



**Aprobat de:**

*Senatul Universității de Vest din Timișoara (UVT), prin HS nr. 33/16.12.2013*

*Consiliul de Administrație (CA) al Universității de Vest din Timișoara, prin Hotărârea nr. 5/28.10.2013*

*Consiliul Facultății de Chimie, Biologie, Geografie (CBG), în Ședința din 18.10.2013*

*Consiliul Departamentului de Biologie-Chimie, în Ședința din 16.10.2013*

## LABORATORUL DE CERCETARE ÎN

# **CHIMIE-FIZICĂ STRUCTURALĂ ȘI COMPUTAȚIONALĂ PENTRU NANOȘTIINȚE ȘI QSAR (CF-SC-NQ)**

## **Regulament/Statut Propriu de Funcționare**

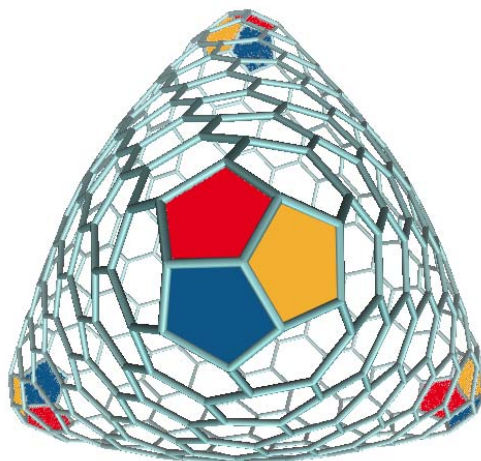
<b>1. DISPOZIȚII GENERALE: TITULATURĂ, LOCAȚIE, ÎNSEMNE, ȘI MODIFICĂRI ULTERIOARE</b>	2
<b>2. MISIUNE</b>	4
<b>3. PROGRAM-CADRU/STRATEGIE, DIRECȚII ȘI TEME DE CERCETARE</b>	6
<b>4. ORGANIZARE ȘI ORGANIGRAMĂ</b>	9
<b>5. RESURSE FINANCIARE ȘI BAZA MATERIALĂ</b>	12
<b>ANEXA 1. Componența curentă (și recentă) a L-CF-SC-NQ</b>	14
<b>ANEXA 2. CV-ul Directorului Științific al L-CF-SC-NQ</b>	16
<b>ANEXA 3. Lucrări ale membrilor L-CF-SC-NQ</b>	25
<i>Cărți și Monografii Internaționale</i>	25
<i>Capitole în Cărți</i>	27
<i>Articole ISI Thompson Reuters</i>	32
<b>ANEXA 4. Citări ISI &amp; BDI ale membrilor L-CF-SC-NQ</b>	39

AVIZAT și INITIAT la 23 Septembrie 2013 de către:  
*Fondator și Director Științific L-CF-SC-NQ*  
*Conf. univ. dr. dr. habil. Mihai V. PUTZ*



## 1. DISPOZIȚII GENERALE: TITULATURĂ, LOCAȚIE, ÎNSEMNE, ȘI MODIFICĂRI ULTERIOARE

- 1.1. Titulatura unității de cercetare este: „*Laboratorul de cercetare în Chimie-Fizică Structurală și Computațională pentru Nanostiințe și QSAR* [<sup>1</sup>]”, denumire reprezentată în continuare prin acronimul (L-)CF-SC-NQ.
- 1.2. Pentru comunicarea în limba engleză, denumirea este: „*Laboratory of Computational and Structural Physical-Chemistry for Nanosciences and QSAR*”, cu păstrarea acronimului „(L-)CF-SC-NQ”.
- 1.3. L-CF-SC-NQ își are sediul în clădirea Facultății de Chimie, Biologie, Geografie (CBG), în cadrul Departamentului Biologie-Chimie, Biroul și Sala Laboratorului de Informatică (S03, parter, lângă Laboratorul Didactic de Chimie-Fizică), pe Str. Pestalozzi 16, Timișoara, 300115, Jud. Timiș, România.
- 1.4. Sigla L-CF-SC-NQ este reprezentată de insigna originală:



creată în spațiul fullerenelor icosaedrale largi de tipul  $C_{240}$ . Structura a fost obținută computațional prin mecanismul  $gSW+2sBerge$  (transformare topologică generalizată de tip Stone-Wales la care se adaugă aplicarea teoremei Berge de transformare a spațiului de isomeri în el însuși, aici limitată la transformarea topologică implicând două legături chimice din structură, pe scurt  $G=2s(H)$ ), completând astfel (inovator) limitarea algoritmului Fowler-Manolopoulos de generare spiralată de inele penta-hexagonale în fullerenele și nanotuburile “clasice”; structura este original produsă și va apare în capitolul de carte “*Generalized Stone-Wales Transformations for Fullerene Graphs Derived from Berge’s Switching Theorem*” cu autorii [Ottorino Ori](#), [Mihai V. Putz](#),

<sup>1</sup> QSAR = Quantitative Structure-Activity Relationship(s)



Ivan Gutman, și Peter Schwerdtfeger, în cadrul monografiei memoriale I. Gutman, B. Pokric, D. Vukicevic (Eds.), *Ante Graovac – Life and Works*, MATHEMATICAL CHEMISTRY MONOGRAPHS, No. 16, Publisher: University of Kragujevac and Faculty of Science Kragujevac, 2014, Hardcover, ISBN: 978-86-6009-021-0 <sup>[2]</sup> și nu are limitări de copyright între autorii capitolului (toți autorii având drepturi intelectuale și de copyright egale asupra capitolului); autorii membri activi ai Laboratorului CF-SC-NQ sunt evidențiați prin “îngroșare+subliniare”.

- 1.5. Sigla CF-SC-NQ este element de identitate vizuală al Laboratorului și trebuie să apară pe toate comunicările oficiale ale acestuia. Sigla laboratorului CF-SC-NQ este însemn propriu, diferit de cele ale Facultății CBG, și UVT, dar trebuie să le însoțească pe acestea; sigla se utilizează pe toate materialele (tipărite, în format electronic sau pe alt suport) promoționale sau informative realizate în acest scop de oricare dintre membrii L-CF-SC-NQ;
- 1.6. Orice modificare a siglei va fi aprobată de Directorul Științific al L-CF-SC-NQ și comunicată Senatului UVT.
- 1.7. Promovarea de tip “art-work” a titlaturii Laboratorului și respectiv a acronimului său (L-CF-SC-NQ) se poate face cu aprobarea Directorului Științific, fără necesitatea aprobărilor la nivel de Senat.
- 1.8. Diseminarea prin publicațiile și prezentările membrilor L-CF-SC-NQ realizate prin colaborarea și/sau cu sprijinul total sau parțial al Laboratorului vor conține, alături de alte eventuale afilieri, datele de identificare specifice L-CF-SC-NQ și anume:

*Laboratory of Computational and Structural Physical-Chemistry for Nanosciences and QSAR*  
Department of Biology-Chemistry  
Faculty of Chemistry, Biology, Geography  
West University of Timișoara  
Pestalozzi Str. No. 16, RO-300115, Timișoara  
Tel:+40-256-592638, Fax: +40-256-592620  
E-mail: (...)@cbg.uvt.ro

- 1.9. Prezentul Regulament intră în vigoare la data aprobării de către Senatul UVT.
- 1.10. Modificări ulterioare ale prezentului Regulament se pot face, la propunerea *Directorul Științific, cu unanimitatea Consiliului Științific al Laboratorului*, și cu aprobarea Senatului UVT.
- 1.11. Dizolvarea L-CF-SC-NQ poate fi decisă de către *Directorul Științific, cu unanimitatea Consiliului Științific al Laboratorului, și cu notificarea Senatului UVT*. Directorul și membrii L-CF-SC-NQ vor stabili în conformitate cu prevederile Cartei și a

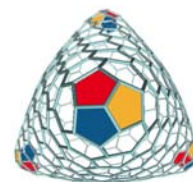
<sup>2</sup> <http://match.pmf.kg.ac.rs/mcm16.html>



Regulamentelor UVT și destinația dotărilor și fondurilor rămase după lichidare; în schimb, lichidarea mijloacelor fixe și mobile ale L-CF-SC-NQ se face în conformitate cu prevederile legale în vigoare.

## 2. MISIUNE

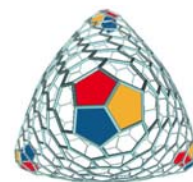
- 2.1. L-CF-SC-NQ este o unitate de cercetare științifică avansată și independentă, fără personalitate juridică, în DOMENIUL FUNDAMENTAL: ȘTIINȚE NATURALE ȘI MATEMATICE, cu obiective de cercetare fundamentală, diseminare, educație, dezvoltare și de promovare instituțională la nivelul CHIMIEI MULTIDISCIPLINARE (incluzând nelimitativ disciplinele de chimie-fizică, chimie informatică, chimie matematică, chimie organică-fizică, chimie nanoanorganică, chimie-biologie, biochimie, biologie informatică, chimie farmaceutică, chimie medicală, ecotoxicologie, geochimie, QSAR, etc.) aplicată fenomenelor și proprietăților NANOSTRUCTURALE ale materiei, în stare izolată și în interacție reciprocă și cu mediul (QS[A-activity/P-property/T-toxicity]R), explicate și controlate de legile FIZICII, cu suport MATEMATIC și COMPUTAȚIONAL.
- 2.2. Cercetarea învederată de L-CF-SC-NQ, este în acord cu *Strategia de cercetare și creație universitară a Universității de Vest din Timișoara pentru 2012-2016* (HS14/12.12.2012) și cu *Regulamentul cercetării științifice și creației universitare* (Anexa 2 din HS17/20.02.2013), și apare din necesitățile de “rezolvare” a limitărilor de cunoaștere cu impact social și economic cu care se confruntă Omenirea în al doilea deceniu al secolului XXI, și anume, conform documentului strategic “Horizon 2020”, cu cele referitoare la:
- Problema: “ENERGIE SIGURĂ, ECOLOGICĂ ȘI EFICIENTĂ”;
  - Problema: “TRANSPORTUL ECOLOGIC ȘI COMUNICAREA INTELIGENTĂ”
  - Problema: “VIAȚĂ MAI LUNGĂ ȘI MAI SĂNĂTOASĂ”;
- 2.3. Astfel, L-CF-SC-NQ se angajează în contribuția la rezolvarea acestor probleme prin abordări de cercetare originală ce presupun re-poziționarea din perspectiva fundamentală a structurii materiei (fotoni, electroni, atomi, molecule, biomolecule) în interacție reciprocă, singura abordare care poate da un ‘salt’ și nu doar un “plus” de calitate în confortul vieții și al exploatarii resurselor Naturii pentru un viitor sustenabil.
- 2.4. Așadar, cercetarea din L-CF-SC-NQ se adresează fenomenelor fundamentale fizico-chimice cu impact bio-eco-farmaco- inclusiv tehnologic, chiar exotice, adică “împinse la limita” lor de manifestare (și cunoaștere), astfel încât să se inducă noi fenomene controlate adaptiv și funcțional (în răspuns de feed-back de tip energy- and information



harvesting), care să stea la baza a noi tehnologii de exploatare și reciclare integrată în polinomul CUNOAȘTERE UMANĂ – PRODUCȚIE / UTILITATE SOCIALĂ – ECONOMIA DE RESURSE – DESIGNUL INTERACȚIEI CU MEDIUL – ECHILIBRUL CU NATURA.

La aceste misiuni legate de cunoașterea novatoare prin cercetare științifică fundamentală, se adaugă misiuni specifice de comunicare și formare profesională în domeniu, dar și de imagine instituțională, și anume:

- 2.5. L-CF-SC-NQ este de asemenea chemat să închidă circuitul cunoaștere-diseminare/comunicare și prin organizarea de curricule de pregătire profesională avansată (post-universitare, la nivel de Master, Doctorat și post-doctorat), dar și pentru organizarea sau co-organizarea în parteneriat a unor sesiuni de work-shopuri, seminarii, conferințe și congrese, în funcție de cerințele, nevoile și posibilitățile de organizare ale acestor acte educaționale în cadrul Facultății CBG și UVT;
- 2.6. L-CF-SC-NQ facilitează pregătirea studenților la ciclul de licență, master, doctorat dar și pentru post-doctoranzi și asigură cadrul financiar și material de colaborare cu aceștia precum și cu cercetătorii invitați și/sau în vizită de lucru (în regim invited researchers, respectiv visiting researchers) în domeniul de cercetare al laboratorului (articolul 2.1), inclusiv cu participare internațională, personală sau în cadrul programelor Uniunii Europene (de tip Erasmus, Marie Curie sau altele asemenea) sau ale Guvernului României (prin bilaterale cu Germania, Italia, Franța, India, China, USA, etc.), etc.;
- 2.7. Nu în ultimul rând, L-CF-SC-NQ este angajat în sporirea prestigiului Universității de Vest din Timișoara și al Domeniului CHIMIEI din cadrul Facultății de Chimie, Biologie, Geografie, prin îmbogățirea constantă a portofoliului de publicații, diseminări și colaborări în cercetarea științifică, afiliate și asociate cu UVT/CBG, cu relevanță și de impact internațional, contribuind semnificativ la efortul colectiv al “echipei UVT” de a **OBȚINE ȘI APOI A MENȚINE CLASIFICĂRILE STRATEGICE** pentru Universitatea de Vest din Timișoara:
  - UVT în Top 500 Shanghai;
  - UVT ca instituție de cercetare avansată și de educație în România (Clasificarea C);
  - Clasificarea A în România pentru linia de CHIMIE din cadrul UVT;
  - Sprijinirea Școlii Doctorale de CHIMIE de la UVT, prin coordonarea ritmică și cu finalizare de succes a tezelor de doctorat de calitate elaborate în cadrul Laboratorului.



### 3. PROGRAM-CADRU/STRATEGIE, DIRECȚII ȘI TEME DE CERCETARE

Conform MISIUNII de cercetare științifică enunțate pentru L-CF-SC-NQ, se identifică trei direcții mari de studiu strategic, ce vor fi abordate sistematic în următorul ciclu sabatic de cercetare și de finanțare la nivel național și al Uniunii Europene:

3.1. *Abordarea “bosonică” a materiei și a legăturii chimice în special*, știut fiind că în această stare cuantică materia se poate condensa în spații restrânse dar cu acumulare de energie, la nivel nanoatomic; în mod fericit, la nivelul grupului s-a dezvoltat know-howul necesar pentru dezvoltarea acestei direcții de cercetare, prin studiile recente legate de modelarea legăturii chimice ca și condensat cuantic (pe baza modelului bosonării electronilor în legătura chimică, cu formarea de particule cuantice ale funcției de legătură chimică – numite BONDONI), conform Anexei 3; la nivel teoretic acest model a fost și este curent aplicat nanosistemelelor extinse de tip grafene, silicene, germanene, cu descrierea și predicția caracteristicilor de transfer de fază pentru defectele de tip topologic (Stone-Wales); la nivel experimental se învederează observarea fenomenelor prezise prin formarea de bondoni echivalenți printr-un ansamblu experimental unic (în fază de proiect) cu ajutorul opticii cuantice și a fotonicii integrate la nivel de micro-electronică, dar cu extensii posibile și la micro-nano-bio-sisteme (MNBS), considerate drept fenomene cheie pentru tehnologiile viitoare (KET: Key Enabling Technologies) ce includ calculatorul cuantic pe baze moleculare, electronica moleculară (molelectronica), etc., economisind astfel considerabil din resursele ne-regenerabile sau greu regenerabile (minerale, Cu, Al, Au, Ag, etc.) ale Pământului în general, dar și ale României în special, precum și din costurile de exploatare respective; astfel, *temele de cercetare* aferente sunt:

- *Teoria Bondonilor, ca particule cuantice ale funcției de undă moleculare*
- *Caracterizarea bondonică a tranzițiilor de fază în nanosisteme extinse (de tip grafenic și fullerenic) cu defecte topologice (rotații Stone-Wales)*
- *Identificarea spectrală a caracterului corpuscular (bondonic) al legăturii chimice*

3.2. *Abordarea cuantică a reactivității chimice*, vizează înțelegerea unitară, pe baze mecanic-cuantice, eventual cu implicarea fenomenologiei de tip bosonic-bondonic, în explicarea mecanismelor de reactivitate la nivel molecular, respectiv în agregarea atomilor-în-molecule și nanocomposite; astfel, principiile consacrate ale electronegativității și ale tăriei chimice, aflate la baza explicării egalizării potențialelor chimice ale subsistemelor (bazinelor cuantice atomice) în molecule (prin frontiere delimitate de anularea gradientului de densitate electronică în molecule, precum în



ierarhia orbitală în atomi), dar și respectiv a reacțiilor chimice cu paradigma acizilor și bazelor tari și slabe, se reformează și se generalizează din perspectiva conceptelor combinate de electrofilicitate (legată de energia de activare) și putere chimică (legată de numărul maxim de electroni inter-schimbați într-o interacție chimică, intra- sau intermoleculară); acest tip de studii creează un model fizico-matematic universal pentru tratarea “atomului chimic”, adică a atomului angajat în legătura chimică și pregătit pentru reactivitate – interacție ulterioară; această abordare permite controlul cuantic al unor noi molecule proiectate cu proprietăți specifice de reactivitate și de răspuns specific (la anumiți atomi sau la alte molecule cu anumite zone moleculare “recunoscute”); astfel, efectele de „memorie” se combină în această direcție cu modelarea informației cuantice, a criptografiei cuantice, cu efectele bohmienne de interacție la distanță (legate de delocalizarea electronilor în poliene și polimeri, de exemplu); se ajunge astfel la un fel de “teleportare a informație chimice și a legăturii chimice în general”, fenomen comprehensibil prin prisma mai sus numitului bondon - particula cuantică a legăturii chimice; impactul în economia și transportul informației cuantice, și deci și a energiei înmagazinate, în diverse procese nano-și mezo-scopice este imediat, dar cu aplicabilitate la sisteme încă în studiu (fullerene, endo-fullerene, lichide ionice, sisteme compozite de tip anorganic-organic), etc.; în acest context, *temele de cercetare* aferente sunt:

- *Electronegativitatea: conceptul modern în teoria funcționalei densitate; principiul de egalizare și de inegalitate al atomilor în moleculă; colorarea topologică cu electronegativitate a nanosistemelor extinse și a precursorilor acestora (hidrocarburi policiclice aromatice-PAH, grafene, silicene, etc.);*
- *Tăria chimică: companion al electronegativității; problema observabilității cuantice; cuantificarea principiului tăriei maxime, și în relație cu principiul acizilor și bazelor tari și slabe (HSAB);*
- *Modelarea și standardizarea reacțiilor chimice cu principiile min-max (și de aromaticitate) ale electronegativității și tăriei chimice;*
- *Unificarea principiilor de reactivitate chimică: acțiunea chimică și legătura chimică.*

3.3. Abordarea topologică și algebrică a interacției chimico-biologice și a toxicității: având ca obiectiv final proiectarea de noi medicamente cu acțiune specifică, din substanțe active sau farmacofori și substanțe generice sintetizate în urma unor proiecții topologice și computaționale, prezenta direcție dezvoltă modele și algoritmi pentru înțelegerea și controlul mecanismelor de interacției dintre ligand (substanța chimică, toxicantul, respectiv structura ”țintă” în sensul de structura învederată de a fi optimizată structural prin modul de interacție alosterică) cu receptorul (situsul biologic și organismal, la nivel celular, care poate fi o biomoleculă de tip enzimă, activator sau inhibitor metabolic); toxicitatea este astfel caracterizată prin tipul de mecanism de legare identificat, direcție



în care grupul CF-SC-NQ a reușit în ultimi ani să propună algoritmi inovatori de corelare a interacției ligand-receptor, substrat-enzimă, prin reformularea problemei cantitative structură (chimică) activitate (biologică), QSAR, a se vedea Anexa 3; prin abordarea algebrică cu varianta Spectral-SAR, iar ultimativ cu considerarea semi-moleculilor, cu legăturile simple conjugate rupte potrivit astfel încât să se formeze lanțuri moleculare cu ramificații primare sau/și secundare, mai adaptate legării de tip similar “cheie-în-broască”, conform principiului Fisherian al medicamentului; s-a făcut astfel pasul esențial în a aduce din virtual o moleculă considerată doar topo-computațional “descompusă” (de tip *SMILES -Simplified Molecular-Input Line-Entry System*) la nivelul “real” conceptual-de mecanism de interacție și de legare prin transducție lipo-celulară sub această formă fragmentară; unicitatea dar și noutatea acestei abordări deschide premise promițătoare pentru viitoare studii QSAR și 3D-QSAR, cu capacitate de predicție ridicată, pentru un design controlat al moleculei țintă, cu potențial toxicologic focusat (scazut, de exemplu pentru aditivi alimentari sau în produse cosmetice, dar ridicat în compozițiile anti-HIV și pentru alte procese de apoptoză celulară în varii boli degenerative, de tip ateroscleroza, Alzheimer, etc.), contribuind astfel la așa numita medicină funcțională prin farmacotoxicologia și farmacodinamia propusă, conceptual-computațional dar și cu perspective de sinteză de laborator farmaceutic; pentru această direcție, *temele de cercetare* aferente sunt:

- *Metoda Spectral-SAR: abordarea algebrică a corelațiilor statistice structură-activitate și structură-toxicitate;*
- *Principiile QSAR ale Organizației pentru Co-operare și Dezvoltare Economică (OECD); modelarea legăturii ligand-receptor cu principiile QSAR; aplicații la molecule de interes ecotoxicologic (structuri alifactice, PAH, lichide ionice, anti-HIV, etc.);*
- *Modelarea SMILES (Simplified Molecular-Input Line-Entry System) a legăturii ligand-receptor; problema virtual-real pentru molecula SMILES în transducția celulară a toxicanților;*
- *Indici topologici și grafuri moleculare: indici topologici cu potențial cuantic (de tip Wiener, dar și echivalenți); formularea de noi indici și corelarea (respectiv colorarea) lor cu reactivitatea chimică și cu activitatea bio-ecotoxicologică*

3.4. Modificarea prezentului program cu direcțiile și temele de cercetare al L-CF-SC-NQ se poate face, odată cu schimbarea Strategiei și Regulamentului UVT pentru Cercetare și Creație Universitară, din necesități de actualitate strategică pentru cercetarea științifică la nivel național și internațional, la solicitarea forurilor academice naționale și internaționale, a partenerilor de cercetare și a membrilor L-CF-SC-NQ, cu aprobarea Directorului Științific al L-CF-SC-NQ și cu acordul majorității simple a Consiliului Științific, și prin comunicarea către Senatul UVT.





## 4. ORGANIZARE ȘI ORGANIGRAMĂ

4.1. L-CF-SC-NQ poate avea în componență cadre didactice și cercetători cu activitate științifică remarcabilă în domeniile CHIMIEI MULTIDISCIPLINARE (*incluzând nelimitativ disciplinele de chimie-fizică, chimie informatică, chimie matematică, chimie organică-fizică, chimie nanoanorganică, chimie-biologie, biochimie, biologie informatică, chimie farmaceutică, chimie medicală, ecotoxicologie, geochimie, QSAR* etc.):

- din cadrul Facultății CBG,
- precum și alte persoane din cadrul altor Facultăți ale UVT,
- precum și din țară și/sau străinătate

care satisfac criteriile de competență și performanță cerute în cadrul L-CF-SC-NQ și care au aderat la programul de cercetare al L-CF-SC-NQ și au solicitat calitatea de membru (printr-o cerere adresată Directorului Științific al L-CF-SC-NQ și cu acordul majorității simple a Consiliului Științific);

- de asemenea, din laboratorul CF-SC-NQ pot face parte *doctoranzi și post-doctoranzi* în domeniile de cercetare ale CHIMIEI MULTIDISCIPLINARE,
- precum și *personal tehnico-administrativ*,

cu aprobarea nominală din partea Directorului Științific al Laboratorului și cu acordul majorității simple a Consiliului Științific, conform cu organigrama prezentată.

4.2. Calitatea de membru activ al L-CF-SC-NQ se poate pierde:

4.2.1. *la cerere;*

4.2.2. prin *neparticiparea* la acțiunile L-CF-SC-NQ pe o perioadă mai mare de șase luni, prin decizia Directorului Științific și a majorității simple a Consiliului Științific;

4.2.3. prin *cheltuirea resurselor L-CF-SC-NQ contrar intereselor și/sau strategiei de cercetare-diseminare a acestuia.*

4.3. Membrii L-CF-SC-NQ pot face parte și din alte colectivele de cercetare, pe baza *principiului liberei asocieri în cercetarea științifică*, respectiv din alte instituții de cercetare, vizând activitatea de cercetare în cadrul unor alte programe, contracte, granturi de cercetare. Totuși, *derularea unui proiect independent* de către o persoană sau un colectiv de cercetare sub identitatea sau cu participarea L-CF-SC-NQ atrage după sine următoarele obligații din partea inițiatorilor:

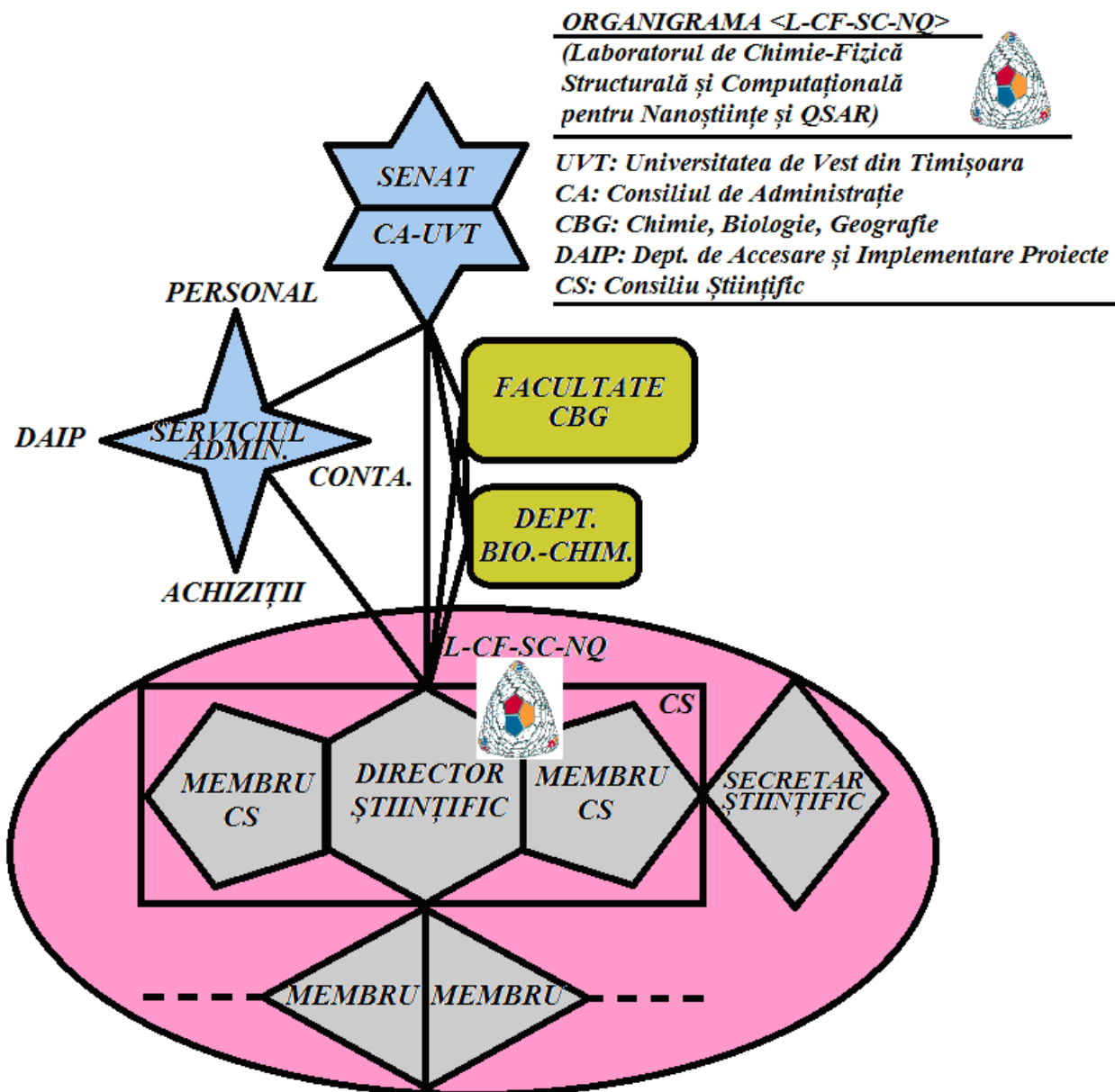


- 4.3.1. se asigură contribuții financiare și materiale către L-CF-SC-NQ, conform Regulamentului de Cercetare al UVT;
- 4.3.2. se declară co-afilierea la L-CF-SC-NQ și implicit la UVT pe toate produsele științifice (articole, cărți) și pe materialele de comunicare (slide-uri, materiale video și audio, autocolante și orice obiect promoțional produs în cadrul proiectului), cu specificarea elementelor de identitate vizuală asociate (sigle originale, respectiv adrese instituționale exacte).
- 4.4. Organul de conducere al L-CF-SC-NQ este *Consiliul Științific constituit din 3 membri ai Laboratorului și condus de Directorul Științific*, care face parte de drept din Consiliul Științific. Consiliul Științific și Directorul L-CF-SC-NQ sunt organe de conducere științifice alese de către cadrele didactice și cercetătorii care intră în componența laboratorului, potrivit art. 4.1, odată la 4 ani în conformitate cu prezentul regulament, dar și cu regulamentele UVT în acest sens.
- 4.5. L-CF-SC-NQ are un *Secretar Științific* care poate să nu facă parte din Consiliul Științific; acesta are rolul principal în a conlucra, alături de Directorul Științific, la creșterea impactului și diseminării cercetării propuse și realizate, dar și avizează raportul anual de activitate al Laboratorului, înaintea prezentării sale în plenul L-CF-SC-NQ, sau în alte foruri academice largite și publice (internet).
- 4.6. Consiliul Științific al L-CF-SC-NQ se întrunește periodic (cel puțin semestrial) în vederea analizării activității de cercetare realizate în conformitate cu strategia și obiectivele L-CF-SC-NQ dar și pentru a decide asupra acțiunilor imediate (participarea selectivă la call-urile pentru granturi de cercetare naționale și internaționale, colaborări, admiterea de noi membri, etc.). Anual, Consiliul întocmește un *raport de activitate științifică* ce va fi prezentat de Directorul Științific în plenul L-CF-SC-NQ, și la cererea conducerii Departamentului/Facultății/Senatului poate fi prezentat și în cadrul largit al Consiliului Facultății și/sau al UVT. Raportul va fi făcut oricum public prin postarea pe o pagina de INTERNET special dedicată Laboratorului, pe platforma Facultății, a UVT, sau a Directorului Științific, de preferință și cu link la paginile Chimie/CBG/UVT. În prezent, realizările științifice și raportările L-CF-SC-NQ sunt prezentate și detaliate pe pagina Directorului Științific, la adresa: <http://www.mvputz.igstorm.ro/cercetare.php>.
- 4.7. Directorul Științific al L-CF-SC-NQ are ca sarcini principale:
  - 4.7.1. conducerea operativă a Laboratorului;
  - 4.7.2. urmărirea realizării activităților de cercetare conform strategiei de cercetare și misiunii asumate;
  - 4.7.3. gestiunea documentelor legate de mobilități, dezvoltare-logistică, publicare, promovarea rezultatelor, resurse umane, financiare, și materiale,



în colaborare cu Departamentul Biologie-Chimie și cu Facultatea CBG precum și cu serviciile aferente (administrativ, tehnic și contabil) de la UVT.

4.7.4. ocuparea eficientă și meritocratică a organigramei prezentate.



## 5. RESURSE FINANCIARE ȘI BAZA MATERIALĂ

5.1. L-CF-SC-NQ funcționează în regim de autonomie financiară, cu activități înregistrate distinct în cadrul contabilității UVT, cu buget obținut prin autofinanțare.

5.2. Resursele financiare ale L-CF-SC-NQ au la bază:

- fonduri alocate de UVT pentru activitatea de cercetare, conform regulamentelor UVT (din finanțarea de bază, suplimentară, sau complementară);
- fondul special de cercetare constituit la nivelul UVT;
- fonduri alocate de la bugetul de stat în conformitate cu prevederile legale, pentru finanțarea programelor provenite din programul național de cercetare științifică, prin atribuire ca fonduri nucleu sau în sistem competitiv, precum și a unor teme de cercetare de interes național sub formă de granturi cu MEN (CNCS, CNDI), ANCS, Academia Română, etc. și alte tipuri de fonduri de la bugetul de stat;
- contracte de cercetare în cadrul programelor finanțate de U.E., Banca Mondială, NATO, programe bilaterale, etc.;
- contracte de cercetare și de dezvoltare-inovare, respectiv transfer de know-how încheiate cu firme românești/străine sau cu administrația locală/regională;
- fonduri atrase de la agenții economici;
- fonduri acordate de fundații sau provenind din alte surse private;
- fonduri constituite conform legii;
- fonduri rezultate de la cursurile postuniversitare de perfecționare și specializare (realizate prin L-CF-SC-NQ);
- fonduri rezultate din veniturile proprii CBG sau ale Departamentului de Biologie-Chimie, în limita posibilităților, de la ciclurile post-universitare (Master, Doctorat) sau provenite din prestări servicii sub forma de cursuri la cerere, respectiv prin furnizarea de produse științifice (analize computaționale, prognoză fizico-chimică, design molecular și topologic, analiză de reactivitate etc.);
- sponsorizări;
- donații de la persoane fizice sau juridice române sau străine, în bunuri sau bani, indiferent de monedă, în acord cu Regulamentele UVT și legislația în vigoare;
- alte surse financiare, în acord cu legislația în vigoare.

5.3. Modul de utilizare a resurselor se aprobă la propunerea Directorului Științific al L-CF-SC-NQ, cu avizarea Consiliului științific și de către conducerea/administrația UVT, cu respectarea dispozițiilor legale.

5.4. Veniturile, bunurile imobile și mobile care vor fi dobândite în cadrul activităților L-CF-SC-NQ, desfășurate în conformitate cu prevederile legale, se constituie în patrimoniu al



UVT, care va fi dat implicit în folosință de drept L-CF-SC-NQ pentru realizarea obiectivelor sale.

- 5.5. Accesul la resursele materiale și umane ale L-CF-SC-NQ de către utilizatori externi poate fi condiționat de plata unor taxe stabilite prin hotărâri ale Consiliului de Administrație al UVT, la propunerea Consiliului Științific al Laboratorului.
- 5.6. Utilizarea resurselor financiare proprii se face în conformitate cu Regulamentele UVT și legislația în vigoare, în vederea:
- retribuirii salariale pentru angajații proprii (permanenți și/sau temporari) sau pentru cercetătorii asociați sau invitați (formatori, experți IT), personal tehnic-administrativ și contabil, etc., pentru realizarea obiectivelor și a contractelor de cercetare asumate;
  - dezvoltării infrastructurii proprii (echipamente, instalații, software, cărți, abonamente, taxe de membru în societăți științifice, etc.);
  - sprijinirii mobilității membrilor pentru participarea (inclusiv cu plata taxei de participare și a diurnei aferente) la conferințe, școli de vară, seminarii, documentare, stagii de cercetare, etc.
  - atribuirii unor burse de cercetare (master, doctorat, post-doctorat) dar și a unor premii de cercetare;
  - suportării cheltuielilor pentru specialiștii invitați;
  - editării și publicării unor articole, reviste, cărți, monografii de specialitate;
  - organizării unor evenimente științifice (conferințe, mese rotunde, workshop-uri, etc.);
  - desfășurării altor activități conexe aprobate de Directorul Științific și de majoritatea simplă a Consiliului Științific, și în acord cu regulamentele UVT și prevederile legale în vigoare.



## **ANEXA 1. Componenta curentă (și recentă) a L-CF-SC-NQ** (modificări ulterioare, cf. Art. 4.1, 4.2, 4.3, 4.4, și 4.5, vor fi anunțate pe pagina de internet a Laboratorului, cf. Art. 4.6, și trecute în Raportul Anual de activitate științifică)

### **Directorul Științific, membru de drept în Consiliul Științific:**



Mihai V. PUTZ (MVP) – lider grup cercetare, membru permanent intern

- Universitatea de Vest din Timișoara
- *Conferențiar universitar (din 2007), Dr. Habil. în Chimie (2013), Post-Doctorate în Chimie și Chimie-Fizică (Italia: 2001-2003 și Germania: 2004, 2010, 2011), Doctor în Chimie (2002), Studii avansate (echivalent Master) în Spectroscopie și materiale LASER (1999), Diplomat în Fizică (1997)*

### **Membrii din Consiliul Științific:**



Ana-Maria PUTZ (n. LACRĂMĂ) – membru permanent extern

- Institutul de Chimie Timișoara al Academiei Române
- Membru în Grantul UEFISCDI/TE16/2010-2013, *Director de proiect MVP*
- *CS III, Doctor în Chimie (2007) prin colaborarea cu MVP, Master în Chimie (Chimia compușilor biologic activi, QSAR); Diplomat în Chimie-Biologie*



Corina DUDA-SEIMAN – membru permanent intern

- Universitatea de Vest din Timișoara
- Membru în Grantul UEFISCDI/TE16/2010-2013, *Director de proiect MVP*
- *Lector universitar, Doctor în Medicină (2012) prin colaborarea cu MVP, Doctor în Chimie, Diplomat în Farmacie, Master și Diplomat în Chimie*

### **Secretarul Științific:**



Ottorino ORI – membru permanent extern-internațional

- Actinium Research, Roma
- *Editor Executiv la FULLERENES, NANOTUBES AND CARBON NANOSTRUCTURES (Taylor & Francis), Cercetător Senior în Nanomateriale (FIAT Industries, etc.), Post-doc în super-computere (Thinking Machines Co., Cambridge, US), Diplomat în Fizică (Universitatea din Parma)*

### **Membri simpli:**



Alexandra M. TUDORAN – membru doctorand

- Universitatea de Vest din Timișoara
- *Doctorand în Chimie (din 2013) sub conducerea științifică MVP, Master în Chimie (2013) sub conducerea științifică MVP, Diplomat în Biologie*



Nicoleta DUDAȘ (n. SUCEVEANU) – membru (post)doctorand

- Universitatea de Vest din Timișoara
- *Doctor în Chimie (2013) la UVT sub conducerea științifică MVP*



**Foști membri:**



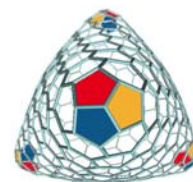
Cosmin IONĂȘCU – membru doctorand

- Universitatea de Vest din Timișoara
- Susține Doctoratul în Chimie la UVT în iarna 2014 *prin colaborarea cu MVP*
- A susținut Teza de Master în Chimie la UVT (2009) *sub coordonarea MVP*
- A susținut Teza de Licență în Chimie la UVT (2007) *sub coordonarea MVP*
- Membru în Grantul CNCSIS/AT54/2006-2007, *Director de proiect MVP*



Marius LAZEA – membru doctorand

- Universitatea de Vest din Timișoara
- A susținut Teza de Doctorat în Chimie la UVT (2011) *prin colaborarea cu MVP*
- Membru în Grantul UEFISCDI/TE16/2010-2013, *Director de proiect MVP*
- A susținut Teza de Master în Chimie la UVT (2009) *sub coordonarea MVP*



## ANEXA 2. CV-ul Directorului Științific al L-CF-SC-NQ



### Curriculum vitae Europass



#### Informații personale

Nume / Prenume	<b>PUTZ, Mihai Viorel</b>
Adresă(e)	Cal. Martirilor nr. 27 A, Ap. 20, Timișoara, RO-300733
Telefon(oane)	++40-(0)256-466184
	Mobil: ++40-(0)726-011866
Fax(uri)	++40-(0)256-592620 (la serviciu, UVT/CBG)
E-mail(uri)	mvputz@cbg.uvt.ro, mv_putz@yahoo.com
Naționalitate(-tăți)	ROMANA
Data nașterii	10.03.1975
Permis(e) de conducere	Permis de conducere automobil, categoria B

#### Locul de muncă actual/ Domeniul ocupațional

**Universitatea de Vest din Timișoara, Departamentul de Biologie-Chimie/Chimie-Fizica Structurală și Computațională**

#### Experiența profesională

Perioada	<b>2007-prezent</b>
Funcția sau postul ocupat	<b>Conferențiar universitar dr.</b>
Activități și responsabilități principale	Predare cursuri licență: Structura Atomilor și Moleculilor (prezent), Fizica Mediului (prezent), Cristalografie (până în 2011); Predare cursuri master: Ecotoxicologie Computațională (prezent); Structura solidă a compușilor chimici și poluanți (prezent); Cuantochimie și Chimie Anorganică Modernă (până în 2010), Design Molecular și Interacții Specifice (până în 2010); Director grant de cercetare CNCSIS-TE16 (2010-2013)
Numele și adresa angajatorului	Universitatea de Vest din Timișoara, Facultatea de Chimie-Biologie-Geografie
Tipul activității sau sectorul de activitate	Învățământ superior, Cercetare universitară
Perioada	<b>2005-2007</b>
Funcția sau postul ocupat	<b>Lector universitar dr.</b>
Activități și responsabilități principale	Predare cursuri licență: Cristalografie, Fizica pentru Chimisti; Director grant de cercetare CNCSIS-AT54 (2006-2007)





Numele și adresa angajatorului	Universitatea de Vest din Timișoara, Facultatea de Chimie-Biologie-Geografie
Tipul activității sau sectorul de activitate	Învățământ superior, Cercetare universitară
Perioada	<b>2002-2005</b>
Funcția sau postul ocupat	<b>Asistent universitar dr.</b>
Activități și responsabilități principale	Predare cursuri și seminarii licență: Cristalografie, Fizica pentru Chimisti
Numele și adresa angajatorului	Universitatea de Vest din Timișoara, Facultatea de Chimie-Biologie-Geografie
Tipul activității sau sectorul de activitate	Învățământ superior, Cercetare universitară
Perioada	<b>1999-2002</b>
Funcția sau postul ocupat	<b>Preparator universitar drd.</b>
Activități și responsabilități principale	Predare seminarii și laboratoare licență și master: Termodinamică, Difrakția cu Raze X
Numele și adresa angajatorului	Universitatea de Vest din Timișoara, Facultatea de Fizică
Tipul activității sau sectorul de activitate	Învățământ superior, Cercetare universitară
Perioada	<b>1998-1999</b>
Funcția sau postul ocupat	<b>Preparator universitar drd.</b>
Activități și responsabilități principale	Predare laboratoare licență: Fizică pentru Ingineri
Numele și adresa angajatorului	Universitatea Politehnică din Timișoara, Facultatea de Electrotehnică, Catedra de Fizică
Tipul activității sau sectorul de activitate	Învățământ superior, Cercetare universitară
<b>Educație și formare</b>	
Perioada	<b>Mai 2012-Martie 2013</b>
Calificarea / diploma obținută	<b>Atestat de Abilitare și Conducere de Doctorat în Chimie (Dr. Habil.)</b> Ordinul Ministrului Delegat (MD) pentru Cercetare nr. 4104/MD/5.07.2013/ANEXA 19
Disciplinele principale studiate / competențe profesionale dobândite	<i>Spații chimice ortogonale pentru atomi și molecule</i> (Chemical Orthogonal Spaces of Atoms and Molecules)
Numele și tipul instituției de învățământ / furnizorului de formare	Universitatea Babes-Bolyai Cluj-Napoca (Ministerul Educației Naționale)
Nivelul în clasificarea națională sau internațională	Top 1000 în top 6000/Shanghai 2011; <a href="http://news.ubbcluj.ro/noutati/shanghai-ranking/">http://news.ubbcluj.ro/noutati/shanghai-ranking/</a>
Perioada	<b>Iulie-August 2011</b>
Calificarea / diploma obținută	<b>Stagiul de cercetare Post-Doctorală în Chimie-Fizică Teoretică</b> ca bursier DAAD (322 A/11/05356)



Disciplinele principale studiate / competențe profesionale dobândite	<i>Formularea Teoriei Funcționalei Densitate pentru Condensatul Bose-Einstein cuasi-omogen</i> în grupul Prof. Dr. Acad. Habil. Multi DHC Hagen Kleinert & Priv. Doz. Dr. Habil. Axel Pelster
Numele și tipul instituției de învățământ / furnizorului de formare	Universitatea Liberă din Berlin Facultatea de Fizică, Institutul pentru Fizica Einstein
Nivelul în clasificarea națională sau internațională	Locul 66 în top 700/QS World University Rankings/2011 <a href="http://en.wikipedia.org/wiki/Free_University_of_Berlin">http://en.wikipedia.org/wiki/Free_University_of_Berlin</a>
Perioada	<b>Iulie-August 2010</b>
Calificarea / diploma obținută	<b>Profesor invitat in stagiul de cercetare Post-Doctorală în Chimie-Fizică Teoretică</b> Bursa Centrului de Cooperare Internațională Free Univ. Berlin (Fondul: 0503041814)
Disciplinele principale studiate / competențe profesionale dobândite	<i>Condensarea Bose-Einstein in Latice Optice, Teoria Funcționalei Densitate a Condensatelor Bose-Einstein</i>
Numele și tipul instituției de învățământ / furnizorului de formare	Universitatea Liberă din Berlin Facultatea de Fizică, Institutul de Fizică Teoretică
Nivelul în clasificarea națională sau internațională	Locul 83 în top 100/Shanghai 2007 <a href="http://en.wikipedia.org/wiki/Academic_Ranking_of_World_Universities">http://en.wikipedia.org/wiki/Academic_Ranking_of_World_Universities</a>
Perioada	<b>Iulie-August 2004</b>
Calificarea / diploma obținută	<b>Stagiul de cercetare Post-Doctorală în Chimie-Fizică Teoretică</b> ca bursier DAAD (322 A/04/17690)
Disciplinele principale studiate / competențe profesionale dobândite	<i>Semiclassical quantum theory by Path Integrals. Atomic scales of electronegativity and chemical hardness</i>
Numele și tipul instituției de învățământ / furnizorului de formare	Universitatea Liberă din Berlin Facultatea de Fizică, Institutul de Fizică Teoretică
Nivelul în clasificarea națională sau internațională	Locul 95 în top 100/Shanghai 2003 <a href="http://en.wikipedia.org/wiki/Academic_Ranking_of_World_Universities">http://en.wikipedia.org/wiki/Academic_Ranking_of_World_Universities</a>
Perioada	<b>Octombrie 2001-Noiembrie 2003</b>
Calificarea / diploma obținută	<b>Cercetare Post-Doctorală în Chimie-Fizică Teoretică și Computațională</b> ca bursier al Ministerului Italian al Educației și Cercetării (143/30.10.2001/UNICAL)
Disciplinele principale studiate / competențe profesionale dobândite	<i>Reactivity Indices in Density Functional Theory. Atomic scales of electronegativity and chemical hardness</i>
Numele și tipul instituției de învățământ / furnizorului de formare	Universitatea din Calabria, Departamentul de Chimie în Grupul de cercetare al Prof. Dr. Nino Russo
Nivelul în clasificarea națională sau internațională	Locul 1022 în top 6000/Shanghai 2009; <a href="http://lcwcu.um.ac.id/wp-content/uploads/2009/07/Webometrics-Dunia-2009-Jul-1001-1050.pdf">http://lcwcu.um.ac.id/wp-content/uploads/2009/07/Webometrics-Dunia-2009-Jul-1001-1050.pdf</a>
Perioada	<b>Decembrie 1998-Martie 2004</b>
Calificarea / diploma obținută	<b>Studii Doctorale în Chimie</b> Diploma de Doctor în Chimie nr. 107/5 Februarie 2003, Seria C Nr. 0005719



<p>Disciplinele principale studiate / competențe profesionale dobândite</p> <p>Numele și tipul instituției de învățământ / furnizorului de formare</p> <p>Nivelul în clasificarea națională sau internațională</p> <p>Perioada</p> <p>Calificarea / diploma obținută</p>	<p><i>Contribuții în Teoria Funcționalei Densitate cu Aplicații în Teoria Reactivității Chimice și Electronegativitate</i></p> <p>Coordonator: Prof. Dr. Chiriac, A.</p> <p>Universitatea de Vest din Timișoara Departamentul de Chimie</p> <p>Locul 1700 în top 6000/Shanghai 2009; <a href="http://www.webometrics.info/top100_europe.asp?country=ro">http://www.webometrics.info/top100_europe.asp?country=ro</a></p> <p><b>Octombrie 2000-Martie 2001</b></p> <p><b>Stagiu de Doctorat în Fizică Teoretică</b> ca bursier DAAD (322 A/00/22455)</p>
<p>Disciplinele principale studiate / competențe profesionale dobândite</p> <p>Numele și tipul instituției de învățământ / furnizorului de formare</p> <p>Nivelul în clasificarea națională sau internațională</p> <p>Perioada</p> <p>Calificarea / diploma obținută</p>	<p><i>Path Integrals in Markovian Processes</i></p> <p>În grupul și elaborând articol comun (publicat la Phys Rev. E/2002) cu Prof. Dr. Acad. Habil. Multi DHC Hagen Kleinert, ultimul colaborator al Nobelistului în Fizică Richard Feynman</p> <p>Universitatea Liberă din Berlin Facultatea de Fizică, Institutul de Fizică Teoretică</p> <p>Locul 95 în top 100/Shanghai 2003 <a href="http://en.wikipedia.org/wiki/Academic_Ranking_of_World_Universities">http://en.wikipedia.org/wiki/Academic_Ranking_of_World_Universities</a></p> <p><b>Octombrie 1997-Iunie 1999</b></p> <p><b>Studii Aprofundate în Fizică, Specializarea Optică, Spectroscopie și Laseri</b> Diplomă de Studii Aprofundate (asimilate Master) nr. 219/5 Aprilie 2001, Seria D Nr. 0015394 (media multianuală pe 2 ani: 10 din 10 maximum)</p>
<p>Disciplinele principale studiate / competențe profesionale dobândite</p> <p>Numele și tipul instituției de învățământ / furnizorului de formare</p> <p>Nivelul în clasificarea națională sau internațională</p> <p>Perioada</p> <p>Calificarea / diploma obținută</p>	<p><i>The Dissociation of HCl in the Condensed Xe Lattice. Theory and Experiment</i></p> <p>Coordonatori: Prof. Dr. Avram, N. (Universitatea de Vest din Timișoara) &amp; Prof. Dr. Schwentner, N. (Universitatea Liberă din Berlin).</p> <p>Universitatea de Vest din Timișoara Facultatea de Fizică</p> <p>Locul 1700 în top 6000/Shanghai 2009; <a href="http://www.webometrics.info/top100_europe.asp?country=ro">http://www.webometrics.info/top100_europe.asp?country=ro</a></p> <p><b>Octombrie 1997-Martie 1998</b></p> <p><b>Stagiu Masteral în Fizică Experimentală, Specializare Spectroscopie</b> ca bursier TEMPUS (JEP 09873)</p>
<p>Disciplinele principale studiate / competențe profesionale dobândite</p> <p>Numele și tipul instituției de învățământ / furnizorului de formare</p> <p>Nivelul în clasificarea națională sau internațională</p>	<p><i>Halides' Dissociations in Rare Gase Matrices</i></p> <p>în grupul Prof. Dr. Schwentner, N.</p> <p>Universitatea Liberă din Berlin Facultatea de Fizică, Institutul de Fizică Experimentală</p> <p>Locul 95 în top 100/Shanghai 2003 <a href="http://en.wikipedia.org/wiki/Academic_Ranking_of_World_Universities">http://en.wikipedia.org/wiki/Academic_Ranking_of_World_Universities</a></p>



Perioada Calificarea / diploma obținută  Disciplinele principale studiate / competențe profesionale dobândite  Numele și tipul instituției de învățământ / furnizorului de formare  Nivelul în clasificarea națională sau internațională	<b>Octombrie 1993-Iunie 1997</b> <b>Studii de Licență, Specializarea Fizică</b> Diploma de Licență nr. 3097/14 Iulie 1998, Seria P Nr. 0103397 (examen licență: 9.90 din 10 maximum; media multianuală pe 4 ani: 9.98 din 10 maximum)  <i>Teoria Experimentelor de Gravităție Atomică prin Interferometrie Atomică cu Laseri</i> Coordonator: Prof. Dr. Vulcanov, N.  Universitatea de Vest din Timișoara Facultatea de Fizică  Locul 1700 în top 6000/Shanghai 2009; <a href="http://www.webometrics.info/top100_europe.asp?country=ro">http://www.webometrics.info/top100_europe.asp?country=ro</a>
Perioada Calificarea / diploma obținută  Disciplinele principale studiate / competențe profesionale dobândite  Numele și tipul instituției de învățământ / furnizorului de formare  Nivelul în clasificarea națională sau internațională	<b>Septembrie 1989-Iunie 1993</b> <b>Bacalaureat</b> Diploma nr. 51/26 Iulie 1993, Seria L Nr. 108591 (examen bacalaureat: 9.80 din 10 maximum; media multianuală pe 4 ani: 9.60 din 10 maximum)  Studii Liceale Specializarea Matematică-Fizică  Colegiul Național "C.D.Loga", Timișoara (Premiul I, unic acordat/clasă în fiecare an școlar).  Locul 166 în top 1500/2011; <a href="http://polimedia.us/trilema/2011/clasificarea-liceelor-romanesti-dupa-mediile-de-la-bac-2011/">http://polimedia.us/trilema/2011/clasificarea-liceelor-romanesti-dupa-mediile-de-la-bac-2011/</a>

**Aptitudini și competențe personale**

Limba(i) maternă(e)

 Limba(i) străină(e)  
 cunoscută(e)

Autoevaluare

Nivel european (\*)

**Engleză**
**Italiană**
**Germană**
**Franceză**
**ROMANA**

Înțelegere				Vorbire				Scriere	
Ascultare		Citire		Participare la conversație		Discurs oral		Exprimare scrisă	
C2	Foarte Bine	C2	Foarte Bine	C1	Foarte Bine	C1	Foarte Bine	C1	Bine
C2	Foarte Bine	C2	Foarte Bine	C1	Foarte Bine	C1	Foarte Bine	C1	Bine
B2	Bine	B2	Bine	B1	Bine	B1	Bine	B1	Baza
B2	Bine	B2	Bine	B1	Baza	B1	Baza	B1	Baza

 (\*) [Nivelul Cadrului European Comun de Referință Pentru Limbi Străine](#)


<b>Competențe și abilități sociale și educaționale</b>	<p>Comunicativ, deschis ideilor noi, cu inițiativă, spirit de echipă și adaptare la mediu multicultural</p> <p>Membru în societăți academice:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>o <i>Romanian Chemical Society</i>, din <b>1999</b></li> <li>o <i>American Chemical Society (ACS)</i>, din <b>2006</b></li> <li>o <i>European Society of Mathematical Chemistry</i>, din <b>2007</b></li> </ul>
<b>Competențe și aptitudini organizatorice</b>	<p>Organizator de manifestări științifice studentești și de cercetare:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Cercul Studentesc "Cercul Principiilor", ediția I în Ianuarie 2005, cu frecvență semestrială (Ianuarie, Mai), la Facultatea de Chimie-Biologie-Geografie, Universitatea de Vest din Timișoara, Președintele Comitetului de Organizare, din care s-au desfășurat 10 ediții între anii 2005-2011</li> <li>2. VIII<sup>th</sup> International Symposium "Young People and Multidisciplinary Research", 11-12 Mai, Timișoara, 2006, Președintele Comitetului de Organizare;</li> <li>3. X<sup>th</sup> International Symposium for Students in Chemistry, Departamentul de Chimie, Facultatea de Chimie-Biologie-Geografie, Timișoara, Președintele Comitetului de Organizare, 8 Decembrie 2005.</li> <li>4. MATH/CHEM/COMP, <i>The Dubrovnik International Course on the Interfaces among Mathematics, Chemistry and Computer Sciences</i>, Inter-University Centre, Dubrovnik, Croatia, Edițiile XXIII (Iunie 16-21, 2008), XXIV (Iunie 8-13 2009), XXV (Iunie 7-12 2010), XXVI (Iunie 12-18 2011); Membru în comitetul de organizare, Co-director al Școlii de vară din 2010 și Editor-in-Chief la Proceeedingurile aferente)</li> </ol>
<b>Competențe și aptitudini tehnice</b>	<p>Abilitate în experimentare, în special în spectroscopie, abilități dobândite astfel:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. absolvirea Facultății de Fizică, Secția Fizică (1997), la Universitatea de Vest din Timișoara;</li> <li>2. absolvirea secției de Spectroscopie la Master în cadrul Facultății de Fizică, Secția Fizică (1999), la Universitatea de Vest din Timișoara;</li> <li>3. desfășurarea unui stagiu de Master la Universitatea Liberă Berlin ca bursier TEMPUS (1997-1998) în cadrul Institutului de Fizică Experimentală;</li> <li>4. preparator la disciplina de Studiu al Perfecțiunii Materialelor cu Difrakția cu Raze X în cadrul Facultății de Fizică, Catedra de Structura Materiei, la Universitatea de Vest din Timișoara (1999-2002)</li> </ol>
<b>Competențe și aptitudini de utilizare a calculatorului</b>	<p>Operare în MS Office Package, HyperChem, Statistica, Gaussian; Programare în Mathematica, aptitudini dobândite pe parcursul educației doctorale și post-doctorale, ca și prin educația continuă</p>
<b>Competențe și aptitudini artistice</b>	<p>Interes în istoria științei; Interes în filosofia științei și metafizică; aptitudini dobândite prin educație continuă și materializate prin eseuri cu caracter cultural precum <i>De Rerum Creatura</i> (2003), <i>Romania Argumentum</i> (2003), <i>De Bello Mundis</i> (2003), <i>La Chimica: il verbo di Dio</i> (2003), <i>La Vita Alchemica</i> (2006), <i>Parousia</i> (2008), și poeme precum <i>L'Alchimista</i> (2003), <i>La promessa</i> (2003), apărute în paginile revistei Redazione UNICAL, revistă editată de Departamentul de Științe Educaționale a Universității din Calabria (Italia) și de Fundația Italiană John Dewey.</p>



Competențe și  
aptitudini de cercetare

Autor a peste 100 de articole științifice apărute în jurnale naționale și internaționale, dintre care cca. 60 articole ISI, cu un factor de impact individual de cca. 60 puncte ISI, cu peste 250 de citări internaționale și un factor de indexare H=12. Rezultatele cercetărilor în domeniul structurii atomilor, moleculelor, cristalelor și a reactivității chimice în jurnale de prestigiu internațional precum *Physical Review* (published by American Physical Society), *Journal of Physical Chemistry* (published by American Chemical Society), *Theoretical Accounts in Chemistry* și *Journal Mathematica Chemistry* (published by Springer), *Journal of Computational Chemistry*, *International Journal of Quantum Chemistry* (published by Wiley), *Journal of Molecular Structure THEOCHEM* și *Chemical Physics Letters* (published by Elsevier), *Journal Theoretical and Computational Chemistry* (published by World Scientific), sau *International Journal of Molecular Sciences*, *Molecules* (published by Multidisciplinary Institute of Digital Publishing – former Molecular Diversity Preservation International). Autorul este promotor internațional activ al metodei DFE (*Density Functional Electronegativity*) și al Mechanistic-QSAR/Spectral-SAR pentru investigarea și controlul reactivității chimice la nivelul nanosistemelor multi-electronice în stare fundamentală și în interacție precum și a modelării activității biologice prin principiile reactivității chimice, respectiv.

Competențe  
Editoriale

- *INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES*, Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI), Basel, Switzerland, ISSN 1422-0067, ISI Impact Factor ~ 2.4, since 2006 [3]
- *INTERNATIONAL JOURNAL OF CHEMOINFORMATICS AND CHEMICAL ENGINEERING*, IGI-Global, Hershey, PA 17033, USA, ISSN: 2155-4110; EISSN: 2155-4129; DOI: 10.4018/IJCCE, since 2011 [4]
- *POLIMER RESEARCH JOURNAL*, NOVA Science Publishers, New York-USA, ISSN: 1935-2530, Indexed by Chemical Abstract Services of American Chemical Society, Elsevier, since 2011 [5]
- *MATCH-COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL AND IN COMPUTER CHEMISTRY*, Kragujevac University Publisher, Serbia, ISSN: 0340-6253, ISI Impact Factor ~ 3.3, since 2012 [6]
- *JOURNAL OF THEORETICAL CHEMISTRY*, Hindawi Publishing Corporation, ISSN: 2314-6184 (Online), DOI: 10.1155/2797, Indexed by CrossREF & Portico, since 2013 [7]

Competențe  
Guest-Editoriale

- *CHEMICAL BOND AND BONDING* – Special Issue of *Int. J. Mol. Sci.*, 2007-2008, MDPI, Basel, Switzerland [8]
- *ATOMS IN MOLECULES AND IN NANOSTRUCTURES* – Special Issue of *Int. J. Mol. Sci.*, 2010-2012, published by MDPI, Basel, Switzerland [9]

<sup>3</sup> [http://www.mdpi.com/journal/ijms/sectioneditors/physical\\_chemistry](http://www.mdpi.com/journal/ijms/sectioneditors/physical_chemistry)

<sup>4</sup> <http://www.igi-global.com/bookstore/titledetails.aspx?titleid=1176&detailstype=reviewboard>

<sup>5</sup> [https://www.novapublishers.com/catalog/editorial.php?products\\_id=5087](https://www.novapublishers.com/catalog/editorial.php?products_id=5087)

<sup>6</sup> <http://www.pmf.kg.ac.rs/match/>

<sup>7</sup> <http://www.hindawi.com/journals/jtc/editors/>

<sup>8</sup> [http://www.mdpi.com/journal/ijms/special\\_issues/bond\\_bonding](http://www.mdpi.com/journal/ijms/special_issues/bond_bonding)

<sup>9</sup> [http://www.mdpi.com/journal/ijms/special\\_issues/atoms-in-molecules](http://www.mdpi.com/journal/ijms/special_issues/atoms-in-molecules)



Competențe Șef-Editoriale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS: FROM STRUCTURE TO CHEMICAL REACTIVITY TO BIOLOGICAL ACTIVITY – Mini Hot Topic (HT-SBJ-COC-0050) Special Issue of <i>Curr. Org. Chem.</i>, <b>2013</b>, published by Bentham Science, Sharjah, U.A.E. [10]</li> <li>• CURRENT CHALLENGES IN QSAR/QSPR ANALYSIS – Mini Hot Topic (HT-SBJ-CCADD-0004) Special Issue of <i>Curr. Comput. Aided Drug Design</i>, <b>2013</b>, published by Bentham Science, Sharjah, U.A.E. [11]</li> <li>• QUANTUM INFORMATION IN MOLECULAR STRUCTURES AND NANOSYSTEMS – Special Issue of <i>Molecules</i>, <b>2013-2014</b>, published by MDPI, Basel, Switzerland [12] <ul style="list-style-type: none"> <li>○ INTERNATIONAL JOURNAL OF CHEMICAL MODELING, NOVA Science Publishers, New York, USA, ISSN: 1941-3955, since <b>2008</b> [13]</li> <li>○ INTERNATIONAL JOURNAL OF ENVIRONMENTAL SCIENCES, Serials Publishers, New Delhi, India, ISSN: 2229-7356, since <b>2011</b> [14]</li> </ul> </li> </ul>
Competențe De Referent Științific	<p><i>Acta Chemica Slovenica; Asian Chemistry Letters; Chemistry Physical Letters; Chemosphere; Current Chemical Medicine; Current Drug Discovery Technologies; European Journal of Chemistry; European Journal of Medicinal Chemistry; Food Research International; Inorganic Chemistry; International Journal of Molecular Sciences; International Journal of Quantum Chemistry; Journal of Chemical &amp; Engineering Data; Journal of Chemical Information and Modeling; Journal of Chemical Physics; Journal of Computational Chemistry; Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry; Journal of Mathematical Chemistry; Journal of Pharmacy and Pharmacology; Journal of Physical Chemistry A; Journal of Quantum Information Science; Journal of Serbian Chemical Society; Journal of Theoretical and Computational Chemistry; MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry; Molecular Physics; New Journal of Chemistry; Pesticide Biochemistry and Physiology; Physical Chemistry Chemical Physics; SAR and QSAR in Environmental Research; Science of The Total Environment; Studia Universitatis Babeș-Bolyai - Seria Chemia; The European Physical Journal – D; etc.</i></p>
Expertiză Științifică (cuvinte cheie în eng.)	<p>quantum and computational physical chemistry; quantum path integrals; reactivity principles; reactivity and topological indices; nano-inorganic and nano-organic chemistry, extended molecular systems and molecular topology, electronegativity; conceptual density functional theory; logistic enzyme kinetics; QSAR; epistemology and philosophy of physical sciences</p>
Realizări Științifice (sumativ)	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ Articole ISI: 57</li> <li>○ Cărți și capitole în cărți: 67</li> <li>○ Prezentări la conferințe: 20</li> <li>○ H-index (ISI Web of Knowledge): 13</li> </ul>

<sup>10</sup> <http://www.benthamscience.com/coc/Special-Issues.htm>

<sup>11</sup> <http://www.benthamscience.com/ccadd/Special-Issues.htm>

<sup>12</sup> [http://www.mdpi.com/journal/molecules/special\\_issues/structures-nanosystems](http://www.mdpi.com/journal/molecules/special_issues/structures-nanosystems)

<sup>13</sup> [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=7111](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=7111)

<sup>14</sup> <http://www.serialspublications.com/journals1.asp?jid=292&dtype=2&jtype=1>



**Management Științific**  
(Director de granturi câștigate prin competiție națională, cu atragere de fonduri cercetare-dezvoltare la UVT)

- **Proiectul:** UNIFICAREA CUANTICĂ A LEGĂTURII CHIMICE PRIN FUNCȚIONALĂ DENSITATE A ELECTRONEGATIVITĂȚII ȘI FUNCȚIA DE LOCALIZARE ELECTRONICĂ CU APLICAȚII LA REACTIVITATEA NANOSISTEMELOR NATURALE COMPLEXE; **Cod CNCISIS:** AT54/2006, **Durata Grantului:** 2 ani (2006-2007), **Valoarea contractului în 2006:** 8,930 RON, **Valoarea contractului în 2007:** 10,000 RON; (<http://194.102.64.7/GranturiFinalizate/faces/index.jsp>, Comisia 1)
- **Proiectul:** CUANTIFICAREA LEGĂTURII CHIMICE ÎN SPAȚII ORTOGONALE DE REACTIVITATE. APLICAȚII LA MOLECULE DE INTERES BIO-, ECO-, ȘI FARMACO-LOGIC; **Cod CNCISIS-UEFICSU:** TE16/2010, **Durata Grantului:** 36 luni (2010-2013), Contract nr. 94/03.08.2010; Valoarea totală a contractului: **690100 RON** ([http://www.cncsis.ro/userfiles/file/competitie%202009%20TE/proiecte%20finantate/REZULTATE%20TE\\_DOMENIU%201\\_2.pdf](http://www.cncsis.ro/userfiles/file/competitie%202009%20TE/proiecte%20finantate/REZULTATE%20TE_DOMENIU%201_2.pdf) , Comisia 1, Subdomeniul CHIMIE)

**Premii** 1996, Decembrie: Diploma și Premiul *Facultății de Fizică* din Universitatea de Vest din Timișoara, pentru *cel mai bun student al facultății* în anul universitar 1995-1996; 2007, Decembrie: Premiat de către Senatul Universității de Vest din Timișoara, pentru rezultate de excelență internațională în cercetarea științifică românească și timișeană în anii 2005-2007; 2008, Decembrie: Diploma și Premiul „Cercetător eminent 2008” de către Asociația „Orizonturi Universitare” Timișoara, Consemnate în jurnalele locale *Agenda Zilei* din 12 Decembrie 2008, pag.6 și *Adevărul de Seara*, 15 Decembrie 2008, pag. 4; 2008, Decembrie: Diploma și Premiul Special al „Academiei Române, Filiala Timișoara”, pentru „rezultate excepționale în activitatea didactică și de cercetare științifică”, Timișoara; 2008, Decembrie: Diploma, Premiul și Medalia „Only healthy ideas can fly all over the world” acordate de Autoritatea Națională pentru Cercetare Științifică din România (ANCS), pentru „Tânărul Cercetător Eminent al Timișoarei”; 2009, Martie: Certificat de Recunoaștere a Activității Editoriale în slujba *International Journal of Molecular Sciences* (la MDPI-Molecular Diversity Preservation International), în calitate de Guest Editor la Special Issue “Chemical Bond and Bonding”, Basel, Elveția; 2009, Septembrie: Diploma Asociației Generale a Inginerilor din România (AGIR) pe 2008, pentru co-autorarea lucrării „Informația Cuantică în Sisteme Multiparticulă”, Editura Politehnica, Timișoara, 2008; 2010-2013: Inclus în Edițiile 27-30 ale prestigioasei publicații biografice internaționale *Marquis Who's Who in the World*, New Providence, NJ (listat în secțiunea *Science: Physical Science*) pentru “realizările excepționale în domeniul profesional care au contribuit major la îmbunătățirea societății contemporane”; 2010, Octombrie: Diploma de Excelență „pentru atragerea de fonduri prin câștigarea de proiecte din surse naționale și internaționale, în anul universitar 2009-2010, în calitate de manager/responsabil de proiect din cadrul Facultății de Chimie, Biologie, Geografie”, acordată la deschiderea publică a Anului Universitar 2010-2011, din Universitatea de Vest din Timișoara; 2010, Noiembrie: PREMIUL I - CERCETĂTORUL ANULUI – GALA PREMIILOR ÎN EDUCAȚIE/Dundația Dinu Patriciu (ediția a II a) pentru „rolul fondator și formator în relația dintre învățare și educare, cunoaștere și cercetare, pentru proiectele naționale și internaționale în domeniul chimiei fizice, precum și pentru bunele practici în relația cu studenții la toate nivelurile de educație (licență, master, doctorat, post-doctorat)”; 2011 Octombrie: DIPLOMA “CEL MAI BUN CERCETĂTOR ȘTIINȚIFIC CONSACRAT DIN UNIVERSITATEA DE VEST DIN TIMIȘOARA” acordată la deschiderea Anului Universitar 2011-2012.





## ANEXA 3. Lucrări ale membrilor L-CF-SC-NQ

(listarea este din ultimii 10 ani cu membrii L-CF-SC-NQ evidențiați prin “îngroșare”)

### *Cărți și Monografii Internaționale*

1. **PUTZ M.V.** "*CONTRIBUTIONS WITHIN DENSITY FUNCTIONAL THEORY WITH APPLICATIONS IN CHEMICAL REACTIVITY THEORY AND ELECTRONEGATIVITY*", Dissertation.com, Parkland, Florida, USA (**2003**) 180 pp.; ISBN: 1-58112-184-9;  
♣ URL: [www.dissertation.com/book.php?method=ISBN&book=1581121849](http://www.dissertation.com/book.php?method=ISBN&book=1581121849).
2. **PUTZ M.V.** (Editor) "*ADVANCES IN QUANTUM CHEMICAL BONDING STRUCTURES*", Transworld Research Network, Kerala, India (**2008**), 419 pp.; ISBN: 978-81-7895-306-9.  
♣ URL: <http://www.trnres.com/putz.htm>.  
♣ URL: <http://www.reassign.com/UserBookDetail.aspx?bkid=755&catid=188#>
3. **PUTZ M.V.** "*ABSOLUTE AND CHEMICAL ELECTRONEGATIVITY AND HARDNESS*", Nova Publishers Inc., New York, USA (**2008**), 95 pp.; ISBN (e-book): 978-1-60741-207-6; ISBN (printed edition): 978-1-60456-937-7.  
♣ URL printed edition (**2008**):  
[https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=7678](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=7678)  
♣ URL-Romania: <http://www.books-express.ro/book/9781604569377/Absolute-Chemical-Electronegativity-Hardness.html>
4. **PUTZ M.V.** (Editor) "*QUANTUM FRONTIERS OF ATOMS AND MOLECULES*", NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (**2011**), 673 pp.; ISBN: 978-1-61668-158-6  
♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=12687](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=12687)
5. **PUTZ M.V.** (Editor) "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING*", NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (**2011**), 467 pp.; ISBN: 978-1-61209-028-3  
♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=20389](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=20389)
6. **PUTZ M.V.** (Editor) "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING. VOLUME 2*", NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (**2011**), 468 pp.; ISBN: 978-1-61209-669-8  
♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=21916](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=21916)
7. **PUTZ M.V.** (Editor) "*CARBON BONDING AND STRUCTURES: ADVANCES IN PHYSICS AND CHEMISTRY*", Springer Verlag, London, **2011**, pages 445, ISBN: 978-94-007-1732-9; *Book included in the SERIES „CARBON MATERIALS: CHEMISTRY AND PHYSICS” (Series Editors: Franco Cataldo, Paolo Milani), Series ISSN: 1875-0745*  
♣ URL: <http://www.springer.com/chemistry/physical+chemistry/book/978-94-007-1732-9>



8. **PUTZ M.V.** (Editor) "*QSAR & SPECTRAL-SAR IN COMPUTATIONAL ECOTOXICOLOGY*", Apple Academics, Ontario, Canada (2012), 242 pp.; ISBN: 978-1-926895-13-0.  
♣URL: <http://www.appleacademicpress.com/title.php?id=50>
9. **PUTZ M.V.** "*QUANTUM THEORY: DENSITY, CONDENSATION, AND BONDING*", Apple Academics, Ontario, Canada (2012), 272 pp.; ISBN: 978-1-926895-14-7.  
♣URL: <http://www.appleacademicpress.com/title.php?id=56>
10. **PUTZ M.V.** (Editor) "*CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTATIONAL CHALLENGES IN 21<sup>ST</sup> ~ A Celebration of 2011 International Year of Chemistry ~*", NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2012), 356 pp.; ISBN: 978-1-61209-712-1  
♣URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=22003](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=22003)
11. **PUTZ M.V.** "*CHEMICAL ORTHOGONAL SPACES*" in *Mathematical Chemistry Monographs*, Vol. 14, Kragujevac, Serbia (2012) X + 240 pp. Hardcover, 12 color illus. ISBN: 978-86-6009-019-7, pp. 240;  
♣URL: <http://www.pmf.kg.ac.rs/match/mcm14.html>
12. **PUTZ M.V.** & MINGOS D.M.P. (Editors) "*APPLICATIONS OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY TO CHEMICAL REACTIVITY*", in "Structure and Bonding" Series, Springer Verlag, Berlin-Heidelberg, Germany (2012), 189 pp.; ISBN (Hardcover): 978-3-642-32752-0  
♣URL: <http://www.springer.com/chemistry/inorganic+chemistry/book/978-3-642-32752-0>
13. **PUTZ M.V.** (Editor) "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING. VOLUME 3*", NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2013), 484 pp.; ISBN: 978-1-62257-110-9.  
♣URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=34573](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=34573)
14. **PUTZ M.V.** & MINGOS D.M.P. (Editors) "*APPLICATIONS OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY TO BIOLOGICAL AND BIOINORGANIC CHEMISTRY*", in "Structure and Bonding" Series, Springer Verlag, Berlin-Heidelberg, Germany (2013), 288 pp.; ISBN (Hardcover): 978-3-642-32749-0  
♣URL: <http://www.springer.com/chemistry/inorganic+chemistry/book/978-3-642-32749-0>
15. **PUTZ M.V.** (Editor) "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING. VOLUME 4*", NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2013), cca 500 pp.; ISBN: 978-1-62808-186-2.  
♣URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=43018](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=43018)
16. **PUTZ M.V.** (Editor) "*RESEARCH HORIZONS OF NANOSYSTEMS STRUCTURE, PROPERTIES AND INTERACTIONS*", Apple Academics, Ontario, Canada (2014), 370 pp.; ISBN: 978-1-926895-90-1  
♣URL: <http://www.appleacademicpress.com/title.php?id=9781926895901>



17. **PUTZ M.V.** "*QUANTUM AND OPTICAL DYNAMICS OF MATTER FOR NANOTECHNOLOGY*", IGI Global, Hershey Passadena, USA (2014), 527 pp.; DOI: 10.4018/978-1-4666-4687-2, ISBN13: 9781466646872, ISBN10: 146664687X, EISBN13: 9781466646889  
♣URL: <http://www.igi-global.com/book/quantum-optical-dynamics-matter-nanotechnology/77401>

### Capitole în Cărți

18. BELCASTRO M., CHIDO S., KONDAKOVA O., LEOPOLDINI M., MARINO, T., MICHELINI M.C., **PUTZ M.V.**, SICILIA E., TOSCANO M., RUSSO, N. "On the Use of Density Functional Theory in the Study of Metal-Ligand Interactions. Some Studied Cases", in "*METAL-LIGAND INTERACTIONS*", Russo, N., Salahub, D.R., Witko, M. (Eds.), NATO Science Series II. Mathematics, Physics and Chemistry – Vol. 116, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Holland (2003) ISBN: 1-4020-1495-3, pp. 1-20. ♣ URL: <http://www.springer.com/chemistry/inorganic/book/978-1-4020-1494-9>
19. **PUTZ M.V.** "Deviance, Minors and the Catastrophe Theory: an Integrated Approach and Its Applications" (originally in Italian as "Devianza, Minori e Teoria delle Catastrofi: un Approach Integrato e le Sue Applicazioni"), in "*ESSENTIAL DISASTERS- THE ANATOMY OF YOUTH DISASTER*" (originally in Italian as "*CATASTROFI ESISTENZIALI- ANATOMIA DEL DISAGIO GIOVANILE*"), edited by Silvana Palazzo with a Foreword by Giovanni Latorre (Rector of University of Calabria), Periferia Publishing House, Cosenza, Italy (2006), ISBN: 88-87080-59-3, pp. 57-85.  
♣ URL: [http://www.edizioniperiferia.it/scheda\\_libro.php?id\\_libro=129](http://www.edizioniperiferia.it/scheda_libro.php?id_libro=129)  
♣ URL: <http://www.silvanapalazzo.it/>
20. **PUTZ M.V.** "Unifying Absolute and Chemical Electronegativity and Hardness Density Functional Formulations through the Chemical Action Concept", in "*PROGRESS IN QUANTUM CHEMISTRY RESEARCH*", Erik O. Hoffman (Ed.), Nova Science Publishers Inc., New York, USA (2007), ISBN-10: 1-60021-621-8, ISBN-13: 978-1-60021-621-3, Chapter 2, pp. 59-121.  
♣URL: [http://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=5571](http://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=5571)
21. **PUTZ M.V.** "Can Quantum-Mechanical Description of Chemical Bond Be Considered Complete?", in "*QUANTUM CHEMISTRY RESEARCH TRENDS*", Mikas P. Kaisas (Ed.), Nova Science Publishers Inc., New York, USA (2007), ISBN-10: 1-60021-620-X, ISBN-13: 978-160021-620-6, Expert Commentary, pp. 3-5.  
♣URL: [http://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=5570](http://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=5570)
22. **PUTZ M.V.**, CHIRIAC A. "Quantum Perspectives on the Nature of the Chemical Bond", in "*ADVANCES IN QUANTUM CHEMICAL BONDING STRUCTURES*", Mihai V. Putz (Ed.),



- Transworld Research Network, Kerala, India (2008), ISBN: 978-81-7895-306-9, Chapter 1, pp. 1-43.  
♣URL: <http://www.trnres.com/putz.htm>.
23. **PUTZ M.V.**, DUDA-SEIMAN D., MANCAȘ S., **DUDA-SEIMAN C.**, **LACRĂMĂ A.-M.** "Quantum and Topological Impact on HMG-CoA Reductase Inhibitors", in "*ADVANCES IN QUANTUM CHEMICAL BONDING STRUCTURES*", Mihai V. Putz (Ed.), Transworld Research Network, Kerala, India (2008), ISBN: 978-81-7895-306-9, Chapter 15, pp. 355-387.  
♣URL: <http://www.trnres.com/putz.htm>.
24. **LACRĂMĂ A.-M.**, **PUTZ M.V.**, OSTAFE V. "Designing a Spectral Structure-Activity Ecotoxicological Battery", in "*ADVANCES IN QUANTUM CHEMICAL BONDING STRUCTURES*", Mihai V. Putz (Ed.), Transworld Research Network, Kerala, India (2008), ISBN: 978-81-7895-306-9, Chapter 16, pp. 389-419.  
♣URL: <http://www.trnres.com/putz.htm>.
25. **PUTZ M.V.** "Fulfilling The Dirac Promises on Quantum Chemical Bond", in "*QUANTUM FRONTIERS OF ATOMS AND MOLECULES*", Mihai V. Putz (Ed.), *Series „Chemistry Research And Applications”*, NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2011), ISBN: 978-1-61668-158-6, Chapter 1, pp. 1-20.  
♣URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=12687](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=12687)
26. **PUTZ M.V.** "Quantum and Electrodynamical Versatility of Electronegativity and Chemical Hardness", in "*QUANTUM FRONTIERS OF ATOMS AND MOLECULES*", Mihai V. Putz (Ed.), *Series „Chemistry Research And Applications”*, NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2011), ISBN: 978-1-61668-158-6, Chapter 11, pp. 251-270.  
♣URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=12687](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=12687)
27. **PUTZ M.V.**, **PUTZ A.M.** "Timișoara Spectral – Structure Activity Relationship (Spectral-SAR) Algorithm: From Statistical and Algebraic Fundamentals to Quantum Consequences", in "*QUANTUM FRONTIERS OF ATOMS AND MOLECULES*", Mihai V. Putz (Ed.), *Series „Chemistry Research And Applications”*, NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2011), ISBN: 978-1-61668-158-6, Chapter 21, pp. 539-580.  
♣URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=12687](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=12687)
28. **PUTZ M.V.** "Conceptual Density Functional Theory: from Inhomogeneous Electronic Gas to Bose-Einstein Condensates", in "*CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTATIONAL CHALLENGES IN 21<sup>ST</sup> CENTURY. A CELEBRATION OF 2011 INTERNATIONAL YEAR OF CHEMISTRY*", Mihai V. Putz (Ed.), *Series „Chemistry Research and Applications” & „Chemical Engineering Methods and Technology”*, NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2011), ISBN: 978-1-61209-712-1, Chapter 1, pp. 1-60.  
♣URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=22003](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=22003)



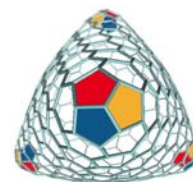
29. **PUTZ M.V.** "Hidden Side of Chemical Bond: The Bosonic Condensate", in "*ADVANCES IN CHEMISTRY RESEARCH. VOLUME 10*", James C. Taylor (Ed.), *Series „Advances in Chemistry Research”*, NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2011), ISBN: 978-1-61324-018-2, Chapter 8, pp. 261-298.  
♣URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=22671](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=22671)
30. **PUTZ M.V.** "Quantum Parabolic Effects of Electronegativity and Chemical Hardness on Carbon  $\pi$ -Systems", in "*CARBON BONDING AND STRUCTURES: ADVANCES IN PHYSICS AND CHEMISTRY*", Mihai V. Putz (Ed.), Springer Verlag, London, 2011, pages. 500, ISBN: 978-94-007-1732-9; *Book included in the SERIES „Carbon Materials: Chemistry and Physics”*, Series ISSN: 1875-0745, Chapter 1, pp. 1-32.  
♣URL: <http://www.springer.com/chemistry/physical+chemistry/book/978-94-007-1732-9>
31. **PUTZ M.V., PUTZ A.M.** "Logistic versus W-Lambert information in modelling enzyme kinetics", in "*ADVANCED METHODS AND APPLICATIONS IN CHEMOINFORMATICS: RESEARCH METHODS AND NEW APPLICATIONS*", E.A. Castro, A. K. Haghi (Editors), IGI Global (formerly Idea Group Inc.), 701 E. Chocolate Avenue Hershey, PA 17033, USA (2011), ISBN 978-1-60960-860-6 (hardcover) -- ISBN 978-1-60960-861-3 (ebook) -- ISBN 978-1-60960-862-0 (print & perpetual access), Chapter 7, pp. 168-188.  
♣URL: <http://www.igi-global.com/bookstore/chapter.aspx?titleid=56454>
32. **PUTZ M.V.** "Levels of a Unified Theory of Chemical Interaction", In "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING*", M.V. Putz (Ed.) NOVA Science Publishers Inc., New York, USA (2011) Chapter 1, pp. 1-7 ♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=20389](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=20389)
33. **PUTZ M.V.** "Chemical Reactivity and Electromagnetic Field", In "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING*", M.V. Putz (Ed.) NOVA Science Publishers Inc., New York, USA (2011) Chapter 2, pp. 9-14 ♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=20389](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=20389)
34. **PUTZ M.V., DUDA-SEIMAN C., DUDA-SEIMAN D.M., PUTZ A.-M.** "Turning SPECTRAL-SAR into 3D-QSAR Analysis. Application on  $H^+K^+$ -ATPase Inhibitory Activity". In "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING*", M.V. Putz (Ed.) NOVA Science Publishers Inc., New York, USA (2011) Chapter 33, pp. 435-451 ♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=20389](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=20389)
35. **PUTZ M.V.** "Chemical Action and the Transition State Reactivity", In: "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING. VOLUME 2*", M.V. Putz (Ed.) NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2011), Chapter 2, pp. 27-33; ♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=21916](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=21916)



36. **PUTZ M.V., PUTZ A.-M., PITULICE L., CHIRIAC V.** In: "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING. VOLUME 2*", M.V. Putz (Ed.) NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2011), Chapter 8, pp. 125-136; ♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=21916](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=21916)
37. **PUTZ M.V., PUTZ A.-M., OSTAFE V., CHIRIAC A.** "Spectral-SAR Ecotoxicology of Ionic Liquids-Acetylcholine Interaction on *E. Electricus* Species", In: "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING. VOLUME 2*", M.V. Putz (Ed.) NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2011), Chapter 18, pp. 263-274; ♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=21916](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=21916)
38. **PUTZ M.V.** "Nanoroots of Quantum Chemistry: Atomic Radii, Periodic Behavior, and Bondons", in "*NANOSCIENCE AND ADVANCING COMPUTATIONAL METHODS IN CHEMISTRY: RESEARCH PROGRESS*", E.A. Castro, A. K. Haghi (Editors), IGI Global (formerly Idea Group Inc.), 701 E. Chocolate Avenue Hershey, PA 17033, USA (2012), DOI: 10.4018/978-1-4666-1607-3.ch004, ISBN13: 9781466616073, ISBN10: 1466616075, EISBN13: 9781466616080; pp. 103-143. ♣ URL: <http://www.igi-global.com/chapter/nanoroots-quantum-chemistry-atomic-radii/66247>
39. **PUTZ M.V.** "Chemical Reactivity and Biological Activity Criteria from DFT Parabolic Dependency  $E=E(N)$ ", in "*THEORETICAL AND COMPUTATIONAL DEVELOPMENTS IN MODERN DENSITY FUNCTIONAL THEORY*", A. K. Roy (Ed.), NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2012), ISBN: 978-1-61942-779-2, Chapter 17, pp. 449-484. ♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=31589](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=31589)
40. **PUTZ M.V., PUTZ A.M.** "SPECTRAL-SAR Approach of the Enzymic Activity", In: "*QSAR & SPECTRAL-SAR IN COMPUTATIONAL ECOTOXICOLOGY*", M.V. Putz (Ed.), Apple Academics, Ontario, Canada (2012), Chapter 2, pp.29-38; ♣ URL: <http://www.appleacademicpress.com/title.php?id=50>
41. **PUTZ M.V., PUTZ A.M., OSTAFE V.** "SPECTRAL-SAR Ecotoxicology of Ionic Liquids: The Daphnia Magna Case", In: "*QSAR & SPECTRAL-SAR IN COMPUTATIONAL ECOTOXICOLOGY*", M.V. Putz (Ed.), Apple Academics, Ontario, Canada (2012), Chapter 7, pp.133-142; ♣ URL: <http://www.appleacademicpress.com/title.php?id=50>
42. **PUTZ M.V.** "Big Chemical Ideas in Context: The Periodic Law and Scerri's Periodic Table", In: "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING. VOLUME 3*", M.V. Putz (Ed.) NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2013), Chapter 1, pp.1-8; ♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=34573](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=34573)
43. **PUTZ M.V.** "On Relationship between Electronic Sharing in Bonding and Electronegativity Equalization of Atoms in Molecules", In: "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING. VOLUME 3*", M.V. Putz (Ed.) NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2013),



- Chapter 3, pp.31-46; ♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=34573](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=34573)
44. **PUTZ M.V., PUTZ A.M., BAROU R.** "Spectral-SAR Realization of OECD-QSAR Principles", In: "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING. VOLUME 3*", M.V. Putz (Ed.) NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2013), Chapter 32, pp. 449-464; ♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=34573](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=34573)
45. **PUTZ M.V., IONAȘCU C., CHIRIAC, A.** "Testing Elemental Periodicity by QSPR", In: "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING. VOLUME 3*", M.V. Putz (Ed.) NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2013), Chapter 33, pp.465-472; ♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=34573](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=34573)
46. **PUTZ A.M., PUTZ M.V.** " Spectral-Structure Activity Relationship (Spectral-SAR) Assessment of Ionic Liquids' in Silico Ecotoxicity", in "*IONIC LIQUIDS - NEW ASPECTS FOR THE FUTURE*", Jun-ichi Kadokawa (Ed.), InTech, Inc., Rijeka-New York-Shanghai, Croatia-USA-China (2013), ISBN: 978-953-51-0937-2, Chapter 4 (DOI:10.5772/51657), pp. 85-126. ♣URL: <http://dx.doi.org/10.5772/51657>
47. DE CORATO M., BERNASCONI M., D'ALESSIO L., **ORI O., PUTZ M.V., BENEDEK G.** "Topological versus Physical and Chemical Properties of Negatively Curved Carbon Surfaces", in "*TOPOLOGICAL MODELING OF NANOSTRUCTURES AND EXTENDED SYSTEMS*", Ali Reza Ashrafi, Franco Cataldo, Ali Iranmanesh, Ottorino Ori (Eds.), Springer Verlag, London (2013) Chapter 4, pp. 105-136; DOI: 10.1007/978-94-007-6413-2\_4; ♣URL: [http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-94-007-6413-2\\_4](http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-94-007-6413-2_4)
48. **PUTZ M.V., DE CORATO M., BENEDEK G., SEDLAR J., GRAOVAC A., ORI O.** Topological Invariants of Moebius-Like Graphenic Nanostructures, in "*TOPOLOGICAL MODELING OF NANOSTRUCTURES AND EXTENDED SYSTEMS*", Ali Reza Ashrafi, Franco Cataldo, Ali Iranmanesh, Ottorino Ori (Eds.), Springer Verlag, London (2013) Chapter 7, pp. 229-244; DOI: 10.1007/978-94-007-6413-2\_7; ♣ URL: [http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-94-007-6413-2\\_7](http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-94-007-6413-2_7)
49. **PUTZ M.V., ORI O., DE CORATO M., PUTZ A.M., BENEDEK G., CATALDO F., GRAOVAC A.** Introducing „Colored“ Molecular Topology by Reactivity Indices of Electronegativity and Chemical Hardness, in "*TOPOLOGICAL MODELING OF NANOSTRUCTURES AND EXTENDED SYSTEMS*", Ali Reza Ashrafi, Franco Cataldo, Ali Iranmanesh, Ottorino Ori (Eds.), Springer Verlag, London (2013) Chapter 9, pp. 265-286; DOI: 10.1007/978-94-007-6413-2\_9; ♣URL:[http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-94-007-6413-2\\_9](http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-94-007-6413-2_9)
50. **PUTZ M.V.** "From Kohn-Sham to Gross-Pitaevsky equation within Bose-Einstein condensation  $\psi$ -theory", In: "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING. VOLUME 4*", M.V.



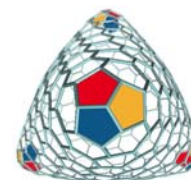
- Putz (Ed.) NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2013), Chapter 1; ♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=43018](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=43018)
51. DE CORATO M., BENEDEK G., **ORI O.**, **PUTZ M.V.** "Topological Study of Schwarzitic Junctions in 1D Lattices", In: "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING. VOLUME 4*", M.V. Putz (Ed.) NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2013), Chapter 19; ♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=43018](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=43018)
52. **PUTZ M.V.**, **TUDORAN M.A.**, **PUTZ A.M.** Modeling Chlorinated Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (Cl-PAH) Eco- and Toxicology by QSAR-OECD ToolBox Facility, In: "*ADVANCES IN CHEMICAL MODELING. VOLUME 4*", M.V. Putz (Ed.) NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2013), Chapter 30; ♣ URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=43018](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=43018)
53. **PUTZ M.V.** Nanouniverse Expanding Macrouniverse: From Elementary Particles to Dark Matter and Energy, In: "*RESEARCH HORIZONS OF NANOSYSTEMS STRUCTURE, PROPERTIES AND INTERACTIONS*", M.V. Putz (Ed.) Apple Academics, Ontario, Canada (2014), Chapter 1; ♣ URL: <http://www.appleacademicpress.com/title.php?id=9781926895901>

### Articole ISI Thompson Reuters

Nr.	Articol	FACTOR DE IMPACT în ordinea disponibilității: media pe ultimii 3-5 ani, valoarea pe 2012, sau pe 2011
1.	KLEINERT H., PELSTER A., <b>PUTZ M.V.</b> "Variational Perturbation Theory for Markov Processes", <i>Physical Review E</i> , 65(6) (2002) 066128/1-7; DOI: 10.1103/PhysRevE.65.066128; ♣ URL: <a href="http://link.aps.org/abstract/PRE/v65/e066128">http://link.aps.org/abstract/PRE/v65/e066128</a> ; ♣ URL: <a href="http://arxiv.org/abs/cond-mat/0202378">http://arxiv.org/abs/cond-mat/0202378</a>	<b>2.307</b> <sup>15</sup> 2008-2012
2.	<b>PUTZ M.V.</b> , RUSSO N., SICILIA E. "Atomic Radii Scale and Related Size Properties from Density Functional Electronegativity Formulation", <i>Journal of Physical Chemistry A</i> , 107(28) (2003) 5461-5465; DOI: 10.1021/jp027492h. ♣ URL: <a href="http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp027492h?prevSearch=&amp;searchHistoryKey">http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp027492h?prevSearch=&amp;searchHistoryKey</a>	<b>2.771</b> <sup>16</sup> 2012
3.	<b>PUTZ M.V.</b> "Electronic Density from Structure Factor Determination in Small Deformed Crystals", <i>International Journal of Quantum Chemistry</i> , 94(4) (2003) 222-231; DOI: 10.1002/qua.10475. ♣ URL: <a href="http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/abstract/104543091/START">http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/abstract/104543091/START</a>	<b>1.319</b> <sup>17</sup> 2008-2013

<sup>15</sup> <http://pre.aps.org/about>

<sup>16</sup> <http://pubs.acs.org/page/jpcfah/about.html>





4.	<b>PUTZ M.V.</b> , RUSSO N., SICILIA E. "On the Application of the HSAB Principle through the Use of Improved Computational Schemes for Chemical Hardness Evaluation", <i>Journal of Computational Chemistry</i> , 25(7) (2004) 994-1003; DOI: 10.1002/jcc.20027. ♣ URL: <a href="http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/abstract/107637137/START">http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/abstract/107637137/START</a>	<b>3.835</b> <sup>18</sup> 2012
5.	<b>PUTZ M.V.</b> , RUSSO N., SICILIA E. "About the Mulliken Electronegativity in DFT", <i>Theoretical Chemistry Accounts</i> , 114(1-3) (2005) 38-45; DOI: 10.1007/s00214-005-0641-4. ♣ URL: <a href="http://www.springerlink.com/content/r5q2791060262416/">http://www.springerlink.com/content/r5q2791060262416/</a> ♣ URL: <a href="http://arxiv.org/abs/physics/0405005">http://arxiv.org/abs/physics/0405005</a>	<b>2.233</b> <sup>19</sup> 2012
6.	<b>PUTZ M.V.</b> "Markovian Approach of the Electron Localization Functions", <i>International Journal of Quantum Chemistry</i> , 105(1) (2005) 1-11; DOI: 10.1002/qua.20645. ♣ URL: <a href="http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/abstract/110497907/START">http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/abstract/110497907/START</a>	<b>1.319</b> <sup>20</sup> 2008-2013
7.	<b>PUTZ M.V.</b> "Systematic Formulation for Electronegativity and Hardness and Their Atomic Scales within Density Functional Softness Theory", <i>International Journal of Quantum Chemistry</i> , 106(2) (2006) 361-389; DOI: 10.1002/qua.20787. ♣ URL: <a href="http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/abstract/112093056/START">http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/abstract/112093056/START</a>	<b>1.319</b> <sup>21</sup> 2008-2013
8.	<b>PUTZ M.V.</b> , LACRĂMĂ A.-M., OSTAFE V. "Full Analytic Progress Curves of the Enzymic Reactions in Vitro", <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 7(11) (2006) 469-484; DOI: 10.3390/i7110469. ♣ URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/7/11/469">http://www.mdpi.com/1422-0067/7/11/469</a>	<b>2.732</b> <sup>22</sup> 2008-2012
9.	<b>DUDA-SEIMAN C.</b> , DUDA-SEIMAN D., DRAGOȘ D., MEDELEANU M., CAREJA V., <b>PUTZ M.V.</b> , LACRĂMĂ A.-M., CHIRIAC A., NUȚIU R., CIUBOTARIU D. "Design of Anti-HIV Ligands by Means of Minimal Topological Difference (MTD) Method", <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 7(11) (2006) 537-555; DOI: 10.3390/i7110537. ♣ URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/7/11/537">http://www.mdpi.com/1422-0067/7/11/537</a>	<b>2.732</b> <sup>23</sup> 2008-2012
10.	<b>DUDA-SEIMAN C.</b> , DUDA-SEIMAN D., <b>PUTZ M.V.</b> , CIUBOTARIU D. "QSAR Modelling of Anti-HIV with HEPT Derivatives", <i>Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures</i> , 2(2) (2007) 207-219 ♣ URL: <a href="http://www.chalcogen.infim.ro/Putz-AntiHIV_DJNB_2007.pdf">http://www.chalcogen.infim.ro/Putz-AntiHIV_DJNB_2007.pdf</a>	<b>1.530</b> <sup>24</sup> /2009-2012
11.	<b>PUTZ M.V.</b> , LACRĂMĂ A.-M. "Enzymatic control of the bio-inspired nanomaterials at the spectroscopic level", <i>Journal of Optoelectronics and Advanced Materials</i> , 9 (8) (2007) 2529 – 2534 ♣ URL: <a href="http://inoe.inoe.ro/joam">http://inoe.inoe.ro/joam</a>	<b>0.479</b> <sup>25</sup> 2008-2012
12.	<b>PUTZ M.V.</b> , LACRĂMĂ A.-M., OSTAFE V. "Introducing logistic enzyme kinetics", <i>Journal of Optoelectronics and Advanced Materials</i> , 9 (9) (2007) 2910 –	<b>0.479</b> <sup>26</sup> 2008-2012

<sup>17</sup> <http://www.bioxbio.com/if/html/INT-J-QUANTUM-CHEM.html>

<sup>18</sup> [http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/\(ISSN\)1096-987X/issues](http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/(ISSN)1096-987X/issues)

<sup>19</sup> <http://www.springer.com/chemistry/theoretical+and+computational+chemistry/journal/214>

<sup>20</sup> <http://www.bioxbio.com/if/html/INT-J-QUANTUM-CHEM.html>

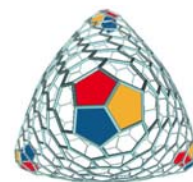
<sup>21</sup> <http://www.bioxbio.com/if/html/INT-J-QUANTUM-CHEM.html>

<sup>22</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>

<sup>23</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>

<sup>24</sup> <http://www.chalcogen.infim.ro/digest.html>

<sup>25</sup> <http://www.bioxbio.com/if/html/J-OPTOELECTRON-ADV-M.html>



	2916 ♣URL: <a href="http://inoe.inoe.ro/joam">http://inoe.inoe.ro/joam</a>	
13.	<b>PUTZ M.V.</b> "Semiclassical Electronegativity and Chemical Hardness", <i>Journal of Theoretical and Computational Chemistry</i> , 6(1) (2007) 33-47; DOI: 10.1142/S0219633607002861; ♣ URL: <a href="http://www.worldscinet.com/jtcc/06/0601/S0219633607002861.html">http://www.worldscinet.com/jtcc/06/0601/S0219633607002861.html</a>	<b>0.693</b> <sup>27</sup> 2008-2012
14.	<b>PUTZ M.V., LACRĂMĂ A.-M.</b> "Introducing Spectral Structure Activity Relationship (S-SAR) Analysis. Application to Ecotoxicology", <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 8(5) (2007) 363-391; DOI: 10.3390/i8050363. ♣ URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/8/5/363">http://www.mdpi.com/1422-0067/8/5/363</a>	<b>2.732</b> <sup>28</sup> 2008-2012
15.	<b>LACRĂMĂ A.-M., PUTZ M.V., OSTAFE V.</b> "A Spectral-SAR Model for the Anionic-Cationic Interaction in Ionic Liquids: Application to <i>Vibrio fischeri</i> Ecotoxicity", <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 8(8) (2007) 842-863; DOI: 10.3390/i8080842; ♣ URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/8/8/842">http://www.mdpi.com/1422-0067/8/8/842</a>	<b>2.732</b> <sup>29</sup> 2008-2012
16.	<b>PUTZ M.V., PUTZ (LACRĂMĂ) A.-M.</b> "Spectral-SAR: Old Wine in New Bottle", <i>Studia Universitatis Babeș-Bolyai - Seria Chimia</i> , 53 (2) (2008) 73 – 81 ♣URL: <a href="http://chem.ubbcluj.ro/~studiachemia/">http://chem.ubbcluj.ro/~studiachemia/</a> ♣URL: <a href="http://chem.ubbcluj.ro/~studiachemia/docs/Chimia_2_2008.pdf">http://chem.ubbcluj.ro/~studiachemia/docs/Chimia_2_2008.pdf</a>	<b>0.18</b> <sup>30</sup> 2010-2011
17.	<b>PUTZ M.V.</b> "Density Functionals of Chemical Bonding", <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 9(6) (2008) 1050-1095; DOI: 10.3390/ijms9061050; ♣ URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/9/6/1050">http://www.mdpi.com/1422-0067/9/6/1050</a>	<b>2.732</b> <sup>31</sup> 2008-2012
18.	<b>PUTZ M.V.</b> "Maximum Hardness Index of Quantum Acid-Base Bonding", <i>MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry</i> , 60(3) (2008) 845-868; ♣ URL: <a href="http://www.pmf.kg.ac.rs/match/content60n3.htm">http://www.pmf.kg.ac.rs/match/content60n3.htm</a>	<b>2.787</b> <sup>32</sup> 2008-2013
19.	<b>VULPEȘ D., PUTZ M.V., CHIRIAC A.</b> "QSAR Study on The Anaesthetic Activity of Some Barbiturates and Thiobarbiturates", <i>Revue Roumaine de Chimie</i> , 54(9) (2009) 723-732; ♣URL: <a href="http://web.icf.ro/rrch/">http://web.icf.ro/rrch/</a>	<b>0.418</b> <sup>33</sup> 2011
20.	<b>PUTZ M.V.</b> "Electronegativity: Quantum Observable", <i>International Journal of Quantum Chemistry</i> , 109 (4) (2009) 733-738; DOI: 10.1002/qua.21957; ♣ URL: <a href="http://www3.interscience.wiley.com/journal/121531030/abstract">http://www3.interscience.wiley.com/journal/121531030/abstract</a>	<b>1.319</b> <sup>34</sup> 2008-2012
21.	<b>PUTZ M.V., PUTZ A.M., LAZEA M., IENCIU L., CHIRIAC A.</b> "Quantum-SAR Extension of the Spectral-SAR Algorithm. Application to Polyphenolic Anticancer Bioactivity", <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 10(3) (2009) 1193-1214; DOI: 10.3390/ijms10031193; ♣ URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/10/3/1193">http://www.mdpi.com/1422-0067/10/3/1193</a>	<b>2.732</b> <sup>35</sup> 2008-2012
22.	<b>PUTZ M.V.</b> "Chemical Action and Chemical Bonding", <i>Journal of Molecular</i>	<b>1.296</b> <sup>36</sup>

<sup>26</sup> <http://www.bioxbio.com/if/html/J-OPTOELECTRON-ADV-M.html>

<sup>27</sup> <http://www.bioxbio.com/if/html/J-THEOR-COMPUT-CHEM.html>

<sup>28</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>

<sup>29</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>

<sup>30</sup> <http://chem.ubbcluj.ro/~studiachemia/>

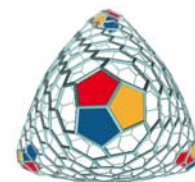
<sup>31</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>

<sup>32</sup> <http://www.bioxbio.com/if/html/MATCH-COMMUN-MATH-CO.html>

<sup>33</sup> <http://revroum.getion.ro/aims-and-scope>

<sup>34</sup> <http://www.bioxbio.com/if/html/INT-J-QUANTUM-CHEM.html>

<sup>35</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>



	<i>Structure: THEOCHEM</i> , 900 (1-3) (2009) 64-70; DOI: 10.1016/j.theochem.2008.12.026; ♣ URL: <a href="http://dx.doi.org/10.1016/j.theochem.2008.12.026">http://dx.doi.org/10.1016/j.theochem.2008.12.026</a>	2008-2012
23.	SELEGEAN M., PUTZ M.V., RUGEA T. "Effect of the Polysaccharide Extract from the Edible Mushroom <i>Pleurotus Ostreatus</i> against Infectious Bursal Disease Virus", <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 10(8) (2009) 3616-3634; DOI: 10.3390/ijms10083616 ♣ URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/10/8/3616">http://www.mdpi.com/1422-0067/10/8/3616</a>	2.732 <sup>37</sup> 2008-2012
24.	CHICU S.A., PUTZ M.V. "Köln-Timișoara Molecular Activity Combined Models toward Interspecies Toxicity Assessment", <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 10(10) (2009) 4474-4497; DOI: doi:10.3390/ijms10104474 ♣ URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/10/10/4474">http://www.mdpi.com/1422-0067/10/10/4474</a>	2.732 <sup>38</sup> 2008-2012
25.	PUTZ M.V. "Path Integrals for Electronic Densities, Reactivity Indices, and Localization Functions in Quantum Systems", <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 10(11) (2009) 4816-4940; DOI: 10.3390/ijms10114816 (included in the Special Issue: Applications of Density Functional Theory/Abhijit Chatterjee, guest editor); ♣ URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/10/11/4816">http://www.mdpi.com/1422-0067/10/11/4816</a>	2.732 <sup>39</sup> 2008-2012
26.	PUTZ M.V., PUTZ A.M., LAZEA M., CHIRIAC A. "Spectral vs. Statistic Approach of Structure-Activity Relationship. Application on Ecotoxicity of Aliphatic Amines", <i>Journal of Theoretical and Computational Chemistry</i> , 8(6) (2009) 1235-1251; DOI: 10.1142/S0219633609005453; ♣ URL: <a href="http://www.worldscinet.com/jtcc/08/0806/S0219633609005453.html">http://www.worldscinet.com/jtcc/08/0806/S0219633609005453.html</a>	0.693 <sup>40</sup> 2008-2012
27.	GHIJU S., PUTZ M.V., CHIRIAC A. "On Specific Vs. Non-Specific Enzymic Inter-Activity in Acute Myocardial Infarction", <i>Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures</i> , 5(1) (2010) 567-574. ♣ URL: <a href="http://www.chalcogen.infim.ro/567_Giju.pdf">http://www.chalcogen.infim.ro/567_Giju.pdf</a>	1.530 <sup>41</sup> 2009-2012
28.	PUTZ M.V. "Chemical Hardness: Quantum Observable?", <i>Studia Universitatis Babeș-Bolyai - Seria Chemia</i> , 55 (2) –Tom I (2010) 47 – 50. ♣ URL: <a href="http://chem.ubbcluj.ro/~studiachemia/docs/Chemia22010t1.pdf">http://chem.ubbcluj.ro/~studiachemia/docs/Chemia22010t1.pdf</a>	0.18 <sup>42</sup> 2010-2011
29.	TARKO L., PUTZ M.V. "On Electronegativity and Chemical Hardness Relationships with Aromaticity", <i>Journal of Mathematical Chemistry</i> , 47(1) (2010) 487-495; DOI: 10.1007/s10910-009-9585-6. ♣ URL: <a href="http://www.springerlink.com/content/f81757qmh225m8v1/">http://www.springerlink.com/content/f81757qmh225m8v1/</a>	1.321 <sup>43</sup> 2008-2012
30.	PUTZ M.V. "On Absolute Aromaticity within Electronegativity and Chemical Hardness Reactivity Pictures", <i>MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry</i> , 64(2) (2010) 391-418. ♣ URL: <a href="http://www.pmf.kg.ac.rs/match/content64n2.htm">http://www.pmf.kg.ac.rs/match/content64n2.htm</a>	2.787 <sup>44</sup> 2008-2013

<sup>36</sup> <http://www.bioxbio.com/if/html/J-MOL-STRUC-THEOCHEM.html>

<sup>37</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>

<sup>38</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>

<sup>39</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>

<sup>40</sup> <http://www.bioxbio.com/if/html/J-THEOR-COMPUT-CHEM.html>

<sup>41</sup> <http://www.chalcogen.infim.ro/digest.html>

<sup>42</sup> <http://chem.ubbcluj.ro/~studiachemia/>

<sup>43</sup> <http://www.bioxbio.com/if/html/J-MATH-CHEM.html>

<sup>44</sup> <http://www.bioxbio.com/if/html/MATCH-COMMUN-MATH-CO.html>



31.	<b>PUTZ M.V.</b> "Compactness Aromaticity of Atoms in Molecules", <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 11(4) (2010) 1269-1310; DOI: 10.3390/ijms11041269; ♣ URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/11/4/1269">http://www.mdpi.com/1422-0067/11/4/1269</a>	<b>2.732</b> <sup>45</sup> 2008-2012
32.	<b>PUTZ M.V.</b> "On Heisenberg Uncertainty Relationship, Its Extension, and the Quantum Issue of Wave-Particle Duality", <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 11(10) (2010) 4124-4139; DOI: 10.3390/ijms11104124 (included in the Special Issue: Advances in Molecular Electronic Structure Calculations/Eduardo A. Castro, guest editor); ♣ URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/11/10/4124">http://www.mdpi.com/1422-0067/11/10/4124</a>	<b>2.732</b> <sup>46</sup> 2008-2012
33.	<b>PUTZ M.V.</b> "The Bondons: The Quantum Particles of the Chemical Bond", <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 11(11) (2010) 4227-4256; DOI: 10.3390/ijms11114227 (included in the Special Issue: Atoms in Molecules and in Nanostructures/Mihai V. Putz, guest editor); ♣ URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/11/11/4227">http://www.mdpi.com/1422-0067/11/11/4227</a>	<b>2.732</b> <sup>47</sup> 2008-2012
34.	DUDA-SEIMAN D., AVRAM S., MANCAS S., CAREJA V., <b>DUDA-SEIMAN C., PUTZ M.V.</b> , CIUBOTARIU D. "MTD-CoMSIA Modeling of HMG-CoA Reductase Inhibitors", <i>Journal of Serbian Chemical Society</i> , 76(1) (2011) 85-99; DOI: 10.2298/JSC100601019D. ♣ URL: <a href="http://www.shd.org.rs/JSCS/Vol76/No1/09_4798_4102.pdf">http://www.shd.org.rs/JSCS/Vol76/No1/09_4798_4102.pdf</a>	<b>0.789</b> <sup>48</sup> 2008-2012
35.	<b>PUTZ M.V.</b> "Chemical Action Concept and Principle", <i>MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry</i> , 66(1) (2011) 35-63. ♣ URL: <a href="http://www.pmf.kg.ac.rs/match/content66n1.htm">http://www.pmf.kg.ac.rs/match/content66n1.htm</a>	<b>2.787</b> <sup>49</sup> 2008-2013
36.	<b>PUTZ M.V.</b> "On Reducible Character of Haldane-Radić Enzyme Kinetics to Conventional and Logistic Michaelis-Menten Models", <i>Molecules</i> , 16(4) (2011) 3128-3145; DOI:10.3390/molecules16043128; (included in the Special Issue: Enzyme-Catalyzed Reactions/Lajos Novak, guest editor); ♣URL: <a href="http://www.mdpi.com/1420-3049/16/4/3128/">http://www.mdpi.com/1420-3049/16/4/3128/</a>	<b>2.679</b> <sup>50</sup> 2008-2012
37.	<b>PUTZ M.V.</b> "Residual-QSAR. Implications for Genotoxic Carcinogenesis", <i>Chemistry Central Journal</i> , 5 (2011) 29 (11 pages); DOI: 10.1186/1752-153X-5-29. ♣ URL: <a href="http://www.journal.chemistrycentral.com/content/5/1/29">http://www.journal.chemistrycentral.com/content/5/1/29</a>	<b>1.803</b> <sup>51</sup> 2010-2012
38.	MATITO E., <b>PUTZ M.V.</b> "New Link between Conceptual Density Functional Theory and Electron Delocalization", <i>Journal of Physical Chemistry A</i> , 115 (45) (2011) 12459-12462; DOI: 10.1021/jp200731d; (included in the Special Issue: Richard F. W. Bader Festschrift); ♣ URL: <a href="http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp200731d">http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp200731d</a>	<b>2.771</b> <sup>52</sup> 2012
39.	<b>PUTZ M.V., LAZEA M., SANDJO L.P.</b> "Quantitative Structure Inter-Activity	<b>2.679</b> <sup>53</sup>

<sup>45</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>

<sup>46</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>

<sup>47</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>

<sup>48</sup> <http://www.bioxbio.com/ift/html/J-SERB-CHEM-SOC.html>

<sup>49</sup> <http://www.bioxbio.com/ift/html/MATCH-COMMUN-MATH-CO.html>

<sup>50</sup> <http://www.mdpi.com/journal/molecules>

<sup>51</sup> 2010: <http://homer.gsu.edu/blogs/library/2009/07/30/chemistry-central-journal-gains-1st-impact-factor/>; 2011:

[http://www.bath.ac.uk/news/2012/08/02/ccj-impact-](http://www.bath.ac.uk/news/2012/08/02/ccj-impact-factor/?utm_source=feedburner&utm_medium=feed&utm_campaign=Feed%3A+uniofbath-news+(University+of+Bath+News))

[factor/?utm\\_source=feedburner&utm\\_medium=feed&utm\\_campaign=Feed%3A+uniofbath-](http://www.bath.ac.uk/news/2012/08/02/ccj-impact-factor/?utm_source=feedburner&utm_medium=feed&utm_campaign=Feed%3A+uniofbath-news+(University+of+Bath+News))

[news+\(University+of+Bath+News\)](http://www.bath.ac.uk/news/2012/08/02/ccj-impact-factor/?utm_source=feedburner&utm_medium=feed&utm_campaign=Feed%3A+uniofbath-news+(University+of+Bath+News)); 2012: <http://journal.chemistrycentral.com/>

<sup>52</sup> <http://pubs.acs.org/page/jpcafh/about.html>



	Relationship (QSIAR). Cytotoxicity Study of Some Hemisynthetic and Isolated Natural Steroids and Precursors on Human Fibrosarcoma Cells HT1080", <i>Molecules</i> , 16(8) (2011) 6603-6620; DOI: 10.3390/molecules16086603 ♣URL: <a href="http://www.mdpi.com/1420-3049/16/8/6603/">http://www.mdpi.com/1420-3049/16/8/6603/</a>	2008-2012
40.	<b>PUTZ M.V., IONAȘCU C., PUTZ A.M., OSTAFE V.</b> "Alert-QSAR. Implications for Electrophilic Theory of Chemical Carcinogenesis", <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 12(8) (2011) 5098-5134; DOI: 10.3390/ijms12085098 ♣ URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/12/8/5098/">http://www.mdpi.com/1422-0067/12/8/5098/</a>	<b>2.732</b> <sup>54</sup> 2008-2012
41.	<b>ORI O., CATALDO F., PUTZ M.V.</b> "Topological Anisotropy of Stone-Wales Waves in Graphenic Fragments", <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 12(11) (2011) 7934-7949; DOI: 10.3390/ijms12117934 ♣ URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/12/11/7934/">http://www.mdpi.com/1422-0067/12/11/7934/</a>	<b>2.732</b> <sup>55</sup> 2008-2012
42.	<b>PUTZ M.V., LAZEA M., PUTZ A.M., SEIMAN-DUDA C.</b> "Introducing Catastrophe-QSAR. Application on Modeling Molecular Mechanisms of Pyridinone Derivative-Type HIV Non-Nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors", <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 12(12) (2011) 9533-9569; DOI: 10.3390/ijms12129533; ♣URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/12/12/9533/">http://www.mdpi.com/1422-0067/12/12/9533/</a>	<b>2.732</b> <sup>56</sup> 2008-2012
43.	<b>TARKO L., PUTZ M.V.</b> "On Quantitative Structure-Toxicity Relationships (QSTR) using High Chemical Diversity Molecules Group", <i>Journal of Theoretical and Computational Chemistry</i> , 11(2) (2012) 265-272; DOI: 10.1142/S0219633612500174 ♣ URL: <a href="http://www.worldscinet.com/jtcc/11/1102/S0219633612500174.html">http://www.worldscinet.com/jtcc/11/1102/S0219633612500174.html</a>	<b>0.693</b> <sup>57</sup> 2008-2012
44.	<b>PUTZ M.V., ORI O.</b> Bondonic Characterization of Extended Nanosystems: Application to Graphene's Nanoribbons. <i>Chemical Physics Letters</i> 548 (2012) 95-100; DOI: 10.1016/j.cplett.2012.08.019. ♣URL: <a href="http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261412009359?v=s5">http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261412009359?v=s5</a>	<b>2.244</b> <sup>58</sup> 2008-2012
45.	<b>PUTZ M.V.</b> Valence Atom with Bohmian Quantum Potential: The Golden Ratio Approach. <i>Chem. Central J.</i> 6 (2012) 135 (16 pages); DOI: 10.1186/1752-153X-6-135; ♣URL: <a href="http://journal.chemistrycentral.com/content/6/1/135/abstract">http://journal.chemistrycentral.com/content/6/1/135/abstract</a>	<b>1.803</b> <sup>59</sup> 2010-2012
46.	<b>PUTZ A.M., PUTZ M.V.</b> Spectral Inverse Quantum (Spectral-IQ) Method for Modeling Mesoporous Systems. Application on Silica Films by FTIR. <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 13(12) (2012) 15925-15941; DOI:10.3390/ijms131215925;	<b>2.732</b> <sup>60</sup> 2008-2012

<sup>53</sup> <http://www.mdpi.com/journal/molecules>

<sup>54</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>

<sup>55</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>

<sup>56</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>

<sup>57</sup> <http://www.bioxbio.com/ift/html/J-THEOR-COMPUT-CHEM.html>

<sup>58</sup> <http://www.bioxbio.com/ift/html/CHEM-PHYS-LETT.html>

<sup>59</sup> 2010: <http://homer.gsu.edu/blogs/library/2009/07/30/chemistry-central-journal-gains-1st-impact-factor/>; 2011: [http://www.bath.ac.uk/news/2012/08/02/ccj-impact-factor/?utm\\_source=feedburner&utm\\_medium=feed&utm\\_campaign=Feed%3A+uniofbath-news+\(University+of+Bath+News\)](http://www.bath.ac.uk/news/2012/08/02/ccj-impact-factor/?utm_source=feedburner&utm_medium=feed&utm_campaign=Feed%3A+uniofbath-news+(University+of+Bath+News)); 2012: <http://journal.chemistrycentral.com/>



	♣ URL: <a href="http://www.mdpi.com/1422-0067/13/12/15925">http://www.mdpi.com/1422-0067/13/12/15925</a>	
47.	<b>PUTZ M.V.</b> Density Functional Theory of Bose-Einstein Condensation: Road to Chemical Bonding Quantum Condensate. <i>Structure and Bonding</i> 149 (2012) 1-50; DOI: 10.1007/978-3-642-32753-7_1; ♣URL: <a href="http://link.springer.com/chapter/10.1007%2F978-3-642-32753-7_1">http://link.springer.com/chapter/10.1007%2F978-3-642-32753-7_1</a>	<b>3.475</b> <sup>61</sup> 2011
48.	<b>PUTZ M.V., PUTZ A.M.</b> DFT Chemical Reactivity Driven by Biological Activity: Applications for the Toxicological Fate of Chlorinated PAHs. <i>Structure and Bonding</i> 150 (2013) 181–232; DOI: 10.1007/978-3-642-32750-6_6; ♣URL: <a href="http://www.springer.com/chemistry/inorganic+chemistry/book/978-3-642-32749-0">http://www.springer.com/chemistry/inorganic+chemistry/book/978-3-642-32749-0</a>	<b>3.475</b> <sup>62</sup> 2011
49.	<b>PUTZ M.V., DUDAȘ N.A.</b> Variational principles for mechanistic quantitative structure–activity relationship (QSAR) studies: application on uracil derivatives’ anti-HIV action, <i>Structural Chemistry</i> 24 (2013) 1873-1893; DOI: 10.1007/s11224-013-0249-6; ♣URL: <a href="http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11224-013-0249-6">http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11224-013-0249-6</a>	<b>1.683</b> <sup>63</sup> 2008-2012
50.	<b>PUTZ M.V., CHATTARAJ P.K.</b> Electrophilicity Kernel and its Hierarchy through Softness in Conceptual Density Functional Theory, <i>International Journal of Quantum Chemistry</i> 113 (2013) 2163–2171; DOI: 10.1002/qua.24473 ♣URL: <a href="http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qua.24473/abstract">http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qua.24473/abstract</a>	<b>1.319</b> <sup>64</sup> 2008-2013
51.	<b>PUTZ M.V.,</b> Koopmans’ Analysis of Chemical Hardness with Spectral Like Resolution, <i>The Scientific World Journal</i> (2013) Volume 2013, Article ID 348415, 14 pages. DOI: 10.1155/2013/348415 ♣URL: <a href="http://www.hindawi.com/journals/tswj/aip/348415/">http://www.hindawi.com/journals/tswj/aip/348415/</a>	<b>1.730</b> <sup>65</sup> /2012
52.	<b>PUTZ M.V., DUDAȘ N.A.,</b> Chemical Reactivity Driving Biological Activity by SMILES Transformations: The Anti-HIV Pyrimidines’ Bonding Mechanism, <i>Molecules</i> 18(8) (2013) 9061-9116; DOI: 10.3390/molecules18089061 ♣URL: <a href="http://www.mdpi.com/1420-3049/18/8/9061">http://www.mdpi.com/1420-3049/18/8/9061</a>	<b>2.679</b> <sup>66</sup> 2008-2012
<b>FACTOR DE IMPACT TOTAL</b>		<b>107.116</b>

<sup>60</sup> <http://www.mdpi.com/journal/ijms>

<sup>61</sup> <http://www.springer.com/series/430>

<sup>62</sup> <http://www.springer.com/series/430>

<sup>63</sup> <http://www.bioxbio.com/if/html/STRUCT-CHEM.html>

<sup>64</sup> <http://www.bioxbio.com/if/html/INT-J-QUANTUM-CHEM.html>

<sup>65</sup> <http://www.hindawi.com/journals/tswj/>

<sup>66</sup> <http://www.mdpi.com/journal/molecules>



## ANEXA 4. Citări ISI & BDI ale membrilor L-CF-SC-NQ

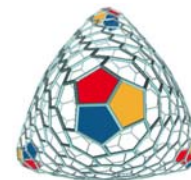
(excluse autocitările, actualizare Septembrie 2013; listarea este din ultimii 10 ani cu membrii L-CF-SC-NQ evidențiați prin “îngroșare”)

Citările articolului [*Variational perturbation theory for Markov processes*, KLEINERT H, PELSTER A, **PUTZ MV**, PHYSICAL REVIEW E65 (6): Art. No. 066128 Part 2, JUN 2002] sunt:

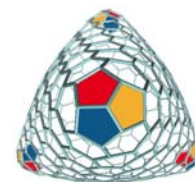
<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
<b>1.</b>	<b>Diagrammatic computation of the random flight motion</b>	Hatamian, S.T.	2004	<i>Physica A: Statistical Mechanics and its Applications</i> 341 (1-4), pp. 401-432
<b>2.</b>	<b>Variational perturbation theory for Fokker-Planck equation with nonlinear drift</b>	Dreger, J., Pelster, A., Hamprecht, B.	2005	<i>European Physical Journal B</i> 45 (3), pp. 355-368
<b>3.</b>	<b>Large-D expansion from variational perturbation theory</b>	Brandt, S.F., Pelster, A.	2005	<i>Journal of Mathematical Physics</i> 46 (11), pp. 1-16
<b>4.</b>	<b>Variational calculation of the limit cycle and its frequency in a two-neuron model with delay</b>	Brandt, S.F., Pelster, A., Wessel, R.	2006	<i>Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics</i> 74 (3), art. no. 036201
<b>5.</b>	<b>Application of Reactivity Indices Within Density Functional Theory to Rationale Chemical Interactions</b>	Chatterjee, A	2012	<i>Structure and Bonding</i> 149, pp. 159-186

Citările articolului [*Atomic radii scale and related size properties from density functional electronegativity formulation*, **PUTZ MV**, RUSSO N, SICILIA E, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A107 (28): 5461-5465 JUL 17 2003] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
<b>6.</b>	<b>Hammett equation and generalized Pauling's electronegativity equation</b>	Liu, L., Fu, Y.,Liu, R., Li, R.-Q., Guo, Q.-X.	2004	<i>Journal of Chemical Information and Computer Sciences</i> 44 (2), pp. 652-657
<b>7.</b>	<b>A new scale of electronegativity based on absolute radii of atoms</b>	Ghosh, D.C.	2005	<i>Journal of Theoretical and Computational Chemistry</i> 4 (1), pp. 21-33
<b>8.</b>	<b>The characteristic boundary radii of atoms</b>	Zhang, M.-B., Zhao, D.-X.,	2005	<i>Journal of Theoretical and Computational Chemistry</i> 4



		Yang, Z.-Z.		(1), pp. 281-288
9.	<b>Quantitative Structure Property Relations (QSPR) for predicting molar diamagnetic susceptibilities, <math>\chi_m</math>, of inorganic compounds</b>	Mu, L.-L., He, H.-M., Feng, C.-J.	2007	<i>Chinese Journal of Chemistry</i> 25 (6), pp. 743-750
10.	<b>Estimation of the van der Waals radii of the d-block elements using the concept of bond valence</b>	Nag, S., Banerjee, K., Datta, D.	2007	<i>New Journal of Chemistry</i> 31, pp. 832-834
11.	<b>Boundary contours of inert atoms in uniform strength electric field</b>	Shi, H., Zhao, D.-X., Yang, Z.-Z.	2007	<i>Wuli Huaxue Xuebao/ Acta Physico - Chimica Sinica</i> 23 (8), pp. 1145-1150
12.	<b>Topological research on diamagnetic susceptibilities of organic compounds</b>	Mu, L., Feng, C., He, H.	2008	<i>Journal of Molecular Modeling</i> 14 (2), pp. 109-134
13.	<b>Modeling diamagnetic susceptibilities of organic compounds with a novel connectivity index</b>	Mu, L., Feng, C., He, H.	2008	<i>Industrial and Engineering Chemistry Research</i> 47 (7), pp. 2428-2433
14.	<b>The wave mechanical evaluation of the absolute radii of atoms</b>	Ghosh D.C., Biswas R., Chakraborty T., Islam N., Rajak S.K.	2008	<i>Journal of Molecular Structure: THEOCHEM</i> 865, pp. 60-67
15.	<b>Variable molecular connectivity indices for predicting the diamagnetic susceptibilities of organic compounds</b>	Mu, L., He, H., Yang, W., Feng, C.	2009	<i>Industrial and Engineering Chemistry Research</i> 48 (8), pp. 4165-4175
16.	<b>Consistent van der Waals radii for the whole main group</b>	Mantina, M., Chamberlin, A.C., Valero, R., Cramer, C.J., Truhlar, D.G.	2009	<i>Journal of Physical Chemistry A</i> 113 (19), pp. 5806-5812
17.	<b>Improved QSPR study of diamagnetic susceptibilities for organic compounds using two novel molecular connectivity indexes</b>	Mu, L., He, H., Yang, W.	2009	<i>Chinese Journal of Chemistry</i> 27 (6), pp. 1045-1054
18.	<b>Is the size of an atom</b>	Bohórquez,	2009	<i>Chemical Physics Letters</i>





	<b>determined by its ionization energy?</b>	H.J., Boyd, R.J.		480 (1-3), pp. 127-131
19.	<b>Computation of the dipole moment of some heteronuclear diatomic molecules in terms of the revised electronegativity scale of Allred and Rochow</b>	Chakraborty, T.; Ghosh, D.C.	2010	<i>European Journal of Chemistry</i> 1 (3), pp. 182-188
20.	<b>Computation of the internuclear distances of some heteronuclear diatomic molecules in terms of the revised electronegativity scale of Gordy</b>	Chakraborty, T., Ghosha, D.C.	2010	<i>European Physical Journal D</i> 59 (2), pp. 183-192
21.	<b>Computation of the atomic radii through the conjoint action of the effective nuclear charge and the ionization energy</b>	Chakraborty, T., Gazi, K., Ghosh, D.C.	2010	<i>Molecular Physics</i> 108 (16), pp. 2081-2092
22.	<b>Computation of Some Descriptors of The Real World in Terms of A New Scale of Electronegativity. Part 1. The Dipole Moments of Some Heteronuclear Diatomic Molecules</b>	Dulal C. Ghosh, Nazmul Islam and Sandip Kumar Rajak	2010	<i>International Journal of Chemical Modeling</i> , 2 (4), pp. 361-374
23.	<b>Study of the Orbital Hardness and the Kohn-Sham Radius on Single Monoatomic Anions</b>	Barrera Mauricio	2011	<i>International Journal Of Quantum Chemistry</i> , 111(12), pp. 3097-311
24.	<b>Modeling of the Chemicophysical Process of Protonation of Molecules Entailing Some Quantum Chemical Descriptors</b>	Sandip K. Rajak, Nazmul Islam, Dulal C. Ghosh	2011	<i>Journal of Quantum Information Science</i> , 1, pp. 87-95
25.	<b>The Electronegativity and the Global Hardness Are Periodic Properties of Atoms</b>	Nazmul Islam, Dulal C. Ghosh	2011	<i>Journal of Quantum Information Science</i> , 1, pp. 135-141
26.	<b>On the electrophilic character of molecules through its relation with electronegativity and chemical hardness</b>	Nazmul Islam and Dulal C. Ghosh	2012	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 13(2), pp. 2160-2175
27.	<b>Relating Bond Angles of Dihalo- and Tetrahydro-methanes, -silanes, and -</b>	Kirschenbaum, Louis J.; Ruekberg, Ben	2012	<i>JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION</i> Volume: 89 Issue: 3 Pages:



	<b>germanes to Electronegativities</b>			351-354
28.	<b>Application of Reactivity Indices Within Density Functional Theory to Rationale Chemical Interactions</b>	Chatterjee, A	2012	<i>Structure and Bonding</i> 149, pp. 159-186

Citările articolului [*On the applicability of the HSAB principle through the use of improved computational schemes for chemical hardness evaluation*, PUTZ MV, RUSSO N, SICILIA E, JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 25 (7): 994-1003 MAY 2004] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
29.	<b>An assessment of a simple hardness kernel approximation for the calculation of the global hardness in a series of Lewis acids and bases</b>	Torrent-Sucarrat, M., Luis, J.M., Duran, M., Solà, M.	2005	<i>Journal of Molecular Structure: THEOCHEM</i> 727(1-3 SPEC. ISS.), pp. 139-148
30.	<b>Computation of the hardness and the problem of negative electron affinities in density functional theory</b>	Tozer, D.J., De Proft, F.	2005	<i>Journal of Physical Chemistry A</i> 109(39), pp. 8923-8929
31.	<b>Activation energy for dibenzofuran desorption from Fe<sup>3+</sup>/TiO<sub>2</sub> and Ce<sup>3+</sup>/TiO<sub>2</sub> photocatalysts coated onto glass fibres</b>	Xia, Q., Li, Z., Xi, H., Xu, K.	2005	<i>Adsorption Science and Technology</i> 23(5), pp. 357-366
32.	<b>Application of binomial coefficients in representing central difference solution to a class of PDE arising in chemistry</b>	Lim, T.-C.	2006	<i>Journal of Mathematical Chemistry</i> 39(1), pp. 177-186
33.	<b>Effects of different metal ions loaded onto activated carbon on adsorption of benzothiophene</b>	Yu, M., Li, Z., Xia, Q., Xi, H.	2006	<i>Huagong Xuebao/ Journal of Chemical Industry and Engineering (China)</i> 57(8), pp. 1943-1948
34.	<b>Adsorption of dibenzothiophene on activated carbons loaded with different metal ions</b>	Yu, M.-X., Li, Z., Xia, Q.-B., Wang, S.-W.	2006	<i>Gongneng Cailiao/Journal of Functional Materials</i> 37 (11), pp. 1816-1818
35.	<b>Theoretical studies on [3 + 2]-cycloaddition reactions</b>	Kuznetsov, M.L.	2006	<i>Russian Chemical Reviews</i> 75 (11), pp. 935-960
36.	<b>Calculation of negative electron affinity and aqueous anion hardness using Kohn-Sham HOMO and LUMO energies</b>	De Proft, F., Sablon, N., Tozer, D.J., Geerlings, P.	2007	<i>Faraday Discussions</i> 135, pp. 151-159
37.	<b>Desorption activation energy of</b>	Yu, M., Li,	2007	<i>Chemical Engineering</i>



	<b>dibenzothiophene on the activated carbons modified by different metal salt solutions</b>	Z., Xia, Q., Xi, H., Wang, S.		<i>Journal</i> 132 (1-3), pp. 233-239
38.	<b>Closing in on Chemical Bonds by Opening up Relativity Theory</b>	Whitney, C. K.	2008	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> 9, pp. 272-298
39.	<b>Adsorption of benzothiophene and dibenzothiophene on different metal ion-exchanged zeolites</b>	Xiao, J., Lei, X.-Y., Liu, B., Xia, Q.-B., Xi, H.-X., Li, Z.	2008	<i>Gongneng Cailiao/Journal of Functional Materials</i> 39 (8), pp. 1373-1376
40.	<b>Adsorption of benzothiophene and dibenzothiophene on ion-impregnated activated carbons and ion-exchanged Y zeolites</b>	Xiao, J., Li, Z., Liu, B., Xia, Q., Yu, M.	2008	<i>Energy and Fuels</i> 22 (6), pp. 3858-3863
41.	<b>Comparison of global reactivity descriptors calculated using various density functionals: A QSAR perspective</b>	Vijayaraj R., Subramanian V., Chattaraj P.K.	2009	<i>Journal of Chemical Theory and Computation</i> 5 (10), pp. 2744-2753
42.	<b>Desorption activation energy of benzo [a]pyrene on SY-6 activated carbons by modified different metal salt solutions</b>	Li, J., Lin, G.-Q., Li, Z., Xi, H.-X.	2010	<i>Gongneng Cailiao/Journal of Functional Materials</i> 41 (1), pp. 47-50+54
43.	<b>Evaluation of global hardness of atoms based on the commonality in the basic philosophy of the origin and the operational significance of the electronegativity and the hardness. Part I. The Gordy's scale of electronegativity and the global hardness</b>	Islam, N, Ghosh, D.C.	2010	<i>European Journal of Chemistry</i> 1 (2), pp. 83-89
44.	<b>Effects of loading different metal ions on an activated carbon on the desorption activation energy of dichloromethane/trichloromethane</b>	Xia, Q., Li, Z., Xiao, L., Zhang, Z., Xi, H.	2010	<i>Journal of Hazardous Materials</i> 179 (1-3), pp. 790-794
45.	<b>Adsorption of dibenzothiophene on Ag/Cu/Fe-supported activated carbons prepared by ultrasonic-assisted impregnation</b>	Xiao, J., Bian, G., Zhang, W., Li, Z.	2010	<i>Journal of Chemical and Engineering Data</i> 55 (12), pp. 5818-5823
46.	<b>On the electrophilic character of molecules through its relation with electronegativity and chemical hardness</b>	Nazmul Islam and Dulal C. Ghosh	2012	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 13(2), pp. 2160-2175



47.	<b>Correlating the site selectivity of protonation in some ambidentate molecules in terms of the dual descriptor</b>	Rajak, S. K.; Ghosh, D. C.	2012	<i>EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL D</i> Volume: 66 Issue: 3 Article Number: 66 DOI: 10.1140/epjd/e2012-20283-6
48.	<b>Theoretical study on the reactivity of Lewis pairs <math>PR_3/B(C_6F_5)_3</math> (R = Me, Ph, tBu, C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)</b>	Wu, Dongling; Jia, Dianzeng; Liu, Anjie; et al.	2012	<i>CHEMICAL PHYSICS LETTERS</i> Volume: 541 Pages: 1-6 DOI: 10.1016/j.cplett.2012.05.009
49.	<b>Application of Reactivity Indices Within Density Functional Theory to Rationale Chemical Interactions</b>	Chatterjee, A	2012	<i>Structure and Bonding</i> 149, pp. 159-186
50.	<b>Ab initio calculations of electronic interactions in inclusion complexes of calix- and thiacalix[n]arenes and block s cations</b>	Barroso-Flores, Joaquin; Silaghi-Dumitrescu, Ioan; Petrar, Petronela M.; et al.	2013	<i>JOURNAL OF INCLUSION PHENOMENA AND MACROCYCLIC CHEMISTRY</i> Volume: 75 Issue: 1-2 Pages: 39-46 DOI: 10.1007/s10847-012-0144-6
51.	<b>Evaluation of Absolute Hardness: A New Approach</b>	Noorizadeh, Siamak; Parsa, Hadi	2013	<i>JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A</i> Volume: 117 Issue: 5 Pages: 939-946 DOI: 10.1021/jp308137w

Citările articolului [About the Mulliken Electronegativity in DFT, PUTZ MV, RUSSO N, SICILIA E, THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS, 114(1-3) 2005] sunt:

Nr.	Titlu	Autori	Anul	Jurnalul
52.	<b>Conceptual DFT: The chemical relevance of higher response functions</b>	Geerlings P., De Proft F.	2008	<i>Physical Chemistry Chemical Physics</i> 10 (21), pp. 3028-3042
53.	<b>Evaluation of the chemical reactivity of the fluid phase through hard-soft acid-base concepts in magmatic intrusions with</b>	Vignerresse, J.L.	2009	<i>Chemical Geology</i> 263 (1-4), pp. 69-81



	<b>applications to ore generation</b>			
54.	<b>Computation of the dipole moment of some heteronuclear diatomic molecules in terms of the revised electronegativity scale of Allred and Rochow</b>	Chakraborty, T.; Ghosh, D.C.	2010	<i>European Journal of Chemistry</i> 1 (3), pp. 182-188
55.	<b>Computation of the internuclear distances of some heteronuclear diatomic molecules in terms of the revised electronegativity scale of Gordy</b>	Chakraborty, T., Ghosh, D.C.	2010	<i>European Physical Journal D</i> 59 (2), pp. 183-192
56.	<b>Computation of Some Descriptors of The Real World in Terms of A New Scale of Electronegativity. Part 1. The Dipole Moments of Some Heteronuclear Diatomic Molecules</b>	Dulal C. Ghosh, Nazmul Islam and Sandip Kumar Rajak	2010	<i>International Journal of Chemical Modeling</i> , 2 (4), pp. 361-374
57.	<b>Modeling of the Chemico-Physical Process of Protonation of Molecules Entailing Some Quantum Chemical Descriptors</b>	Sandip K. Rajak, Nazmul Islam, Dulal C. Ghosh	2011	<i>Journal of Quantum Information Science</i> , 1, pp. 87-95
58.	<b>The Electronegativity and the Global Hardness Are Periodic Properties of Atoms</b>	Nazmul Islam, Dulal C. Ghosh	2011	<i>Journal of Quantum Information Science</i> , 1, pp. 135-141
59.	<b>Reduction potentials of para-substituted nitrobenzenesuan infrared, nuclear magnetic resonance, and density functional theory study</b>	Kuhn Annemarie; von Eschwege Karel G.; Conradie Jeanet	2012	<i>Journal Of Physical Organic Chemistry</i> , 25(1), pp. 58-68
60.	<b>A spectroscopic, electrochemical and DFT</b>	Muller Theunis J.;	2012	<i>POLYHEDRON</i> , 33(1) pp. 257-266



	<b>study of para-substituted ferrocene-containing chalcone derivatives: Structure of FcCOCHCH(p-(BuC6H4)-Bu-t</b>	Conradie Jeanet; Erasmus Elizabeth		
61.	<b>On the electrophilic character of molecules through its relation with electronegativity and chemical hardness</b>	Nazmul Islam and Dulal C. Ghosh	2012	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 13(2), pp. 2160-2175
62.	<b>Electronic and Photocatalytic Properties of Ag<sub>3</sub>PC<sub>4</sub>VI (C = O, S, Se): A Systemic Hybrid DFT Study</b>	Ma, Zuju; Yi, Zhiguo; Sun, Jing; et al.	2012	<i>JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C</i> Volume: 116 Issue: 47, Pages: 25074-25080 DOI: 10.1021/jp3093447
63.	<b>Ab initio design of GaN-based photocatalyst: ZnO-codoped GaN nanotubes</b>	Lim, Yao Kun; Koh, Eugene Wai Keong; Zhang, Yong-Wei; et al.	2013	<i>JOURNAL OF POWER SOURCES</i> Volume: 232 Pages: 323-331 DOI: 10.1016/j.jpowsour.2013.01.066

Citările articolului [*Markovian Approach of the Electron Localization Functions*, PUTZ MV, INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 105: 1-11, 2005] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
64.	<b>Bonding in Mercury-Alkali Molecules: Orbital-driven van der Waals Complexes</b>	Kraka, E.; Cremer, D.	2008	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> 9, pp. 926-942
65.	<b>Electron delocalization and bond formation under the ELF framework</b>	Contreras-Garcia J.; Recio J. M.	2011	<i>Theoretical Chemistry Accounts</i> , 128 (4-6), pp. 411-418
66.	<b>Topological (ELF and rho) study of the unusually long N-O bond in (CF<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NO-NO</b>	Berski, S; Gordon, AJ	2012	<i>Chemical Physics Letters</i> , 525-526, pp. 24-31
67.	<b>The Bond Analysis Techniques (ELF and Maximum Probability Domains) Application to a Family of Models Relevant to Bio-Inorganic Chemistry</b>	Causa, M; D'Amore, M; Garzillo, C; Gentile, F; Savin, A	2013	<i>Structure and Bonding</i> 150, pp. 119-141



Citările articolului [*Systematic Formulation for Electronegativity and Hardness and Their Atomic Scales within Density Functional Softness Theory*, **PUTZ MV**, INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 106: 361-386, 2006] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
68.	<b>Closing in on Chemical Bonds by Opening up Relativity Theory</b>	Whitney, C. K.	2008	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> 9 (3), pp. 272-298
69.	<b>Semi-empirical Evaluation of the Global Hardness of the Atoms of 103 Elements of the Periodic Table Using the Most Probable Radii as their Size Descriptors.</b>	Ghosh, Dulal; Islam, Nazmul	2010	<i>International Journal of Quantum Chemistry</i> 110 (6), pp. 1206–1213
70.	<b>Evaluation of global hardness of atoms based on the commonality in the basic philosophy of the origin and the operational significance of the electronegativity and the hardness. Part I. The Gordy's scale of electronegativity and the global hardness</b>	Islam, N, Ghosh, D.C.	2010	<i>European Journal of Chemistry</i> 1 (2), pp. 83-89
71.	<b>Quantitative structure-property relationships on dissolvability of pcdd/fs using quantum chemical descriptors and partial least squares</b>	Lu, G.-N., Tao, X.-Q., Dang, Z.H.I., Huang, W., Li, Z.	2010	<i>Journal of Theoretical and Computational Chemistry</i> 9 (SUPPL. 1), pp. 9-22
72.	<b>Correlation between the electronegativity ansatz of Mulliken and Gordy</b>	Islam, N.	2010	<i>Journal of Molecular Structure: THEOCHEM</i> 947, p. 123
73.	<b>Computation of the dipole moment of some heteronuclear diatomic molecules in terms of the revised electronegativity scale of Allred and Rochow</b>	Chakraborty, T.; Ghosh, D.C.	2010	<i>European Journal of Chemistry</i> 1 (3), pp. 182-188
74.	<b>Computation of the</b>	Chakraborty,	2010	<i>European Physical Journal D</i> 59



	<b>internuclear distances of some heteronuclear diatomic molecules in terms of the revised electronegativity scale of Gordy</b>	T., Ghosh, D.C.		(2), pp. 183-192
75.	<b>Computation of Some Descriptors of The Real World in Terms of A New Scale of Electronegativity. Part 1. The Dipole Moments of Some Heteronuclear Diatomic Molecules</b>	Dulal C. Ghosh, Nazmul Islam and Sandip Kumar Rajak	2010	<i>International Journal of Chemical Modeling</i> , 2 (4), pp. 361-374
76.	<b>Should negative electron affinities be used for evaluating the chemical hardness?</b>	Cárdenas, C., Ayers, P., De Proft, F., Tozer, D.J., Geerlings, P.	2011	<i>Physical Chemistry Chemical Physics</i> 13 (6), pp. 2285-2293
77.	<b>Spectroscopic evaluation of the global hardness of the atoms</b>	Islam, Nazmul; Ghosh, Dulal C.	2011	<i>Molecular Physics</i> , 109 (12), pp. 1533-1544
78.	<b>Modeling of the Chemico-Physical Process of Protonation of Molecules Entailing Some Quantum Chemical Descriptors</b>	Sandip K. Rajak, Nazmul Islam, Dulal C. Ghosh	2011	<i>Journal of Quantum Information Science</i> , 1, pp. 87-95
79.	<b>The Electronegativity and the Global Hardness Are Periodic Properties of Atoms</b>	Nazmul Islam, Dulal C. Ghosh	2011	<i>Journal of Quantum Information Science</i> , 1, pp. 135-141
80.	<b>On the Several Molecules and Nanostructures of Water</b>	Kolb Whitney, Cynthia	2012	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 13(1), pp.1066-1094
81.	<b>On the electrophilic character of molecules through its relation with electronegativity and chemical hardness</b>	Nazmul Islam and Dulal C. Ghosh	2012	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 13(2), pp. 2160-2175
82.	<b>The Structure Lacuna</b>	Boeyens, Jan C. A.;	2012	<i>INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES Volume:</i>





		Levendis, Demetrius C.		13. Issue: 7 Pages: 9081-9096 DOI: 10.3390/ijms13079081
83.	<b>Development of ecotoxicity QSAR models based on partial charge descriptors for acrylate and related compounds</b>	Furuhama, A.; Aoki, Y.; Shiraishi, H.	2012	SAR AND QSAR IN ENVIRONMENTAL RESEARCH Volume: 23 Issue: 7 -8 Pages: 731-749 DOI: 10.1080/1062936X.2012.719542
84.	<b>Application of Reactivity Indices Within Density Functional Theory to Rationale Chemical Interactions</b>	Chatterjee, A	2012	Structure and Bonding 149, pp. 159-186

Citările articolului [Full Analytic Progress Curves of the Enzymic Reactions in Vitro, **PUTZ MV, LACRĂMĂ, A.M., OSTAFE, V.**, INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES 7: 469-484, 2006] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
85.	<b>Exact and Effective Pair-Wise Potential for Protein-Ligand Interactions Obtained from a Semiempirical Energy Partition</b>	Carvalho A.R.F., Puga A.T., Melo A.	2008	International Journal of Molecular Sciences 9, pp. 1652-1664, DOI: 10.3390/ijms9091652
86.	<b>Probability distribution of (Schwämmle and Tsallis) two-parameter entropies and the Lambert W-function</b>	Asgarani, S., Mirza, B.	2008	Physica A: Statistical Mechanics and its Applications 387 (25), pp. 6277-6283
87.	<b>Explicit reformulations of time-dependent solution for a Michaelis-Menten enzyme reaction model</b>	Goličnik, M.	2010	Analytical Biochemistry 406 (1), pp. 94-96
88.	<b>Site-specific NMR mapping and time-resolved monitoring of serine and threonine phosphorylation in reconstituted kinase reactions and mammalian cell extracts</b>	Theillet, FX; Rose, HM; Liokatis, S; Binolfi, A; Thongwichian, R; Stuiver, M; Selenko, P	2013	NATURE PROTOCOLS, 8 (7):1416-1432;

Citările articolului [Design of anti-HIV Ligands by means of minimal topological difference (MTD) method, **DUDA-SEIMAN C., DUDA-SEIMAN D., DRAGOȘ D., MEDELEANU M.**,



CAREJA V., PUTZ M.V., LACRĂMĂ A.-M., CHIRIAC A., NUȚIU R., CIUBOTARIU D. *INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES* Volume: 7 Issue: 11 Pages: 537-555 DOI:10.3390/i71110537 Published: NOV 2006] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
89.	<b>Evaluation of the 1-octanol/water partition coefficient of nucleoside analogs via free energy estimated in quantum chemical calculations</b>	Bayat, Z.; Movaffagh, J.	2010	<i>RUSSIAN JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A</i> Volume: 84 Issue: 13 Pages: 2293-2299; DOI: 10.1134/S0036024410130157
90.	<b>The Effect of Leverage and/or Influential on Structure-Activity Relationships</b>	Bolboaca, Sorana D.; Jaentschi, Lorentz	2013	<i>COMBINATORIAL CHEMISTRY &amp; HIGH THROUGHPUT SCREENING</i> Volume: 16 Issue: 4 Pages: 288-297
91.	<b>Biological Activity and Toxicity: A Conceptual DFT Approach</b>	Chakraborty, A; Pan, S; Chattaraj, PK	2013	<i>Structure and Bonding</i> 150, pp. 143-179

Citările articolului [*Semiclassical Electronegativity and Chemical Hardness*, **PUTZ MV**, *JOURNAL OF THEORETICAL AND COMPUTATIONAL CHEMISTRY* 6: 33-47, 2007] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
92.	<b>Closing in on Chemical Bonds by Opening up Relativity Theory</b>	Whitney, C. K.	2008	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> 9, pp. 272-298
93.	<b>Evaluation of global hardness of atoms based on the commonality in the basic philosophy of the origin and the operational significance of the electronegativity and the hardness. Part I. The Gordy's scale of electronegativity and the global hardness</b>	Islam, N, Ghosh, D.C.	2010	<i>European Journal of Chemistry</i> 1 (2), pp. 83-89
94.	<b>Computation of the dipole moment of some heteronuclear diatomic molecules in terms of the revised electronegativity scale of Allred and Rochow</b>	Chakraborty, T.; Ghosh, D.C.	2010	<i>European Journal of Chemistry</i> 1 (3), pp. 182-188
95.	<b>Quantitative structureproperty relationships on dissolvability of</b>	Lu, G.-N., Tao, X.-Q., Dang,	2010	<i>Journal of Theoretical and Computational Chemistry</i> 9



	<b>pcdd/fs using quantum chemical descriptors and partial least squares</b>	Z.H.I., Huang, W., Li, Z.		(SUPPL. 1), pp. 9-22
96.	<b>Computation of the internuclear distances of some heteronuclear diatomic molecules in terms of the revised electronegativity scale of Gordy</b>	Chakraborty, T., Ghosh, D.C.	2010	<i>European Physical Journal D</i> 59 (2), pp. 183-192
97.	<b>Computation of Some Descriptors of The Real World in Terms of A New Scale of Electronegativity. Part 1. The Dipole Moments of Some Heteronuclear Diatomic Molecules</b>	Dulal C. Ghosh, Nazmul Islam and Sandip Kumar Rajak	2010	<i>International Journal of Chemical Modeling</i> , 2 (4), pp. 361-374
98.	<b>Modeling of the Chemico-Physical Process of Protonation of Molecules Entailing Some Quantum Chemical Descriptors</b>	Sandip K. Rajak, Nazmul Islam, Dulal C. Ghosh	2011	<i>Journal of Quantum Information Science</i> , 1, pp. 87-95
99.	<b>The Electronegativity and the Global Hardness Are Periodic Properties of Atoms</b>	Nazmul Islam, Dulal C. Ghosh	2011	<i>Journal of Quantum Information Science</i> , 1, pp. 135-141
100.	<b>On the electrophilic character of molecules through its relation with electronegativity and chemical hardness</b>	Nazmul Islam and Dulal C. Ghosh	2012	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 13(2), pp. 2160-2175
101.	<b>The Structure Lacuna</b>	Boeyens, Jan C. A.; Levendis, Demetrius C.	2012	<i>INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES</i> Volume: 13 Issue: 7 Pages: 9081-9096 DOI: 10.3390/ijms13079081
102.	<b>Application of Reactivity Indices Within Density Functional Theory to Rationale Chemical Interactions</b>	Chatterjee, A	2012	<i>Structure and Bonding</i> 149, pp. 159-186

Citările articolului [*Enzymatic Control of the Bio-Inspired Nanomaterials at the Spectroscopic Level*, PUTZ MV, LACRĂMĂ, A.M., JOURNAL OF OPTOELECTRONICS AND ADVANCED MATERIALS 9: 2529-2534, 2007] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
------------	--------------	---------------	-------------	-----------------



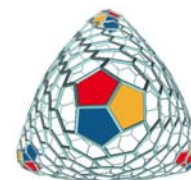
<b>103.</b>	<b>Exact and Effective Pair-Wise Potential for Protein-Ligand Interactions Obtained from a Semiempirical Energy Partition</b>	Carvalho A.R.F., Puga A.T., Melo A.	2008	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> 9, pp. 1652-1664
-------------	---	-------------------------------------	------	---

Citările articolului [*Introducing logistic enzyme kinetics*, PUTZ MV, LACRĂMĂ, A.M., OSTAFE, V., JOURNAL OF OPTOELECTRONICS AND ADVANCED MATERIALS 9: 2910-2916, 2007] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
<b>104.</b>	<b>Exact and Effective Pair-Wise Potential for Protein-Ligand Interactions Obtained from a Semiempirical Energy Partition</b>	Carvalho A.R.F., Puga A.T., Melo A.	2008	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> 9, pp. 1652-1664
<b>105.</b>	<b>Explicit reformulations of time-dependent solution for a Michaelis-Menten enzyme reaction model</b>	Goličnik, M.	2010	<i>Analytical Biochemistry</i> 406 (1), pp. 94-96

Citările articolului [*Introducing Spectral structure activity relationship (S-SAR) analysis. Application to ecotoxicology*, PUTZ MV, LACRĂMĂ, A.M., INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES 8: 363-391, 2007] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
<b>106.</b>	<b>Optofluidic ring resonator sensors for rapid DNT vapor detection</b>	Sun Y., Liu J., Frye-Mason G., Ja S.-J., Thompson A.K., Fan X.	2009	<i>Analyst</i> 134 (7), pp. 1386-1391
<b>107.</b>	<b>Topological Descriptors for Predicting Affinity of Xanthine Derivates to A<sub>2b</sub> Adenosine Receptors</b>	Teijeira M., González M.P., Saíz-Urra L., Terán C., Rivero V., López-Romero J.M.	2009	<i>International Journal of Chemical Modeling</i> 1(3-4), pp. 445-458
<b>108.</b>	<b>Classification of 5-HT<sub>1A</sub> Receptor Ligands on the Basis of Their Binding Affinities by Using PSO-Adaboost-SVM</b>	Zhengjun Cheng, Yuntao Zhang, Changhong Zhou, Wenjun Zhang, Shibo Gao	2009	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> 10(8), pp. 3316-3337
<b>109.</b>	<b>QSAR Analysis on <i>Spodoptera litura</i> Antifeedant Activities for Flavone Derivatives</b>	Duchowicz P.R., Goodarzi M., Ocsachoque M.A., Romanelli G.P.,	2009	<i>Science of the Total Environment</i> 408(2), pp. 277-285



		Ortiz E.V., Autino J.C., Bennardi D.O., Ruiz D.M., Castro E.A.		
110.	<b>Meta-heuristics on quantitative structure-activity relationships: Study on polychlorinated biphenyls</b>	Jäntschi, L., Bolboacă, S.D., Sestraș, R.E.	2010	<i>Journal of Molecular Modeling</i> 16 (2), pp. 377-386
111.	<b>QSAR Applied on Gas Chromatography Indices of Polycyclic Aromatic Compounds</b>	Duchowicz P.R., Castro E.A., Marrugo J. J. H., Viva-Reyes R.	2010	<i>International Journal of Environmental Sciences</i> 1(1), pp. 73-477
112.	<b>Study on QSTR of benzoic acid compounds with MCI</b>	Li, Z., Sun, Y., Yan, X., Meng, F.	2010	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> 11 (4), pp. 1228-1235
113.	<b>Amino acid profiles and quantitative structure-property relationships for malts and beers</b>	Pomilio, A.B., Duchowicz, P.R., Giraud, M.A., Castro, E.A.	2010	<i>Food Research International</i> 43 (4), pp. 965 - 971
114.	<b>Quantitative structureproperty relationships on dissolvability of pcdd/fs using quantum chemical descriptors and partial least squares</b>	Lu, G.-N., Tao, X.-Q., Dang, Z.H.I., Huang, W., Li, Z.	2010	<i>Journal of Theoretical and Computational Chemistry</i> 9 (SUPPL. 1), pp. 9-22
115.	<b>Replacement method and enhanced replacement method versus the genetic algorithm approach for the selection of molecular descriptors in QSPR/QSAR theories</b>	Mercader, A.G., Duchowicz, P.R., Fernández, F.M., Castro, E.A.	2010	<i>Journal of Chemical Information and Modeling</i> 50 (9), pp. 1542-1548
116.	<b>QSAR and pharmacophore modeling of 4-arylthieno [3, 2-d] pyrimidine derivatives against adenosine receptor of Parkinson's disease</b>	Ahmed, S.S.S.J., Ahameethunisa, A., Santosh, W.	2010	<i>Journal of Theoretical and Computational Chemistry</i> 9 (6), pp. 975-991



117.	<b>High-Dimensional Descriptor Selection and Computational QSAR Modeling for Antitumor Activity of ARC-111 Analogues Based on Support Vector Regression (SVR)</b>	Zhou, Wei; Dai, Zhijun; Chen, Yuan; Wang, Haiyan; Yuan, Zheming	2012	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 13 (1), pp. 1161-1172
118.	<b>Multivariate evaluation of the correlation between retention data and molecular descriptors of antiepileptic hydantoin analogs</b>	Tatjana Djaković-Sekulić, Adam Smoliński, Nemanja Trišović, Gordana Ušćumlić	2012	<i>Journal Of Chemometrics</i> , 26 (3-4), pp. 95-107
119.	<b>SMILES-based QSPR model for half-wave potentials of 1-phenyl-5-benzyl-sulfanyltetrazoles using CORAL</b>	Toropov, Andrey A.; Nesmerak, Karel	2012	<i>CHEMICAL PHYSICS LETTERS</i> Volume: 539 Pages: 204-208 DOI: 10.1016/j.cplett.2012.04.061
120.	<b>A tandem regression-outlier analysis of a ligand cellular system for key structural modifications around ligand binding</b>	Lin, Ying-Ting	2013	<i>JOURNAL OF CHEMINFORMATICS</i> Volume: 5 Article Number: 21 DOI: 10.1186/1758-2946-5-21
121.	<b>Modeling And Predicting The Glass Transition Temperature Of Vinyl Polymers By Using Hybrid Pso-Svr Method</b>	Pei, J. F.; Cai, C. Z.; Zhu, Y. M.	2013	<i>JOURNAL OF THEORETICAL &amp; COMPUTATIONAL CHEMISTRY</i> Volume: 12 Issue: 3 Article Number: 1350002 DOI: 10.1142/S0219633613500028
122.	<b>Biological Activity and Toxicity: A Conceptual DFT Approach</b>	Chakraborty, A; Pan, S; Chattaraj, PK	2013	<i>Structure and Bonding</i> 150, pp. 143-179
123.	<b>Three Dimensional Quantitative Structure-Activity Relationship of 5H-Pyrido[4,3-b]indol-4-carboxamide JAK2 Inhibitors</b>	Wu, XY; Wan, SH; Zhang, JJ	2013	<i>INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES</i> , 14 (6):12037-12053



Citările articolului [*A Spectral-SAR model for the anionic-cationic interaction in ionic liquids: Application to Vibrio fischeri ecotoxicity*, LACRĂMĂ, A.M., PUTZ MV, OSTAFE, V., INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES 8: 842-863, 2007] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
124.	<b>Analysis of relationships between structure, surface properties, and antimicrobial activity of quaternary ammonium chlorides</b>	Krysiński J., Płaczek, J., Skrzypczak A., Błaszczak J., Prędko B.	2009	<i>QSAR and Combinatorial Science</i> 28 (9), pp. 995-1002
125.	<b>QSAR Analysis on <i>Spodoptera litura</i> Antifeedant Activities for Flavone Derivatives</b>	Duchowicz P.R., Goodarzi M., Ocsachoque M.A., Romanelli G.P., Ortiz E.V., Autino J.C., Bennardi D.O., Ruiz D.M., Castro E.A.	2009	<i>Science of the Total Environment</i> 408(2). pp. 277-285
126.	<b>Topological Descriptors for Predicting Affinity of Xanthine Derivates to A<sub>2b</sub> Adenosine Receptors</b>	Teijeira M., González M.P., Saíz-Urra L., Terán C., Rivero V., López- Romero J.M.	2009	<i>International Journal of Chemical Modeling</i> 1(3-4), pp. 445-458
127.	<b>Quantitative structure-activity relationships (QSARs) to estimate ionic liquids ecotoxicity EC50 (<i>Vibrio fischeri</i>)</b>	Luis, P., Garea, A., Irabien, A.	2010	<i>Journal of Molecular Liquids</i> 152 (1-3) 28-33
128.	<b>Amino acid profiles and quantitative structure-property relationships for malts and beers</b>	Pomilio, A.B., Duchowicz, P.R., Giraudó, M.A., Castro, E.A.	2010	<i>Food Research International</i> 43 (4), pp. 965 - 971
129.	<b>QSAR Applied on Gas Chromatography Indices of Polycyclic Aromatic Compounds</b>	Duchowicz P.R., Castro E.A., Marrugo J. J. H., Viva-Reyes R.	2010	<i>International Journal of Environmental Sciences</i> 1(1), pp. 73-477
130.	<b>Evaluation and comparison of global scalar properties for the</b>	Anantharaj, R., Banerjee, T.	2010	<i>Fluid Phase Equilibria</i> 293 (1), pp. 22-31



	<b>simultaneous interaction of ionic liquids with thiophene and pyridine</b>			
131.	<b>Replacement method and enhanced replacement method versus the genetic algorithm approach for the selection of molecular descriptors in QSPR/QSAR theories</b>	Mercader, A.G., Duchowicz, P.R., Fernández, F.M., Castro, E.A.	2010	<i>Journal of Chemical Information and Modeling</i> 50 (9), pp. 1542-1548
132.	<b>Design of ionic liquids: an ecotoxicity (<i>Vibrio fischeri</i>) discrimination approach</b>	Alvarez-Guerra Manuel; Irabien Angel	2011	<i>Green Chemistry</i> , 13 (6), pp. 1507-1516
133.	<b>Development of a novel mathematical model using a group contribution method for prediction of ionic liquid toxicities</b>	Hossain M. Ismail; Samir Brahim Belhaouari; El-Harbawi Mohanad; et al.	2011	<i>Chemosphere</i> , 85 (6), pp. 990-994
134.	<b>QSAR Study and Molecular Design of Open-Chain Enaminones as Anticonvulsant Agents</b>	Garro Martinez, J.C.; Duchowicz, P.R.; Estrada, M.R.; Zamarbide, G.N.; Castro, E.A.	2011	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 12 (12), pp. 9354-9368
135.	<b>High-Dimensional Descriptor Selection and Computational QSAR Modeling for Antitumor Activity of ARC-111 Analogues Based on Support Vector Regression (SVR)</b>	Zhou, Wei; Dai, Zhijun; Chen, Yuan; Wang, Haiyan; Yuan, Zheming	2012	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 13 (1), pp. 1161-1172
136.	<b>Toxicity assessment of various ionic liquid families towards <i>Vibrio fischeri</i> marine bacteria</b>	Ventura Sonia P. M.; Marques Carolina S.; Rosatella Andreia A.; et al.	2012	<i>Ecotoxicology And Environmental Safety</i> , 76 (1), pp. 162-168
137.	<b>Multivariate evaluation of the correlation between retention data</b>	Tatjana Djaković-Sekulić, Adam	2012	<i>Journal Of Chemometrics</i> , 26 (3-4), pp. 95-107





	<b>and molecular descriptors of antiepileptic hydantoin analogs</b>	Smoliński, Nemanja Trišović, Gordana Ušćumlić		
138.	<b>Correlating the structure and composition of ionic liquids with their toxicity on <i>Vibrio fischeri</i>: A systematic study</b>	Viboud, Sylvie; Papaiconomou, Nicolas; Cortesi, Aurelien; et al.	2012	<i>JOURNAL OF HAZARDOUS MATERIALS</i> Volume: 215 ; Pages: 40-48; DOI: 10.1016/j.jhazmat.2012.02.019
139.	<b>Automated high-throughput <i>Vibrio fischeri</i> assay for (eco)toxicity screening: Application to ionic liquids</b>	Pinto, Paula C. A. G.; Costa, Susana P. F.; Lima, Jose L. F. C.; et al.	2012	<i>ECOTOXICOLOGY AND ENVIRONMENTAL SAFETY</i> Volume: 80; Pages: 97-102 DOI: 10.1016/j.ecoenv.2012.02.013
140.	<b>Predicting Toxicity of Ionic Liquids in Acetylcholinesterase Enzyme by the Quantitative Structure-Activity Relationship Method Using Topological Indexes</b>	Yan, Fangyou; Xia, Shuqian; Wang, Qiang; et al.	2012	<i>JOURNAL OF CHEMICAL AND ENGINEERING DATA</i> Volume: 57 Issue: 8 Pages: 2252-2257 DOI: 10.1021/je3002046
141.	<b>QSAR Applications During Last Decade on Inhibitors of Acetylcholinesterase in Alzheimer's Disease</b>	Wong, K. Y.; Duchowicz, P. R.; Mercader, A. G.; et al.	2012	<i>MINI-REVIEWS IN MEDICINAL CHEMISTRY</i> Volume: 12 Issue: 10 Pages: 936-946
142.	<b>A tandem regression-outlier analysis of a ligand cellular system for key structural modifications around ligand binding</b>	Lin, Ying-Ting	2013	<i>JOURNAL OF CHEMINFORMATICS</i> Volume: 5 Article Number: 21 DOI: 10.1186/1758-2946-5-21
143.	<b>Biological Activity and Toxicity: A Conceptual DFT Approach</b>	Chakraborty, A; Pan, S; Chattaraj, PK	2013	<i>Structure and Bonding</i> 150, pp. 143-179
144.	<b>Three Dimensional Quantitative Structure-Activity Relationship of 5H-Pyrido[4,3-b]indol-4-carboxamide JAK2</b>	Wu, XY; Wan, SH; Zhang, JJ	2013	<i>INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES</i> , 14 (6):12037-12053



<b>Inhibitors</b>
-------------------

Citările articolului [*Spectral SAR Ecotoxicology of Ionic Liquids: The Daphnia magna Case*, PUTZ MV, LACRAMĂ, A.M., OSTAFE, V., RESEARCH LETTERS IN ECOLOGY VOL. 2007, ARTICLE ID: 12813, 5 PAGES, DOI:10.1155/2007/12813] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
145.	<b>Topological Descriptors for Predicting Affinity of Xanthine Derivates to A<sub>2b</sub> Adenosine Receptors</b>	Teijeira M., González M.P., Saíz-Urra L., Terán C., Rivero V., López-Romero J.M.	2009	<i>International Journal of Chemical Modeling</i> 1(3-4), pp. 445-458
146.	<b>QSAR Applied on Gas Chromatography Indices of Polycyclic Aromatic Compounds</b>	Duchowicz P.R, Castro E.A., Marrugo J. J. H., Viva-Reyes R.	2010	<i>International Journal of Environmental Sciences</i> 1(1), pp. 73-477

Citările articolului [*QSAR modelling of anti-HIV activity with hept derivatives*, SEIMAN C.D., SEIMAN D.D., PUTZ M.V., CIUBOTARIU D., DIGEST. J. NANOMAT. BIOSTRUCT, 2, PP. 207-219, 2007] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
147.	<b>QSAR study of PETT derivatives as potent HIV-1 reverse transcriptase inhibitors</b>	Sabet, R., Fassihi, A., Moeinifard, B.	2009	<i>Journal of Molecular Graphics and Modelling</i> 28 (2), pp. 146-155
148.	<b>Machine learning based QSAR for discovering potential drug candidate from endemic plants of Sri Lanka- case study: HIV-1 RT</b>	Lokuge, S., Hewavitarne, H., Wimalaratne, P., Ranawana, R.	2010	<i>Proceedings - 2nd Vaagdevi International Conference on Information Technology for Real World Problems, VCON 2010</i> , art. no. 5692989, pp. 12-17
149.	<b>Evaluation of the 1-octanol/water partition coefficient of nucleoside analogs via free energy estimated in quantum chemical calculations</b>	Bayat, Z.; Movaffagh, J.	2010	<i>RUSSIAN JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A</i> Volume: 84 Issue: 13 Pages: 2293-2299 DOI: 10.1134/S0036024410130157
150.	<b>4D-QSAR study of HEPT derivatives by electron conformational genetic algorithm method</b>	Akyuz, L.; Sarpinar, E.; Kaya, E.; et al.	2012	<i>SAR AND QSAR IN ENVIRONMENTAL RESEARCH</i> Volume: 23 Issue: 5-6 Pages: 409-433 DOI: 10.1080/1062936X.2012.665082
151.	<b>QSAR modeling of thymine based derivatives</b>	Tripathi, Uttam K.;	2012	<i>JOURNAL OF THE INDIAN CHEMICAL SOCIETY</i>



	<b>of HEPT series for anti-HIV compounds against HIV-1</b>	Pandey, Indra P.; Barelia, Laxmi; et al.		<i>Volume: 89 Issue: 2 Pages: 239-246</i>
152.	<b>A quantitative structure-activity relationships study for the anti-HIV -1 activities of 1-[(2-hydroxyethoxy)methyl]-6-(phenylthio)thymine derivatives using the multiple linear regression and partial least squares methodologies</b>	Ivan, Daniela; Crisan, Luminita; Funar-Timofei, Simona; et al.	2013	<i>JOURNAL OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY Volume: 78 Issue: 4 Pages: 495-506 DOI: 10.2298/JSC120713085I</i>
153.	<b>Biological Activity and Toxicity: A Conceptual DFT Approach</b>	Chakraborty, A; Pan, S; Chattaraj, PK	2013	<i>Structure and Bonding 150, pp. 143-179</i>

Citările articolului [*Spectral-SAR: Old Wine in New Bottle*, PUTZ MV, PUTZ (LACRĂMĂ) A.M., STUDIA UNIVERSITATIS BABEȘ-BOLYAI - SERIA CHIMIA 53 (2): 73-81, 2008] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
154.	<b>Topological Descriptors for Predicting Affinity of Xanthine Derivates to A<sub>2b</sub> Adenosine Receptors</b>	Teijeira M., González M.P., Saíz-Urra L., Terán C., Rivero V., López-Romero J.M.	2009	<i>International Journal of Chemical Modeling</i> 1(3-4), pp. 445-458
155.	<b>QSAR Applied on Gas Chromatography Indices of Polycyclic Aromatic Compounds</b>	Duchowicz P.R, Castro E.A., Marrugo J. J. H., Viva-Reyes R.	2010	<i>International Journal of Environmental Sciences</i> 1(1), pp. 73-477

Citările articolului [*Turning SPECTRAL-SAR into 3D-QSAR Analysis. Application on H+K+-ATPase Inhibitory Activity*, PUTZ MV, DUDA-SEIMAN C., DUDA-SEIMAN D.M., PUTZ A.M., INTERNATIONAL JOURNAL OF CHEMICAL MODELING 1 (1): 45-62, 2008] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
156.	<b>Topological Descriptors for Predicting Affinity of Xanthine Derivates to A<sub>2b</sub> Adenosine Receptors</b>	Teijeira M., González M.P., Saíz-Urra L., Terán C., Rivero V., López-Romero J.M.	2009	<i>International Journal of Chemical Modeling</i> 1(3-4), pp. 445-458
157.	<b>QSAR Applied on Gas Chromatography Indices of Polycyclic Aromatic Compounds</b>	Duchowicz P.R, Castro E.A., Marrugo J. J. H., Viva-Reyes R.	2010	<i>International Journal of Environmental Sciences</i>



1(1), pp. 73-477

Citările articolului [*Density functionals of chemical bonding*, **PUTZ MV**, INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES 9 (6): 1050-1095, 2008] sunt:

Nr.	Titlu	Autori	Anul	Jurnalul
158.	<b>Dechlorination pathways of diverse chlorinated aromatic pollutants conducted by Dehalococcoides sp. strain CBDB1</b>	Lu, G.-N., Tao, X.-Q., Huang, W., Dang, Z., Li, Z., Liu, C.-Q.	2010	<i>Science of the Total Environment</i> 408 (12) pp. 2549 - 2554
159.	<b>Modeling of the Chemico-Physical Process of Protonation of Molecules Entailing Some Quantum Chemical Descriptors</b>	Sandip K. Rajak, Nazmul Islam, Dulal C. Ghosh	2011	<i>Journal of Quantum Information Science</i> , 1, pp. 87-95
160.	<b>Topological (ELF and rho) study of the unusually long N-O bond in (CF<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NO-NO</b>	Berski Slawomir; Gordon Agnieszka J.	2012	<i>Chemical Physics Letters</i> , 525-26, pp. 24-31
161.	<b>Two-Center Two-Electron Covalent Bonds with Deficient Bonding Densities</b>	Yang, Yang	2012	<i>JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A</i> Volume: 116 Issue: 41 Pages: 10150-10159 DOI: 10.1021/jp304420c

Citările articolului [*Maximum hardness index of quantum acid-base bonding*, **PUTZ MV**, MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 60(3): 845-868, 2008] sunt:

Nr.	Titlu	Autori	Anul	Jurnalul
162.	<b>Dechlorination pathways of diverse chlorinated aromatic pollutants conducted by Dehalococcoides sp. strain CBDB1</b>	Lu, G.-N., Tao, X.-Q., Huang, W., Dang, Z., Li, Z., Liu, C.-Q.	2010	<i>Science of the Total Environment</i> 408 (12) pp. 2549 - 2554
163.	<b>Evaluation of global hardness of atoms based on the commonality in the basic philosophy of the origin and the operational significance of the electronegativity and the hardness. Part I. The Gordy's scale of</b>	Islam, N, Ghosh, D.C.	2010	<i>European Journal of Chemistry</i> 1 (2), pp. 83-89



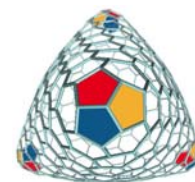
	<b>electronegativity and the global hardness</b>			
164.	<b>Should negative electron affinities be used for evaluating the chemical hardness?</b>	Cárdenas, C., Ayers, P., De Proft, F., Tozer, D.J., Geerlings, P.	2011	<i>Physical Chemistry Chemical Physics</i> 13 (6), pp. 2285-2293
165.	<b>Correlating the site selectivity of protonation in some ambidentate molecules in terms of the dual descriptor</b>	Rajak, S. K.; Ghosh, D. C.	2012	<i>EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL D</i> Volume: 66 Issue: 3 Article Number: 66 DOI: 10.1140/epjd/e2012-20283-6
166.	<b>Theoretical study on the reactivity of Lewis pairs PR<sub>3</sub>/B(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>3</sub> (R = Me, Ph, tBu, C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)</b>	Wu, Dongling; Jia, Dianzeng; Liu, Anjie; et al.	2012	<i>CHEMICAL PHYSICS LETTERS</i> Volume: 541 Pages: 1-6 DOI: 10.1016/j.cplett.2012.05.009
167.	<b>Prediction of Dechlorination Pathways of Diverse Chlorinated Aromatic Pollutants Conducted by Dehalococcoides ethenogenes Strain 195</b>	Xing, Yu; Zhang, Fang-Li; Tao, Xue-Qin; et al.	2012	<i>ASIAN JOURNAL OF CHEMISTRY</i> Volume: 24 Issue: 11 Pages: 4863-4867
168.	<b>Application of Reactivity Indices Within Density Functional Theory to Rationale Chemical Interactions</b>	Chatterjee, A	2012	<i>Structure and Bonding</i> 149, pp. 159-186
169.	<b>Ab initio calculations of electronic interactions in inclusion complexes of calix- and thiacalix[n]arenes and block s cations</b>	Barroso-Flores, Joaquin; Silaghi-Dumitrescu, Ioan; Petrar, Petronela M.; et al.	2013	<i>JOURNAL OF INCLUSION PHENOMENA AND MACROCYCLIC CHEMISTRY</i> Volume: 75 Issue: 1-2 Pages: 39-46 DOI: 10.1007/s10847-012-0144-6

Citările cărții [*Absolute and Chemical Electronegativity and Hardness*, PUTZ MV, NOVA PUBLISHERS INC., New York, USA (2008, 2009), pag. 95; ISBN (e-book): 978-1-60741-207-6; ISBN (printed edition): 978-1-60456-937-7] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
170.	<b>Evaluation of global hardness of atoms</b>	Islam, N,	2010	<i>European Journal</i>



	<b>based on the commonality in the basic philosophy of the origin and the operational significance of the electronegativity and the hardness. Part I. The Gordy's scale of electronegativity and the global hardness</b>	Ghosh, D.C.		<i>of Chemistry</i> 1 (2), pp. 83-89
171.	<b>Dechlorination pathways of diverse chlorinated aromatic pollutants conducted by Dehalococcoides sp. strain CBDB1</b>	Lu, G.-N., Tao, X.-Q., Huang, W., Dang, Z., Li, Z., Liu, C.-Q.	2010	<i>Science of the Total Environment</i> 408 (12) pp. 2549 - 2554
172.	<b>Nitrogen-electronegativity-induced bowing character in ternary zincblende Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>N alloys</b>	Tit, N.	2010	<i>Journal of Alloys and Compounds</i> 503 (2), pp. 529-537
173.	<b>Whether electronegativity and hardness are manifest two different descriptors of the one and the same fundamental property of atoms-A quest</b>	Dulal C. Ghosh, Nazmul Islam	2011	<i>International Journal of Quantum Chemistry</i> 111 (1), pp. 40-51
174.	<b>Whether there is a hardness equalization principle analogous to the electronegativity equalization principle-A quest</b>	Ghosh, D.C., Islam, N.	2011	<i>International Journal of Quantum Chemistry</i> , 111(9), pp. 1961-1969
175.	<b>A new algorithm for the evaluation of the global hardness of polyatomic molecules</b>	Islam, N., Chandra Ghosh, D.	2011	<i>Molecular Physics</i> , 109 (6), pp. 917-931
176.	<b>A new algorithm for the evaluation of equilibrium inter nuclear bond distance of heteronuclear diatomic molecules based on the hardness equalization principle</b>	Islam, N., Ghosh, D.C.	2011	<i>European Physical Journal D</i> , 61(2), pp. 341-348
177.	<b>Determination of Some Descriptors of the Real World Working on the Fundamental Identity of the Basic Concept and the Origin of the Electronegativity and the Global Hardness of Atoms, Part 1: Evaluation of Internuclear Bond Distance of Some Heteronuclear Diatomics</b>	Dulal C. Ghosh, Nazmul Islam	2011	<i>International Journal of Quantum Chemistry</i> 111 (9), pp. 1942-1949
178.	<b>Charge Transfer Associated With the Physical Process of Hardness Equalization and the Chemical Event of the Molecule Formation and the</b>	Dulal C. Ghosh, Nazmul Islam	2011	<i>International Journal of Quantum Chemistry</i> , 111



	<b>Dipole Moments</b>			(12), pp. 2811-2819
<b>179.</b>	<b>A New Radial Dependent Electrostatic Algorithm for the Evaluation of the Electrophilicity Indices of the Atoms</b>	Islam Nazmul; Ghosh Dulal C.	2011	<i>International Journal of Quantum Chemistry</i> , 111 (14), pp. 3556-3564

Citările articolului [*Path Integrals for Electronic Densities, Reactivity Indices, and Localization Functions in Quantum Systems*, **PUTZ MV**, INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES 10(11) (2009) 4816-4940] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
<b>180.</b>	<b>The Bond Analysis Techniques (ELF and Maximum Probability Domains) Application to a Family of Models Relevant to Bio-Inorganic Chemistry</b>	Causa, M; D'Amore, M; Garzillo, C; Gentile, F; Savin, A	2013	<i>Structure and Bonding</i> 150, pp. 119-141

Citările articolului [*Electronegativity: Quantum Observable*, **PUTZ MV**, INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 109: 733-738, 2009] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
<b>181.</b>	<b>The electronegativity scale of Allred and Rochow: Revisited</b>	Ghosh D.C., Chakraborty T., Mandal B.	2009	<i>Theoretical Chemistry Accounts</i> 124 (3-4), pp. 295-301
<b>182.</b>	<b>Computation of the internuclear distances of some heteronuclear diatomic molecules in terms of the revised electronegativity scale of Gordy</b>	Chakraborty, T., Ghosh, D.C.	2010	<i>European Physical Journal D</i> 59 (2), pp. 183-192
<b>183.</b>	<b>Evaluation of global hardness of atoms based on the commonality in the basic philosophy of the origin and the operational significance of the electronegativity and the hardness. Part I. The Gordy's scale of electronegativity and the global hardness</b>	Islam, N, Ghosh, D.C.	2010	<i>European Journal of Chemistry</i> 1 (2), pp. 83-89
<b>184.</b>	<b>Computation of the dipole moment of some heteronuclear</b>	Chakraborty, T.; Ghosh,	2010	<i>European Journal of Chemistry</i>



	<b>diatomic molecules in terms of the revised electronegativity scale of Allred and Rochow</b>	D.C.		1 (3), pp. 182-188
185.	<b>Computation of the atomic radii through the conjoint action of the effective nuclear charge and the ionization energy</b>	Chakraborty, T., Gazi, K., Ghosh, D.C.	2010	<i>Molecular Physics</i> 108 (16), pp. 2081-2092
186.	<b>Spectroscopic evaluation of the global hardness of the atoms</b>	Islam Nazmul; Ghosh Dulal C.	2011	<i>Molecular Physics</i> 109 (12), pp. 1533-1544
187.	<b>Determination of Some Descriptors of the Real World Working on the Fundamental Identity of the Basic Concept and the Origin of the Electronegativity and the Global Hardness of Atoms, Part 1: Evaluation of Internuclear Bond Distance of Some Heteronuclear Diatomics</b>	Dulal C. Ghosh, Nazmul Islam	2011	<i>International Journal of Quantum Chemistry</i> 111 (9), pp. 1942-1949
188.	<b>Derivation of Gordy's scale and computation of some useful descriptors of chemical reactivity</b>	Nazmul Islam	2011	<i>European Journal of Chemistry</i> 2 (4), pp. 448-454
189.	<b>Modeling of the Chemicophysical Process of Protonation of Molecules Entailing Some Quantum Chemical Descriptors</b>	Sandip K. Rajak, Nazmul Islam, Dulal C. Ghosh	2011	<i>Journal of Quantum Information Science</i> , 1, pp. 87-95
190.	<b>The Electronegativity and the Global Hardness Are Periodic Properties of Atoms</b>	Nazmul Islam, Dulal C. Ghosh	2011	<i>Journal of Quantum Information Science</i> , 1, pp. 135-141
191.	<b>On the electrophilic character of molecules through its relation with electronegativity and chemical hardness</b>	Nazmul Islam and Dulal C. Ghosh	2012	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 13(2), pp. 2160-2175
192.	<b>The Structure Lacuna</b>	Boeyens, Jan C. A.; Levendis, Demetrius C.	2012	<i>INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES</i> Volume: 13. Issue: 7 Pages: 9081-9096 DOI: 10.3390/ijms13079081
193.	<b>Application of Reactivity</b>	Chatterjee, A	2012	<i>Structure and Bonding</i>





	<b>Indices Within Density Functional Theory to Rationale Chemical Interactions</b>			149, pp. 159-186
--	--	--	--	------------------

Citările articolului [*Quantum-SAR Extension of the Spectral-SAR Algorithm. Application to Polyphenolic Anticancer Bioactivity*, **PUTZ MV**, **PUTZ AM**, **LAZEA M**, IENCIU L, CHIRIAC A, INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES 10(3): 1193-1214, 2009] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
194.	<b>Classification of 5-HT<sub>1A</sub> Receptor Ligands on the Basis of Their Binding Affinities by Using PSO-Adaboost-SVM</b>	Zhengjun Cheng, Yuntao Zhang, Changhong Zhou, Wenjun Zhang, Shibo Gao	2009	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> 10(8), pp. 3316-3337
195.	<b>QSAR Analysis on <i>Spodoptera litura</i> Antifeedant Activities for Flavone Derivatives</b>	Duchowicz P.R., Goodarzi M., Ocsachoque M.A., Romanelli G.P., Ortiz E.V., Autino J.C., Bennardi D.O., Ruiz D.M., Castro E.A.	2009	<i>Science of the Total Environment</i> 408(2). pp. 277-285
196.	<b>Amino acid profiles and quantitative structure-property relationships for malts and beers</b>	Pomilio, A.B., Duchowicz, P.R., Giraud, M.A., Castro, E.A.	2010	<i>Food Research International</i> 43 (4), pp. 965 - 971
197.	<b>Study on QSTR of benzoic acid compounds with MCI</b>	Li, Z, Sun, Y., Yan, X., Meng, F.	2010	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> 11 (4), pp. 1228-1235
198.	<b>Quantitative structureproperty relationships on dissolvability of pcdd/fs using quantum chemical descriptors and partial least squares</b>	Lu, G.-N., Tao, X.-Q., Dang, Z.H.I., Huang, W., Li, Z.	2010	<i>Journal of Theoretical and Computational Chemistry</i> 9 (SUPPL. 1), pp. 9-22
199.	<b>Replacement method and enhanced replacement method versus the genetic algorithm approach for the selection of molecular descriptors in QSPR/QSAR theories</b>	Mercader, A.G., Duchowicz, P.R., Fernández, F.M., Castro, E.A.	2010	<i>Journal of Chemical Information and Modeling</i> 50 (9), pp. 1542-1548



200.	<b>QSAR and pharmacophore modeling of 4-arylthieno [3, 2-d] pyrimidine derivatives against adenosine receptor of Parkinson's disease</b>	Ahmed, S.S.S.J., Ahameethunisa, A., Santosh, W.	2010	<i>Journal of Theoretical and Computational Chemistry</i> 9 (6), pp. 975-991
201.	<b>Quantitative Structure and Activity Relationship modeling Study of Corrosion Inhibitors: Genetic Function Approximation and Molecular Dynamics Simulation Methods</b>	Khaled, K. F.; Abdel-Shafi, N. S.	2011	<i>INTERNATIONAL JOURNAL OF ELECTROCHEMICAL SCIENCE</i> Volume: 6 Issue: 9 Pages: 4077-4094
202.	<b>High-Dimensional Descriptor Selection and Computational QSAR Modeling for Antitumor Activity of ARC-111 Analogues Based on Support Vector Regression (SVR)</b>	Zhou, Wei; Dai, Zhijun; Chen, Yuan; Wang, Haiyan; Yuan, Zheming	2012	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 13 (1), pp. 1161-1172
203.	<b>Multivariate evaluation of the correlation between retention data and molecular descriptors of antiepileptic hydantoin analogs</b>	Tatjana Djaković-Sekulić, Adam Smoliński, Nemanja Trišović, Gordana Ušćumlić	2012	<i>Journal Of Chemometrics</i> , 26 (3-4), pp. 95-107
204.	<b>Correlating metal ionic characteristics with biological activity using QSAR model. Electronic properties</b>	Zoltan Saitos, Marius Lazea, Adrian Chiriac	2012	<i>Sudia UBB Chemia</i> , LVII, 3, 2012 (p. 191 – 198)
205.	<b>QSAR Applications During Last Decade on Inhibitors of Acetylcholinesterase in Alzheimer's Disease</b>	Wong, K. Y.; Duchowicz, P. R.; Mercader, A. G.; et al.	2012	<i>MINI-REVIEWS IN MEDICINAL CHEMISTRY</i> Volume: 12 Issue: 10 Pages: 936-946
206.	<b>A Predictive Model for Corrosion Inhibition of Mild Steel by Thiophene and Its Derivatives Using Artificial Neural Network</b>	Khaled, K. F.; Al-Mobarak, N. A.	2012	<i>INTERNATIONAL JOURNAL OF ELECTROCHEMICAL SCIENCE</i> Volume: 7 Issue: 2 Pages: 1045-1059
207.	<b>Biological Activity and Toxicity: A Conceptual DFT Approach</b>	Chakraborty, A; Pan, S; Chattaraj, PK	2013	<i>Structure and Bonding</i> 150, pp. 143-179
208.	<b>Using Molecular Dynamics Simulations and Genetic</b>	Khaled, K. F.; El-Sherik, A. M.	2013	<i>INTERNATIONAL JOURNAL OF</i>



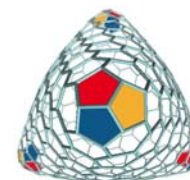
	<b>Function Approximation to Model Corrosion Inhibition of Iron in Chloride Solutions</b>			<i>ELECTROCHEMICAL SCIENCE</i> , 8 (7):10022-10043
--	---	--	--	--

Citările articolului [*"Spectral vs. Statistic Approach of Structure-Activity Relationship. Application on Ecotoxicity of Aliphatic Amines"*], **PUTZ M.V.**, **PUTZ A.M.**, **LAZEA M.**, **CHIRIAC A.**, J THEOR COMPUT CHEM 8(6) (2009) 1235-1251;] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
209.	<b>Correlating metal ionic characteristics with biological activity using QSAR model. Electronic properties</b>	Zoltan Saitos, Marius Lazea, Adrian Chiriac	2012	<i>Sudia UBB Chemia</i> , LVII, 3, 2012 (p. 191 – 198)
210.	<b>QSAR Studies of Some Metal Ions Toxicity</b>	Lazea, M; Saitos, Z; Chiriac, A	2013	<i>JOURNAL OF ENVIRONMENTAL PROTECTION AND ECOLOGY</i> , 14 (2):699-706

Citările articolului [*Effect Of The Polysaccharide Extract From The Edible Mushroom Pleurotus Ostreatus Against Infectious Bursal Disease Virus*], SELEGEAN, M., **PUTZ, M.V.**, RUGEAN, T., INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES, 10(8): 3616 – 3634, 2009] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
211.	<b>Effect Of Environmental Factors on The Yield Of Selected Mushroom Species Growing in Two Different Agro Ecological Zones of Pakistan</b>	Sher, H., Al-Yemeni, M., Bahkali, A.H.A., Sher, H.	2010	<i>Saudi Journal of Biological Sciences</i> , volume 17, issue 4, pp. 321 - 326
212.	<b>Cultivation of the oyster mushroom (pleurotus ostreatus (jacq.) p. kumm.) in two different agroecological zones of Pakistan</b>	Sher, H., Al-Yemeni, M., Khan, K.	2011	<i>African Journal of Biotechnology</i> 10 (2), pp. 183-188
213.	<b>: Isolation of a polysaccharide with antiproliferative, hypoglycemic, antioxidant and HIV-1 reverse transcriptase inhibitory activities from</b>	Wang, Chang Rong; Tzi Bun Ng; Li, Le; et al.	2011	<i>JOURNAL OF PHARMACY AND PHARMACOLOGY</i> Volume: 63 Issue: 6 Pages: 825-832 DOI: 10.1111/j.2042-7158.2011.01274.x



	<b>the fruiting bodies of the abalone mushroom <i>Pleurotus abalonus</i></b>			
214.	<b>Fungi-Derived Beta-Glucans As A Component Of Functional Food</b>	Sobieralski, Krzysztof; Siwulski, Marek; Lisiecka, Jolanta; et al.	2012	<i>ACTA SCIENTIARUM POLONORUM-HORTORUM CULTUS</i> Volume: 11 Issue: 4 Pages: 111-128
215.	<b>Dietary methionine and n-6/n-3 polyunsaturated fatty acid ratio reduce adverse effects of infectious bursal disease in broilers</b>	Maroufyan, E.; Kasim, A.; Ebrahimi, M.; et al.	2012	<i>POULTRY SCIENCE</i> Volume: 91 Issue: 9 Pages: 2173-2182 DOI: 10.3382/ps.2012-02317
216.	<b>Genetic Diversity of the Edible Mushroom <i>Pleurotus</i> sp by Amplified Fragment Length Polymorphism</b>	Pawlik, Anna; Janusz, Grzegorz; Koszerny, Joanna; et al.	2012	<i>CURRENT MICROBIOLOGY</i> Volume: 65 Issue: 4 Pages: 438-445 DOI: 10.1007/s00284-012-0175-7
217.	<b>A polysaccharide from <i>Armillaria mellea</i> exhibits strong in vitro anticancer activity via apoptosis-involved mechanisms</b>	Wu, Jun; Zhou, Jinxu; Lang, Yaoguo; et al.	2012	<i>INTERNATIONAL JOURNAL OF BIOLOGICAL MACROMOLECULES</i> Volume: 51 Issue: 4 Pages: 663-667 DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2012.06.040
218.	<b>Theoretical Model for the Prediction of the Stability of Co<sup>2+</sup>, Ni<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup>, and Cd<sup>2+</sup> mono-complexes with monocarboxylic acids based on (3)chi(nu) connectivity index</b>	Milicevic, Ante; Raos, Nenad	2013	<i>ACTA CHIMICA SLOVENICA</i> Volume: 60 Issue: 1 Pages: 120-123
219.	<b>Antioxidant properties of polysaccharides obtained by batch cultivation of <i>Pleurotus ostreatus</i> mycelium</b>	Vamanu, E	2013	<i>NATURAL PRODUCT RESEARCH</i> , 27 (12):1115-1118; DOI: 10.1080/14786419.2012.704376

Citările articolului [*QSAR Study on The Anaesthetic Activity of Some Barbiturates and Thiobarbiturates*, VULPEȘ D., PUTZ M.V., CHIRIAC A., REVUE ROUMAINE DE CHIMIE, 54(8): 723-732, 2009] sunt:



<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
220.	<b>Electronic structure and biological activity: Barbiturates vs. thiobarbiturates</b>	Novak, I., Kovač, B.	2010	Chemical Physics Letters volume 493, issue (4-6), pp. 242 - 244

Citările articolului [*Chemical action and chemical bonding*, **PUTZ M.V.**, JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM (2009) Volume: 900 Issue: 1-3 Pages: 64-70 DOI:10.1016/j.theochem.2008.12.026] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
221.	<b>On the electrophilic character of molecules through its relation with electronegativity and chemical hardness</b>	Nazmul Islam and Dulal C. Ghosh	2012	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 13(2), pp. 2160-2175
222.	<b>The Structure Lacuna</b>	Boeyens, Jan C. A.; Levendis, Demetrius C.	2012	<i>INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES</i> Volume: 13 Issue: 7 Pages: 9081-9096 DOI: 10.3390/ijms13079081

Citările articolului [*Köln-Timișoara Molecular Activity Combined Models toward Interspecies Toxicity Assessment*, CHICU SA, **PUTZ MV**, INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES 10(10): 4474-4497, 2009] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
223.	<b>Amino Acid Profiles and Quantitative Structure Property Relationships for Malt and Beers</b>	Pomilio, A.B., Duchowicz, P.R., Giraud, M.A., Castro, E.A.	2010	<i>Food Research International</i> 43 (4), pp. 965-971
224.	<b>QSAR and pharmacophore modeling of 4-arylthieno [3, 2-d] pyrimidine derivatives against adenosine receptor of Parkinson's disease</b>	Ahmed, S.S.S.J., Ahameethunisa, A., Santosh, W.	2010	<i>Journal of Theoretical and Computational Chemistry</i> 9 (6), pp. 975-991
225.	<b>Replacement method and enhanced replacement method versus the genetic algorithm approach for the selection of molecular descriptors in QSPR/QSAR theories</b>	Mercader, A.G., Duchowicz, P.R., Fernández, F.M., Castro, E.A.	2010	<i>Journal of Chemical Information and Modeling</i> 50 (9), pp. 1542-1548



226.	<b>Hydractinia echinata test system. II. SAR toxicity study of some anilide derivatives of Naphthol-AS type</b>	Chicu, S.A., Funar-Timofei, S., Simu, G.-M.	2011	<i>Chemosphere</i> volume 82, issue 11, year 2011, pp. 1578 - 1582
227.	<b>QSAR Study and Molecular Design of Open-Chain Enaminones as Anticonvulsant Agents</b>	Garro Martinez Juan C.; Duchowicz Pablo R.; Estrada Mario R.; et al.	2011	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 12(12), pp. 9354-9368
228.	<b>High-Dimensional Descriptor Selection and Computational QSAR Modeling for Antitumor Activity of ARC-111 Analogues Based on Support Vector Regression (SVR)</b>	Zhou, Wei; Dai, Zhijun; Chen, Yuan; Wang, Haiyan; Yuan, Zheming	2012	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 13 (1), pp. 1161-1172
229.	<b>Multivariate evaluation of the correlation between retention data and molecular descriptors of antiepileptic hydantoin analogs</b>	Tatjana Djaković- Sekulić, Adam Smoliński, Nemanja Trišović, Gordana Ušćumlić	2012	<i>Journal Of Chemometrics</i> , 26 (3-4), pp. 95-107
230.	<b>SMILES-based QSPR model for half-wave potentials of 1-phenyl-5-benzyl-sulfanyltetrazoles using CORAL</b>	Toropov, Andrey A.; Nesmerak, Karel	2012	<i>CHEMICAL PHYSICS LETTERS</i> Volume: 539 Pages: 204-208 DOI: 10.1016/j.cplett.2012.04.061
231.	<b>QSAR Applications During Last Decade on Inhibitors of Acetylcholinesterase in Alzheimer's Disease</b>	Wong, K. Y.; Duchowicz, P. R.; Mercader, A. G.; et al.	2012	<i>MINI-REVIEWS IN MEDICINAL CHEMISTRY</i> Volume: 12 Issue: 10 Pages: 936-946
232.	<b>The Effect of Leverage and/or Influential on Structure-Activity Relationships</b>	Bolboaca, Sorana D.; Jaentschi, Lorentz	2013	<i>COMBINATORIAL CHEMISTRY &amp; HIGH THROUGHPUT SCREENING</i> Volume: 16 Issue: 4 Pages: 288-297
233.	<b>Biological Activity and Toxicity: A Conceptual DFT Approach</b>	Chakraborty, A; Pan, S; Chattaraj, PK	2013	<i>Structure and Bonding</i> 150, pp. 143-179



Citările articolului ["*Chemical Action and Chemical Bonding*", PUTZ M.V. J MOLEC STRUCT: THEOCHEM, 900 (1-3) (2009) 64-70] sunt:

Nr.	Titlu	Autori	Anul	Jurnalul
234.	<b>Modeling of the Chemico-Physical Process of Protonation of Molecules Entailing Some Quantum Chemical Descriptors</b>	Sandip K. Rajak, Nazmul Islam, Dulal C. Ghosh	2011	<i>Journal of Quantum Information Science</i> , 1, pp. 87-95
235.	<b>The Electronegativity and the Global Hardness Are Periodic Properties of Atoms</b>	Nazmul Islam, Dulal C. Ghosh	2011	<i>Journal of Quantum Information Science</i> , 1, pp. 135-141

Citările articolului [*On Electronegativity and Chemical Hardness Relationships with Aromaticity*, TARKO L, PUTZ MV, JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY 47(1): 487-495, 2010] sunt:

Nr.	Titlu	Autori	Anul	Jurnalul/Publisher
236.	<b>Contributions from orbital-orbital interactions to nucleus-independent chemical shifts and their relation with aromaticity or antiaromaticity of conjugated molecules</b>	Pérez-Juste, I., Mandado, M., Carballeira, L.	2010	<i>Chemical Physics Letters</i> 491 (4-6), pp. 224-229
237.	<b>Chemical applications of neural networks: aromaticity of pyrimidine derivatives</b>	Alonso Mercedes; Miranda Carlos; Martin Nazario; et al.	2011	<i>Physical Chemistry Chemical Physics</i> , 13(46), pp. 20564-20574
238.	<b>Modeling of the Chemico-Physical Process of Protonation of Molecules Entailing Some Quantum Chemical Descriptors</b>	Sandip K. Rajak, Nazmul Islam, Dulal C. Ghosh	2011	<i>Journal of Quantum Information Science</i> , 1, pp. 87-95
239.	<b>The Electronegativity and the Global Hardness Are Periodic Properties of Atoms</b>	Nazmul Islam, Dulal C. Ghosh	2011	<i>Journal of Quantum Information Science</i> , 1, pp. 135-141
240.	<b>On the electrophilic character of molecules through its relation with electronegativity and chemical hardness</b>	Nazmul Islam and Dulal C. Ghosh	2012	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 13(2), pp. 2160-2175
241.	<b>Theoretical Model for the Prediction of the Stability of Co<sup>2+</sup>, Ni<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup>, and Cd<sup>2+</sup> mono-complexes with</b>	Milicevic, Ante; Raos, Nenad	2013	<i>ACTA CHIMICA SLOVENICA</i> Volume: 60 Issue: 1 Pages: 120-123



	<b>monocarboxylic acids based on (3)chi(nu) connectivity index</b>			
--	--	--	--	--

Citările articolului [The Bondons: The Quantum Particles of the Chemical Bond, **PUTZ, MV**, INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES (2010) Volume: 11 Issue: 11 Pages: 4227-4256 DOI: 10.3390/ijms11114227] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul/Publisher</i>
242.	<b>On induced current density in the perylene/bisanthrene homologous series</b>	Radenkovic, Slavko; Bultinck, Patrick; Gutman, Ivan; et al.	2012	<i>CHEMICAL PHYSICS LETTERS</i> Volume: 552 Pages: 151-155 DOI: 10.1016/j.cplett.2012.09.055
243.	<b>Theoretical study on the reactivity of Lewis pairs PR<sub>3</sub>/B(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>3</sub> (R = Me, Ph, tBu, C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)</b>	Wu, Dongling; Jia, Dianzeng; Liu, Anjie; et al.	2012	<i>CHEMICAL PHYSICS LETTERS</i> Volume: 541 Pages: 1-6 DOI:10.1016/j.cplett.2012.05.009
244.	<b>The Structure Lacuna</b>	Boeyens, Jan C. A.; Levendis, Demetrius C.	2012	<i>INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES</i> Volume: 13 Issue: 7 Pages: 9081-9096 DOI: 10.3390/ijms13079081

Citările articolului [*On absolute aromaticity within electronegativity and chemical hardness reactivity pictures*, **PUTZ MV**, MATCH 64(2): 391-418, 2010] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul/Publisher</i>
245.	<b>Contributions from orbital-orbital interactions to nucleus-independent chemical shifts and their relation with aromaticity or antiaromaticity of conjugated molecules</b>	Pérez-Juste, I., Mandado, M., Carballeira, L.	2010	<i>Chemical Physics Letters</i> 491 (4-6), pp. 224-229
246.	<b>Should negative electron affinities be used for evaluating the chemical hardness?</b>	Cárdenas, C., Ayers, P., De Proft, F., Tozer, D.J., Geerlings, P.	2011	<i>Physical Chemistry Chemical Physics</i> 13 (6), pp. 2285-2293
247.	<b>Chemical applications of neural networks: aromaticity of</b>	Alonso Mercedes; Miranda	2011	<i>Physical Chemistry Chemical Physics</i> , 13(46), pp. 20564-20574





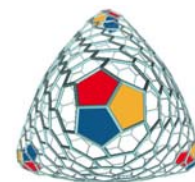
	<b>pyrimidine derivatives</b>	Carlos; Martin Nazario; et al.		
248.	<b>On the electrophilic character of molecules through its relation with electronegativity and chemical hardness</b>	Nazmul Islam and Dulal C. Ghosh	2012	<i>International Journal Of Molecular Sciences</i> , 13(2), pp. 2160-2175
249.	<b>Development of ecotoxicity QSAR models based on partial charge descriptors for acrylate and related compounds</b>	Furuhama, A.; Aoki, Y.; Shiraishi, H.	2012	<i>SAR AND QSAR IN ENVIRONMENTAL RESEARCH</i> Volume: 23 Issue: 7-8 Pages: 731-749 DOI: 10.1080/1062936X.2012.719542
250.	<b>Ab initio calculations of electronic interactions in inclusion complexes of calix- and thiocalix[n]arenes and block s cations</b>	Barroso-Flores, Joaquin; Silaghi-Dumitrescu, Ioan; Petrar, Petronela M.; et al.	2013	<i>JOURNAL OF INCLUSION PHENOMENA AND MACROCYCLIC CHEMISTRY</i> Volume: 75 Issue: 1-2 Pages: 39-46 DOI: 10.1007/s10847-012-0144-6

Citările cărții [*Quantum Frontiers of Atoms and Molecules*, **PUTZ MV** (Editor) NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA (2011), pag. 615; ISBN: 978-1-61668-158-6] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
251.	<b>Graphical Representation of Proteins</b>	Milan Randić, Alexandru T. Balaban, Dražen Vikić-Topić, and Dejan Plavšić	2011	<i>Chem. Rev.</i> 111, pp. 790-862

Citările articolului [New link between conceptual density functional theory and electron delocalization, Matito E., **PUTZ MV**, J PHYS CHEM A 115(45): 12459-12462, 2011] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul/Publisher</i>
252.	<b>Influence of electron correlation and degeneracy on the Fukui matrix and extension of frontier molecular orbital theory to correlated quantum chemical methods</b>	Bultinck Patrick, Van Neck Dimitri, Acke Guillaume, Ayers Paul W.	2012	<i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> , 14(7), pp. 2408-2416
253.	<b>Correlating the site selectivity of protonation in some ambidentate molecules in terms</b>	Rajak, S. K.; Ghosh, D. C.	2012	<i>EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL D</i> Volume: 66 Issue: 3 Article



	<b>of the dual descriptor</b>			<i>Number: 66 DOI: 10.1140/epjd/e2012- 20283-6</i>
254.	<b>Chemical reactivity in the framework of pair density functional theories</b>	Otero, Nicolas; Mandado, Marcos	2012	<i>JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY Volume: 33 Issue: 13 Pages: 1240-1251 DOI: 10.1002/jcc.22955</i>
255.	<b>Applying Conventional Ab Initio and Density Functional Theory Approaches to Electric Property Calculations. Quantitative Aspects and Perspectives</b>	Maroulis, G	2012	<i>Structure and Bonding 149, pp. 95-129</i>

Citările articolului [Chemical Action Concept and Principle, **PUTZ, MV**, MATCH-COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL AND IN COMPUTER CHEMISTRY Volume: 66 Issue: 1, Pages: 35-63 Published: 2011] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul/Publisher</i>
256.	<b>Theoretical Model for the Prediction of the Stability of Co<sup>2+</sup>, Ni<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup>, and Cd<sup>2+</sup> mono-complexes with monocarboxylic acids based on (3)chi(nu) connectivity index</b>	Milicevic, Ante; Raos, Nenad	2013	<i>ACTA CHIMICA SLOVENICA Volume: 60 Issue: 1 Pages: 120-123</i>

Citările articolului [Residual-QSAR. Implications for genotoxic carcinogenesis, **PUTZ MV** CHEMISTRY CENTRAL JOURNAL (2011) Volume: 5 Article Number: 29 DOI: 10.1186/1752-153X-5-29] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul/Publisher</i>
257.	<b>A tandem regression-outlier analysis of a ligand cellular system for key structural modifications around ligand binding</b>	Lin, Ying- Ting	2013	<i>JOURNAL OF CHEMINFORMATICS, Volume: 5 Article Number: 21 DOI: 10.1186/1758-2946-5-21</i>
258.	<b>The average numbers of outliers over groups of various splits into training and test sets: A criterion of the reliability of a QSPR? A case of water solubility</b>	Toropova, Alla P.; Toropov, Andrey A.; Benfenati, Emilio; et al.	2012	<i>CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 542 Pages: 134-137 DOI: 10.1016/j.cplett.2012.05.073</i>
259.	<b>SMILES-based QSPR</b>	Toropov,	2012	<i>CHEMICAL PHYSICS LETTERS</i>



	<b>model for half-wave potentials of 1-phenyl-5-benzyl-sulfanyl-tetrazoles using CORAL</b>	Andrey A.; Nesmerak, Karel		Volume: 539 Pages: 204-208 DOI: 10.1016/j.cplett.2012.04.061
--	--	----------------------------	--	--

Citările articolului [Alert-QSAR. Implications for Electrophilic Theory of Chemical Carcinogenesis. **PUTZ MV; IONASCU C; PUTZ AM;** et al.; INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES (2011) Volume: 12 Issue: 8 Pages: 5098-5134 DOI:10.3390/ijms12085098] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul/Publisher</i>
260.	<b>QSAR Applications During Last Decade on Inhibitors of Acetylcholinesterase in Alzheimer's Disease</b>	Wong, K. Y.; Duchowicz, P. R.; Mercader, A. G.; et al.	2012	<i>MINI-REVIEWS IN MEDICINAL CHEMISTRY</i> Volume: 12 Issue: 10, Pages: 936-946
261.	<b>Development of classification and regression based QSAR models to predict rodent carcinogenic potency using oral slope factor</b>	Kar, Supratik; Deeb, Omar; Roy, Kunal	2012	<i>ECOTOXICOLOGY AND ENVIRONMENTAL SAFETY</i> Volume: 82 Pages:85-95 DOI: 10.1016/j.ecoenv.2012.05.013
262.	<b>Relationships Between Base-Catalyzed Hydrolysis Rates or Glutathione Reactivity for Acrylates and Methacrylates and Their NMR Spectra or Heat of Formation</b>	Fujisawa, Seiichiro; Kadoma, Yoshinori	2012	<i>INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES</i> Volume: 13 Issue: 5 Pages: 5789-5800 DOI: 10.3390/ijms13055789
263.	<b>Mechanisms of Action of (Meth)acrylates in Hemolytic Activity, in Vivo Toxicity and Dipalmitoylphosphatidylcholine (DPPC) Liposomes Determined Using NMR Spectroscopy</b>	Fujisawa, Seiichiro; Kadoma, Yoshinori	2012	<i>INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES</i> Volume: 13 Issue: 1 Pages: 758-773 DOI: 10.3390/ijms13010758

Citările articolului [Introducing Catastrophe-QSAR. Application on Modeling Molecular Mechanisms of Pyridinone Derivative-Type HIV Non-Nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors, **PUTZ, Mihai V. ; LAZEA, Marius; PUTZ, Ana-Maria; Seiman-Duda, Corina** INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES Volume: 12 Issue: 12 Pages: 9533-9569 DOI: 10.3390/ijms12129533; Published: DEC 2011] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul/Publisher</i>
264.	<b>Theoretical Model for the Prediction of the Stability of Co<sup>2+</sup>, Ni<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup>,</b>	Milicevic, Ante; Raos,	2013	<i>ACTA CHIMICA SLOVENICA</i>



	<b>and Cd<sup>2+</sup> mono-complexes with monocarboxylic acids based on (3)chi(nu) connectivity index</b>	Nenad		<i>Volume: 60 Issue: 1 Pages: 120-123</i>
--	--	-------	--	---

Citările articolului [Quantitative Structure Inter-Activity Relationship (QSInAR). Cytotoxicity Study of Some Hemisynthetic and Isolated Natural Steroids and Precursors on Human Fibrosarcoma Cells HT1080, **PUTZ, Mihai V.**; LAZEA, Marius; SANDJO, Louis P. MOLECULES (2011) Volume: 16 Issue: 8 Pages: 6603-6620 DOI: 10.3390/molecules16086603] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul/Publisher</i>
265.	<b>A catalytic approach for the synthesis of allylic azides from aryl vinyl carbinols</b>	Srinu, G.; Srihari, P.	2013	<i>TETRAHEDRON LETTERS Volume: 54 Issue: 19 Pages: 2382-2385 DOI: 10.1016/j.tetlet.2013.02.094</i>

Citările articolului [On Quantitative Structure-Toxicity Relationships (QSTR) Using High Chemical Diversity Molecules Group, Tarko, Laszlo; **PUTZ, Mihai V.**, JOURNAL OF THEORETICAL & COMPUTATIONAL CHEMISTRY (2012) Volume: 11 Issue: 2 Pages: 265-272 DOI: 10.1142/S0219633612500174] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul</i>
266.	<b>The average numbers of outliers over groups of various splits into training and test sets: A criterion of the reliability of a QSPR? A case of water solubility</b>	Toropova, Alla P.; Toropov, Andrey A.; Benfenati, Emilio; et al.	2012	<i>CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 542 Pages: 134-137 DOI: 10.1016/j.cplett.2012.05.073</i>

Citările articolului [Bondonic characterization of extended nanosystems: Application to graphene's nanoribbons, **PUTZ, Mihai V.** ; **ORI, Ottorino**, CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 548 Pages: 95-100 DOI: 10.1016/j.cplett.2012.08.019, Published: OCT 1 2012] sunt:

<i>Nr.</i>	<i>Titlu</i>	<i>Autori</i>	<i>Anul</i>	<i>Jurnalul/Publisher</i>
267.	<b>On induced current density in the perylene/bisanthrene homologous series</b>	Radenkovic, Slavko; Bultinck, Patrick; Gutman, Ivan; et al.	2012	<i>CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 552 Pages: 151-155 DOI: 10.1016/j.cplett.2012.09.055</i>

