

**Informare privind activitatea Secției de Științe Chimice pentru anul 2020**

1. Membrii Secției – lucrări publicate în anul 2020; cea mai importantă lucrare a fiecărui membru apărută în anul 2019.

**Acad. Marius ANDRUH** – 13 lucrări publicate, o conferință

Molecule-based magnetic materials constructed from paramagnetic organic ligands and two different metal ions

M.G.F. Vaz, **M. Andruh**, *Coord. Chem. Rev.*, **427**, 213611 (2021)

Alte publicații:

Mai interesează pe cineva meseria de profesor? <https://www.edupedu.ro/marius-andruh-mai-intereseaza-pe-cineva-meseria-de-profesor/>

O educație a bucuriei, *Dilema Veche*, nr. 862, 15-21 octombrie 2020

Manual de Chimie pentru clasa a VIII-a, Editura Intuitext

Alte activități:

Membru in Editorial Boards: Journal of Coordination Chemistry, Magnetochemistry (Section Editor-in-Chief; special issue: Magnetic coordination polymers), ChemistrySelect, Inorganica Chimica Acta, Inorganics (special issue: Heterometallic complexes)

Redactor șef al Revue Roumaine de Chimie

Președinte al Comisiei Centrale a Olimpiadei Naționale de Chimie; Coordonator lot olimpic chimie

Director două proiecte de cercetare

**Acad. Alexandru Balaban**

Criteria for ranking poly(cyclic) chemical constitutional graphs and their vertices via centralities measures

J.A. Rodriguez-Velazquez, **A.T. Balaban**, *Journal of Mathematical Chemistry*, **58**, 439-457, (2020)

**Acad. Ionel Haiduc** – 3 lucrări publicate

Inverse coordination chemistry: oxocarbons, other polyoxo carbocyclic molecules and oxygen heterocycles as coordination centers. Topology and systematization

**I. Haiduc**, *Journal of Coordination Chemistry*, **73**, 2117-2170, (2020)

**Acad. Cristian SILVESTRU** – 9 lucrări publicate, 1 capitol carte

Chimia

**C. Silvestru**, I. Haiduc

în *Universitatea din Cluj în Perioada Interbelică*, I.-A. Pop, S. Simon, I. Bolovan (Eds.), Vol. IV – *Facultatea de Științe*, S. Simon (Coord.), Presa Universitară Clujeană, Cluj-Napoca, **2020**, Ch. 3, pp. 139-180 (chimia), 399-445 (medalioane).

ISBN 978-3-11-052794-0

**Acad. Bogdan C. Simionescu** – 4 lucrări publicate; 6 conferințe invitate

Synthesis and characterization of k-carrageenan bio-nanocomposite films reinforced with bentonite nanoclay

B.I. Dogaru, **B.C. Simionescu**, M.C. Popescu, *Int. J. Biological Macromol.*, 154, 9-17 (2020) (IF = 5,162)

Alte activități:

Vicepreședinte al Academiei Române, membru al Biroului Prezidiului Academiei Române

Președinte al Comitetului Roman de Istoria și Filisofia Științei și Tehnicii (CRIFST)

Membru al CRIC (din martie 2020)

Profesor, Departamentul Polimeri naturali si sintetici, Universitatea Tehnica “Gh. Asachi” din Iași / CSI (1/4 normă), Institutul de Chimie Macromoleculară “Petru Poni” din Iași al Academiei Române – activitate didactică și științifică

Director proiect „Platforme teranostice antitumorale pe bază de carbon dots și matrice polimerice”, PNCDI III – Proiecte complexe realizate in consorții CDI-2017

**Acad. Maria Zaharescu** – 2 lucrări publicate, 1 capitol de carte

Inter-trap tunneling in vanadium doped TiO<sub>2</sub> sol-gel films

S. Simeonov, A. Szekeres, M. Covei, D. Spassov, L. Predoana, M. Gartner, **M. Zaharescu**, *Mater. Res. Bull.*, **127**, 110854 (2020) FI = 4,019

Alte activități:

- Președinta al Consiliului de Onoare al Academiei Române

- Director al Departamentului de Științe Exacte al Scolii Doctorale din Academia Română

- Membru în Comitetul Editorial: Journal of Sol-Gel Science and Technology, Ed.Springer, Revue Roumine de Chimie, Ed.Academiei Române, Revista de Chimie, Revista Română de Materiale, Optoelectronic Advanced Materials – Rapid Communications

- 2 proiecte de cercetare și 2 colaborări interacademice

**Prof. Ion Grosu** – 6 lucrări publicate

Halogen Bonds (N--I) at Work: Supramolecular Catemeric Architectures of 2,7-Dipyridylfluorene with ortho-, meta-, or para Diiodotetrafluorobenzene Isomers

I.G. Grosu, L. Pop, M. Miclăuș, N.D. Hădade, A. Terec, A. Bende, C. Socaci, M. Bărboiu, **I. Grosu**, *Cryst. Growth Des.*, **2020**, 20, 3429-3441 (IF = 4.089)

**Prof. Mihaela Hillebrand**

Hydroacridines: Part 33. An experimental and DFT study of the <sup>13</sup>C NMR chemical shifts of the nitrosamines derived from the six stereoisomers of tetradecahydroacridine

F. Potmischil, **M. Hillebrand**, H. Kalchhauser, *Magnetic Resonance Chemistry*, **58**, 249-259, (2020)

**Prof. Gheorghe Maria** – 4 articole, 1 carte

In-silico determination of some conditions leading to glycolytic oscillations and their interference with some other processes in *e. coli* cells

**G. Maria**, *Frontiers in Chemistry* - section Physical Chemistry and Chemical Physics, Special issue on “Advances in Oscillating Reactions”, vol. 8, pag. 526679-526693, 2020 (IF= 3.693)

**Prof. Dumitru OANCEA** – 8 lucrări publicate

Influence of initial pressure and vessel’s geometry on deflagration of stoichiometric methane-air mixture in small-scale closed vessels

M. Mitu, V. Giurcan, D. Razus, **D. Oancea**, *Energy & Fuels*, **34**, 3828-3835, (2020)

**Prof. Petre T. Frangopol**

Ions release from hydroxyapatite and substituted hydroxyapatites in different immersion liquids. In vitro experiments and theoretical modelling study

A. Mocanu, O. Cadar, **P.T. Frangopol**, O. Horovitz, M. Tomoaia-Cotișel, Royal Society Open Science (in press)

**Dr. Nicolae I. Ionescu** – 3 lucrări publicate

In situ electrical conductivity study of Pt doped V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/gama Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst for propene deep oxidation

V. Bratan, P. Chesler, C. Hornoiu, M. Scurtu, G. Postole, P. Pietrzyk, A. Gervasini, A. Aoroux, **N.I. Ionescu**, *Journal of Materials Science*, **55**, 19466 (2020)

2. Institute/centre de cercetare. Domenii de cercetare. Programe fundamentale (dacă este cazul). Programe prioritare (dacă este cazul).

**Institutul de Chimie Fizică “Ilie Murgulescu”, București**

Domenii de cercetare:

1. Termodinamică și cinetică chimică. Chimie cuantică
2. Procese și materiale catalitice
3. Procese de electrod, materiale pentru sisteme electrochimice și coroziune
4. Știința materialelor și metode avansate de caracterizare
5. Coloizi funcționali complecși
6. Aplicații biomedicale și de protecție a mediului
7. Știința suprafețelor și a straturilor subțiri

**Institutul de Chimie Macromoleculară “Petru Poni”, Iași**

Domenii de cercetare:

1. Bio-nano-conjugate și biopolimeri
2. Monomeri și polimeri specifici – precursori în obținerea de nanomateriale
3. Polimeri termostabili heterociclici și heterocatenari pentru micro- și nanomateriale înalt performante
4. Polimeri ionici sintetici și naturali
5. Polimeri naturali. Materiale bioactive și biocompatibile
6. Materiale polimere multifuncționale și hibridi organici/anorganici
7. Polimeri conjugați și materiale micro- și nanostructurate
8. Materiale multicomponente
9. Relații structură-proprietăți la polimeri și materiale polimere

**Institutul de Chimie “Coriolan Drăgulescu”, Timișoara**

Domenii de cercetare:

1. Proiectarea moleculară asistată de calculator
2. Contribuții la chimia compușilor organici, element-organici și polimerici conținând F, N, P, S. Sinteză, caracterizare, aplicații
3. Chimia și aplicațiile compușilor tetrapirolici din clasa porfirinelor
4. Compuși anorganici și hibridi cu relevanță în știința materialelor nanostructurate. Precursori pentru materiale avansate

**Centrul de Chimie Organică “Costin D. Nenițescu”, București**

Domenii de cercetare:

1. Chimie organică teoretică
2. Chimia hidrocarburilor și a derivaților lor funcționali
3. Chimia compușilor heteroatomici
4. Materiale noi

3. Resurse umane: cercetători, doctori, conducători de doctorate (vezi anexa 2).

4. Activități de formare a tinerilor cercetători: doctoranzi, post-doctoranzi.

Activitatea de formare a tinerilor cercetători se desfășoară în cadrul SCOSAAR, Departamentele: Științe Exacte, Filiala Iași și Filiala Timișoara (vezi anexa 2).

5. Infrastructură de cercetare nouă achiziționată/completată în anul 2019: biblioteca de specialitate, echipamente de cercetare (cu valori peste 10k Euro) etc.

Infrastructura de peste 10 kEuro achiziționată a totalizat **1 341 863 Euro** la ICMPP, **45 000 Euro** la ICT.

6. Rezultatele cercetării desfășurate în anul 2019 (vezi anexa 2).

7. Realizări excelente obținute în anul 2019, ale Secției și institutelor/centrelor coordonate:

#### **Institutul de Chimie Fizică „Ilie Murgulescu”, București**

Lucrări științifice publicate în reviste cu factor de impact mare

- Conductive diamond powder inclusion in drop-casted graphene for enhanced effectiveness as electrocatalyst substrate, N. Spataru, J.M. Calderon-Moreno, P. Osiceanu, T. Kondo, C. Terashima, M. Popa, M.M. Radu, D. Culita, L. Preda, M.A. Mihai, T. Spataru, *Chemical Engineering Journal*, **402**, 126258 (2020) **FI = 10.652**

- Nitrite electrochemical sensing platform based on tin oxide films, Lete, C., Chelu, M., Marin, M., Mihai, S., Preda, S., Anastasescu, M., Calderon-Moreno, J.M., Dinulescu, S., Moldovan, C., Gartner, M., *Sensors & Actuators, B: Chemicals*, **FI = 7.100**

- Versatile by design: Hollow Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> architectures for superior lithium storage prepared by alternative green Pechini method, Patrinoiu, G.; Rodriguez, J.R.; Wang, Y.; Birjega, R.; Osiceanu, P.; Musuc, A.M.; Qi, Z.; Wang, H.; Pol, V.G.; Calderon-Moreno, J.M.; Carp O., *Applied Surface Science*, **510**, 145431, (2020), **FI = 6.182**

#### **Institutul de Chimie Macromoleculară „Petru Poni”, Iași**

Lucrări științifice (publicate în reviste cu factor de impact mare)

- Multi-stimuli responsive free-standing films of DR1- grafted silicones; C. Racles, C. Ursu, M. Dascalu, M. Asandulesa, V. Tiron, A. Bele, C. Tugui, S. Teodoroff-Onesim; *Chemical Engineering Journal* 401, 126087 (2020) **FI = 10.652**

- Sonochemical production of nanoscaled crystalline cellulose using organic acids; E. Robles, N. Izaguirre, B.-I. Dogaru, C.-M. Popescu, I. Barandiaran, J. Labidi; *Green Chemistry* 22(14), 4627-4639 (2020) **FI = 9.480**

- Removal of heavy metal ions from multi-component aqueous solutions by eco-friendly and low-cost composite sorbents with anisotropic pores; D. Humelnicu, M. M. Lazar, M. Ignat, I. A. Dinu, E. S. Dragan, M. V. Dinu; *Journal of Hazardous Materials* 381, 120980 (2020) **FI = 9.038**

- Removal and separation of heavy metal ions from multi-component simulated waters using silica/(polyethyleneimine)<sub>n</sub> composite microparticles, F. Bucatariu, C.-A. Ghiorghita, M.-M. Zaharia, S. Schwarz, F. Simon, M. Mihai, *ACS Applied Materials and Interfaces* 12, 37585-37596 (2020) **FI = 8.758**

#### *Brevet international acordat*

- Non-isocyanate polyurethane thermoreversible hydrogel and methods for its preparation, C. Ciobanu, M. L. Grădinaru, L. D. Țigău, WO2020/209740, 15.10.2020

### **Institutul de Chimie „Coriolan Drăgulescu”, Timișoara**

- Lucrări științifice (publicate în reviste cu factor de impact ridicat):

- a. Avram S., Halip L., Curpan R., Oprea T.I., Novel Drug Targets in 2019. *Nat. Rev. Drug Discovery*, 19(5), 300, **2020, Factor de impact: 64.797**
- b. Avram S., Bologa C.G., Holmes J., Bocci G., Wilson T.B., Nguyen D.T., Curpan, R., Halip L., Bora A., Yang J.J., Knockel J., Sirimulla S., Ursu O., Oprea T.I., Drug Central 2021 supports drug discovery and repositioning, *Nucleic Acids Res.*, doi: 10.1093/nar/gkaa997, **2020, Factor de impact: 11.501**
- c. Nicola R., Muntean S.G., Nistor M.A., Putz A.M., Almásy L., Săcărescu L., Highly efficient and fast removal of colored pollutants from single and binary systems, using magnetic mesoporous silica, *Chemosphere*, 261, 127737, **2020, Factor de impact: 5.778**
- d. Andelescu A.-A., Heinrich B., Spirache M. A., Voirin E., La Deda M., Di Maio G., Szerb E. I., Donnio B., Costisor O., Playing with Pt<sup>II</sup> and Zn<sup>II</sup> Coordination to Obtain Luminescent Metallomesogens, *Chem. Eur. J.*, 26, 4850 – 4860, **2020, Factor de impact: 4.857**

- Alte realizări pe care le considerați excelente:

- a. **Proiect:** POC/448/1/1/Mari infrastructuri de CD, Cod MySMIS 127952, nr. contract 371/20.07.2020

**Titlul proiectului:** ICT - Centru interdisciplinar de specializare inteligentă în domeniul chimiei biologice RO-OPENSSCREEN”

**Director de proiect:** Liliana Pacureanu

**Valoarea totala a contractului:** 42 459 595,61 RON

**Buget pentru anul 2020:** 1 252 099,00 lei

**Durata contractului:** 20.07.2020-31.12.2023 (42 luni)

- b. **Proiect:** 5U24CA224370-02

**Titlul proiectului:** Knowledge Management Center for Illuminating the Druggable Genome/3RDZ5

**Director proiect:** Dr. Sorin Avram

**Valoare totala proiect si buget ICT 2020:** 64 800 \$

**Durata contractului:** 01.1.2020-31.12.2020 (12 luni)

### **Centrul de Chimie Organică „Costin D. Nenițescu”, București**

- Lucrări științifice (primele 3 cele mai bine cotate)

- X. Xu, V. V. Jerca, R. Hoogenboom, „Bio-inspired Hydrogels as Multi-task Anti-icing Hydrogel Coatings”, *Chem*, 2020, 6(4), 820-822. DOI: 10.1016/j.chempr.2020.03.015, **FI = 19,735**
- X. Xu, V. V. Jerca, R. Hoogenboom, „Structural Diversification of Pillar[n]arene Macrocycles”, *Angewandte Chemie International Edition*, 2020, 59(16), 6314-6316. DOI: 10.1002/anie.202002467, **FI = 12,959**
- S. Divanis, T. Kutlusoy, I.M.I. Boye, I.C. Man\*, J. Rossmeisl, “Oxygen Evolution Reaction: A perspective on a decade of atomic scale simulations”, *Chemical Science*, 2020, 11, 2943-2950, **FI = 9,556**

- Alte realizări:

- Factorul mediu de impact per lucrare publicată de cercetătorii din CCO, în jurnale indexate pe Web of Science în 2020, este 3,670.
- Factorul mediu de impact cumulativ per cercetător din CCO (45 cercetători) în 2020 este 5,382.
- S-au publicat 15 lucrări în reviste internaționale de prestigiu cu factor de impact peste 5

8. Premii internaționale/naționale, ale Academiei Române obținute de către cercetători (autori, lucrări premiate).

Institutul de Chimie Fizică „Ilie Murgulescu”

**Dr. Crina Anastasescu**, grupul de lucrări *Nanostructuri atipice de SiO<sub>2</sub> obținute prin metoda sol-gel cu aplicații în foto/bio/electro/cataliză* – Premiul I.G. Murgulescu al Academiei Române

**Dr. Gabriela Petcu**, Premiu special acordat de Societatea de Chimie în cadrul Simpozionului International Priorities of Chemistry for a Sustainable Development PRIOCHEM XVI pentru prezentarea orală intitulată TiO<sub>2</sub>Ni AND TiO<sub>2</sub>Co MIXED OXIDES SUPPORTED ON Y ZEOLITE WITH DIFFERENT POROSITY AS PHOTOCATALYSTS IN DEGRADATION OF AMOXICILLIN

**V. Soare, M. Burada, D. Dumitreacu, I. Constantin, A.M. Popescu, V. Constantin, E.I. Neacsu, C. Donath, M. Buzatu**, Medalia de aur la Salonul Internațional de invenții și Inovații "Traian Vuia", Timisoara 15.10.2020 pentru invenția/brevet: "Procedeu de recuperare a metalelor prețioase din deseuri electrice și electronice prin dizolvare anodică în lichide ionice"

**M. Burada, M.T. Olaru, A.M. Popescu, V. Constantin**, Medalia de bronz la Salonul Internațional de invenții și Inovații "Traian Vuia", Timisoara 15.10.2020 pentru invenția: "Sinteza electrochimică a aliajelor cu entropie înaltă cu rezistență superioară tribologică și la coroziune-HEASYNTCORR"

Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni"

**Dr. Liliana Roșu și Dr. Cristian-Dragoș Varganici**, grupul de lucrări *Sisteme polimerice multicomponente naturale – modificare, degradare, stabilizare* – Premiul Costin D. Nenițescu al Academiei Române

**Dr. Adrian Bele**, grupul de lucrări *Materiale siliconice în sisteme de conversie a energiei* – Premiul Cristofor I Simionescu al Academiei Române

**Dr. D. Ciolacu**, Diploma de excelență și Medalie INVENTICA 2020; Procedure and composition for preparation of superabsorbent materials; XXVI<sup>th</sup> International Exhibition of Inventions INVENTICA 2020

**Dr. D. Ciolacu**, Diploma de onoare și Medalie INVENTICA 2020; Hydrogels based on exopolysaccharides biosynthesis by lactic acid bacteria strain; XXVI<sup>th</sup> International Exhibition of Inventions INVENTICA 2020

Institutul de Chimie „Coriolan Drăgulescu”

**Dr. Eugenia Fagadar-Cosma**, Award & Diploma for most appreciated Plenary LECTURE PRIOCHEM International Conference, Bucharest 28-30 October 2020

**Dr. Eugenia Fagadar-Cosma**, Outstanding reviewer of Elsevier for Journal of Alloys and Compounds

**Dr. Eugenia Fagadar-Cosma**, Outstanding reviewer of Elsevier for Molecular Structure

**Dr. Elisabeta Szerb**, grupul de lucrări *Contribuții la chimia combinațiilor complexe ale metalelor din blocul d și f pentru obținerea de materiale funcționale avansate cu proprietăți optoelectronice și/sau aplicații în biomedicină* – Premiul Gheorghe Spacu al Academiei Române

**Dr. Liliana Cseh Liliana**, grupul de lucrări *Sisteme organice cu stări multiple/multifuncționale reversibile din clasa analogilor de curcumina* – Premiul Gheorghe Spacu al Academiei Române

Centrul de Chimie Organică „Costin D. Nenițescu”

**Dr. Isabela Costinela Man**, grupul de lucrări *Modelarea interacțiunilor catalizator – substrat organic la nivel molecular prin tehnici cuantice ab initio* – premiul Nicolae Teclu al Academiei Române

9. Cooperări științifice naționale și internaționale, inclusiv în cadrul proiectelor; vizitatori din străinătate.

Institutede subordonate secției au fost implicate în numeroase proiecte naționale și internaționale, așa cum reiese din rapoartele de activitate.

10. Conferințe (simpozioane)/manifestări științifice organizate de Secție:

Situația sanitară a împiedicat organizarea unor manifestări științifice, cum ar fi: **Simpozionul româno-american**, programat în Aula Academiei Române, în perioada 18-20 iunie 2020, ședințele comisiilor secției, etc.

Conferințe (simpozioane)/manifestări științifice organizate de institutelor/centrelor coordonate:

Institutul de Chimie Macromoleculară “Petru Poni”

**ICMPP – poartă deschisă spre viitor. Sesiune de comunicări științifice a tinerilor cercetători (MacroYouth’2020)**, 19 noiembrie 2020, Iași

Institutul de Chimie „Coriolan Drăgulescu”

**EU-OPENSREEN - Achieving competitiveness in chemical biology through chemical repository sharing – workshop**, 30 noiembrie 2020

11. Granturi/proiecte câștigate în competiții naționale/europene (tabel separat, (dacă este cazul) - titlul, director grant/proiect, organismul finanțator, durata grantului/proiectului, valoarea totală /valoarea pentru anul 2019).

ICF – 11 naționale și 10 internaționale; ICMPP – 43 naționale și 11 internaționale, ICT – 5 naționale și 3 internaționale, CCO – 12 naționale

Titlul proiectelor și celelalte informații se găsesc în rapoartele de activitate ale institutelor.

12. Concluzii și propuneri

În anul 2020 activitatea secției și a institutelor pe care le coordonează a fost afectată de situația sanitară din țară și din lume.

Membrii secției au încercat să se implice în activitățile desfășurate în cadrul Academiei Române și, alături de cercetătorii din institutelor coordonate, au desfășurat activități de cercetare și diseminare a rezultatelor cercetării.

02.12.2020

PREȘEDINTE SECȚIE

Acad. Marius Andruh

\* Sunteți rugați să prezentați materialele redactate concis, fără amănunte de importanță minoră.

**TABEL\***  
**cu rezultatele institutelor/centrelor Academiei Romane pentru anul 2020**

Nr. Crt.	Institutul/Centrul	Resurse umane					Articole publicate			Cărți/capitole			Premii		Citări ale lucrărilor anterioare în 2019	Conferințe organizate/conferințe susținute	Rapoarte de interes public	Brevete de invenții
		Nr cercet.	Cond. doct.	Dr.	Drd.	Post-Doc.	Reviste ISI străinătate	Reviste ISI România	Reviste România B+	în străinăt.	EAR	în țară	în străinăt.	în AR				
1	ICF	130	8	130	12		70	16	8	6/1	1	2	3	1	2619	4	-	9
2	ICMPP	133	15	178	47	3	217	35	-	-/19	-/2	2/-	2	2	6286	1/129	-	4
3	ICT	40 atest.	3	40	9	-	47	8	3	3	-	-	5/14	2	685	1	1	2
4	CCO	45	3	40	4	0	47	19	0	0	0	0	0	1	2040	0 / 17	7	7
	<b>TOTAL</b>	<b>348</b>	<b>29</b>	<b>388</b>	<b>72</b>	<b>3</b>	<b>381</b>	<b>78</b>	<b>11</b>	<b>9</b>	<b>1</b>	<b>4</b>	<b>10</b>	<b>6</b>	<b>11630</b>	<b>6</b>	<b>8</b>	<b>22</b>

\*Rapoartele întocmite de institute/centre pot include și alte activități/date considerate relevante – acestea pot fi incluse în Informarea privind activitatea Secției