

**PROIECTE DE CERCETARE PENTRU STIMULAREA REVENIRII IN
TARA A CERCETATORILOR - TIP RP FINALIZATE
EVALUAREA REZULTATELOR-Monitorizare finala**

Programul: Resurse Umane
Tipul proiectului: Proiecte de cercetare pentru
stimularea revenirii in tara a
cercetatorilor
Cod proiect: RP-14 Nr.2 / 1.07.2009
Nume director: Dr. Aurel Jurjiu
Institutia gazda: Universitatea Babes-Bolyai
Titlu proiect: Studiul teoretic al procesului de denaturare a structurilor ADN
ramificate
Durata proiectului (ani): 2
Valoarea totala aprobata pentru finantarea proiectului: 489460.84 Lei

Rezultatele raportate

Indicator 1

Rezultate stiintifice obtinute

A.. Numar articole de tip “regular” sau “review” publicate in jurnale indexate WoS, cu factor de influenta relativ (AISr) ≥ 0.5 , ca autor principal (prim autor sau corespondent); **30 p/articol**

1. „Relaxation dynamics of a polymer network modeled by a multihierarchical structure”, **A. Jurjiu**, A. Volta, and T. Beu, Physical Review E, **84**, 011801, (2011), AISr 1.426

Obs. Multumiri RP, adresa corecta

B. Numar articole de tip “regular” sau “review” publicate in jurnale indexate WoS, cu factor de influenta relativ (AISr) ≥ 0.5 , in colaborare (co-autor); **15 p/articol**

1. „Relaxation dynamics of perturbed regular hyperbranched fractals”, A. Volta, M. Galiceanu, and **A. Jurjiu**, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, **43**, 105205, (2010), AISr 1.542

Obs. Multumiri RP, adresa corecta

2. „Dynamics of multilayered hyperbranched fractals through random walks”, A. Volta, M. Galiceanu, **A. Jurjiu**, L. Gualandri, and T. Gallo, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical (in curs de publicare)

Obs. Multumiri RP, adresa corecta

3. „Radiation-induced fragmentation of fullerenes”, A. Beu and **A. Jurjiu**, Physical Review B, **83**, 024103, (2011), AISr 2.552

Obs. Multumiri grant IDEI, adresa corecta

C. Numar articole de tip “regular” sau “review” publicate in jurnale indexate WoS, cu factor de influenta relativ (AISr) < 0.5 , ca autor principal (prim autor sau corespondent); **10 p/articol**

Nu este cazul

D. Numar articole de tip “regular” sau “review” publicate in jurnale indexate WoS, cu factor de influenta relativ (AISr) <0.5 , in colaborare (co-autor); **5p/articol**

Nu este cazul

Articolele publicate pe parcursul desfasurarii proiectului se indica astfel: titlul, autorii, jurnalul, volumul, paginile, anul publicarii, factorul de influenta relativ (AISr). Pentru a fi luate in considerare, articolele trebuie sa contina:

- a) Mentiunea clara a contributiei finantatorului (CNCSIS/UEFISCDI) la sectiunea “acknowledgement” si a grantului RP. In cazul in care exista mai multe granturi acordate de institutii din Romania, care au sustinut financiar desfasurarea cercetarii publicate in articol si sunt mentionate ca atare la sectiunea “acknowledgement”, punctajul articolului se imparte la numarul de granturi. Aceasta prevedere nu se aplica in cazul colaboratorilor externi, sustinuti financiar de propriile granturi.
- b) Afilierea directorului de proiect la institutia din Romania unde s-a desfasurat proiectul.

Nota: se vor atasa/prezenta copii (PDF) pentru fiecare articol publicat

Indicator 2

Modul de utilizare a resurselor financiare (0-40 %).

A. Utilizare a fondurilor pentru achizitia de echipamente si a primei de instalare (daca este cazul). Se va urmari daca:

- a) Echipamentele prevazute in proiect au fost achizitionate si sunt functionale; **10 p**
- b) Echipamentele achizitionate au fost folosite pentru desfasurarea activitatilor proiectului; **10 p**

Din fondurile proiectului au fost achizitionate:

-Prima de instalare: 9 statii grafice si 8 stabilizatoare de curent (UPS-uri), din prima parte a primei de instalare (anul 2009) au fost achizitionate 3 statii grafice si 3 UPS-uri, iar din a doua parte a primei de instalare (anul 2010) au fost achizitionate prin licitatie 6 statii grafice. In urma licitatiei au mai ramas fonduri pe care le-au folosit pentru cumpararea a 5 UPS-uri.

- **Logistica:** -3 statii grafice (doua au fost cumparate in 2009 si una in 2010)
 - pentru climatizarea sistemului de calcul au fost achizitionate doua sisteme de aer conditionat (primul de 17,4 KW si cel de-al doilea de 7,1 KW)
 - a mai fost achizitionata o imprimanta color si 2 hard-uri externe (2 Terra fiecare)

Se arata ca prima de instalare a fost cheltuita integral si toata aparatura a fost achizitionata conform planului de realizare a proiectului. Toate echipamentele sunt functionale, sunt inca in garantie si nu a fost nevoie de nici o reparatie.

Statiile grafice achizitionate au fost folosite pentru studierea procesului de denaturare a structurilor ADN ramificate prin simulari de dinamica moleculara. Au fost investigate sisteme cu un numar de atomi cuprins intre 30000 si 78000. De asemenea au mai fost folosite pentru diagonalizarea numerica a matricilor de conectivitate a

structurilor multi-ierarhice la generari mai mici pentru a compara valorile proprii cu cele obtinute prin metodele iterative pe care le-am determinat.

Pentru a evita pierderea de rezultate de simulare (la simulari mari) datorita intreruperilor de curent, au fost atasate statiilor grafice UPS-uri.

Prin achizitionarea celor doua sisteme de aer conditionat s-a realizat o foarte buna climatizare a sistemului de calcul in cele doua incaperi ale laboratorului nostru.

B. Utilizarea fondurilor pentru mobilitati. Se vor indica manifestarile stiintifice/conferinte/congrese astfel: denumire, locatie, perioada desfasurarii. Pentru a fi luate in considerare, manifestarile stiintifice unde s-a facut deplasarea trebuie sa aiba legatura directa cu domeniul de studiu al proiectului. De asemenea, deplasarea trebuie sa se fi concretizat cu prezentare:

a) poster; **10 puncte**

b) prezentare orala; **20 puncte**

Raportul directorului de proiect referitor la deplasari este listat mai jos:

1. In perioada 29.06.2010-10.07.2010 am efectuat un stagiu de documentare-cercetare la Universitatea din Freiburg, Departamentul „Theoretische Polymerphysik” condus de Dl. Prof. Dr. Alexander Blumen.

Scopul: Adaptarea metodei de decimare a spatiului real, initial folosita pentru fractali regulati, la structuri multi-ierarhice. Aceasta consta in gasirea transformarilor prin care se reduce structura de la o generare oarecare g la generarea inediat inferioara g-1.

Realizari: Au fost gasite transformarile pentru doua structuri multi-ierarhice: fractal Vicsek replicat in forma fractalului Sierpinski si fractal Sierpinski replicat in forma fractalului Vicsek. Pe baza acestor transformari am reusit sa determinam metodele iterative de generare a valorilor proprii ale matricilor de conectivitate ale acestor structuri. Cu ajutorul valorilor proprii determinate iterativ s-a investigat relaxarea dinamica a acestor structuri multi-ierarhice la generari foarte mari. Au fost calculate modulele de relaxare dinamica (storage modulus si loss modulus) si deplasarea medie a monomerului.

O parte din aceste rezultate (fractal Vicsek replicat in forma fractalului Sierpinski) sunt publicate in:

„Relaxation dynamics of a polymer network modeled by a multihierarchical structure”, A. Jurjiu, A. Volta, and T. Beu, Physical Review E, **84**, 011801, (2011).

Nota: Dl. Prof. Dr. Alexander Blumen nu este co-autor deoarece articolul ii era dedicat dansului. Datorita regulilor jurnalului a trebuit sa modificam ulterior sectiunea Acknowledgements.

Acknowledgements initial: „This work is dedicated to Professor Alexander Blumen with gratitude for the guidance in the field of polymer networks given to A. J. and A. V. as PhD students in his group at the University of Freiburg. A. J. acknowledges the support of CNCSIS-UEFISCSU, project number RP-14 NR 2 / 1.07.2009. A. V. acknowledges ARPA-SIMC and professor Federico Magnani for the grant and the computer facilities. The discussions with Dr. M. Galiceanu were very helpful.”

Costurile deplasării:

- cazare: 2833.89 Lei
- transport: 1901.21 Lei
- diurna: 1573.19 Lei
- Total: 6308.29 Lei

2. In perioada 26.11.2010-03.12.2010 am efectuat un stagiul de documentare-cercetare la Universitatea din Bologna, Departamentul de chimie „Giacomo Ciamician” condus de Dl. Prof. Dr. Francesco Zerbetto.

Scopul: -De a invata cum se pot introduce forte suplimentare (in codul AMBER) cu care sa tragem de anumite capete (3 end sau 5 end) ale structurii ADN ramificate pentru a rupe legaturile de hidrogen si a denatura structura.

-Determinarea unor parametrii ce pot descrie colapsul termic a doua structuri fractalice: Koch island si fractal Vicsek(cu functionalitatea 6)

Realizari: De la Dl. Dr. Siegfried Hoefinger am invatat metoda Steered Molecular Dynamics. Pe baza acestei metode s-au introdus forte suplimentare si a putut fi realizata denaturarea a trei structuri ADN ramificate (X-DNA, Y-DNA si T-DNA). Pentru studiul procesului de colaps termic au fost identificati doi parametrii ce descriu dinamica: evolutia lungimii conturului (border length) si raza de giratie. S-a demonstrat ca evolutia lungimii conturului (numai pentru von Koch island) si a razei de giratie (la ambele structuri) poate fi descrisa de o suma de doua exponentiale. Aceste rezultate nu sunt publicate. Articolul este inca in faza de editare, iar cand va fi gata va fi trimis la Physical Review Letters. O varianta in lucru a acestui articol am atasat-o acestui raport.

„Thermal collapse of snowflake fractals”, T. Gallo, F. Zerbetto, A. Volta, and A. Jurjiu

In cadrul colaborarii realizate a fost negociat si realizat un stagiul de 3 luni pentru un doctorand din grupul nostru condus de Dl. Prof. Dr. Titus Beu la Universitatea din Bologna in grupul D-lui. Prof. Dr. Francesco Zerbetto.

Costurile deplasării:

- cazare: 1658.66 Lei
- transport: 745 Lei
- diurna: 1206.3 Lei
- Total: 3609.96 Lei

3. In perioada 29.05.2011-03.06.2011 am efectuat un alt stagiul de documentare-cercetare la Universitatea din Bologna, Departamentul de chimie „Giacomo Ciamician” condus de Dl. Prof. Dr. Francesco Zerbetto.

Scopul: - Determinarea metodei iterative de generare a valorilor proprii a matricii de conectivitate a unei structuri formata din straturi identice de fractali Vicsek conectati.

Realizari: A fost gasita metoda iterativa de determinare a valorilor proprii pentru structura formata din straturi de fractali Vicsek conectati. Pe baza valorilor proprii generate prin metoda iterativa a fost calculata probabilitatea medie de intoarcere a unui random walker la pozitia sa initiala. S-a observat ca probabilitatea medie de intoarcere prezinta un comportament de decompozitie in zona de timpi intermediari. Acest comportament consta din doua regiuni de scalare reprezentand fie realizarea echilibrului in interiorul fiecarui fractal Vicsek fie intre fractalii Vicsek conectati in structura de straturi. Aceste rezultate au fost trimise spre publicare.

„Dynamics of multilayered hyperbranched fractals through random walks”, A. Volta, M. Galiceanu, A. Jurjiu, L. Gualandri, and T. Gallo, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical (trimis spre publicare).

De asemenea am stabilit cu Dl. Prof. Dr. Francesco Zerbetto ca urmatorul pas in colaborarea noastra sa fie studierea procesului de colaps termic al structurilor multi-ierarhice.

Costurile deplasarii

- cazare: 1239.99 Lei
- transport: 1211.08 Lei
- diurna: 723.33 Lei
- Total: 3174.4 Lei

In urma vizitei la UBB Cluj comisia desemnata de conducerea CNCS a constatat ca datele raportate sunt corecte si a stabilit punctajul:

$$\text{Indicator 1} = 30 (A) + 2 \times 15 (B) = 60$$

$$\text{Indicator 2} = 20 (A) + 20 (B)^* = 40$$

La indicatorul B, s-a considerat ca stagiile de cercetare in laboratoarele de cercetare partenere au permis diseminarea eficienta prin articole publicate in reviste cu AISR mare finalizate si au permis atingerea obiectivelor proiectului. Finantarea in “salturi” a grantului si elementele de incertitudine privind finantarea nu au permis (in mod justificat) angajarea directorului de proiect (prin plata taxei de participare) in participarea la congrese si conferinte internationale.

$$\text{TOTAL punctaj } 60 + 40 = 100 \text{ puncte}$$

Comisia considera ca obiectivele proiectului au fost integral realizate