknowledge.com/summary.do?qid=1&product=UA&SID=Z2OdJOBdL7Jngf6kJl%40&search\\_mode=GeneralSearch](http://apps.isiknowledge.com/summary.do?qid=1&product=UA&SID=Z2OdJOBdL7Jngf6kJl%40&search_mode=GeneralSearch) și

[http://apps.isiknowledge.com/CitingArticles.do?product=UA&SID=Z2OdJOBdL7Jngf6kJl@&search\\_mode=CitingArticles&parentQid=1&parentDoc=1&db\\_id=WOS&recid=171909110](http://apps.isiknowledge.com/CitingArticles.do?product=UA&SID=Z2OdJOBdL7Jngf6kJl@&search_mode=CitingArticles&parentQid=1&parentDoc=1&db_id=WOS&recid=171909110)

2. **“One-Plus Rate Equation, an Useful Tool to Elucidate the Reaction Mechanism”**

Baldea, I., Sabou, D.-M., Csavidari, A.

*Studia Universitatis Babeş-Bolyai, Ser. Chem.*, **2007**, 52(1), 19-34.

**(2 citări):**

- 1) “Oxidation of 2-mercaptopropionic acid by hexacyanoferrate-(III). Mechanistic interpretation on the basis of one-plus rate equation”

Baldea, I., Sabou, D. M., Csavidari, A.

*Revue Roumaine de Chimie*, **2009**, 54(10), 791-798.

Sursă:

pdf articol la: [http://revroum.getion.ro/wp-content/uploads/2009/RRCh\\_10\\_2009/Art%2002.pdf](http://revroum.getion.ro/wp-content/uploads/2009/RRCh_10_2009/Art%2002.pdf)

sau: <http://web.icf.ro/rrech/>; se selectează “No 10, Octobre 2009”.

- 2) “Oxidation of DL-Methionine (2-Amino-4-ethylthiobutanoic Acid) by Chromate. Mechanistic Interpretation on the Base of an One-Plus Rate Equation”

Csavidari, A., Baldea, I., Sabou, D.-M.

*Studia Universitatis Babeş-Bolyai, Ser. Chem.*, **2007**, 52(3), 113-120.

Surse:

[http://cm.isiknowledge.com/viewCitationIndex.do?sid=R1B42K4knkC7fpLjdHn&contentSet=LIT&dataSource=WOK&databaseName=WOS&recordId=163789521&tccount=1&refcount=28&locale=en\\_US](http://cm.isiknowledge.com/viewCitationIndex.do?sid=R1B42K4knkC7fpLjdHn&contentSet=LIT&dataSource=WOK&databaseName=WOS&recordId=163789521&tccount=1&refcount=28&locale=en_US);

se selectează “backward only”, apoi “create map”

<http://chem.ubbcluj.ro/~studiachemia/ndxs/arch.html> ; se selectează pdf 2007 (III)

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

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

1. **“Kinetics of the formation of the blue complex CrO(O<sub>2</sub>)<sub>2</sub> formed by dichromate and H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> in acid solutions. A stopped-flow investigation using rapid-scan UV-VIS detection”**

Grampp, G., Landgraf, S., Wesierski, T., Jankowska, B., Kalisz, E., Sabou, D.-M., Mladenova, B.

*Monatshefte fur Chemie*, **2002**, 133 (10), 1363-1372

**(2 citări):**

- 1) “Blue CrO<sub>5</sub> assay: A novel spectrophotometric method for the evaluation of the antioxidant and oxidant capacity of various biological substances”

Charalampidis, P.S., Veltsistas, P., Karkabounas, S., Evangelou, A.

*European Journal of Medicinal Chemistry*, **2009**, 44 (10), 4162-4168.

Surse:

[http://apps.isiknowledge.com/CitingArticles.do?product=UA&SID=Z2OdJOBdL7Jngf6kJl@&search\\_mode=CitingArticles&parentQid=1&parentDoc=3&db\\_id=WOS&recid=127022873](http://apps.isiknowledge.com/CitingArticles.do?product=UA&SID=Z2OdJOBdL7Jngf6kJl@&search_mode=CitingArticles&parentQid=1&parentDoc=3&db_id=WOS&recid=127022873)

[http://www.scopus.com/results/citedbyresults.url?sort=plf-f&cite=2-s2.0-67049136596&src=s&imp=t&sid=\\_5xfhhPHI6XLxHQR7cdeDbV%3a70&sot=cite&sdt=a&sl=0&origin=resultslist&txGid=\\_5xfhhPHI6XLxHQR7cdeDbV%3a7](http://www.scopus.com/results/citedbyresults.url?sort=plf-f&cite=2-s2.0-67049136596&src=s&imp=t&sid=_5xfhhPHI6XLxHQR7cdeDbV%3a70&sot=cite&sdt=a&sl=0&origin=resultslist&txGid=_5xfhhPHI6XLxHQR7cdeDbV%3a7)

2) "Peroxides and chromium compounds - The ether test for identity"

Bucher, G., Kampe, M., Roelcke, J.F.

*Zeitschrift Fur Naturforschung Section B-A Journal of Chemical Sciences*, **2005**, 60 (1), 1-6.

Sursă:

[http://apps.isiknowledge.com/CitingArticles.do?product=UA&SID=Z2OdJOBdL7Jngf6kJl@&search\\_mode=CitingArticles&parentQid=1&parentDoc=3&db\\_id=WOS&recid=127022873](http://apps.isiknowledge.com/CitingArticles.do?product=UA&SID=Z2OdJOBdL7Jngf6kJl@&search_mode=CitingArticles&parentQid=1&parentDoc=3&db_id=WOS&recid=127022873)

2. "A comparative study on the oxidation of hydroxy- and mercapto- compounds by Cr(VI)"

Baldea, I., Sabou, D.-M.

*Studia Universitatis Babeş-Bolyai, Ser. Chem.*, **2001**, 45(1,2), 17-33.

(3 citări):

1) "Oxidation of 2-mercaptopropionic acid by hexacyanoferrate-(III). Mechanistic interpretation on the basis of one-plus rate equation"

Baldea, I., Sabou, D. M., Csavdari, A.

*Revue Roumaine de Chimie*, **2009**, 54(10), 791-798.

Sursă:

pdf articol la: [http://revroum.getion.ro/wp-content/uploads/2009/RRCh\\_10\\_2009/Art%2002.pdf](http://revroum.getion.ro/wp-content/uploads/2009/RRCh_10_2009/Art%2002.pdf)

sau: <http://web.icf.ro/rrech/>; se selectează "No 10, Octobre 2009".

2) "One-plus rate equation, an useful tool to elucidate the reaction mechanism"

Baldea, I., Sabou, D.-M., Csavdari, A.

*Studia Universitatis Babeş-Bolyai, Ser. Chem.*, **2007**, 52(1), 19-34.

Surse:

[http://cm.isiknowledge.com/viewCitationIndex.do?sid=R1B42K4knkC7fpLjdHn&contentSet=LIT&dataSource=WOK&databaseName=WOS&recordId=171909174&tccount=0&refcount=43&locale=en\\_US](http://cm.isiknowledge.com/viewCitationIndex.do?sid=R1B42K4knkC7fpLjdHn&contentSet=LIT&dataSource=WOK&databaseName=WOS&recordId=171909174&tccount=0&refcount=43&locale=en_US);

se selectează "backward only", apoi "create map"

<http://chem.ubbcluj.ro/~studiachemia/ndx/arch.html> ; se selectează pdf 2007 (I)

3) "Oxidation of DL-Methionine (2-Amino-4-ethylthiobutanoic Acid) by Chromate. Mechanistic Interpretation on the Base of an One-Plus Rate Equation"

Csavdari, A., Baldea, I., Sabou, D.-M.

*Studia Universitatis Babeş-Bolyai, Ser. Chem.*, **2007**, 52(3), 113-120.

Surse:

[http://cm.isiknowledge.com/viewCitationIndex.do?sid=R1B42K4knkC7fpLjdHn&contentSet=LIT&dataSource=WOK&databaseName=WOS&recordId=163789521&tccount=1&refcount=28&locale=en\\_US](http://cm.isiknowledge.com/viewCitationIndex.do?sid=R1B42K4knkC7fpLjdHn&contentSet=LIT&dataSource=WOK&databaseName=WOS&recordId=163789521&tccount=1&refcount=28&locale=en_US);

se selectează "backward only", apoi "create map"

<http://chem.ubbcluj.ro/~studiachemia/ndx/arch.html> ; se selectează pdf 2007 (III)

3. "The reaction between chromate and thiols. VI: The oxidation of benzenethiol and  $\alpha$ -toluenethiol in acetic acid solutions"

Baldea, I., Sabou, D.M.

*Revue Roumaine de Chimie*, **2000**, 45 (6), 537-544.

(4 citări):

1) "Oxidation of 2-mercaptopropionic acid by hexacyanoferrate-(III). Mechanistic interpretation on the basis of one-plus rate equation"

Baldea, I., Sabou, D. M., Csavdari, A.

*Revue Roumaine de Chimie*, **2009**, 54(10), 791-798.

Sursa:

pdf articol la: [http://revroum.getion.ro/wp-content/uploads/2009/RRCh\\_10\\_2009/Art%2002.pdf](http://revroum.getion.ro/wp-content/uploads/2009/RRCh_10_2009/Art%2002.pdf)

sau: <http://web.icf.ro/rrech/>; se selectează "No 10, Octobre 2009".

2) "Kinetics of the phenol oxidation by permanganate in acidic media"

Copolovici, L., Baldea, I.

*Revue Roumaine de Chimie* **2007**, 52 (11), 1045-1050.

Sursă:

[http://www.scopus.com/results/citedbyresults.url?sort=plf-f&cite=2-s2.0-](http://www.scopus.com/results/citedbyresults.url?sort=plf-f&cite=2-s2.0-0042910260&src=s&imp=t&sid=_5xfhhPHI6XLxHQR7cdeDbV%3a90&sot=cite&sdt=a&sl=0&origin=r)

[0042910260&src=s&imp=t&sid=\\_5xfhhPHI6XLxHQR7cdeDbV%3a90&sot=cite&sdt=a&sl=0&origin=r](http://www.scopus.com/results/citedbyresults.url?sort=plf-f&cite=2-s2.0-0042910260&src=s&imp=t&sid=_5xfhhPHI6XLxHQR7cdeDbV%3a90&sot=cite&sdt=a&sl=0&origin=r)  
[esultslist&txGid=\\_5xfhhPHI6XLxHQR7cdeDbV%3a9](http://www.scopus.com/results/citedbyresults.url?sort=plf-f&cite=2-s2.0-0042910260&src=s&imp=t&sid=_5xfhhPHI6XLxHQR7cdeDbV%3a90&sot=cite&sdt=a&sl=0&origin=r)

3) "Oxidation of DL-Methionine (2-Amino-4-ethylthiobutanoic Acid) by Chromate. Mechanistic Interpretation on the Base of an One-Plus Rate Equation"

Csavdari, A., Baldea, I., Sabou, D.-M.

*Studia Universitatis Babeş-Bolyai, Ser. Chem.*, **2007**, 52(3), 113-120.

Surse:

[http://cm.isiknowledge.com/viewCitationIndex.do?sid=R1B42K4knkC7fpLjdHn&contentSet=LIT&dataS](http://cm.isiknowledge.com/viewCitationIndex.do?sid=R1B42K4knkC7fpLjdHn&contentSet=LIT&dataSource=WOK&databaseName=WOS&recordId=163789521&tccount=1&refcount=28&locale=en_US;)

[ource=WOK&databaseName=WOS&recordId=163789521&tccount=1&refcount=28&locale=en\\_US;](http://cm.isiknowledge.com/viewCitationIndex.do?sid=R1B42K4knkC7fpLjdHn&contentSet=LIT&dataSource=WOK&databaseName=WOS&recordId=163789521&tccount=1&refcount=28&locale=en_US;)

se selectează "backward only", apoi "create map"

<http://chem.ubbcluj.ro/~studiachemia/ndxs/arch.html> ; se selectează pdf 2007 (III)

4) "One-plus rate equation, an useful tool to elucidate the reaction mechanism"

Baldea, I., Sabou, D.-M., Csavdari, A.

*Studia Universitatis Babeş-Bolyai, Ser. Chem.*, **2007**, 52(1), 19-34.

Surse:

[http://cm.isiknowledge.com/viewCitationIndex.do?sid=R1B42K4knkC7fpLjdHn&contentSet=LIT&dataS](http://cm.isiknowledge.com/viewCitationIndex.do?sid=R1B42K4knkC7fpLjdHn&contentSet=LIT&dataSource=WOK&databaseName=WOS&recordId=171909174&tccount=0&refcount=43&locale=en_US;)

[ource=WOK&databaseName=WOS&recordId=171909174&tccount=0&refcount=43&locale=en\\_US;](http://cm.isiknowledge.com/viewCitationIndex.do?sid=R1B42K4knkC7fpLjdHn&contentSet=LIT&dataSource=WOK&databaseName=WOS&recordId=171909174&tccount=0&refcount=43&locale=en_US;)

se selectează "backward only", apoi "create map"

<http://chem.ubbcluj.ro/~studiachemia/ndxs/arch.html> ; se selectează pdf 2007 (I)

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

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

- Îndrumare lucrari 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)

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

- Îndrumare lucrari 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 in comitetul de redacție la reviste ISI

#### 8. Membru in comitetul de redacție la reviste BDI

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

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

Nr. Contract: 87GR/28.05.2007, Cod CNCIS 1483  
Titlu proiect: Diverse tehnici de calibrare în metode cinetice cu aplicație în chimia analitică  
Director proiect: Conf. Dr. Ing. Alexandra CSAVDARI  
Durata: 2007-2008 (2 ani)  
Valoare proiect: 2007: 81.650 lei; 2008: 67.900 lei

**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**

Cinetica chimică analizează procesele de reacție sub aspectul vitezei lor și a influenței diverșilor factori. Scopul final este cel mai adesea identificarea mecanismului de reacție, adică a ansamblului de evenimente chimice elementare care conduc la transformarea reactanților în produși.

Preocupările mele, ca parte integrantă a cercetărilor colectivului de cinetică chimică, se referă la studiul unor reacții cu mecanisme complexe (rețele de reacții) și au o componentă axată pe îmbunătățirea metodelor de extragere și prelucrare a informației din date experimentale de natură cinetică, pentru a scurta drumul de la experiment la aflarea mecanismului de reacție. În context, cele trei articole publicate menționate la criteriul I (două în 2007 și unul în 2009), argumentează cu succes un unghi nou de abordare propus de grupul nostru. Consider aceasta o realizare importantă, fie și numai prin prisma faptului că, interpretate în noua lumină, date originale sau din literatură pot furniza un plus de concluzii. Personal, am contribuit din plin la promovarea acestei noi abordări, prin furnizarea a mare parte din rezultatele care o susțin. Voi arăta aici în ce constă și ce avantaje are această nouă abordare comparativ cu cea tradițională.

Descrierea evoluției unui proces chimic se face prin legea de viteză – o ecuație în care apar explicit influențele concentrațiilor de reactanți, ridicate la puteri numite ordine de reacție parțiale, și un parametru numit constantă de viteză, care conține influențele factorilor de mediu. Uzual, ordinele se găsesc experimental; dar pentru procesele elementare nu pot fi decât întregi sau cel mult semi-întregi.

Pașii de urmat în descifrarea mecanismului de reacție sunt: **compilarea unei legi de viteză empirice** (necesită experimente numeroase, pe un domeniu larg de condiții), **postularea unui mecanism de reacție** (pornind de la legea empirică), **obținerea legii de viteză teoretice** (prin combinarea vitezelor etapelor elementare din mecanismul propus) și, în final, **verificarea legii teoretice și a mecanismului** (prin potrivirea lor pe datele experimentale).

Pentru rețele de reacții, în abordarea clasică, legile de viteză empirice de forma „cu puteri” conțin de obicei ordine fracționare, uneori chiar variabile. O astfel de formă este imposibil de regăsit din combinarea unor etape elementare. Postularea mecanismului de reacție și determinarea parametrilor legii teoretice (constantele de viteză ale etapelor elementare) se fac cu dificultate, iar etapa de verificare a mecanismului este esențială, uneori cerând suplimentarea experimentelor

În abordarea noastră, propunem folosirea unei forme modificate a legii de viteză empirice, mai întâi prin înlocuirea termenilor de ordin fracționar din legea de viteză clasică cu combinații de termeni de ordin întreg, prin care legea empirică devine o fracție cu mai mulți termeni în numitor. Apoi, împărțirea cu unul din termenii numitorului conduce la așa-numita ecuație de forma „unu-plus”, matematic cunoscută, dar puțin exploatată în conetxte ca cel propus de noi. Sub această formă legea empirică coincide cu cea teoretică; în plus, modul de obținere permite deducerea secvențială a mecanismului de reacție, verificarea finală devenind doar o rutină. Mai mult, împărțirea reduce cu unu numărul coeficienților fenomenologici ai ecuației, ceea ce permite calculul mai multor parametri din același număr de date experimentale.

Data:

Semnătura:

**Certific validitatea datelor prezentate**

Șef de catedră,