



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

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	http://chem.ubbcluj.ro/pagini/anorganica/isi.html
Adresa e-mail	zak@chem.ubbcluj.ro

Criteria 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 Moleculară 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,