



PN-II-ID-PCCE-2008-1

2010-2012

Codul proiectului finanțat

Se completează de către directorul de proiect

Perioada raportării

FISA DE MONITORIZARE

1. Date personale ale directorului de proiect :

1.1. Nume:	ASTILEAN
1.2. Prenume:	SIMION
1.3. Telefon:	0264405300/5188
1.4. E-Mail:	simion.astilean@phys.ubbcluj.ro

2. Institutia coordonatoare a proiectului:

2.1. Denumire Institutie:	UNIVERSITATEA BABES-BOLYAI
2.2. Facultate/ Department:	FACULTATEA DE FIZICA
2.3. Telefon:	0264405300
2.4. E-Mail:	

3. Titlul proiectului:

(Max 200 caractere)

NANOPARTICULE BIOFUNCTIONALE PENTRU DEZVOLTAREA UNOR NOI METODE DE IMAGISTICA, SENZORISTICA, DIAGNOSTIC SI TERAPIE MOLECULARA IN MEDII BIOLOGICE

4. Modul de utilizare a bugetului:

(cheltuieli reale efectuate din devizul postcalcul)

NR. CRT	DENUMIRE CAPITOL BUGET	VALOARE 2010 (LEI)	VALOARE 2011 (LEI)
1.	CHELTUIELI DE PERSONAL - max. 60% din valoarea totală a contractului	592.720	1.364.289
2.	CHELTUIELI INDIRECTE (regie) - max. 10% din valoarea totală a contractului	90.908,45	227.268,57
3.	MOBILITĂȚI - max. 10% din valoarea totală a contractului (se asigură participarea la stagii de documentare-cercetare în țara și străinătate, participări la manifestări științifice naționale și internaționale, organizare WE și SSA)	16.354,78	81.082,87
4.	CHELTUIELI DE LOGISTICĂ - max. 35% din valoarea totală a contractului pentru derularea proiectului (infrastructura de cercetare, cheltuieli materiale, diseminare etc.)	300.016,77	827.313,87
	TOTAL	1.000.000	2.499.954,31

5. Publicații:

5.1. Articole în reviste ISI cu scor relativ de influență calculat

LISTA COMPLETA A ARTICOLELOR PUBLICATE IN REVISTE ISI CU SCOR RELATIV DE INFLUENTA ESTE PREZENTATA IN ANEXA ATASATA PREZENTEI FISE DE MONITORIZARE. PINA IN PREZENT S-AU PUBLICAT UN NUMAR DE 27 ARTICOLE CARE REALIZEAZA UN FACTOR DE IMPACT TOTAL DE 82.86 SI UN SCOR RELATIV DE INFLUENTA DE 50.45.

5.2. Articole cotate ISI fără scor relativ de influență

LISTA COMPLETA A ARTICOLELOR PUBLICATE IN REVISTE COTATE ISI FARA SCOR RELATIV DE INFLUENTA ESTE PREZENTATA IN ANEXA ATASATA PREZENTEI FISE DE MONITORIZARE. IN TOTAL S-AU PUBLICAT 3 ARTICOLE CARE REALIZEAZA UN FACTOR DE IMPACT CUMULAT DE 2,541.

5.3. Articole în alte reviste indexate ISI și în proceedings de conferințe indexate ISI

NU ESTE CAZUL

5.4. Alt tip de publicație rezultat ca urmare a proiectului (cărți, capitole de carte, brevete, articole în reviste ne-indexate ISI, proceedings de conferințe ne-indexate ISI, etc...).

LISTA COMPLETA A TUTUROR ARTICOLELOR PUBLICATE ESTE PREZENTATA IN ANEXA ATASATA PREZENTEI FISE DE MONITORIZARE. IN TOTAL S-AU PUBLICAT 2 ARTICOLE NE-INDEXATE ISI

6. Relevanța publicațiilor

Descrieți pe scurt relevanța publicațiilor de la punctul I pentru obiectivele proiectului.

(font Times New Roman, size 12, line spacing 1.5 - Max. 2 pag.)

Relevanta publicatiilor de la punctul I rezulta din urmatoarele considerente:

1) Factorul de impact mare si chiar foarte mare al revistelor in care s-au publicat o buna parte dintre cele 27 articole: Angew. Chem. Int. Ed. (FI 12.73), Chem. Commun. (FI: 5,787), J. Mater. Chem. (FI: 5.099). Cancer Letters (FI: 4,864), J Phys Chem (FI=4.224), Nanotechnology (FI: 3,644), etc.

2) Factorul de impact cumulat pentru cele 27 de articole este de 82.87, ceea ce reprezinta o medie 3 puncte ISI / articol care se situeaza peste media domeniului fizica (aprox 2-2.5). In mod similar s-a realizat un scor relative de influenta cumulat mare 50.45, ceea ce reprezinta o medie de 1.86 / articol.

3) Revista Nanotechnology ilustreaza coperta numarului din 4 Februarie 2011 (Vol 22, Nr 5, 2011) cu o imagine selectata dintre figurile articolului nostru "Flower-shaped gold nanoparticles: synthesis, characterization and their application as SERS-active tags inside living cells", Nanotechnology, 2011, 22, 055702. vezi <http://ej.iop.org/pdf/nano/vol22/na2205-webcover.pdf>.

4) In lucrarea "Chitosan-coated triangular silver nanoparticles as a novel class of biocompatible, highly effective photothermal transducers for in vitro cancer cell therapy, Cancer Letters 311 (2011) 131-140) am demonstrat pentru prima data in literatura aplicabilitatea nanoparticulelor de argint de forma prismatica biocomptibilizate cu biopolimer (chitosan) in distrugerea celulele cancerigene prin incalzire indusa de excitarea laser a rezonantelor plasmonice. Lucrarea este in prezent mediatizata in comunitatea stiintifica pe site-ul Global Medical Discovery Series la categoria "key scientific article" (vezi <http://globalmedicaldiscovery.com/key-scientific-articles/chitosan-coated-triangular-silver-nanoparticles-as-a-novel-class-of-biocompatible-highly-effective-photothermal-transducers-for-in-vitro-cancer-cell-therapy/>)

5) Lucrarea "Evidence of a surface plasmon-mediated mechanism in the generation of the SERS background" Chem. Commun. 2011, 47, pp 3861-3863 este o lucrare de tip "Invited Paper" si reprezinta o recunoastere internationala a contributiei noastre la dezvoltarea

domeniului SERS.

6) Lucrarea "Mapping the SERS Efficiency and Hot-Spots Localization on Gold Film over Nanospheres Substrates" J. Phys. Chem. C, 2010, 114 (27), pp 11717-11722, a cumulat pina in prezent un numar de 18 citari.

7) In legatura cu articolul "Synergistic antibacterial activity of chitosan-silver nanocomposites on Staphylococcus aureus" publicat in Nanotechnology, Vol 22, pp135101 (2011), am primit din partea editorului urmatorul mesaj: " Dear Dr MP, I am pleased to tell you that your article, "Synergistic antibacterial activity of chitosan-silver nanocomposites on Staphylococcus aureus", in Nanotechnology, Vol 22, pp135101 (2011), has been downloaded 250 times so far. To put this into context, across all IOP journals 10% of articles were accessed over 250 times this quarter."

8) Lucrarea "Chitosan-coated anisotropic silver nanoparticles as a SERS substrate for single-molecule detection", publicata recent in Nanotechnology 23 (2012) 055501, este mediatizata pe site-ul revistelor IOP (Institute of Physics) la adresa <http://iopscience.iop.org/0957-4484/labtalk-article/48366> cu urmatorul text rezumat "Scientists from Babes-Bolyai University, Romania, have shown that small ensembles of anisotropic silver nanoparticles trapped within thin films of chitosan operate as excellent plasmonic substrates for single-molecule detection by surface-enhanced Raman scattering (SERS). Solid SERS substrates enabling single-molecule detection have been prepared in the past, but this is the first time that a biocompatible SERS substrate with such extremely high sensitivity has been produced reliably. ETC" vezi si <http://www.facebook.com/pages/WITec/109032995792429>.

9) In lucrarea "Solution-phase, dual LSPR-SERS plasmonic sensors of high sensitivity and stability based on chitosan coated anisotropic silver nanoparticles J. Mater. Chem. 2011, 21, 3625-3633" s-au publicat rezultate relevante apentru dezvoltarea ulterioara a proiectului. In raport cu alte studii din literatura, s-a demonstrat: a) controlul rezonantele plasmonice prin forma si dimesiunea nanoparticulelor de argint in domeniul spectral de la UV la NIR, b) cresterea semnificativa a capacitatii de detectie SERS si LSPR la "varfurile" nanoparticulelor triunghiulare c) cresterea stabilitatii si biocompatibilitatii prin invelirea lor intr-un strat protector de chitosan.

10) S-au finalizat calculele de chimie cuantica asupra unor macrostructuri moleculare, determinandu-se energiile, barierele de inversie si geometriile unor sisteme carbaboranice functionalizate cu grupari fosfetanice. Aceste rezultate sunt relevante pentru experimentalist in gasirea celor mai eficiente metode de obtinere a unor astfel de sisteme macrociclice, vezi articolul publicat "Carbaborane-Substituted 1,2-Diphosphetanes" in Angew. Chem. Int. Ed. 2011, 50, 4701 -4703 .

7. Rezultate științifice obținute și nepublicate

Descrieți pe scurt rezultatele științifice obținute și încă nepublicate și relevanța acestora pentru obiectivele proiectului. Indicați strategia de valorificare a acestor rezultate (inclusiv data preconizată pentru publicare).

(font Times New Roman, size 12, line spacing 1.5 - Max. 2 pag.)

1) S-a studiat efectul microsferelor aluminisilicate dopate cu ytriu ($70 \text{ Al}_2\text{O}_3\text{-}20\text{SiO}_2\text{-}10\text{Y}_2\text{O}_3$ (% mol)) asupra liniilor celulare de keratinocite. Microsferele au fost preparate prin metoda pulverizarii uscata (spray drying). Dimensiunea, morfologia si starile de suprafata lor a fost analizata prin metode combinate (SEM, TEM, XRD, XPS)). Efectele microsferelor asupra celulelor keratinocite au fost urmarite in vitro prin metode de microscopie optica si electronica. S-a demonstrat ca nu exista modificari de morfologie celulara in urma internalizarii microsferelor dupa 48 ore de incubare. In concluzie se raporteaza faptul ca microsferele $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3$ ar putea fi utilizate in terapia tintita a cancerului. Rezultatele sunt redactate si urmeaza sa fie trimise spre

publicare: In vitro evaluation of the effects of yttrium aluminosilicates microspheres on human keratinocyte cells. Radu T, Chiriac MT, Popescu O and Simon S. (European Cells and Materials Journal, IF: 9,65).

2) S-au efectuat studii teoretice in vederea predicției corecte a modului de aranjare și interacțiune a moleculelor adsorbite pe suprafețe solide sau sub forma de agregate în fază lichidă. Utilizand o serie de metode de calcul performante derivate din teoria DFT au fost determinate curbele de energie potențială ale dimerilor în funcție de distanța inter-monomer și de asemenea au fost caracterizate minimele locale și minimul global al suprafeței de energie potențială a acestora. S-a demonstrat faptul că structura dimerilor PTCDI și PTCDA corespunde monomerilor roțiți unul față de celalalt dar nedeplasați în lungul axelor lor, ceea ce este diferit fata de structura în stare solidă. In plus spectrele electronice de absorbție și emisie calculate pentru dimeri confirma o concordanță mai buna cu datele experimentale decât în cazul modelelor monomerice. Rezultatele stiintifice finalizate au fost incluse într-o teza de doctorat și într-o lucrare de licență și vor fi valorificate într-o publicație: Potential energy curves for PTCDI and PTCDA dimers obtained by MP2 and DFT methods with dispersion correction, Mircea Oltean, George Mile, Mihai Vidrighin, Nicolae Leopold, Vasile Chiș, Journal of Computational Chemistry (FI=4.05).

8. Resursa umană

Prezentați pe scurt fiecare membru al echipei, cu menționarea tipului de poziție ocupată și a rolului în desfășurarea proiectului.

(font Times New Roman, size 12, line spacing 1.5 - Max. 2 pag.)

Prezentarea completa a resursei umane cu mentionarea tipului de pozitie și a rolului fiecaruia in desfasurarea proiectului se face in anexa atasata prezentei fise de evaluare.

Structura resursei umane a proiectului PCCE 129/2008 este urmatoarea:

Partenerul 1 are echipa de cercetare formata din 5 cercetatori cu experienta, 6 tineri cercetatori, 6 doctoranzi și 2 masteranzi. Pe parcursul derularii proiectului pozitia unor membri s-a schimbat de la statutul de doctorand la cel de tanar cercetator, sau de la masterand la cel de doctorand, au fost cooptati in echipa noi masteranzi.

Partenerul 2 are echipa de cercetare formata din 3 cercetatori cu experienta, 8 tineri cercetatori, 1 doctorand și 3 masteranzi. Pe parcursul derularii proiectului componenta echipei s-a schimbat, in scopul pastrarii și imbunatatirii competentelor necesare derularii activitatilor din proiect.

Astfel in echipa partenerului 2 au mai fost 2 tineri cercetatori, 4 doctoranzi și 1 masterand.

Partenerul 3 are echipa de cercetare formata din 4 cercetatori cu experienta, 3 tineri cercetatori, 2 doctoranzi și 2 masteranzi. Pe parcursul derularii proiectului componenta echipei s-a modificat in scopul pastrarii competentelor necesare derularii activitatilor din proiect. Astfel, in echipa partenerului 3 au fost 2 doctoranzi și 1 masterand.

Partenerul 4 are echipa de cercetare formata din 1 cercetator cu experienta, 4 tineri cercetatori și 1 doctorand.

Partenerul 5 are echipa de cercetare formata din 3 cercetatori cu experienta, 1 tinar cercetator si 1 doctorand. Pe parcursul derularii proiectului echipa a fost completata cu cele 2 persoane tinere, care au dus la cresterea competentelor stiintifice.

Partenerul 6 are echipa de cercetare formata din 1 cercetator cu experienta si 1 doctorand.

Partenerul 7 are echipa de cercetare formata din 2 cercetatori cu experienta, 1 tinar cercetator, 1 doctorand si 1 masterand.

Partenerul 8 are echipa de cercetare formata din: 2 cercetatori cu experienta, 1 tinar cercetator si 1 doctorand. Pe parcursul derularii proiectului din echipa au facut parte si 2 doctoranzi..

9. Utilitatea echipamentelor

Pentru echipamentele achizitionate din proiect și al caror cost depășește 20000 RON (inclusiv TVA) descrieți pe scurt modul în care au fost folosite pentru îndeplinirea obiectivelor proiectului.

(font Times New Roman, size 12, line spacing 1.5 - Max. 2 pag.)

Echipamente achizitionate in 2010:

1. Echipament ZetaSizer ZS90 (Malvern Instruments) pentru determinarea distributiei dimensionale si a potentialului electric al nanoparticulelor (potential Z) suspensii coloidale (Total valoare 215.760 / decontat din proiect 169.397), (P1)

Echipamentul permite evaluarea rapida a razelor hidrodinamice ale nanoparticulelor, modificarea sarcinii electrice superficiale in urma biofunctionalizarii, urmarirea in timp a stabilizarii bio-conjugatelor, a agregarii acestor in functie de valorile pH-ului, etc.

2. Rezervor de azot lichid (200l cryogenic tank), (total valoare 25.325 / decontat din proiect 4021,55) (P3) necesar pentru efectuarea de masuratori cu temperatura si in functionarea spectrometrului RMN

3. Rack Switch for IBM System (BNT 1GB/10GB G8000) , (total valoare 22.350,07 / decontat din proiect 22.350,07) (P4)

Sursa incorporabila pentru nodul de calcul cu ajutorul caruia au fost derulate calculele de structura si dinamica moleculara si caracterizarea teoretica a unor nanostructuri functionalizate

Echipamente achizitionate in 2011

1. Extensie Microscop confocal Alpha 300/500/700 pt. 785 nm (total valoare 429118,74 (60% in 2011, 40% in 2012) / decontat din proiect 166791,73) (P1)

Echipament folosit in mod curent pentru caracterizarea spectroscopica (masuratori

Raman confocal, SERS, AFM) si extensie la lungimea de unda 785 nm, necesara pentru studii pe linii celulare

2. Sistem curatare a suprafetelor prin iradiere UV cu platforma cu control de temperatura controlata, (total valoare 24133,24 / decontat din proiect 9513,24) (P1)

Echipament folosit pentru hidrofilizarea suprafetelor., curatirea virfurilor AFM, deconataminarea in UV si tratamente de suprafata

3. Stație grafică: (HP Z800 Workstation, NVIDIA Quadro 600 1.0GB, HP 600GB SAS 15K 1st HDD, 2x Intel Xeon X5675 3.06 12MB/1333 6C CPU, HP 64GB(8x8GB) DDR3-1333 ECC Memory), (total valoare 49.848 / decontat din proiect 49.848) (P6)

Echipament folosit pentru calcule de structura si dinamica moleculara/supramoleculara pentru diferite sisteme nanostructurate

4. Cititor multimod pentru microplaci Fluostar Omega care include Spectrofotometru UV/VIS, (total valoare 126799,92 / decontat din proiect 126799,92), (P2),

Echipament folosit pentru analize si teste pe culturi celulare, masuratori de citotoxicitate caracterizarea in-vitro a bioconjugatelor produse.

5. Cap de proba MASNMR multinuclear, dublu rezonant, (175000 / decontat din proiect 70000), (P3),

Accesorii la spectrometrul RMN, necesar caracterizarea spectroscopice a bioconjugatelor nanostructurate si a microstructurilor biofunctionalizate.

6. Componente pentru upgrade al Spectrometrului XPS, (total valoare 135000 / decontat din proiect 30000), (P3),

Accesorii pentru spectrometrul XPS necesare caracterizarii modului de legare a (bio)moleculelor la suprafata nanoparticulelor.

7. Bidistilator Direct-Q 3UV, (total valoare 20701,60 / decontat din proiect 20701,60), (P5)

Echipament pentru obținerea de apă ultrapură care este necesară în laboratorul Raman la prepararea coloizilor de argint și aur precum și pentru dizolvarea compușilor

8. Spectrometru UV-VIS V-630, (total valoare 28839,92/ decontat din proiect 28839,92), (P5)

Echipament pentru măsurarea spectrelor UV-Vis pentru probele investigate în diferiți

solvenți și pentru măsurarea spectrelor UV-Vis pentru coloizii preparați.

9. Electrode rotitor (PINE AFMSRCE, USA), (total valoare 47764,8/ decontat din proiect 23.882), (P8)

Echipament folosit pentru caracterizarea electrochimică a electrozilor modificați realizați în cadrul proiectului.

10. Dificultăți întâmpinate în derularea proiectului

Prezentați succint (maxim 2 pagini) dificultățile și obstacolele întâmpinate și care au afectat negativ derularea proiectului. Propuneți soluții de remediere a acestor probleme.

(Max. 2 pag. - font Times New Roman, size 12, line spacing 1.5)

Pina in prezent nu este cazul, dar pot apare dificultati in derularea etapei 2012 datorita lipsei de finantare pe ianuarie-februarie-martie, daca se va decide continuarea finantarii.

**PRIN ACEASTA SE CERTIFICA LEGALITATEA SI CORECTITUDINEA
DATELOR CUPRINSE IN PREZENTUL FISE DE MONITORIZARE**

DATA: 2 MARTIE 2012

DIRECTOR DE PROIECT,

Nume, prenume: Astilean Simion

Semnatura

Project ID_PCCCE 129/2008

Director: Prof dr Simion Astilean

ANEXE LA FISA DE MONITORIZARE

Anexa 5.1 –Articole publicate in reviste ISI cu factor de impact (FI) si scor relativ de influenta (SRI)

Total articole: 27

Total factor de impact: 82.86 (medie FI = 3 / articol)

Total scor relativ de influenta: 50.45 (medie SRI = 1.86 / articol)

Nr	Identificare articol	IF	SRI
1	Mapping the SERS Efficiency and Hot-Spots Localization on Gold Film over Nanospheres Substrates , Cosmin Farcau, Simion Astilean, <i>J. Phys. Chem. C</i> , 2010, 114 (27), pp 11717-11722, (doi: 10.1021/jp100861w) (IF: 4.224)	4,224	2,99785
2	Localized surface plasmon resonance (LSPR) and surface-enhanced Raman scattering (SERS) studies of 4-aminothiophenol adsorption on gold nanorods , A.M. Gabudean, D. Biro and S. Astilean, <i>Journal of Molecular Structure</i> , 2011, 993, pp 420-424, (doi: 10.1016/j.molstruc.2010.11.045),	1,551	0,55066
3	Spectroscopic studies on pH- and thermally-induced conformational changes of Bovine Serum Albumin adsorbed onto gold nanoparticles , Monica Iosin, Valentin Canpean, Simion Astilean, <i>Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry</i> , 2011, 217, pp 395-401, (doi: 10.1016/j.jphotochem.2010.11.012)	2,553	1,00000
4	Study of the interaction between CdSe/ZnS core-shell quantum dots and bovine serum albumin by spectroscopic techniques , Milohum Mikesokpo Dzagli, Valentin Canpean, Monica Iosin, Messanh Agbeko Mohou, Simion Astilean, <i>Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry</i> , 2010, 215, 1, pp 118-122, (doi: 10.1016/j.jphotochem.2010.08.008)	2,553	1,00000
5	Synergistic Antibacterial Activity of Chitosan–Silver Nanocomposites on <i>Staphylococcus Aureus</i> , Monica Potara, Endre Jakab, Annette Damert, Octavian Popescu, Valentin Canpean, Simion Astilean, <i>Nanotechnology</i> , 2011, 22, article number 135101 (9pp), (doi: 10.1088/0957-4484/22/13/135101) (IF: 3,644)	3,644	2,66667
6	Silver effect on the structure of SiO2-CaO-P2O5 ternary system , A. Vulpoi, L. Baia, S. Simon, V.	1,842	0,95837

	Simon, <i>Materials Science and Engineering C</i> , 2012, 32, pp 178-183, (doi:10.1016/j.msec.2011.10.015),		
7	Experimental assessment of the phonon confinement in TiO₂ anatase nanocrystallites by Raman spectroscopy , D. Georgescu, L. Baia, O. Ersen, M. Baia, S. Simon, <i>J. Raman Spectroscopy</i> (doi: 10.1002/jrs.3103),	3,147	1,27944
8	Metal-metal Bonding in Bis(alkylthio)hexacarbonyldicobalt Complexes: Open Structures versus Butterfly and Tetrahedrane Structures , Menyhárt B. Sárosi, I. Silaghi-Dumitrescu, R. Bruce King, <i>European Journal of Inorganic Chemistry</i> , 2011, nr. 12, pp 1967-1973, (doi: 10.1002/ejic.201001365) (IF: 2.941)	2,941	1,61163
9	Spectroscopic and DFT Study of Atenolol and Metoprolol and their Copper Complexes , O. Cozar, L. Szabo, I.B. Cozar, N. Leopold, L. David, V. Chis, <i>Journal of Molecular Structure</i> , 2011, vol. 993, nr. 1-3, pp 357-366, (doi: 10.1016/j.molstruc.2010.12.014)	1,551	0,55066
10	IR, Raman, SERS and DFT Study of Paroxetine , I.B. Cozar, L. Szabo, N. Leopold, D. Mare, V. Chis, L. David, <i>Journal of Molecular Structure</i> , 2011, vol. 993, nr. 1-3, pp 243-248, (doi:10.1016/j.molstruc.2010.12.020)	1,551	0,55066
11	Simulation of the flow of aqueous solutions through carbon nanotubes , T. Beu, <i>Computer Physics Communications</i> , 2010, vol 182, nr. 9, pp 2004-2008, (doi: 10.1016/j.cpc.2010.11.014)	1,958	2,16092
12	Composition rules for Omega polynomial in nano-dendrimers , M. V. Diudea, <i>MATCH Commun. Math. Comput. Chem.</i> 2010, 63, 247-256,	3,217	2,20659
13	Omega polynomial in azulenic dendrimers , M. V. Diudea, A. E. Vizitiu, F. Gholami-Nezhad, A. R. Ashrafi, <i>MATCH Commun. Math. Comput. Chem.</i> 2011, 65(1), 173-182,	3,217	2,20659
14	Self-assembled architecture based on triiron-substituted polyoxomolybdate anion and positively charged polymer , Graziella Turdean, Ionel Catalin Popescu, <i>Journal of Solid State Electrochemistry</i> , 2012, nr.16, 681-687, (doi:10.1007/s10008-011-1385-9)	1,821	0,85933
15	Flower-shaped gold nanoparticles: synthesis, characterization and their application as SERS-active tags inside living cells , S. Boca, D. Rugina, A. Pinteau, L. Barbu-Tudoran, S. Astilean, <i>Nanotechnology</i> , 2011, 22, article number 055702 (7 pp) (doi: 10.1088/0957-4484/22/5/055702)	3,644	2,66667
16	Solution-phase, dual LSPR-SERS plasmonic sensors of high sensitivity and stability based on chitosan coated anisotropic silver nanoparticles , M. Potara, A. Gabudean, S. Astilean, <i>J. Mater. Chem.</i> 2011, 21, pp 3625-3633 (doi: 10.1039/c0jm03329d)	5,099	3,41505
17	Evidence of a surface plasmon-mediated mechanism in the generation of the SERS background , C. Farcau, S. Astilean, <i>Chem. Commun.</i> 2011, 47, pp 3861-3863 (doi: 10.1039/C0CC05190J)	5,787	4,75749
18	Simple colloidal lithography approach to generate inexpensive stamps for polymer nano-patterning ,	2,117	1,30108

	Cosmin Farcau, Simion Astilean, <i>Materials Letters</i> , 2011, 65, pp 2190-2192 (doi: 10.1016/j.matlet.2011.04.082)		
19	Chitosan-coated triangular silver nanoparticles as a novel class of biocompatible, highly effective photothermal transducers for in vitro cancer cell therapy , Sanda C. Boca, Monica Potara, Ana-Maria Gabudean, Aurelie Juhem, Patrice L. Baldeck, Simion Astilean, <i>Cancer Letters</i> , 2011, acceptat	4,864	1,52866
20	Amorphous and nanostructured silica and aluminosilicate spray-dried microspheres , M. Todea, R.V.F. Turcu, B. Frentiu, M. Tamasan, H. Mocuta, O. Ponta, S. Simon, <i>J. Mol. Struct.</i> , 1000, nr. 1-3, pp 62-68, 2011, (doi: 10.1016/j.molstruc.2011.05.053)	1,599	0,55066
21	Gold nanoparticles developed in sol-gel derived apatite - bioactive glass composites , S. Simon, R. Ciceo-Lucacel, T. Radu, L. Baia, O. Ponta, A. Iepure, V. Simon, <i>Journal of Materials Science: Materials in Medicine</i> , 2012 (doi: 10.1007/s10856-012-4590-x)	2,325	1,0000
22	Carborane-Substituted 1,2-Diphosphetanes , Anika Kreienbrink, Menyhárt B. Sárosi, Evgeny G. Rys, Peter Lönnecke, Evamarie Hey-Hawkins, <i>Angewandte Chemie-International edition</i> , 50, 20, pp 4701-4703, 2011, (doi: 10.1002/ange.201102437)	11,829	10,11377
23	IR and ESR study of copper(II) complexes with 15N-labelled lysine and ornithine , O. Cozar, I. Bratu, L. Szabó, I.B. Cozar, V. Chiş, L. David, <i>J. Mol. Struct</i> , 993 , pp. 397-403; 2011, (doi:10.1016/j.molstruc.2011.02.001)	1,599	0,55066
24	Molecular dynamics simulations of ion transport through carbon nanotubes. II. Structural effects of the nanotube radius, solute concentration, and applied electric fields , T. A. Beu, <i>J. Chem. Phys.</i> , 135, 044515 (2011)	2,92	1,62951
25	Molecular dynamics simulations of ion transport through carbon nanotubes. III. Influence of the nanotube radius, solute concentration, and applied electric fields on the transport properties , T. A. Beu, <i>J. Chem. Phys.</i> , 135, 044516 (2011)	2,92	1,62951
26	Network analysis using a novel highly discriminating topological index , Diudea, MV; Ilić, A; Varmuza, K; Dehmer, M; <i>Complexity</i> , 16(6) (2011) 32-39. (doi: 10.1002/cplx.20363)	1,367	0,97032
27	All-Pentagonal Face Multi Tori , Diudea, MV; Ilic, A; <i>Journal of Computational and Theoretical Nanoscience</i> , 8(4) (2011) 736-739. (doi: 10.1166/jctn.2011.1746)	0,843	0,83832
	TOTAL	82.86	50.45

ANEXA 5.2 Articole in reviste ISI fara scor relativ de influenta: total IF: 2,541

Nr	Identificare articol	IF
1	Interaction between methemoglobin and some bioglass systems studied by EPR spectroscopy , Gruian C, Steinhoff HJ, Simon S, <i>Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures</i> , 2011, vol. 6, nr. 2, pp 373-383	2,079
2	Diamond D5, a novel allotrope of carbon , Diudea, MV, <i>Studia Universitatis Babes-Bolyai Chemia</i> , 50(4) (2010) 11-17	0,231
3	Omega polynomial for nanostructures designed by (P4)kLe operations , Saheli, M; Diudea, MV; <i>Studia Universitatis Babes-Bolyai Chemia</i> , 50(4) (2010), pp 225-232	0,231

Relevanta publicatiilor de mai sus rezulta din urmatoarele considerente:

- 1) Factorul de impact mare si chiar foarte mare al unora dintre revistele in care s-au publicat o buna parte dintre cele 27 articole: *Angew. Chem. Int. Ed.* (FI 12.73), *Chem. Commun.* (FI: 5,787), *J. Mater. Chem.* (FI: 5.099). *Cancer Letters* (FI: 4,864), *J Phys Chem* (FI=4.224), *Nanotechnology* (FI: 3,644), etc.
- 2) Factorul de impact cumulat pentru cele 27 de articole este de 82.87, ceea ce reprezinta o medie 3 puncte ISI / articol care se situeaza peste media domeniului fizica (aprox 2-2.5). In mod similar s-a realizat un scor relative de influenta cumulat mare 50.45 ceea ce reprezinta o medie de 1.86 / articol.
- 3) Revista *Nanotechnology* ilustreaza coperta numarului din 4 Februarie 2011 (Vol 22, Nr 5, 2011) cu o imagine selectata dintre figurile articolului nostru "Flower-shaped gold nanoparticles: synthesis, characterization and their application as SERS-active tags inside living cells", *Nanotechnology*, 2011, 22, 055702. vezi <http://ej.iop.org/pdf/nano/vol22/na2205-webcover.pdf>
- 4) In lucrarea "Chitosan-coated triangular silver nanoparticles as a novel class of biocompatible, highly effective photothermal transducers for in vitro cancer cell therapy", *Cancer Letters* 311 (2011) 131-140 am demonstrat pentru prima data in literatura aplicabilitatea nanoparticulelor de argint de forma prismatica biocompatibilizate cu biopolimer (chitosan) in distrugerea celulele cancerigene prin incalzire indusa de excitarea laser a rezonantelor plasmonice. Lucrarea este in prezent mediatizata in comunitatea stiintifica pe site-ul Global Medical Discovery Series la categoria "key scientific article" (vezi <http://globalmedicaldiscovery.com/key-scientific-articles/chitosan-coated-triangular-silver-nanoparticles-as-a-novel-class-of-biocompatible-highly-effective-photothermal-transducers-for-in-vitro-cancer-cell-therapy/>)

- 5) Lucrarea "Evidence of a surface plasmon-mediated mechanism in the generation of the SERS background" Chem. Commun. 2011, 47, pp 3861-3863 este o lucrare de tip "Invited Paper" si reprezinta o recunoastere internationala a contributiei noastre la dezvoltarea domeniului SERS.
- 6) Lucrarea "Mapping the SERS Efficiency and Hot-Spots Localization on Gold Film over Nanospheres Substrates" J. Phys. Chem. C, 2010, 114 (27), pp 11717-11722, a cumulat pina in prezent un numar de 18 citari.
- 7) In legatura cu articolul "Synergistic antibacterial activity of chitosan-silver nanocomposites on Staphylococcus aureus" publicat in Nanotechnology, Vol 22, pp135101 (2011), am primit din partea editorului urmatoorul mesaj: "Dear Dr MP, I am pleased to tell you that your article, "Synergistic antibacterial activity of chitosan-silver nanocomposites on Staphylococcus aureus", in Nanotechnology, Vol 22, pp135101 (2011), has been downloaded 250 times so far. To put this into context, across all IOP journals 10% of articles were accessed over 250 times this quarter."
- 8) Lucrarea "Chitosan-coated anisotropic silver nanoparticles as a SERS substrate for single-molecule detection", publicata recent in Nanotechnology 23 (2012) 055501, este mediatizata pe site-ul revistei IOP (Institute of Physics) la adresa <http://iopscience.iop.org/0957-4484/labtalk-article/48366> cu urmatoorul text rezumat "Scientists from Babes-Bolyai University, Romania, have shown that small ensembles of anisotropic silver nanoparticles trapped within thin films of chitosan operate as excellent plasmonic substrates for single-molecule detection by surface-enhanced Raman scattering (SERS). Solid SERS substrates enabling single-molecule detection have been prepared in the past, but this is the first time that a biocompatible SERS substrate with such extremely high sensitivity has been produced reliably. ETC" vezi si <http://www.facebook.com/pages/WITec/109032995792429>.
- 9) In lucrarea "Solution-phase, dual LSPR-SERS plasmonic sensors of high sensitivity and stability based on chitosan coated anisotropic silver nanoparticles J. Mater. Chem. 2011, 21, 3625-3633" s-au publicat rezultate relevante apentru dezvoltarea ulterioara a proiectului. In raport cu alte studii din literatura, s-a demonstrat: a) controlul rezonantele plasmonice prin forma si dimensiunea nanoparticulelor de argint in domeniul spectral de la UV la NIR, b) cresterea semnificativa a capacitatii de detectie SERS si LSPR la "varfurile" nanoparticulelor triunghiulare c) cresterea stabilitatii si biocompatibilitatii prin invelirea lor intr-un strat protector de chitosan.
- 10) S-au finalizat calculele de chimie cuantica asupra unor macrostructuri moleculare, determinandu-se energiile, barierele de inversie si geometriile unor sisteme carbaboranice functionalizate cu grupari fosfetanice. Aceste rezultate sunt relevante pentru experimentalist in gasirea celor mai eficiente metode de obtinere a unor astfel de sisteme macrociclice, vezi articolul publicat "Carbaborane-Substituted 1,2-Diphosphetanes" in Angew. Chem. Int. Ed. 2011, 50, 4701 -4703 .

ANEXA 5.3-4 Alte articole in reviste indexate BDI

1. **Monitoring of copper-glycine complex adsorption on silver surface**, D. Maniu, T. Iliescu, *Studia UBB, Physica*, nr. 2, 2011, pp 87-96.
2. **Synthesis and characterization of silicaencapsulated gold nanorods**, A.M. Gabudean, D. Biro, S. Astilean, *Studia UBB, Physica*, vol 2, 2010, pp 33-39,

Articole trimise spre publicare:

1. **Potential energy curves for PTCDI and PTCDA dimers obtained by MP2 and DFT methods with dispersion corrections**, Mircea Oltean, George Mile, Mihai Vidrighin, Nicolae Leopold, Vasile Chiş, *Journal of Computational Chemistry* - in process de recenzie, (IF = 4,050)
2. **Electronic Properties of Calix[n]arenes as possible drug delivery systems: Model theoretical study on the interaction of calix[n]arenes (n = 4, 5, 6 and 8) with 3-phenyl-1H-[1]benzofuro[3,2-c]pyrazole, a new tyrosine kinase inhibitor drug**, Barroso-Flores, Joaquin, Petrar, Petronela. M.; Silaghi-Dumitrescu, Ioan; Kunsagi-Mate Sandor, *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry*, 2011 – in process de recenzie (IF: 1,22)
3. **Synthesis and spectral characterization of some new p-tert-octyl calix[4]arene derivatives**, Alina Saponar, Elisabeth-Jeanne Popovici, Ecaterina Bica, Gabriela Nemes, *Chemical Papers*, 2011, trimis (IF: 0,754)
4. **A theoretical study on the derivatization of gold surfaces through chalcogen atoms**, P.M. Petrar, G. Nemes, *J. Mol. Struct. –THEOCHEM*

Articole aflate in stadiul de pregatire:

1. **In vitro evaluation of the effects of yttrium aluminosilicates microspheres on human keratinocyte cells**, Radu T, Chiriac MT, Popescu O and Simon S., *European Cells and Materials Journal* - in pregatire (IF: 9,65)
2. **Electrochemical investigation of a self-assembled monolayer of S-acetyl-calix[8]arene on gold surface**, A Killyeni, A. Nicoara, G. L. Turdean, I. C. Popescu, *Electrochem. Comm.*, - în pregatire (IF: 4,282).

Anexa 8–Resursa umana

Resursa umana a proiectului PCCCE 129/2008 este urmatoarea:

Partenerul 1 are echipa de cercetare formata din:

5 *cercetatori cu experienta*: Prof dr Astilean Simion (directorul proiectului si coordonator P1), Conf dr Maniu Dana (managerul de proiect), Conf dr Baia Monica, Conf dr Burda Ioan si Prof dr Todica Mihai. Implementarea, indrumarea si organizarea activitatilor prevazute pentru atingerea obiectivelor proiectului, elaborarea si proiectarea de experimente noi; analiza si evaluare rezultate, redactare publicatii,elaborare rapoarte stiintifice, achizitii si decontari.

6 *tineri cercetatori*: Dr Canpean Valentin, Dr Focsan Monica, Dr Cosmin Farcau, Dr Boca Sanda si Dr Giloan Mircea, Dr Tunyagi Arthur. Sinteze si caracterizare micro/nano-structuri, Conceperea si efectuarea de masuratori noi de caracterizare bio-nano-structurilor produse, obtinerea de bionano-conjugate, nanomanipularea nanoparticulelor cu AFM, calculul raspunsului optic al nanoparticulelor in camp si publicarea rezultatelor.

6 *doctoranzi*: Gabudean Ana Maria, Potara Monica, Leordean Cosmin, Simon Timeea, Iliut Maria si Suarasan Sorina: efectuarea de sinteze, caracterizarea legaturilor nanoparticule-molecule prin diferite metode experimentale (potential Zeta spectroscopie UV-vis, Raman, Fluorescenta , fabricarea de nano-perforatii, testarea unor molecule incalitate de senzori SERS, studii literaturii internationale,

2 *masteranzi*: Marta Bogdan si Saracut Vasile. Acestia se formeaza alaturi de doctoranzi in activitati specifice (obtinerea de nanostructuri/nanoparticule autoasamblate, functionalizare), activiati de documentare, studiul literaturii internationale,

Pe parcursul derularii proiectului pozitia unor membri s-a schimbat de la statutul de doctorand la cel de tanar cercetator , sau de la masterand la cel de doctorand si au fost angajati noi masteranzi in echipa de cercetare.

Partenerul 2 are echipa de cercetare formata din:

3 *cercetatori cu experienta*: Prof dr Popescu Octavian (coordonatorul partenerului 2), CP I Damert Annette si Dr Ghetea Ligia Gabriela. Acestia se ocupa cu indrumarea si organizarea activitatilor, caracterizarea legaturii formate intre celule si nanoparticule biofunctionalizate, interpretarea si publicarea rezultatelor, intocmirea rapoartelor stiintifice.

8 *tineri cercetatori*: Dr Barbu-Tudoran Lucian, Dr Chiriac Mircea, dr Lupan Iulia, Dr Kelemen Beatrice, Dr Balint Miklos, Dr Jakob Endre, Dr Motoc Rozalia si dr Gregorian Liliana. Acestia se ocupa cu masuratori de citotoxicitate a nanoparticulelor produse asupra diferitelor tulpini de celule

1 *doctorand*: Marian Constantin, Masuratori de citotoxicitate asupra complexului celulelor eucariote-nanoparticule.

3 *masteranzi*: Ochis Cornelia, Ianc Bianca, Matetovici Irina. Acestia se ocupa cu cresterea celulelor eucariote.

Pe parcursul derularii proiectului componenta echipei s-a schimbat partial dar s-au conservat competentele necesare derularii activitatilor din proiect.

Partenerul 3 are echipa de cercetare formata din:

4 *cercetatori cu experienta*: Prof dr Simion Simon (coordonatorul partenerului 3), Conf dr Lucian Baia, Lect dr Mihai Vasilescu, Dr Mihaela Aluas. Implementarea, indrumarea si organizarea activitatilor aferente atingerii obiectivelor proiectului, elaborare si proiectarea experimentelor; caracterizarea micro si nanostructurilor obtinute, interpretarea rezultatelor, intocmirea rapoartelor stiintifice.

3 tineri cercetatori: Bogdan Frentiu, Gruian Cristina si Trandafir Diana. Acestia se ocupa cu producerea de micro si nanoparticule prin metode fizico-chimice si caracterizarea acestora, publicarea rezultatelor.

2 doctoranzi: Horia Mocuta, Bogdan Oprea: Producerea de nanostructuri hibride si caracterizarea acestora cu ajutorul echipamentelor din dotare (difractie Raze X)

2 masteranzi: Nicolae Corojan si Vasile Muresan. isi formeaza competente in activitati specifice de producerea de microstructuri metalice si hibride;

Pe parcursul derularii proiectului componenta echipei s-a modificat partial dar s-au pastrat competentelor necesare derularii activitatilor din proiect. Astfel, in echipa partenerului 3 au mai fost urmatoarele persoane: 2 doctoranzi: Marieta Muresan (2010,2011) si Maria Maier (2010,2011) si 1 masterand: Iepure Alexandra (2010).

Partenerul 4 are echipa de cercetare formata din:

1 cercetator cu experienta: Conf dr Gabriela Nemes (coordonatorul partenerului 4) Activitatea in cadrul proiectului consta in stabilirea protocolului de sinteza pentru obtinerea calixarenelor functionalizate si a sistemelor metal-calixarena. Determinarea stabilitatii sistemelor metal-calix[*n*]arena(functionalizata), interpretarea si publicarea rezultatelor, intocmirea rapoartelor stiintifice

4 tineri cercetatori: Dr Petronela Petrar, Dr Alexandru Lupan, Dr Matei Maria Uta si Dr Sarosi Menyhart. Se ocupa cu caracterizarea fizico-chimica si studiul conformational a sistemelor calixarenice si a sistemelor metal-calixarenice, calcule DFT si ab initio asupra unor sisteme macrociclice ce contin atomi de metale incluse in cavitate,

1 doctorand: Paic Sebastian. Sinteza si caracterizarea fizico chimica a calixarenelor functionalizate la nivel upper si lower rim.

Partenerul 5 are echipa de cercetare formata din:

3 cercetatori cu experienta: Prof dr Cozar Onuc (coordonatorul partenerului 5), prof dr Chis Vasile, Lect dr Leopold Nicolae, măsurători IR, Raman și SERS, calcule teroretice, elaborarea metodologiilor de lucru, stabilirea obiectivelor, monitorizarea desfasurarii etapelor, implementarea si decontarea grantului, elaborare si publicarea rezultatelor

1 tinar cercetator: Dr Oltean Mircea calcule DFT și Hartree-Fock, analiza rezultatelor teoretice, elaborarea rapoartelor științifice

1 doctorand: Cozar Bogdan (din 2011), măsurători IR și Raman, analiza rezultatelor experimentale

Partenerul 6 are echipa de cercetare formata din:

1 cercetator cu experienta: Prof dr Beu Titus Adrian, (coordonatorul partenerului 6). Simularea proceselor de curgere prin nanotuburi, calcule de structura si dinamica supramoleculara, interpretarea si publicarea rezultatelor, elaborarea rapoartelor stiintifice.

1 doctorand: Pop Sergiu Cristian, Calcule de structura si dinamica moleculara.

Partenerul 7 are echipa de cercetare formata din:

2 *cercetatori cu experienta*: Prof de Mircea Diudea (coordonatorul partenerului 7) si Dr Gabriel Katona. Designul si caracterizarea teoretica a unor nanostructuri functionalizate sau cu posibila functionalizare, interpretarea si publicarea rezultatelor, elaborarea rapoartelor stiintifice.

I tinar cercetator: Csaba L. Nagy. Modelarea de nanostructuri functionalizate.

I doctorand: Nagy Katalin, Design si caracterizarea teoretica a formelor alotrope de carbon

I masterand: Fustos Melinda Emese, implementare program pentru design-ului molecular.

Partenerul 8 are echipa de cercetare formata din:

2 *cercetatori cu experienta*: Prof dr Popescu Ionel Catalin (coordonatorul partenerului 8) si conf dr Turdean Gratiela. Studiul de chimia suprafetei si caracterizarea bioconjugatelor prin metode fizico-chimice, interpretarea si publicarea rezultatelor, elaborarea rapoarte stiintifice.

I tinar cercetator: Dr Nicoara Adrian. Obținerea și caracterizarea de microstructuri prin ansamblare de microsferă și depuneri electrochimice de filme de aur

I doctorand: Silai Aniko. Obținerea și caracterizarea de microstructuri prin ansamblare de microsferă și depuneri electrochimice de filme de aur