



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.	UȚĂ, MATEI-MARIA
Facultatea, Catedra	Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică
Domeniul științific	Chimie
Adresa paginii web personale	http://chem.ubbcluj.ro/pagini/anorganica/isi/matei.html
Adresa e-mail	umatei@chem.ubbcluj.ro

Criteriaul I – Output

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

1.1.

**Density Functional Theory Study of 10-Atom Germanium Clusters:
Effect of Electron Count on Cluster Geometry**

R.B.King, I.Silaghi-Dumitrescu, M.M.Uță, *Inorg.Chem.*, **2006**, *45*, 4974-4981. (4.147)

1.2.

**Density Functional Theory Study of Twelve-Atom Germanium Clusters:
Conflict Between the Wade-Mingos Rules and Optimum Vertex Degrees**

R.B.King, I.Silaghi-Dumitrescu, M.M.Uță, *J.Chem.Soc. Dalton Trans.*, **2007**, 364-372. (3.580)

1.3.

**Beyond the Wade-Mingos Rules in Bare 10- and 12-Vertex Germanium Clusters:
Transition States for Symmetry Breaking Processes**

R.B.King, I.Silaghi-Dumitrescu, M.M.Uță, *J.Chem.TheoryComput.*, **2008**, *4*, 209-215. (4.274)

1.4.

**Nitrite Linkage Isomerism in Bioinorganic Chemistry:
A Case for Mechanistic Promiscuity**

R.Silaghi-Dumitrescu, M.M.Uță, *Studia.Univ.Babes-Bolyai Chemia*, **2008**, *53* (2), 61-65. ()

1.5.

**Polyhedral Structures with Three-, Four-, and Five Fold Symmetry in
Metal-Centered Ten-Vertex Germanium Clusters**

R.B.King, I.Silaghi-Dumitrescu, M.M.Uță, *Chem.Eur.J.*, **2008**, *14*, 4542-4550. (5.454)

1.6.

Beyond the Icosahedron:

A Density Functional Theory Study of 14-Atom Germanium Clusters

R.B.King, I.Silaghi-Dumitrescu, M.M.Uță, *Eur.J.Inorg.Chem.*, **2008**, 25, 3996-4003. (2.694)

1.7.

Endohedral Nickel, Palladium, and Platinum Atoms in 10-Vertex Germanium Clusters: Competition between Bicapped Square Antiprismatic and Pentagonal Prismatic Structures

R.B.King, I.Silaghi-Dumitrescu, M.M.Uță, *J.Phys.Chem.A*, **2009**, 113 (3), 527-533. (2.871)

1.8.

The Unique Palladium-Centered Pentagonal Antiprismatic Cationic Bismuth Cluster: A Comparison of Related Metal-Centered 10-Vertex Pnictogen Cluster Structures by Density Functional Theory

R.B.King, I.Silaghi-Dumitrescu, M.M.Uță, *Inorg.Chem.*, **2009**, 48 (17), 8508-8514. (4.147)

1.9.

Carbon Dioxide Activation:

Hydration by Carbonic Anhydrase and Related Systems – What Makes a Good Catalyst?

R.Silaghi-Dumitrescu, M.M.Uță, A.Kállay, J.Bódis *J.Mol.Struct.Theochem*, **2010**, 942 (1), 15-18. (1.167)

2. Articole științifice publicate în ISI proceedings

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

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

1.1.

Titlu: Density functional theory study of 10-atom germanium clusters: Effect of electron count on cluster geometry

Autor(i): King, RB; Silaghi-Dumitrescu, I; Uta, MM

Sursa: INORGANIC CHEMISTRY Volume: 45 Issue: 13 Pages: 4974-4981

Anul publicării: 2006

Factor de impact: 4.147

Număr de citări: 10

1.2.

Titlu: Density functional theory study of twelve-atom germanium clusters: conflict between the Wade-Mingos rules and optimum vertex degrees

Autor(i): King, RB; Silaghi-Dumitrescu, I; Uta, MM

Sursa: DALTON TRANSACTIONS Pages: 364-372

Anul publicării: 2007

Factor de impact: 3.580

Număr de citări: 4

1.3.

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

Autor(i): King, RB; Silaghi-Dumitrescu, I; Uta, MM

Sursa: JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION Volume: 4 Issue: 1 Pages: 209-215

Anul publicării: 2008

Factor de impact: 4.274

Număr de citări: 1

1.4.

Titlu: Nitrite linkage isomerism in bioinorganic chemistry - A case for mechanistic promiscuity

Autor(i): Silaghi-Dumitrescu, R; Uta, MM

Sursa: STUDIA UNIVERSITATIS BABES-BOLYAI CHEMIA Volume: 53 Issue: 2 Pages: 61-65

Anul publicării: 2008

Factor de impact:

Număr de citări: 0

1.5.

Titlu: Polyhedral structures with three-, four-, and five fold symmetry in metal-centered ten-vertex germanium clusters

Autor(i): King, RB; Silaghi-Dumitrescu, I; Uta, MM

Sursa: CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL Volume: 14 Issue: 15 Pages: 4542-4550

Anul publicării: 2008

Factor de impact: 5.454

Număr de citări: 4

1.6.

Titlu: Beyond the icosahedron: A density functional theory study of 14-atom germanium clusters

Autor(i): King, RB; Silaghi-Dumitrescu, I; Uta, MM

Sursa: EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY Issue: 25 Pages: 3996-4003

Anul publicării: 2008

Factor de impact: 2.694

Număr de citări: 0

1.7.

Titlu: Endohedral nickel, palladium, and platinum atoms in 10-vertex germanium clusters: Competition between bicapped square antiprismatic and pentagonal prismatic structures

Autor(i): King, RB; Silaghi-Dumitrescu, I; Uta, MM

Sursa: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 113 Issue: 3 Pages: 527-533

Anul publicării: 2009

Factor de impact: 2.871

Număr de citări: 1

1.8.

Titlu: The unique palladium-centered pentagonal antiprismatic cationic bismuth cluster: A comparison of related metal-centered 10-vertex pnictogen cluster structures by density functional theory

Autor(i): King, RB; Silaghi-Dumitrescu, I; Uta, MM

Sursa: INORGANIC CHEMISTRY Volume: 48 Issue: 17 Pages: 8508-8514

Anul publicării: 2009

Factor de impact: 4.147

Număr de citări: 0

1.9.

Titlu: Carbon dioxide activation: Hydration by carbonic anhydrase and related systems – What makes a good catalyst?

Autor(i): Silaghi-Dumitrescu, R; Uta, MM; Kallay, A; Bodis, J

Sursa: JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM Volume: 942 Issue: 1 Pages: 15-18

Anul publicării: 2010

Factor de impact: 1.167

Număr de citări: 0

2. Alte citări ale lucrărilor listate mai sus

3. Citări în perioada 2005-2009 ale articolelor anterioare anului 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) :**
- 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 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 in 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. CEEX-AC consorțiu, *Mecanisme moleculare ale recunoașterii adeziunii celulare mediate de interacțiuni glican-glican*, 2005-2007, 32200 RON.

10.2. CEEX-SUPRACOM, *Chimie organometalică supramoleculară: De la design prin sinteză și structură la aplicații*, 2005-2008, 1000000 RON.

10.3. CEEX-MOLMOD, *Modelare moleculară în chimie și biochimie*, 2006-2008, 200000 RON.

10.4. CEEX-ET, *Izomeria nitro/nitrito în metalocomplecși cu relevanță biocatalitică*, 2006-2008, 120000 RON.

10.5. PNII-Capacități-CMMCCC, *Centru de modelare moleculară și chimie cuantică computațională*, 2007-2009, 14000000 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:

Semnătura:

Certific validitatea datelor prezentate

Sef de catedră,