

**Secția de Științe Chimice**



# Conferința Cercetării Științifice din Academia Română CCSAR-2021

## ACADEMIA ROMÂNĂ Secția de Științe Chimice



Institutul de Chimie Fizică „Ilie. G. Murgulescu”, București  
Institutul de Chimie Macromoleculară „Petru Poni”, Iași  
Institutul de Chimie „Coriolan Drăgulescu”, Timișoara  
Centrul de Chimie Organică „C. D. Nenițescu”, București

**22.11.2021**

Institutul de Chimie Fizică „Ilie G. Murgulescu”, București: **119 cercetători atestați,**  
**207 publicații, 8 conducători doctorat**

Institutul de Chimie Macromoleculară „Petru Poni”, Iași: **145 cercetători atestați,**  
**441 publicații, 15 conducători doctorat**

Institutul de Chimie „Coriolan Drăgulescu”, Timișoara: **37 cercetători atestați,**  
**106 publicații; 2 conducători doctorat**

Centrul de Chimie Organică „C. D. Nenițescu”, București: **36 cercetători atestați,**  
**109 publicații, 2 conducători doctorat**

---

**337 cercetători atestați; 4 membri ai Academiei Române**  
**863 publicații (2020 – 2021); 27 conducători doctorat**  
**Peste 20 000 de citări (2020 - 2021)**

# ACADEMIA ROMÂNĂ – spațiu al cercetării fundamentale

---

**SINTEZE DE NOI COMPUSI/MATERIALE**

**DESCRIERE SI INTELEGERE DE FENOMENE**

**PROPRIETATI INTERESANTE SAU PROPRIETATI UTILE TEHNOLOGIC**

**VALORIFICARI SI RECUPERARI DE PRODUSE**

**CERCETARI INTERDISCIPLINARE**

---

**Tematica modernă și de impact**



# **Institutul de Chimie Fizică „Ilie G. Murgulescu”**



# ACADEMIA ROMÂNĂ INSTITUTUL DE CHIMIE FIZICĂ “ILIE MURGULESCU”



## 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**

# Rezultate 2020 – 2021

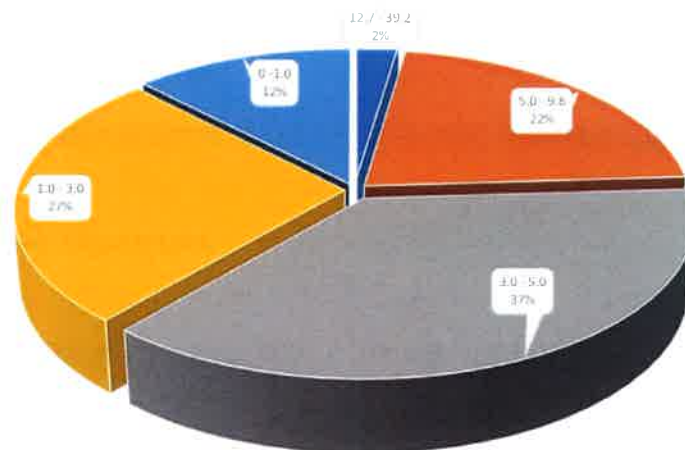
❖ 207 Număr total de lucrări ISI, FIC = 779.10, FI<sub>mediu</sub> = 3.76

176 lucrări ISI străinătate

FIC = 754.90

31 lucrări ISI țară

FIC = 24.197



❖ 17 Lucrări non-ISI

❖ 3 Cărți (2 în țară; 1 editată în străinătate)

❖ 10 Capitole de carte (1 în țară; 9 în străinătate)

❖ 12 Brevete (1 internațional; 11 naționale)

❖ 6 Proiecte internaționale

❖ 14 Proiecte naționale

❖ 9 Proiecte interacademice

❖ 5505 Citări

❖ Premiul I.G. Murgulescu al Academiei Române Dr. C. Anastasescu.

❖ Medalia de aur la Salonul Internațional de invenții și Inovații "Traian Vuia", Timișoara 2020 (A.M. Popescu, V. Constantin, E.I. Neacșu, C. Donath, et al.).

❖ Medalia de bronz la Salonul Internațional de invenții și Inovații "Traian Vuia", Timișoara 2020 (A.M. Popescu, V. Constantin, et al.).

❖ Premiul special acordat de Societatea de Chimie în cadrul Simpozionului Internațional *Priorities of Chemistry for a Sustainable Development PRIOCHEM XVI, 2020*, Dr. G. Petcu.

❖ Medalia de argint la 13<sup>th</sup> EUROINVENT 2021 (A.M. Popescu, V. Constantin, et al.).



# TERMODINAMICĂ CHIMICĂ

26 lucrări ISI, FIC = 153.795, 3 capitole în cărți (1 în țară, 2 în străinătate), carte editată în străinătate

## Studiul termodinamic al interacțiilor la interfața bio-nano

### Proiecte Europene

Responsabil proiecte Dr. Speranța Tănăsescu

▪ **HORIZON 2020** *Safety testing in the life cycle of nanotechnology-enabled medical technologies for health (SAFE-N-MEDTECH) - Innovation Action (IA)* Call: H2020-NMBP-TO-IND (Foundations for tomorrow's) 2019 – 2023. Valoare contract: **324.250 EUR**

▪ **HORIZON 2020 - EuroNanoMed III: Targeted multifunctional nanoemulsions to interrupt metastatic progression (METASTARG)**, 2019-2022. Valoare contract: **932.000 RON**

▪ **HORIZON 2020** *Development and implementation of Grouping and Safety-by-Design approaches within regulatory framework (NANOREG II) - Research and Innovation Action (RIA)*, 2015-2020. Valoare contract: **125.625 EUR**

### Lucrări relevante

• N. Jeliaskova [...], A. Botea-Petcu, D. Gheorghe, R. Sandu, A. Precupas, S. Tanasescu et al, *Towards FAIR Nanosafety Data*, **Nature Nanotechnology**, 2021, 16(6), 644-654 (FI = 39.213 - Q1)

• A. Balmori, R. Sandu, D. Gheorghe, A. Botea-Petcu, A. Precupas, S. Tanasescu et al., *Revising protein Corona Characterization Combining ITC and NanoDSC to Understand the Interaction of Proteins with porous Nanoparticles*, **Frontiers in Bioengineering and Biotechnology**, 2021, 9, 650281 (FI = 5.89 - Q1)

### Carte publicată în străinătate în calitate de Editor Academic

*Structure-Processing-Property Relationships in Stoichiometric and Nonstoichiometric Oxides*, 2020, Academic Editor: S. Tănăsescu, Ed. In Tech Open, DOI: 10.5772 / intechopen.77573; ISBN 978-1-78985-452-7

## Termodinamica sistemelor în fază pură și la echilibrul între faze în domenii extinse de temperatură și de presiune

▪ **Proiect PN-III-P4-ID-PCE-2020-1241**, Director proiect: Dr. F. Maxim, *Oxizi metalici pe suport de carbon produși prin metoda impregnării în condiții supercritice ale apei (APASUPER)*, 2021-2023, Valoare contract **1.198.032 lei**.



1. Reactor tubular în flux continuu cu manta de încălzire și pre-încălzire;
2. Pompe de înaltă presiune;
3. Valvă control presiune;
4. Sistem achiziții date și control automat al parametrilor de lucru

Echipment pentru studiul proceselor chimice în condiții supercritice ale apei (unic pe plan național)

### Cooperare științifică

**înternațională:** Contract de colaborare cu transfer de echipament între Paul Scherrer Institut, Villigen, Elveția și ICF

### ▪ Joint Research Projects, Director de proiecte Dr. D. Dragoescu

- Romanian Academy – National Academy of Sciences of Belarus, *A comparative study of the thermophysical properties for binary mixtures of cycloalkanes and cycloketones with aromatic hydrocarbons*, **AR-FRBCF**, 2020-2021

- Romanian Academy – Hungarian Academy of Sciences, *Structural and thermodynamic studies of aqueous solutions*, **AR-HAS**, 2018-2021

### Lucrări relevante:

• F. Maxim et.al, *Thermodynamics and dynamics of supercritical water pseudo-boiling*, **Advanced Science**, 8, 2021, 2002312 (FI = 16.806 – Q1)

• D. Dragoescu, F. Sirbu et al. *Study of the thermophysical properties for aqueous solutions of alkanediols binary mixtures*, **Journal of Molecular Liquids**, 2021, 116150 (FI = 6.165 - Q1)

• F. Sirbu, D. Dragoescu et al. *Optical and viscometric properties for 1-chlorohexane+ toluene/tetradecane binary mixtures at temp 298.15 K - 318.15 K and atmospheric pressure*, **J. Molecular Liquids**, 2021, 339, 116171 (FI = 6.165)

# CHIMIE CUANTICĂ. CINETICĂ CHIMICĂ

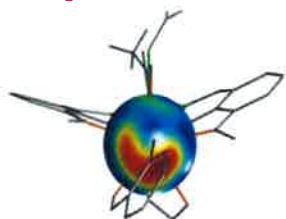
## Chimie Teoretică și Structurală



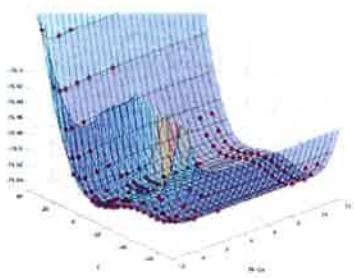
## Anizotropia Magnetică

M. Suta, F. Cimpoeșu, W. Urland, *The angular overlap model of ligand field theory for f elements: An intuitive approach building bridges between theory and experiment*, *Coordination Chemistry Reviews*, 2021, 441, 213981 (FI = 22.315 – Q1)

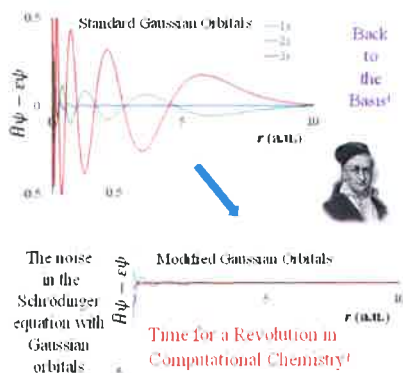
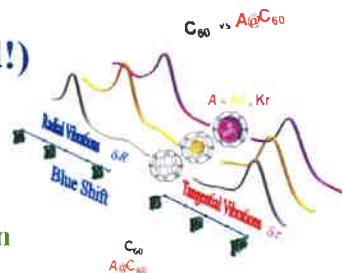
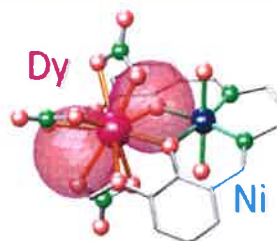
## Sinopsis tematic. (Bond. Chemical Bond!)



## Hamiltoniane Efective



## Reactivitate



## Dinamica reacțiilor rapide de oxidare și descompunere în sisteme omogene

15 Lucrări ISI; FIC = 41.808



C. Movileanu, M. Mitu, V. Giurcan, D. Razus, D. Oancea, *Quenching distances and minimum ignition energies of propane-air-inert mixtures*, *Fuel*, 2020, 274, 117836 (FI = 6.609 – Q1)

Carte: D. Oancea, D. Razus, "Explozia chimică", Editura Academiei Române, 2021, ISBN 978-973-27-3370-7

## Colaborări științifice internaționale

- *Mărimi caracteristice privind protecția anti-ex la utilizarea amestecurilor de gaze*, Colaborare cu PTB (Physikalische-Technische Bundesanstalt), Braunschweig, Germania.
- *Inflamabilitatea amestecurilor combustibil/inert/oxidant*, Colaborare cu BAM (Federal Institute for Material Research and Testing), Berlin, Germania.

# PROCESE ȘI MATERIALE CATALITICE

## Procese catalitice nepoluante dezvoltate ca aplicații ale nanomaterialelor

### Capitol de carte

V. Parvulescu, M. Ciobanu, G. Petcu, *Immobilization of Semiconductor Photocatalysts, Handbook of Photocatalytic Materials: Fundamentals, Fabrications, and Water Resources Applications*, ed. Chaudhery Mustansar Hussain, Ajay Kumar Mishra, Elsevier, **2020**, 103-140.

### Lucrări relevante

1. M. Filip, G. Petcu, E.M. Anghel, S. Petrescu, B. Trica, P. Osiceanu, N. Stanica, I. Atkinson, C. Munteanu, M. Mureseanu, V. Parvulescu, *FeTi- SBA-15 magnetic nanocomposites with photocatalytic properties*, **Catalysis Today**, **2021**, 366, 10-19 (FI = 6.766 – Q1)
2. M. Ciobanu, G. Petcu, E.M. Anghel, F. Papa, N.G.Apostol, D.C. Culita, I. Atkinson, S. Todorova, M. Shopska, A. Naydenov, R. Velinova, V. Parvulescu, *Influence of Ce addition and Pt loading upon the catalytic properties of modified mesoporous PtTi-SBA-15 in total oxidation reactions*, **Applied Catalysis A: General**, **2021**, 118123 (FI = 5.706 – Q1)
3. V. Bratan, P. Chesler, C. Hornoiu, M. Scurtu, G. Postole, P. Pietrzyk, A. Gervasini, A. Auroux, N.I. Ionescu, *In situ electrical conductivity study of Pt-impregnated VO<sub>x</sub>/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts in propene deep oxidation*, **J. Mater. Sci.**, **2020**, 55, 10466–10481 (FI = 4.220 – Q2)
4. L. Ilieva, P. Petrova, A.M.Venezia, E.M. Anghel, R. State, G. Avdeev, T. Tabakova, *Mechanochemically Prepared Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>-CeO<sub>2</sub> Catalysts for Complete Benzene Oxidation*, **Catalysts**, **2021** (FI = 4.146 - Q2)

### Carte

P. Chesler, C. Vladut, "Senzori chimici rezistivi", Editura Berg, **2020**, ISBN 978-606-9036-60-0.

19 Lucrări ISI; FIC = 61.367

## Simulări pentru chimia fizică prin calcule de înaltă performanță- Cluster calculatoare

**Proiecte** PN-III-P2-2.1-PED-2019-4816, *Cadru combinat experimental – calcule numeric e pentru studiul stocării hidrogenului in nanoparticule bazate pe magneziu*, director Dr. V. Chihaiia, valoare proiect **600.000** lei  
Join Research Project through the collaboration agreement Romanian Academy and National Research Council Italy, Director Dr. V. Chihaiia, valoare proiect **12.000** Euro

### Lucrare relevantă:

O. Kim Le, V.Chihaiia, M.P. Pham-Ho, D. Ngoc Son, *Electronic and optical properties of monolayer MoS<sub>2</sub> under the influence of polyethyleneimine adsorption and pressure*, **RSC Adv.**, **2020**, 10, 4201-4210 (FI = 3,361 – Q2)

### Capitol de carte

V. Chihaiia, V. Alexiev, S. Hasan, *Assessment of the Heat Capacity by Thermodynamic Approach based on Density Functional Theory Calculations*, in book: *Calorimetry*, Editor: Dr. Jose Luis Rivera Armenta, (IntechOPEN:England and Wales, **2021**)

### Schimburi interacademice

- 3 proiecte interacademice cu Institutul de Cataliză, Sofia, Bulgaria

# ȘTIINȚA SUPRAFEȚELOR ȘI A STRATURILOR SUBȚIRI

## Senzori și materiale piezoelectrice

21 Lucrări ISI/2020; FIC = 91, Citări 2020 - 289  
19 Lucrări ISI/2021; FIC = 57, Citări 2021 - 529

### Lucrări ISI relevante

1. A. Slav, I. Dascalescu, A.M. Lepadatu, C. Palade, N. Zoita, H. Stroescu, S. Lazanu, M. Gartner, D. Buca, V. Teodorescu, M. Ciurea, M. Braic, T. Stoica, *GeSn/SiO<sub>2</sub> multilayers by magnetron sputtering deposition for SWIR photonics*, **ACS Applied Materials & Interfaces**, **2020**, 12, 50, 56161–56171 (FI = 9.229 – Q1)
2. M. Chelu, H. Stroescu, M. Anastasescu, J.M. Calderon-Moreno, S. Preda, M. Stoica, Z. Fogarassy, P. Petrik, M. Gheorghe, C. Moldovan, M. Gartner, *High-quality PMMA/ZnO NWs piezoelectric coating on rigid and flexible metallic substrates*, **Applied Surface Science**, **2020**, 529, 147135 (FI = 6.707 – Q1)
3. C. Lete, M. Chelu, M. Marin, S. Mihaiu, S. Preda, M. Anastasescu, J.M. Calderon-Moreno, S. Dinulescu, C. Moldovan, M. Gartner, *Nitrite electrochemical sensing platform based on tin oxide films*, **Sens. Actuators B: Chem.**, **2020**, 316, 128102 (FI = 7.46 – Q1)
4. V. Purcar, V. Raditoiu, A. Raditoiu, F.M. Raduly, R. Manea, A. Frone, M. Anastasescu, G.C. Ispas, L.E. Wagner, S. Caprarescu, *Bilayer coatings based on silica materials and iron (III) phthalocyanine - sensitized TiO<sub>2</sub> photocatalyst*, **Mater. Res. Bull.**, **2021**, 138, 111222 (FI = 4.641 – Q2)
5. M. Nicolescu, M. Anastasescu, J.M. Calderon-Moreno, A.-V. Maraloiu, V.S. Teodorescu, S. Preda, L. Predoana, M. Zaharescu, M. Gartner, *Optical, microstructural and vibrational properties of sol-gel ITO films*, **Opt. Mater.**, **2021**, 114, 110999 (IF = 3.08 – Q2)

### Proiecte

1. SENSIS 2018-2020, *Senzori si sisteme electronice si fotonice integrate pentru securitatea persoanelor si a infrastructurilor*, Responsabil Dr. M. Gartner.
2. VOC 2019-2022, *Sistem inteligent autonom pentru detectarea compusilor organici volatili*, Responsabil Dr. M. Gartner.
3. TECH4GREEN 2020-2022, *Micro-nanotehnologii pentru monitorizarea gazelor cu efect de seră*, Director proiect Dr. M. Gartner.
4. PTE26/2019, *Tratarea apei din surse contaminate cu azotați și compuși organici clorurați utilizând procese integrate de reducere/oxidare catalitică și biofiltrare*, Responsabil proiect Dr. F. Papa.
5. PCE 234/2021, *Structuri tip scaffold absorbabile obtinute prin printare 3D cu laser; cu stabilitate biomecanica prelungita in fluide biologice*, Director proiect Dr. J. Calderon

### Schimburi interacademice

- România - Bulgaria 2018-2020, Dr. M. Gartner
- România - Ungaria 2019-2022, Dr. M. Gartner

### Aparat unic pe plan național elipsometrul IR



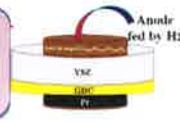
# ȘTIINȚA SUPRAFETELOR ȘI A STRATURILOR SUBȚIRI

8 Lucrări ISI, FIC = 51.53

Pile de combustie  
cu electrolit polimer  
(PEMFC)



Pile de combustie  
cu electrolit oxid solid  
(SOFC)



Dezvoltare straturi anodice pentru pilele de combustie alimentate cu hidrogen care convertesc energia chimică în energie electrică

3 Lucrări ISI, FIC = 27.416

Proiect internațional

M-ERA.NET 110/2019 (HU-RO-ES), *Holistic design of fuel cell electrocatalysts for the least power applications (CATALEAST)*, 01/06/2019-31/05/2022, Responsabil de proiect Dr. S. Șomăcescu, Valoare contract 470.000 RON

Lucrări relevante

1. L. Navarrete, M. Florea, P. Osiceanu, J. M. Calderon-Moreno, M. Trandafir, S. Somacescu\*, J. M. Serra, *NiO / Sr doped Ce<sub>0.85</sub>Pr<sub>0.10</sub>Er<sub>0.05</sub>O<sub>(2-delta)</sub> mesoarchitected catalyst for partial oxidation of CH<sub>4</sub> and anode fueled by H<sub>2</sub>*, *Micropor. Mesopor. Mater.*, **2021**, 323, 111171 (FI = 5.455 – Q1)

2. S. Neatu, F. Neatu, M.I. Chirica, I. Borbáth, Emilia Tálás, A Tompos, S. Somacescu, P. Osiceanu, A. M Folgado, A. M. Chaparro, M. Florea, *Recent progress on electrocatalysts and electrodes for portable fuel cells*, *REVIEW, J. Mater. Chem. A*, **2021**, 9, 17065-17128 (FI = 12.732 – Q1)

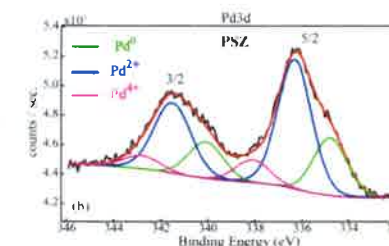
3. S. Neatu, F. Neatu, V. C. Diculescu, M. M. Trandafir, N. Petrea, S. Somacescu, F. Krumeich, J. T. C. Wennmacher, A. J. Knorpp, J. A. van Bokhoven, M. Florea, *Undoped SnO<sub>2</sub> as Support for Ni Species to Boost the Oxygen Generation through Alkaline Water Electrolysis*, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2020** 12, 16, 18407–18420, (FI = 9.229 – Q1)

Senzori cu limită joasă de detecție  
pentru H<sub>2</sub>S și CO



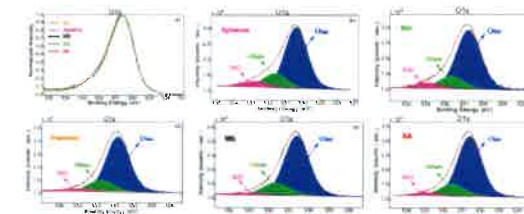
5 Lucrări ISI, FIC = 24.114

- Senzori de tip Pd/SnO<sub>2</sub> și Pd/SnO<sub>2</sub> dopat cu Zn pentru detecție CO la temperatura joasă
- Sensibilitatea și selectivitatea la CO influențate de chimia suprafeței Pd cu stări de oxidare multiple, Pd<sup>0</sup>, Pd<sup>2+</sup>, Pd<sup>4+</sup>, evidențiate prin XPS



A Stanoiu, C Ghica, S Somacescu, AC Kuncser, A. M. Vlaicu, I.F. Mercioniu, O.G. Florea, C.E. Simion, *Low temperature CO sensing under infield conditions with in doped Pd/SnO<sub>2</sub>*, *Sensors and Actuators B: Chem.* **2020**, 308, 127717 (FI = 7.46 – Q1)

Suprafața hidroxilată diferit (grupări OH și H<sub>2</sub>O adsorbite pe suprafață) oferă explicația pentru performanța senzorilor bazați pe WO<sub>3</sub> pentru monitorizarea calității aerului.



A. Staerz, S. Somacescu, M. Epifani, T. Kida, U. Weimar, N. Barsan, *WO<sub>3</sub> - Based Gas Sensors: Identifying Inherent Qualities and Understanding the Sensing Mechanism*, *ACS Sens.* **2020**, 5, 6, 1624–1633 (FI = 7.711 – Q1)

# PROCESE DE ELECTROD, COROZIUNE ȘI MATERIALE PENTRU SISTEME ELECTROCHIMICE

18 lucrări ISI; FIC = 63.68

**Obținerea și caracterizarea prin metode electrochimice de materiale cu proprietăți prestabilite**

## Lucrări reprezentative

1. N. Spătaru, J.M. Calderon-Moreno, P. Osiceanu, T. Kondo, C. Terashima, M. Popa, M.M. Radu, D. Culita, L. Preda, M.A. Mihai, T. Spătaru, *Conductive diamond powder inclusion in drop-casted graphene for enhanced effectiveness as electrocatalyst substrate*, **Chemical Engineering Journal**, 402, 2020, 126258 (FI = 13.273 – Q1)
2. J. García-Guzmán, D. López-Iglesias, L. Cubillana-Aguilera, D. Bellido-Milla, J. M. Palacios-Santander, M. Marin, S. D. Grigorescu, C. Lete, S. Lupu, *Silver nanostructures - poly(3,4-ethylenedioxythiophene) sensing material prepared by sinusoidal voltage procedure for detection of antioxidants*, **Electrochimica Acta**, 393, 2021, 139082 (FI= 6.9 –Q1)

**Lichide ionice: proprietăți și aplicații electrochimice**

## Proiecte naționale

PN-III-P2-2.1-PED-2019-0022 / 25.09.2019, Ctr.330PED/2020, *Sinteza electrochimică a aliajelor cu entropie înaltă cu rezistență superioară tribologică și la coroziune (HEASYNTCORR)*, Director de proiect: Dr. A.M.Popescu

## Schimb interacademic

Romania - Belarus (2020-2022), *Corrosion resistance of new composite materials based on encapsulated iron powders for the electrical industry*, Director Romania: Dr. A.M. Popescu, Director Belarus: Dr. O. Demidenko.

**Caracterizarea în medii corosive a unor aliaje inovative, filme protectoare și inhibitori biodegradabili**

## Brevete naționale

1. Brevet nr. 132258, 05.02.2020, *Metodă de depunere a nanoparticulelor de argint pe suprafața unui nou aliaj 60Co-26.5Cr-4.Mo-0.8Mn-6Nb-0.8Zr*.
2. Brevet nr. 132259, 30.07.2020, *Metodă de depunere proteină biomimetică pentru biofuncționalizarea suprafeței noului aliaj Ti-15Ta-5Zr*.
3. Brevet nr. 130251, 8.04.2020, *Procedeu de obținere a unui aliaj Ti-20Zr biocompatibil și a unui produs cu suprafața funcționalizată din acest aliaj*.

## Proiecte naționale

PN-III-P1-1.1-TE-2019-1054, *Aliaj terțiar cu proprietăți antibacteriene și elemente de aliere non-toxice pentru implanturi*, Director de proiect Dr. S.I. Drob.

## Proiecte internaționale

Programme Research Stays for University Academics and Scientists, 2020, DAAD, *New sulfite oxidase bioanodes/photobioanodes based on graphene quantum dots for enzymatic fuel cells*, Dr. L. Preda, Universitat Potsdam, Institute for Biochemistry and Biology, AG Analytical Biochemistry, 2020-2021, Prof. Dr. Ulla Wollenberger

## Articole ISI = 26; FIC = 136.673

### Lucrări reprezentative

1. R. A. Mitran, *High temperature shape - stabilized phase change materials obtained using mesoporous silica and NaCl - NaBr - Na<sub>2</sub>MoO<sub>4</sub> salt eutectic*, *Sol. Energy Mater Sol. Cells*, **2020**, 218, 110760 (FI = 7.267 - Q1)
2. V. Fruth, *Multifunctional Composite Coatings Based on Photoactive Metal-Oxide Nanopowders (MgO/TiO<sub>2</sub>) in Hydrophobic Polymer Matrix for Stone Heritage Conservation*, *Nanomaterials*, **2021**, 11 (10), 2586 (FI = 5.076 - Q1)
3. I. Atkinson et al. *Preparation and Biocompatibility of Poly Methyl Methacrylate (PMMA)-Mesoporous Bioactive Glass (MBG) Composite Scaffolds*, *Gels*, **2021**, 7, 180., 2021 (FI = 4.702 - Q1)
4. L. Predoana et al., *Comparative study of the thermal behavior of Sr-Cu-O gels obtained by sol-gel and microwave-assisted sol-gel method*, *J. Therm. Anal. Calorim.*, **2021**, 143, 2893-2900 (FI = 4.626 - Q1)

## 5 Proiecte Nationale; 1 COST Action

1. PN-III-P1-1.2-PCCDI-2017-0476 51PCCDI/2018, (2018-2021), *Materiale traditionale si avansate utilizate pentru protejarea componentelor arhitecturale ale patrimoniului cultural* (2018-2021) Dr. L. Predoana-1.095.930 lei
  2. PN-III-P1-1.1-TE-2016-0520, 95TE/2018 (2018-2020), *Nanoconfinement in mesoporous Silica: Towards next generation energy storage materials*, Dr. R.A. Mitran- 450.000 lei
  3. PN-III-P1-1.2-PCCDI-2017-0701.85PCCDI/2018, (2018 - 2021)- *Valorificarea Complexă a Bioresurselor din Zona Mării Negre prin dezvoltarea și aplicarea unor biotehnologii inovatoare și emergente.*, Dr. R.A. Mitran, 24.132 lei-2021
  4. PN-III-P2-2.1-PED-2019-0598 Contract PED 258/2020, (2020-2022)- *Functionalized mesoporous bioglass based 3D scaffolds for hard tissue regeneration*, Dr. I. Atkinson, 350.000 lei
  5. PN-III-P1-1.1-TE-2019-1456 Contract TE 166/2020- MOST (2020-2022), *Metal-ceramic nanocomposites: next-generation thermal energy storage materials*, Dr. R.A. Mitran, 431.900 lei
- COST ACTION-CA20126** *Network for research, innovation and product development on porous semiconductors and oxides* (2021-2025)

## DIRECTII DE CERCETARE

- **Studiul sistemelor oxidice cristalizate și vitroase.**
- **Studiul sistemelor oxidice mono- și policomponente obținute prin metode chimice, în soluție.**
- **Materiale avansate pentru stocare și producere de energie în condiții ecologice.**

## Brevete

### 1 US; 2 Naționale

1. US-CO-Crystals, US 2021/0032210 A1

1. *Procedeu de obținere a unor pelicule nanocompozite destinate protejării componentelor arhitecturale litice ale patrimoniului cultural* **134390/2021**
2. *Materiale nanocomposite metal-oxid mezoporos pentru stocarea energiei termice la temperaturi ridicate și procedeu de obținere ale acestora.* **A 2021** 00100.

## Cărți/Capitole de carte

### 1-Carte

M. Crisan et al., *Nanomateriale fotocatalitice pe bază de TiO<sub>2</sub> cu utilizări în degradarea avansată a compușilor xenobiotici din apă*, Editori: M. Crișan, A. Ianculescu., București: Politehnica Press, 2021, ISBN 978-606-515-970-9

### 3 Capitole de carte

1. M. Zaharescu et al, *Sol-Gel and Hydrothermal Derived Mn-doped ZnO Films with Optical and Piezoelectric Properties in Recent Developments in Engineering Research*, Vol. 1, Dr. P. Elangovan, (Editor) **2020**, Publisher: Book Publisher International
2. M. Crisan et. al., *Fe-doped TiO<sub>2</sub> nanomaterials for water depollution; in Nanotechnology in the Beverage Industry* ISBN 978-0-12-819941-1, Ed. A. Amrane, S. Rajendran, T.A. Nguyen, A. Assadi, A. Sharoba, Elsevier, **2020**, 226-313
3. L. Predoana et. al., *Influence of the microwaves on the sol-gel synthesis and on the properties of the resulted oxide nanostructures* in "Microwave Heating" book, **2020**, Published by IntechOpen

## ȘTIINȚA MATERIALELOR ȘI METODE AVANSATE DE CARACTERIZARE 2020-2021

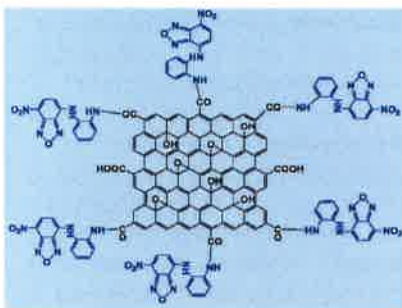
## Colaborări interacademice

1. Proiect Interacademic de Mobilitate între Institutul de Chimie Fizică Ilie Murgulescu și Centre of Natural Sciences, Hungarian Academy of Sciences, România - Ungaria (2019-2021) - Director Acad Dr. Maria Zaharescu
2. Proiect Interacademic de Mobilitate între Institutul de Chimie Fizică Ilie Murgulescu și Institute of Photonics and Electronics of the Czech Academy of Sciences, România - Republica Cehă (2020-2022) - Director Dr. Luminita Predoana

# ȘTIINȚA MATERIALELOR ȘI METODE AVANSATE DE CARACTERIZARE

**Materiale hibride organice-anorganice cu aplicații biologice și în procese de depoluare**

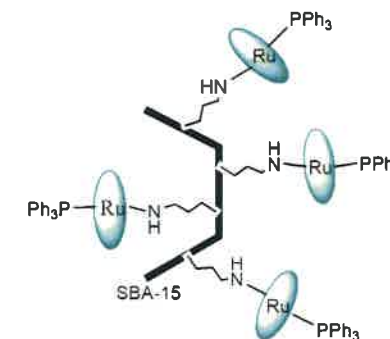
**19 Lucrări ISI; FIC = 80.47**



## Noi materiale hibride bioactive (antibacteriene și citotoxice)

M. Tudose\*, E.M. Anghel, E.N. Hristea, M. Voicescu, S. Somacescu, D. Culita, A. Musuc, F.D. Dumitrascu, A.M. Hanganu, A. Kuncser, F.L. Zorila, M. Alexandru, M.A. Acasandrei, D.I. Savu, *Benzofurazan derivatives modified graphene oxide nanocomposite: physico-chemical characterization and interaction with bacterial and tumoral cells*, **Materials Science & Engineering C**, 2021, 112028 (FI = 7.328 – Q1)

G. Marinescu, D.C. Culita\*, C. Romanitan, S. Somacescu, C.D. Ene, V. Marinescu, D.G. Negreanu, C. Maxim, M. Popa, L. Marutescu, M. Stan, C. Chifiriuc, *Novel hybrid materials based on heteroleptic Ru(III) complexes immobilized on SBA-15 mesoporous silica as highly potent antimicrobial and cytotoxic agents*, **Applied Surface Science**, 2020, 520, 146379 (FI = 6.707 – Q1)



**Schimb interacademic**  
România – Bulgaria, Dr. D.C. Culita

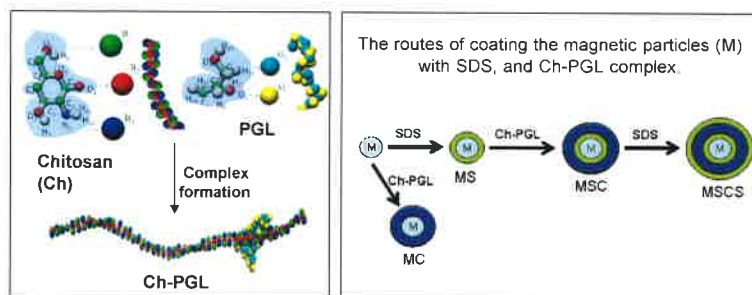
## Corelații structură - proprietăți magnetice

N. Stanica, P. Chesler\*, C. Hornoiu, C. Radu, S.H. Suh, *Monte Carlo modeling of bulk Gd*, **Journal of Physics and Chemistry of Solids**, 2020, 146, 109571 (FI = 3.442 – Q2)



## COLOIZI FUNCȚIONALI COMPLECȘI

Complecși chitosan – poliglicidol - surfactant pentru acoperirea particulelor magnetice, cu rol în adsorbția de coloranți din ape uzate



A. Iovescu, G. Stîngă, M. Elisabeta Maxim, M. Gosecka, T. Basinska, S. Slomkowski, D. Angelescu, S. Petrescu, N. Stănică, A. Băran, D.F. Anghel, *Chitosan-polyglycidol complexes to coating iron oxide particles for dye adsorption*, **Carbohydrate Polymers**, 2020, 246, 116571 (FI = 9,381 – Q1)

### Schimb interacademic

România – Polonia, *Studii asupra filmelor formate de copolimeri amfifili prin metode fluorescente*, Dr. D.F. Anghel, Dr. T. Basinska

8 Lucrări ISI; FIC = 36,86

Coloizi funcționali pentru nanomateriale avansate și compozite cu aplicații în industrie, biologie și medicină

Nanomateriale supramoleculare cu proprietăți optice controlate pentru detecție chimică și imagistică, obținute prin încorporarea albastrului de metilen în complecși de acid poliacrilic marcat cu piren și surfactant cationic



G. Stîngă, A. Băran, A. Iovescu, F. Brânzoi, D.F. Anghel, *Impact of cationic surfactant on fluorescent complex of pyrene labeled poly(acrylic acid) and methylene blue*, **Journal of Molecular Liquids**, 2021, 322, 114545 (FI = 6,165 – Q1)

Editare număr special

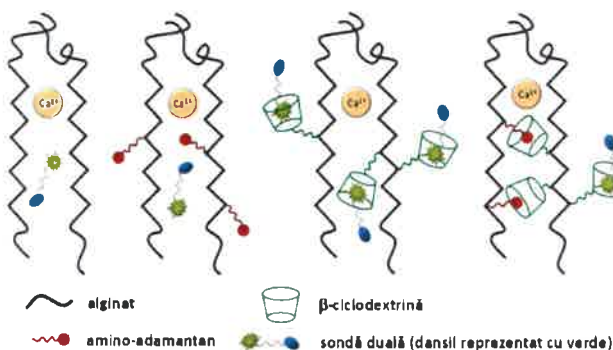


D.F. Anghel, L.O. Cintează (editori), *Functional Colloids for Advanced Nanomaterials and Composites: From Theory to Applications*, **Molecules**, 2021.

# APLICAȚII BIOMEDICALE ȘI DE PROTECȚIE A MEDIULUI

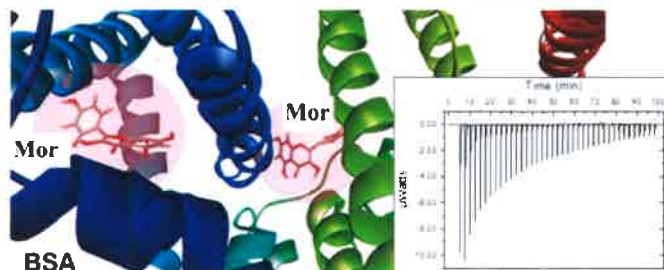
12 Lucrări ISI; FIC = 42.5

**Interacții gazdă – oaspete în geluri de alginat puse în evidență cu ajutorul sondelor duale**



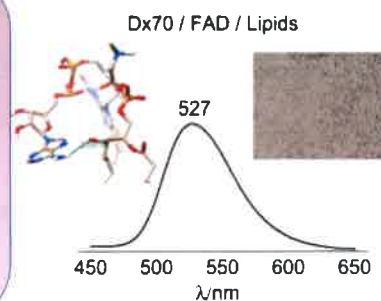
E.I. Popescu, L. Aricov, S. Mocanu, I. Matei, E. Hristea, R. Baratoiu, A. Leonties, C. Petcu, E. Alexandrescu, G. Ionita, *Subtle influence on alginate gel properties through host-guest interactions between covalently appended cyclodextrin and adamantane units*, *New J. Chem.*, 2021, 45, 8083 (FI = 3.591 - Q2)

**Interacția ligand – proteină investigată prin metode calorimetrice (ITC, DSC) și docare moleculară**



A. Precupas, R. Sandu, A. V. F. Neculae, A. Neacsu, V. T. Popa, *Calorimetric, spectroscopic and computational investigation of morin binding effect on bovine serum albumin stability*, *J. Mol. Liq.*, 2021, 333, 115953 (FI = 6.165 - Q1)

**Afinitatea flavinei și flavin adeninei pentru sisteme biomimetice dextran70/fosfatidil colină, evaluată prin spectroscopie de fluorescență și dinamică moleculară**

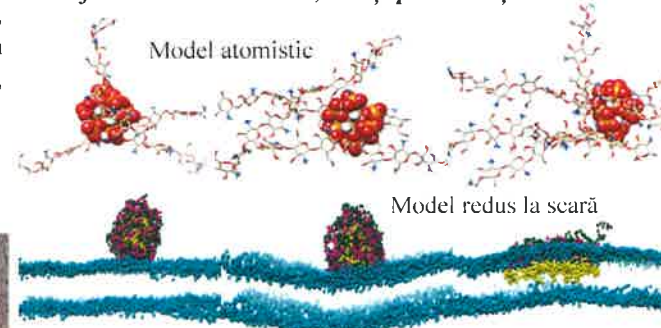


M. Voicescu, O. Craciunescu, D.G. Angelescu, R. Tatia, L. Moldovan, *Spectroscopic, molecular dynamics simulation and biological studies of flavin mononucleotide and flavin adenine dinucleotide in biomimetic systems*, *Spectrochim. Acta A Mol. Biomol. Spectrosc.*, 2021, 246, 118997 (FI = 4.098 - Q1)

**Exemple de sistem echilibrat furnizate de simulările de dinamică moleculară**

R.M. Visan, A.R. Leonties, L. Aricov, V. Chihaiia, D.G. Angelescu, *Polymorphism of chitosan-based networks stabilized by phytate investigated by molecular dynamics simulations*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2021, 23, 22601 (FI = 3.676 - Q1)

**Ion fitat conectând două, trei și patru lanțuri de chitosan**



**Încapsularea unui complex amfifilic bloc-copolimeric într-o membrană lipidică**

D.G. Angelescu, *Structural behavior of amphiphilic polyion complexes interacting with saturated lipid membranes investigated by coarse-grained molecular dynamic simulations*, *RSC Adv.*, 2020, 10, 39204 (FI = 3.361 - Q2)

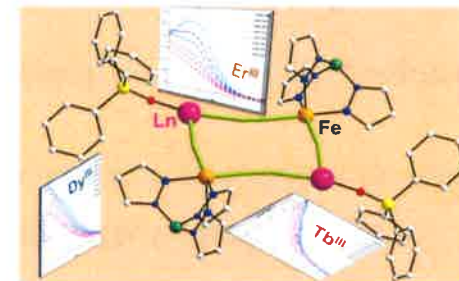
## APLICAȚII BIOMEDICALE ȘI DE PROTECȚIE A MEDIULUI

### Chimia metalosupramoleculară: ingineria cristalină a materialelor moleculare (multi)funcționale

**Design de "pătrate" moleculare  $\{Fe^{III}Ln^{III}\}_2$  heterometalice, asamblate din metaloliganzi de tip tri(ciano)ferat(III): exemple rare de nanomagneți moleculari de tipul 3d - 4f.**

M.G. Alexandru, D. Visinescu\*, B. Cula, S. Shova, R. Rabelo, N. Moliner, F. Lloret, J. Cano and M. Julve, *A rare isostructural series of 3d–4f cyanido-bridged heterometallic squares obtained by assembling  $[Fe^{III}\{HB(pz)_3\}(CN)_3]^-$  and  $Ln^{III}$  ions: synthesis, X-ray structure and cryomagnetic study*, **Dalton Transactions**, 2021, (*Spotlight Collection: Lanthanide and transition metal complexes as molecular magnets*), 50, 14640-14652 (FI = 4.39 – Q1)

12 Lucrări ISI; FIC = 33.24  
1 lucrare NonISI



D. Visinescu\*, M.G. Alexandru\*, D.G. Dumitrescu, S. Shova, N. Moliner, F. Lloret, M. Julve\*, *Cyanido-bridged  $\{Fe^{III}Ln^{III}\}$  heterobimetallic chains assembled through the  $[Fe^{III}\{HB(pz)_3\}(CN)_3]^-$  complex as metalloligand: synthesis, crystal structure and magnetic properties*, **CrystEngComm**, 2021, (*Themed collection: Coordination networks*), 26, 4615–4626 (FI = 3.545 – Q1)

### Chimia verde

**Compozite cu activitate electrocatalitică și caracteristici capacitive din asocierea unor materiale carbonatoase obținute din biomasă cu radicali organici stabili.**

G. Patrinoiu, J.M. Calderon-Moreno, S. Somacescu, A. Musuc, T. Spataru, P. Ionita, O. Carp\*, *Rational Functionalization Towards Redox-Active TEMPO Stable Free-Radical-Hydrochar Composites*, **ChemSusChem**, 2021, 14(9), 2042-2049 (*Front Cover*) (FI = 8.928 – Q1)

G. Patrinoiu, J.R. Rodriguez, Y. Wang, R. Birjega, P. Osiceanu, A. Musuc, Z. Qi, H. Wang, V.G. Pol, J.M. Calderon-Moreno\*, O. Carp\*, *Versatile by design: Hollow  $Co_3O_4$  architectures for superior lithium storage prepared by alternative green Pechini method*, **Applied Surface Science**, 2020, 510, 145431 (FI = 6.707 – Q1)

**Proiect IDEI 2021-2024 – PN-III-P4-ID-PCE-2020-2324 (PCE 54/2021), Materiale carbonatoase derivate din (poli)zaharide: platformă pentru dezvoltarea unei noi generații de senzori electrochimici verzi pe bază de cupru**, Director de proiect: Dr. O. Carp / Dr. D. Vișinescu





## Activitate doctorală

### Școala de Studii Avansate a Academiei Române (SCOSAAR)



#### 8 Conducători de doctorat

Acad. Maria Magdalena Zaharescu  
Dr. Speranța Valeria Tănăsescu  
Dr. Măriuca Florica Gartner  
Dr. Dan Florin Anghel  
Dr. Viorica Pârvulescu  
Dr. Gabriela Elena Ioniță  
Dr. Niculae Spătaru  
Dr. Daniel George Angelescu

#### 9 Doctoranzi

	Anul înmatriculării
Mihai Marian Radu	2017
Matei Andreea	2018
Mihaela Ioan	2018
Raluca Marieta Vișan	2020
Elena Alexandra Săndulescu	2020
Mihai Marius Alexandru	2020
Alexandru Vicențiu Florian Neculae	2020
Tenița Maria	2020
Șerban Adriana Petruța	2021

#### 5 Lucrări de doctorat susținute în perioada 2020-2021

- *Sisteme moleculare și supramoleculare în care sunt evidențiate interacții de spin*, M.C. Buta, conducător științific Dr. G. Ioniță, **2020**.
- *Sisteme ce conțin polizaharide studiate prin spectroscopia de rezonanță electronică de spin*, E.I. Popescu, conducător științific Dr. G. Ioniță, **2021**.
- *Nanomateriale oxidice mezostructurate pe bază de TiO<sub>2</sub> cu aplicații în procesele de depoluare fotocatalitică a mediului*, D. Negoescu, conducător științific Dr. V. Pârvulescu, **2021**.
- *Materiale catalitice performante pe bază de zeolit Y și silice mezoporoasă, funcționalizate cu metale tranziționale, utilizate în degradarea și valorificarea unor poluanți din apă și aer*, G. Petcu, conducător științific Dr. V. Pârvulescu, **2021**.
- *Proiectarea, sinteza, caracterizarea și testarea unor materiale oxidice nanostructurate pentru aplicații senzoriale și piezoelectrice*, M. Chelu, conducător științific Dr. M. Gartner, **2021**.



## **Institutul de Chimie Macromoleculară „Petru Poni” al Academiei Române**

**Alea Grigore Ghica Vodă, nr. 41A,  
700487 Iași, Romania  
Tel.: +40-232-217454, Fax: +40-232-  
211299  
e-mail: [pponi@icmpp.ro](mailto:pponi@icmpp.ro)  
<http://www.icmpp.ro>**



**PETRU PONI**



# Generalități



1949 Cladirea Moldova”



1952 – 1956  
(1100 mp)



1972  
(3000 mp)

Fondat în 1949 ca Institut de Chimie al Academiei Române.

*Institut de excelenta* al Academiei Romane

Institutul pentru Informare Științifică (ISI Thomson), Philadelphia, USA, (instituția principală pentru monitorizarea și cuantificarea cercetării) a situat ICMPP pe primele trei poziții (în funcție de anul analizei) printre principalii “actori” ai României pe “scena” cercetării internaționale.

# Generalități



În anul 2005, ICMPP a devenit *Centru de Excelență de nivel european*. Această recunoaștere a fost câștigată în urma unei competiții deschise în cadrul FP6, când în România au fost recunoscute 8 astfel de centre pe lângă alte 4 certificate în anul 2000 în cadrul FP5. În urma competiției, ICMPP a obținut finanțare prin proiectul de integrare europeană a cercetării românești în domeniul nanoștiinței, nanotehnologiei și materialelor multifuncționale (RAINS). Proiectul a fost finanțat de Uniunea Europeană pentru o perioadă de 3 ani, cu 800 000 Euro.

Din punct de vedere al capacității de inovare, ICMPP ocupă un loc de top conform statisticilor OSIM (Biroul de Stat pentru Patente).

# Laboratoare de cercetare



**Centrul de cercetări avansate pentru bionanoconjugate și biopolimeri**



**Poliadiție și fotochimie**



**Policondensare și polimeri termostabili**



**Polimeri funcționali**



**Polimeri naturali, materiale bioactive și biocompatibile**



**Polimeri anorganici, sisteme hibride și complexe**



**Polimeri electroactivi și plasmochimie**



**Chimia fizică a polimerilor**



**Caracterizarea polimerilor și a materialelor polimerice**



# Laboratoare suport



- **Laborator de analiză spectrometrică**
- **Laborator de analiză dimensională / suprastructură / morfologie**
- **Laborator de spectroscopie**
- **Laborator de proprietăți termice, mecanice și magnetice**
- **Laborator pentru analiza masei moleculare a compușilor macromoleculari**
- **Laborator pentru modelarea și proiectarea *in-silico* a materialelor (nano)funcționale**

# Echipamente - <https://erris.gov.ro/ICMPP>



- **Sinteza și purificare / condiționare - sinteza polimerilor și a compușilor organici**
- **Caracterizare structură și microstructură - spectrometre RMN, FTIR, Raman; microscopie TEM, SEM, AFM; Difractometre cu raze X**
- **Analiză dimensională - Zetasizer, Mastersizer, Elipsometru, Morphologi**
- **Proprietăți termice și mecanice- analiză termogravimetrică, microcalorimetrie diferențială, analiză dinamo-mecanică**
- **Proprietăți optice - spectrometre UV-Vis, de fluorescență, refractometre**
- **Proprietăți electrice - spectrometru dielectric, electrometru**
- **Proprietăți reologice - reometre, viscozimetre automate**



## Educație



- în medie 10 teze de doctorat susținute anual
- 15 conducători de teze de doctorat

## Servicii, consultanță

- consultanță pentru sinteza și prelucrarea polimerilor / materialelor polimerice
- transferul de cunoștințe și tehnologie

# Cercetare aplicativă, transfer tehnologic, microproducție



## Tehnologii industriale

- *siliconi*: uleiuri, elastomeri, rășini, adezivi, paste, lubrifianți
- *poliuretani*: piele sintetică, adezivi, grăsimi blocante
- *schimbători de ioni anionici și cationici*

## Materiale speciale

- *microparticule*: tratamentul rănilor cutanate
- *hidrogeluri termosensibile bioresorbabile*: tratamentul infarctului miocardic minor
- *certificarea materialelor (nano) polimerice*

# Organizator de evenimente științifice



## Conferințe

- 28<sup>th</sup> International Conference Progress in organic and macromolecular compounds, MACRO Iași (2021)
- 2<sup>nd</sup> Scientific Meeting ff Young Researchers – “ICMPP - OPEN DOOR TO THE FUTURE”, MacroYouth (2021)
- 10<sup>th</sup> edition of “Cristofor I. Simionescu” *Frontiers in Macromolecular and Supramolecular Science* Symposium (2018)
- 12<sup>th</sup> Conference on Colloid and Surface Chemistry (2016)
- 12<sup>th</sup> Franco-Romanian Symposium on Polymers, Sophia Antipolis, France
- 4<sup>th</sup> International Conference on Analytical Chemistry

## Seminarii

- Summer School on Multifunctional Polymeric materials (2013)

## Workshop-uri

- The 3<sup>rd</sup> CEEP Workshop on Polymer Science (2015)



# 2020-2021 – centralizator rezultate



PETRU PONI

	2020	2021
lucrări publicate în reviste ISI	218/33	223 / 19
factor de impact cumulat	860,7	1037,4
factor de impact mediu/lucrare	4,06	4,28
lucrări publicate în reviste necotate ISI	9	12
lucrări publicate în volume de manifestări științifice	12	40
capitole cărți apărute în străinătate	29	35
cărți editate în străinătate:	2	4
brevete în străinătate / în România	0/8	1 /8
conferinte invitate/plenare prezentate la manifestari științifice internaționale/ naționale	18/10	16/2
comunicari orale prezentate la manifestari științifice internaționale/naționale	88/40	132/17
postere prezentate la manifestari științifice internaționale/naționale	79/34	62/6
citari în anul 2021 ale lucrărilor publicate:	5023 (25.11.2020)	7080 (17.11.2021)
Indice Hirsh		80

# 2020-2021 – lucrări reprezentative



- Non-isocyanate polyurethane thermoreversible hydrogel and method for its preparation; C. Ciobanu, L.M. Grădinaru, L.D. Tigau; US 2021/0301057 A1, 30.09.2021
- Cellulose-based biogenic supports, remarkably friendly biomaterials for proteins and biomolecules, M. E. Culica, A. L. Chibac-Scutaru, T. Mohan, S. Coseri, *Biosensors and Bioelectronics*, 182, Article 113170/1-18, 2021  $FI_{2020} = 10,618$
- Designing smart triple-network cationic cryogels with outstanding efficiency and selectivity for deep cleaning of phosphate, E. S. Dragan, D. Humelnicu, M. V. Dinu, *Chemical Engineering Journal*, 426, Article 131411/1-17, 2021  $FI_{2020} = 13,273$
- Cellulose: A ubiquitous platform for ecofriendly metal nanoparticles preparation, G. Biliuta, S. Coseri, *Coordination Chemistry Reviews*, 383, 155-173, 2020  $FI_{2019} = 13,476$
- Biomaterials of PVA and PVP in medical and pharmaceutical applications: Perspectives and challenges, M. Teodorescu, M. Bercea, S. Morariu, *Biotechnology Advances*, 37, 109-131, 2020  $FI_{2019} = 12,831$
- *Polymeric Nanomaterials in Nanotherapeutics*; C. Vasile, Ed.; Elsevier, Amsterdam, 558 p (2020)

# 2020-2021 – centralizator rezultate



PETRU PONI

	2020		2021	
			Derulate	Propuneri
Proiecte complexe realizate în consorții CDI (PCCDI)	9		8	
Proiecte complexe de cercetare de frontieră (PCCF)	1		1	
Proiecte de cercetare exploratorie (PCE)	4	26	6	27
Tinere Echipe (TE)	11		7	36
Postdoctorale (PD)	16		12	13
Proiect experimental demonstrativ (PED)	14		14	38 (coordonator) + 20 (partener)
Transfer la operatorul economic (PTE)				1
Granturi Norvegiene			2	
Fonduri structurale	5		3	
H2020	3	5	2	
ERA Net	3	1		3
ERC Synergy Grants				1
<b>TOTAL</b>	<b>66</b>	<b>32</b>	<b>55</b>	<b>139</b>



# Cercetare fundamentală și aplicată

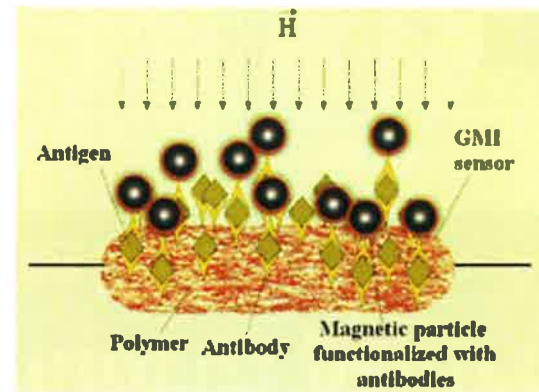
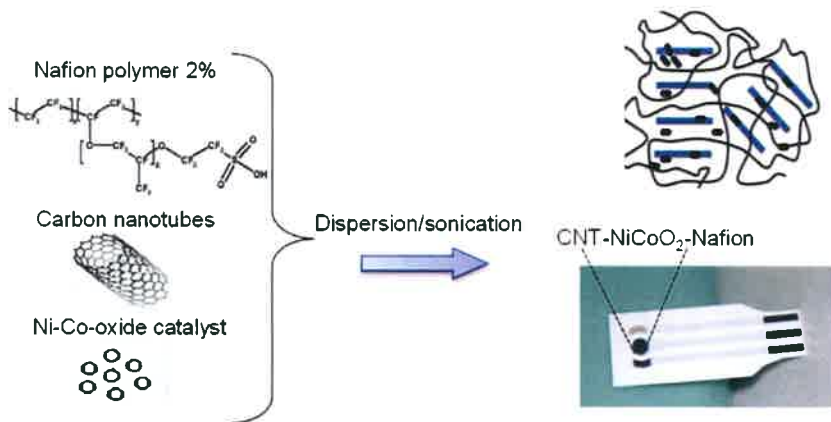
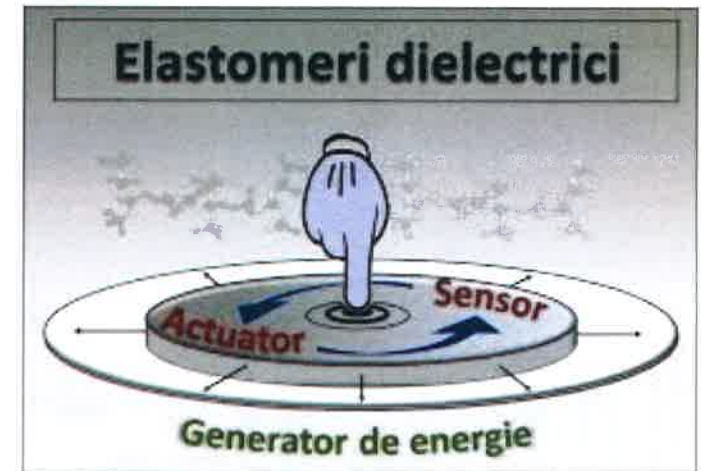
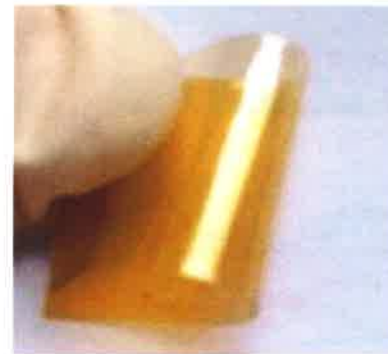


## Exemple



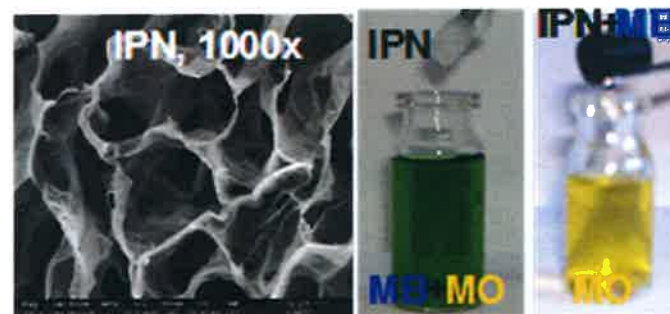
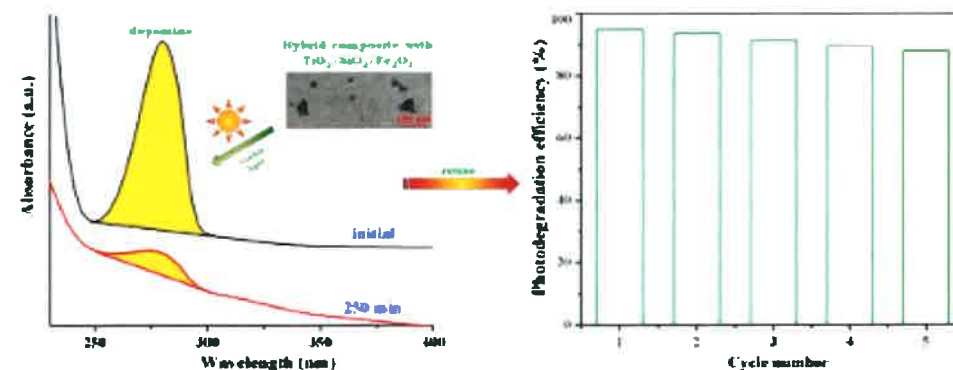
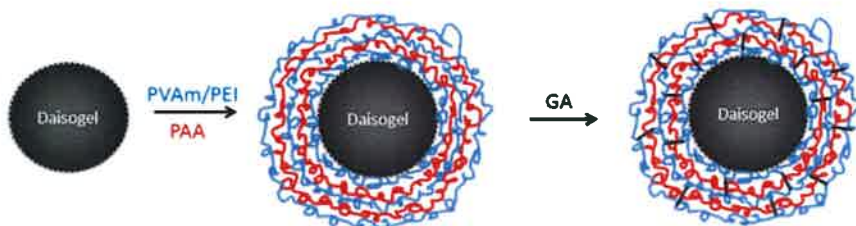
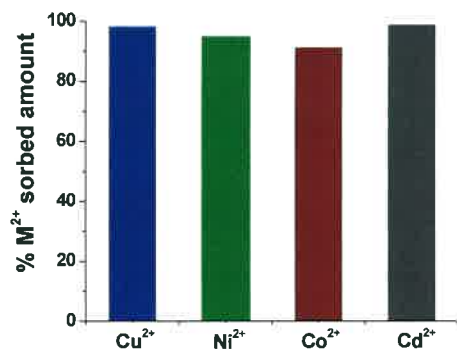
# Nanomateriale electro- și optoactive

- **Senzori și biosenzori**
- **Materiale pentru celule solare**
- **Polimeri electro- și optic activi**



# Materialle polimerice și hibrizi pentru protecția mediului și cataliză

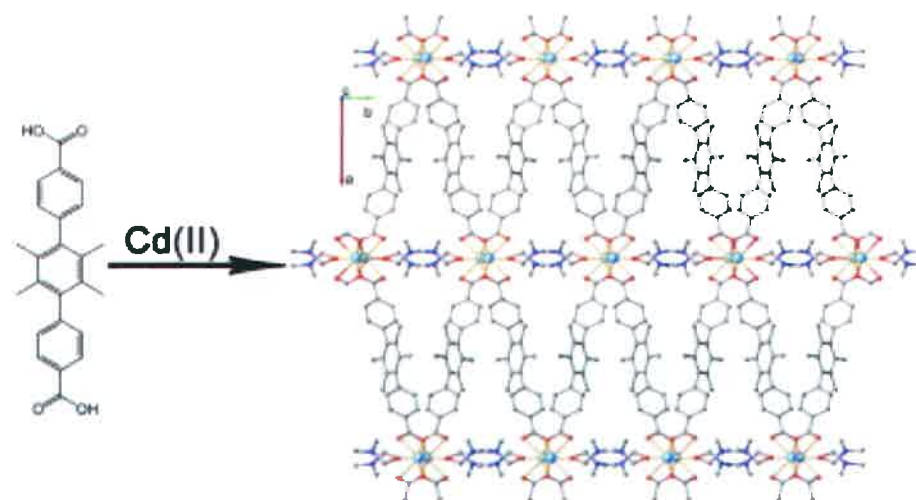
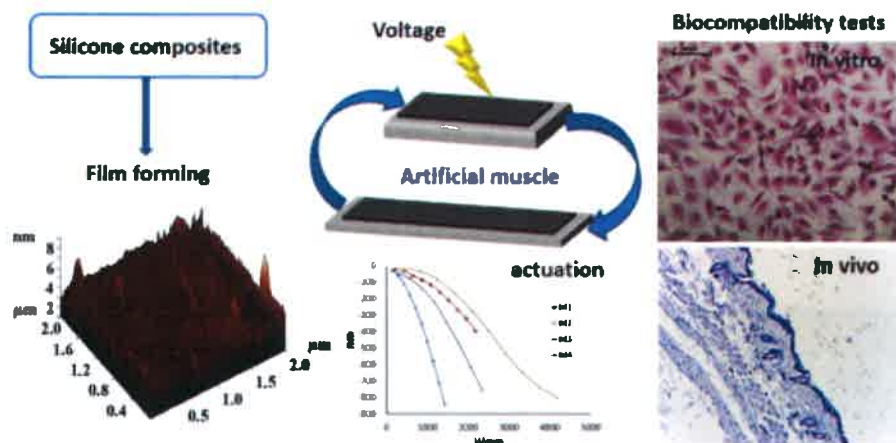
- Catalizatori chimici
- Catalizatori fotochimici
- Materiale compozite



# Polimeri și materiale avansate pentru conversia și stocarea energiei



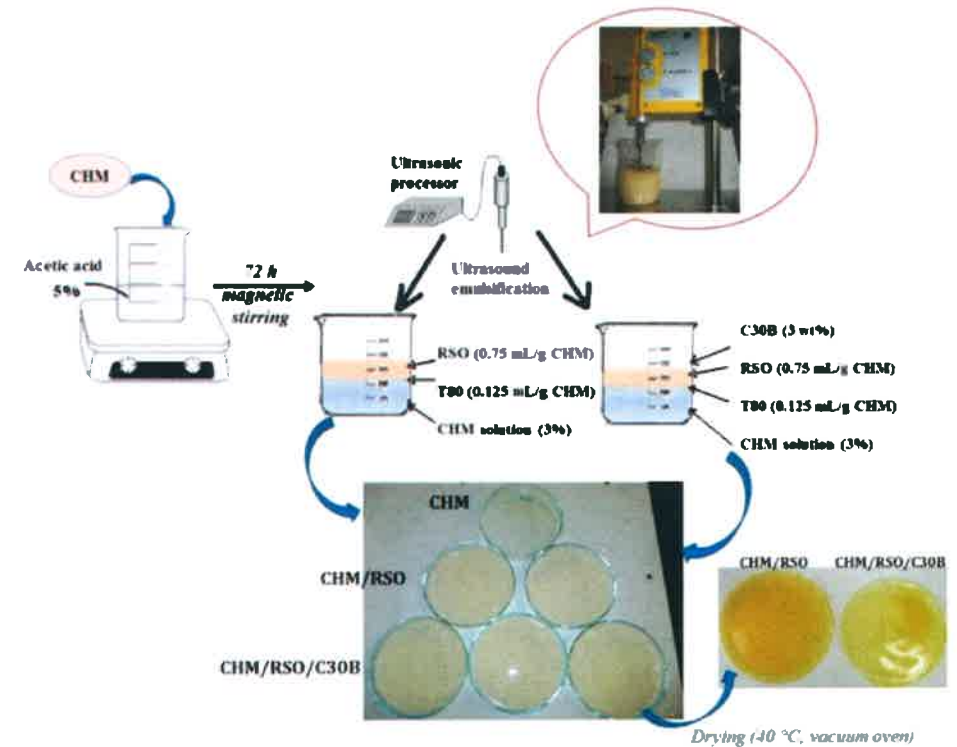
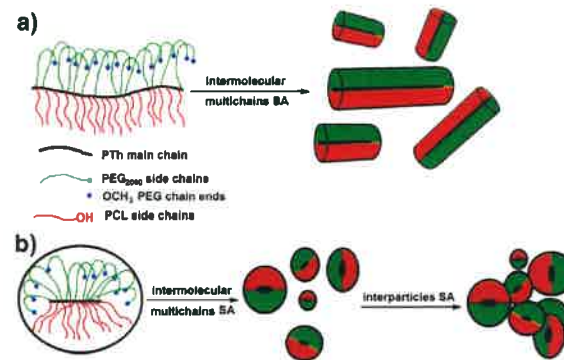
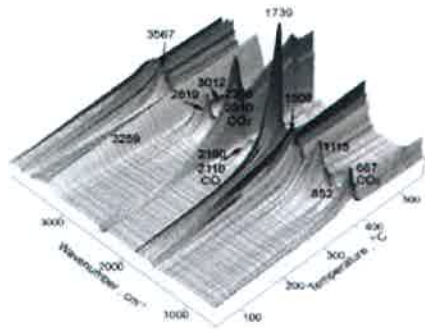
- Elastomeri dielectrici
- Materiale poroase
- Sintează compuși macromoleculari funcționali element-organici



# Materialle polimerice biodegradabile și tehnologii ecologice pentru recuperarea deșeurilor polimerice



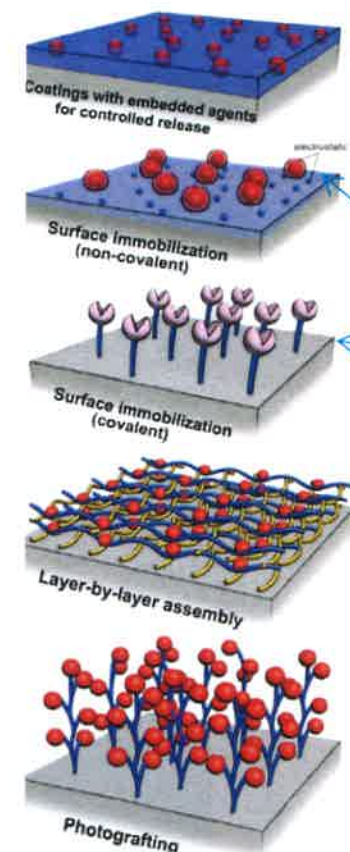
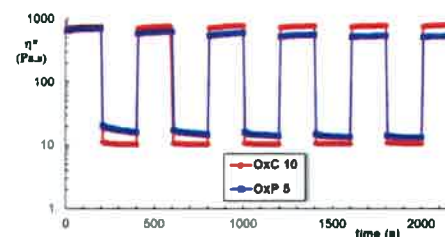
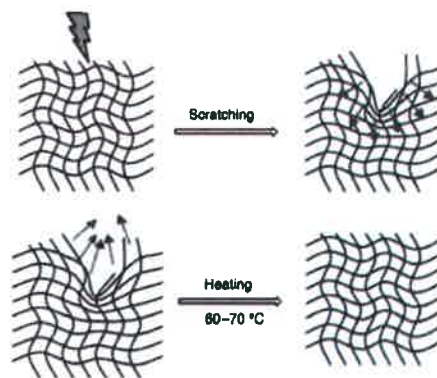
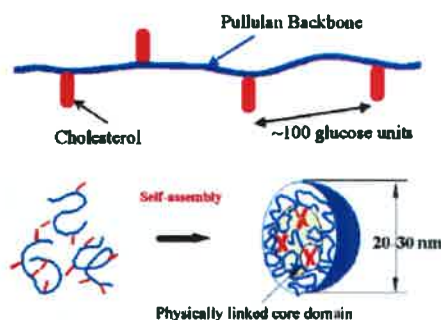
- Piroliza deșeurilor polimerice
- Gazeificarea deșeurilor polimerice
- Materiale biodegradabile
- Testare biodegradabilitate
- Analiza emisiilor de gaze toxice



# Materialle polimerice multifuncționale și eco-tehnologii pentru filme, acoperiri, adezivi



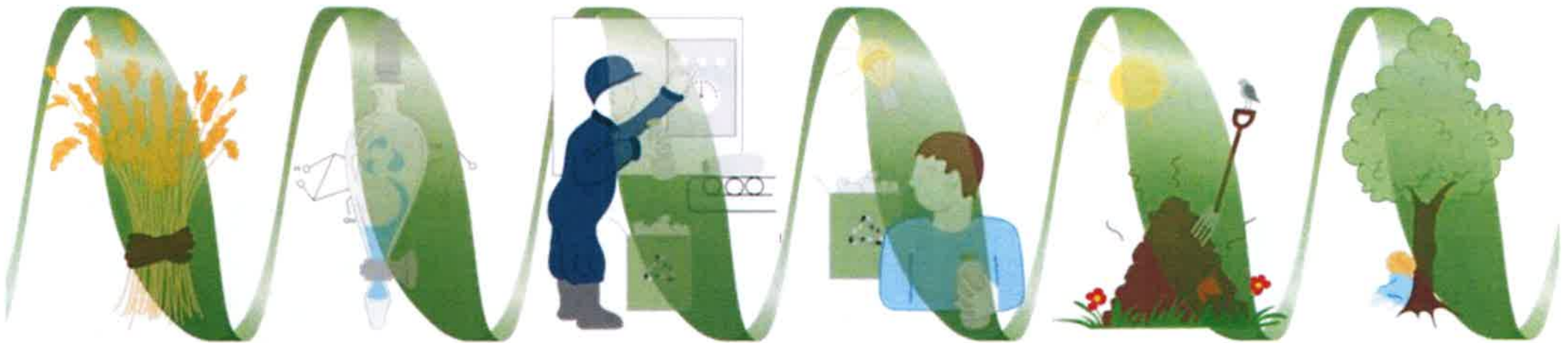
- Materiale superhidrofobe
- Materiale polimerice „self-healing”
- Materiale polimerice cu autocurățare
- Materiale polimerice rezistente la șocuri
- Materiale polimerice rezistente la flacără
- Polimeri organici și hibrizi funcționali



# Eco-tehnologii pentru utilizarea complexă a biomasei vegetale



- Efectori bioenzimatici pentru biosinteză
- Sisteme biotehnologice
- Ingineria aplicațiilor biotehnologice







# **Institutul de Chimie “Coriolan Drăgulescu”**



65 ani de la înființare:  
1956 – Secția de Chimie a  
Bazei de Cercetări Științifice din  
Timișoara a Academiei Române

2019 - HG. 1021/dec.2019

**Institutul de Chimie “Coriolan Drăgulescu”**

## Programe de cercetare 2020-2021

Nr	Programe	Proiecte	CS +AsC
1	Proiectarea moleculară asistată de calculator	2	10 +1AsC
2	Contribuții la chimia compușilor organici, element-organici și polimeri.	3	10
3	Chimia și aplicațiile compușilor tetrapirolici din clasa porfirinelor	2	2 + 3AsC
4	Compuși anorganici și hibridi cu relevanță în știința materialelor nanostructurate. Precursori pentru materiale avansate.	3	13+5AsC
	<b>Total</b>	<b>10</b>	<b>35+9AsC</b>

# Proiecte obținute prin competiție. Proiecte naționale

## Active în 2020

- 1. Îndepărtarea Poluanților din Apele Reziduale cu Ajutorul Rețelelor MetalOrganice Convenționale și Neconvenționale Fosfonice.** Cod proiect: PN-III-P1-1.1-TE; Nr. contract 18/2018. Dr. Aurelia Visa
- 2. Tehnologii eco-inovative de recuperare a grupului de metale platinice din convertorii catalitici auto uzați (ECOTECH-GMP).** Cod proiect: PN-III-P1-1.2-PCCDI-2017-1; Nr. contract 76/2018. Dr. Eugenia Fagadar-Cosma

## Active în 2021

- 1. Nanorețele Avansate Hibrade Auto-organizate cu Poziții Inter-nanoelectrozi Controlabile pentru Detecție Ultrasensibilă în Aplicații Medicale (SHIN-PULS).** Cod proiect: PN-III-P4-ID-PCE-2020-1958; Nr. Contract: PCE 48; Dr. Elisabeta Szerb
- 2. Materiale hibride de tip ceramic/porfirine depuse ca straturi unice sau de tip sandviș prin tehnica PLD pentru inhibarea coroziunii oțelurilor în mediu acid. (CERAPORCORR).** Cod proiect: PN-III-PED-2019-0487; Nr. contract: 528/2020; Dr. Eugenia Fagadar-Cosma
- 3. Detecția de înalta sensibilitate a calității apei contaminate “în urme” cu medicamente cu ajutorul electrozilor de carbon nanostructurați și cristale lichide (DRUWATSENS).** Cod proiect: PN-III-P1-1.1-PD-2019-0676; Nr. contract: 88/2020; Dr. Sorina Ilies

## Proiecte internaționale

**1. Ensuring long-term sustainability of excellence in chemical biology within Europe and beyond (EU-OPENSREEN-DRIVE).** Program H2020; cod apel INFRADEV; Dr. Liliana Pacureanu

**2. RO-OPENSREEN ICT – Centru Interdisciplinar de Specializare Inteligentă în domeniul Chimiei Biologice.** Cod apel: POC 2014-2020; Dr. Liliana Pacureanu



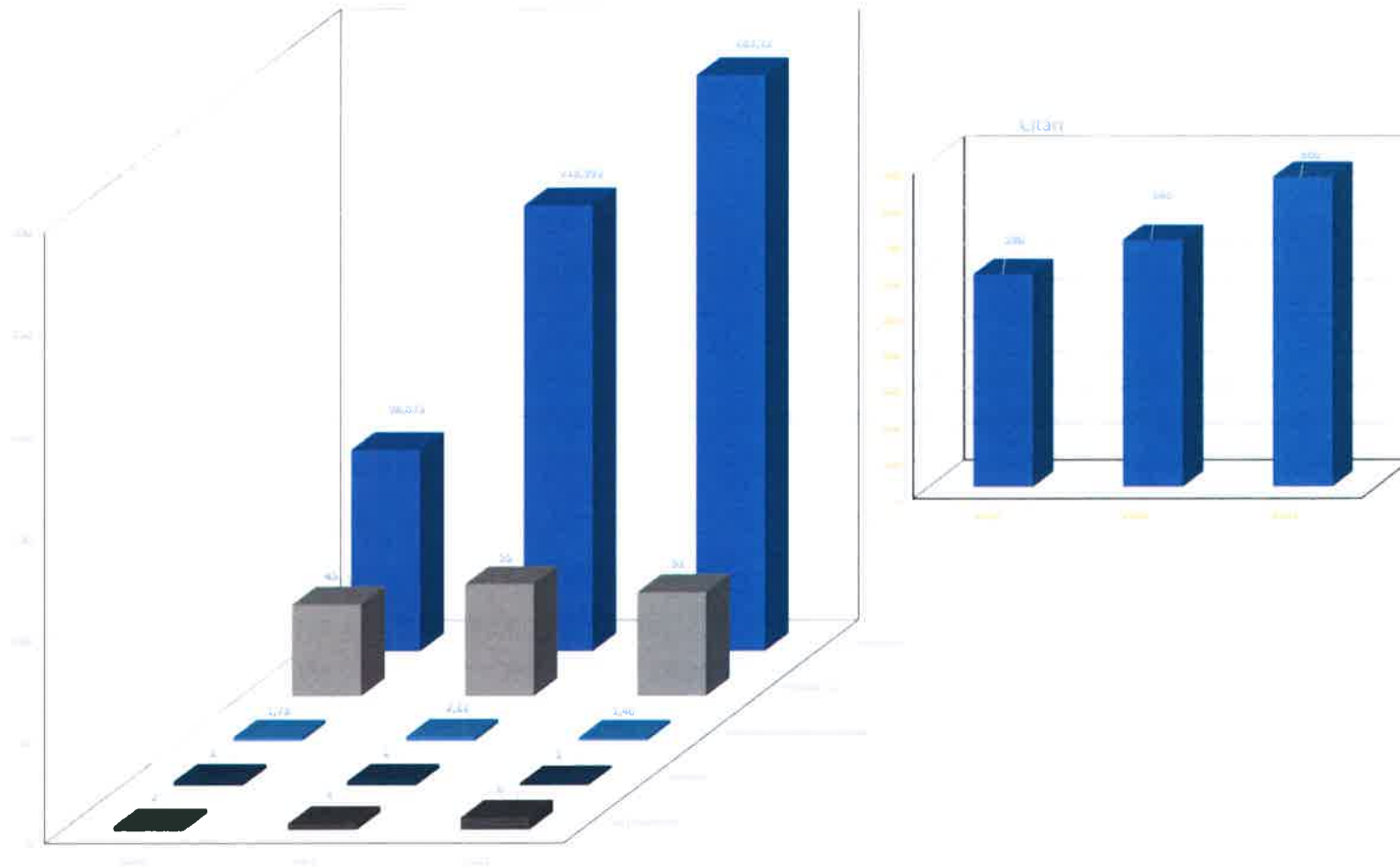
**3. Structural investigations of functionalized mesoporous silica by means of small angle neutron scattering and other methods.** JINR-Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Federația Rusă – MEC; Dr. Anamaria Putz

**4. Development of Chemical and Biochemical Laboratory For Multifunctional Use In IBR-2M Reactor Experiments.** Grant nr. 17 – IUNC, Rusia; nr. 367/11.05.2021; cod 04-4-1142-2021/2025; Dr. Anamaria Putz

**5. Insertion of sensitive fluorescent species in structured surfactant-based fluids for advanced photophysics.** Colaborare bilaterală AR – CNR Italia; Dr. Elisabeta Szerb

**6. Sinteze și aplicații de silice mezoporoasă funcționalizată.** Colaborare bilaterala AR – Academia Ungară; Dr. Anamaria Putz

# VIZIBILITATEA ICT



## IOD în cadrul SCOSAR

- 2 Conducători de doctorat
- Doctoranzi (în prezent): 3
- Teze susținute: 4

## Premiile Academiei Române în 2020

**Premiul “Gheorghe Spacu”:** 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”:** Dr. Liliana Cseh

Grupul de lucrări: *Sisteme organice cu stări multiple/multifuncționale reversibile din clasa analogilor de curcumină.*

# TEMA 1: Materiale funcționale pe bază de combinații complexe ale metalelor din blocul „d”, dr. Elisabeta Szerb

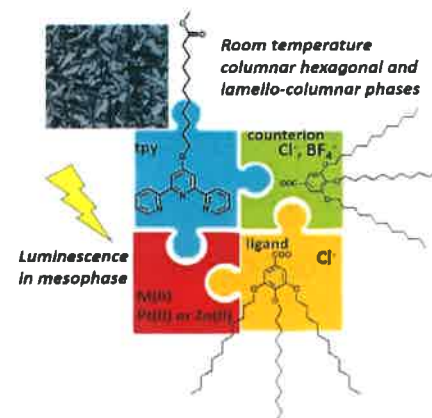
## 1. Metalomesogeni (MMs):

Scop:

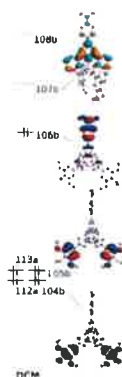
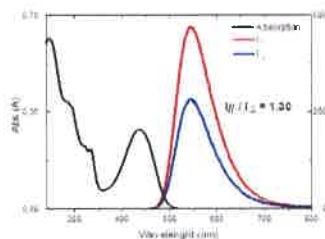
- materiale înalt luminescente și ordonate generatoare de lumină polarizată, cu aplicații în electro-optică.

Rezultate:

- ✓ MMs cu formula generală  $L^1ZnL^2$  ( $L^1$  = derivat de terpiridină,  $L^2$  = derivat de galat) care prezintă luminescență în mezofază cu *randamente cuantice înalte*.
- ✓ primul exemplu de emisie de lumină polarizată pentru un metalomesogen columnar



Emisie polarizată în film  
subțire  $I_{||}/I_{\perp} = 1.30$



**Premiul “Gheorghe Spacu”** : Dr. SZERB Elisabeta I.

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*

Szerb E. I. *et al. Chem. Eur. J.* 26, 4850, 2020. FI = 4.857

Szerb E. I. *et al. J. Mater. Chem.*, under review.

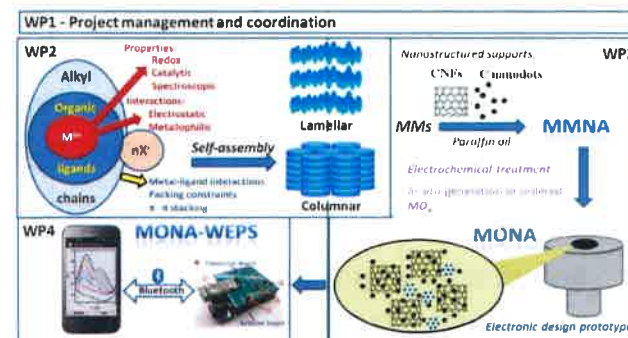


### Scop:

- MMs cu elemente din blocul *d* pentru generarea electrochimică *in-situ* de rețele *ordonate* de nanoelectrozi (MONA) de oxizi metalici ( $\text{MO}_x$ ) pentru fabricarea unor senzori electrochimici hibridi de înaltă performanță (*Proiect PCE 48/2021*).

### Rezultate:

- ✓ MMs cu formula generală  $[\text{L}^1\text{Cu}]\text{X}$  ( $\text{L}^1$  = derivat al bischinolinei;  $\text{X} = \text{BF}_4, \text{ClO}_4$ ) pentru fabricarea unor senzori electrochimici de  $\text{CuO}_x$ /grafenă quantum dots nanostructurată/nanotuburi de carbon (Cu/GRQD/CNT) pentru detecția doxorubicinei (DOX).
- ✓ Pentru dezvoltarea și îmbunătățirea protocolului de detecție pe electrodul pastă Cu/GRQD/CNT, s-au utilizat tehnicile avansate de amperometrie, cu scopul de a obține performanțe electroanalitice îmbunătățite în ceea ce privește sensibilitatea și cea mai scăzută limită de detecție. Electrodul pastă Cu/GRQD/CNT a demonstrat performanțe analitice remarcabile care permit o disponibilitate mai bună pentru aplicații practice de tip *detecția on-site* a analitului țintă.



Szerb E. I. *et al. Appl. Sci.* 10, 8419, 2020. FI = 2.474

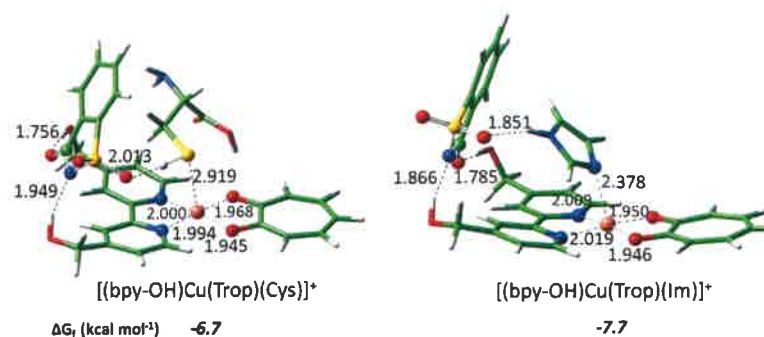
Szerb E. I. *et al. Nanomaterials* 11, 2788, 2021. FI = 5.074

## 2. Metalul ca purtător de liganzi cu activitate biologică

➤ S-a obținut combinația complexă heteroleptică cu formula generală [(bipy-OH)Cu(Trop)Sac] (bipy-OH = 4,4'-bis(hidroximetil)-2,2'-bipiridina, Trop = tropolonat, Sac = sacarinat), conținând liganzi biologic activi cu activitate antimicrobială, insecticidală, citotoxică și cu capacitate de a inhiba enzima CA IX din țesuturile tumorale.

➤ Studiile de difracție de raze X au arătat în acest compus un mod de coordinare mai puțin obișnuit al sacarinatului, respectiv prin unul din atomii de oxigen al grupării sulfonil. S-a studiat prin modelare moleculară *in silico* comportamentul în mediu biologic, evaluând interacțiunile cu liganzi N- și S-donori cum ar fi imidazolul și cisteina, ca potențiale ținte biologice. Pe baza datelor experimentale și computaționale, s-a propus un mecanism de schimb de liganzi și formare de legături de H între combinația complexă nou formată și ionul Sac prin care ionul Sac ajunge la ținta finală.

Szerb E. I. *et al. Inorg. Chem. Front.* 8, 3342,  
2021. FI = 6.569

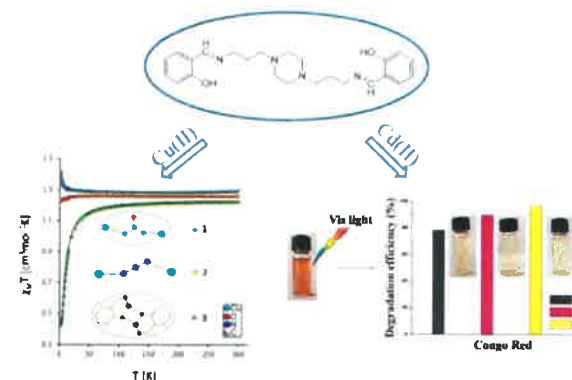


### 3. Combinații complexe ale unor elemente de tip „d” conținând liganzi de tip baze Schiff, drd. I. Buta

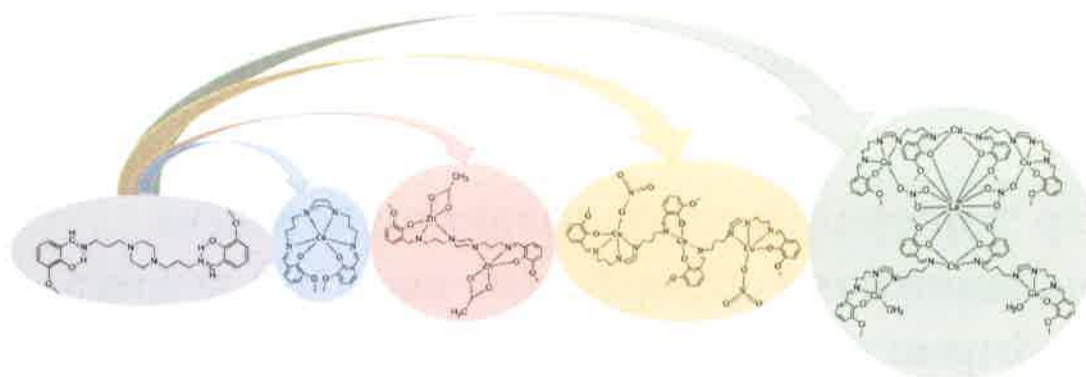
- ✓ S-au obținut polimeri de coordonare monodimensionali ai ionilor  $\text{Cu}^{\text{II}}$  și  $\text{Cd}^{\text{II}}$  cu proprietăți magnetice și fotocatalitice în procesul de epurare a apelor reziduale din industria textilă, randamentele de degradare ale coloranților anionici fiind cuprinse între 79,15 și 98,06% în prezența radiației în vizibil

Buta I. *et al. Polyhedron*, 190, 114766, 2020. FI = 3.052

Buta I. *et al. J. Photochem. Photobiol. A* 404, 112961, 2021. FI = 4.291



- ✓ S-au obținut combinații complexe mono- și oligonucleare ale ionilor:  $\text{Co}^{\text{III}}$ ,  $\text{Zn}^{\text{II}}$ ,  $\text{Cu}^{\text{II}}$  și  $\text{Cu}^{\text{II}}$ - $\text{La}^{\text{III}}$  cu proprietăți luminescente și electrochimice



Buta I. *et al. J. Mol. Struct.*

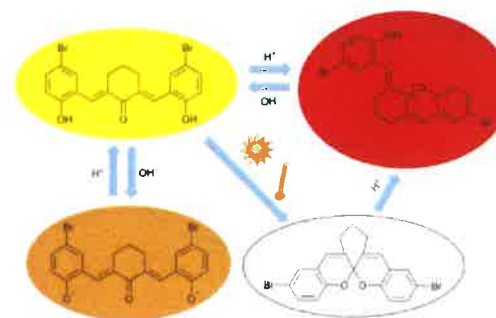
1248, 131439, 2021. FI = 3.196

## TEMA 2. Sisteme organice cu stări multiple/multifuncționale, reversibile din clasa analogilor de curcumină sub acțiunea stimulilor externi cu aplicații optice și biologice, dr. Liliana Cseh

- ✓ S-au sintetizat o serie de 15 compuși - derivații 2,6-bis(ariliden)ciclohexanonei;
- ✓ Sub acțiunea stimulilor externi (pH, lumina, temperatura) fiecare compus poate genera stări stabile și metastabile, fiecare formând un sistem reversibil de reacții chimice;
- ✓ Sistemele noi fotocromice/halocromice studiate oferă posibilitatea de blocare selectivă în 3 forme: cation xantiliu, spironaftopiran și *trans*-chalcona. Acestea pot fi rapid deblocate prin aplicarea unui stimul extern, deschizând calea spre noi tipuri de mașini moleculare cu stare finită.

S-a publicat o serie de 10 lucrări științifice (2014-2021): *J Phys Chem*, *J Org Chem*, etc.

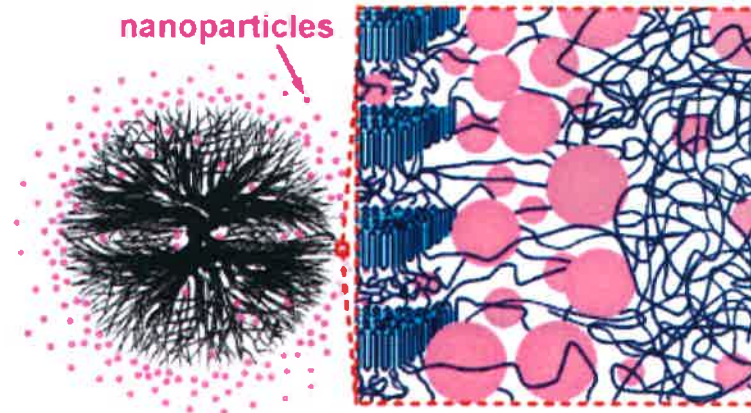
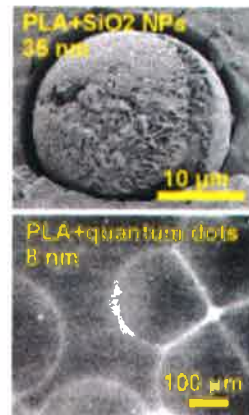
Corici L. *et al.*, *Dyes & Pigments*, 174, 108013, 2020 (IF = 4.889)



**Premiul „GHEORGHE SPACU”** pentru grupul de lucrări: *Sisteme organice cu stări multiple/multifuncționale reversibile din clasa analogilor de curcumina*, 2020

## Tema 2b. Studiul morfologiei și mecanismul de creștere al sferulitelor prin microscopie 2D și 3D

- ❖ S-a realizat: Determinarea morfologiei și mecanismului de creștere ale nanocompozitelor de tip sferic fluorescente a fost pusă în evidență pentru prima dată prin microscopie confocală.
- ❖ Primele imagini 3D ce reprezintă creșterea nanocompozitelor de tip sferic



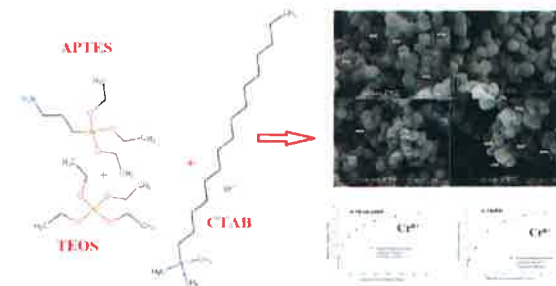
Cseh L., *et al.*, *Nature Comm.*, 12(1), 5054, 2021 (IF = 14.919)

Cseh L., *et al.*, *Polymer*, 191, 122246, 2020 (IF = 4.43)

## TEMA 3. Sisteme multicomponente cu proprietăți optice, magnetice și farmaceutice, dr. Anamaria Putz

### 1. Materiale oxidice nanostructurate sintetizate cu agenți de direcționare cationici și lichide ionice

- S-a evaluat capacitatea MO de adsorbție a ionilor de Cr(VI) și s-a arătat că funcționalizarea prin condensare duce la creșterea capacității de adsorbție a ionilor de Cr(VI), de 10 ori mai mare comparativ cu cea prin post-grefare.



Putz A.-M. et al., *Materials* 14(3), 628, 2021, FI = 3.623.

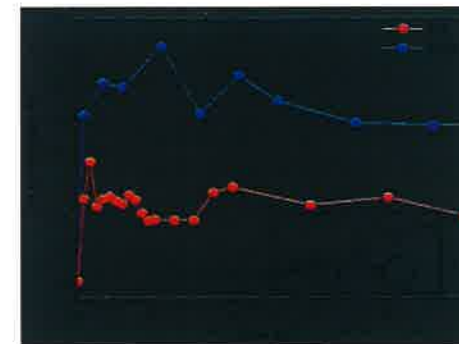
Putz A.-M. et al *Materials* 14(17), 4918, 2021, FI = 3.623

### 2. Xerogeluri de silice funcționalizate cu grupări metilice utilizate în eliberarea controlată a captoprilului

- S-a arătat că aceste sisteme controlate au aplicabilitate atunci când o doză mare de medicament este necesară a se elibera rapid, urmată de o eliberare lentă în următoarele 24 de ore.

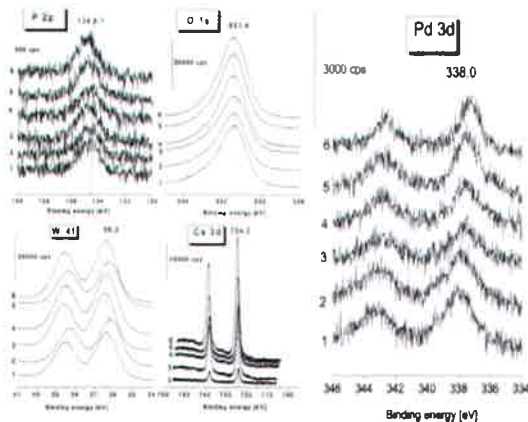
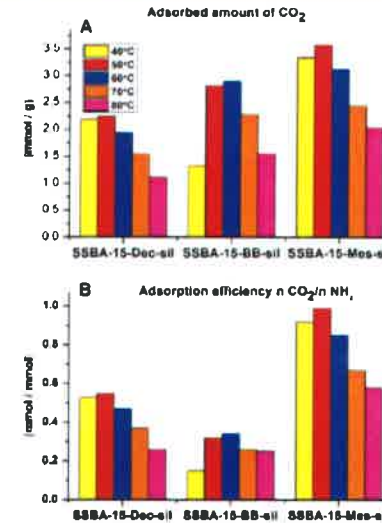
Len A., Putz A.-M. et al., *Int J. Mol. Sci.* 22(17), 9197, 2021, FI = 5.923

Policichio A., Putz A.-M. et al., *J Porous Mater.* 28, 1049-1058, 2021, FI = 2.496



## TEMA 4. Compusi solizi depusi pe suport cu proprietati catalitice dirijate, dr. A. Popa

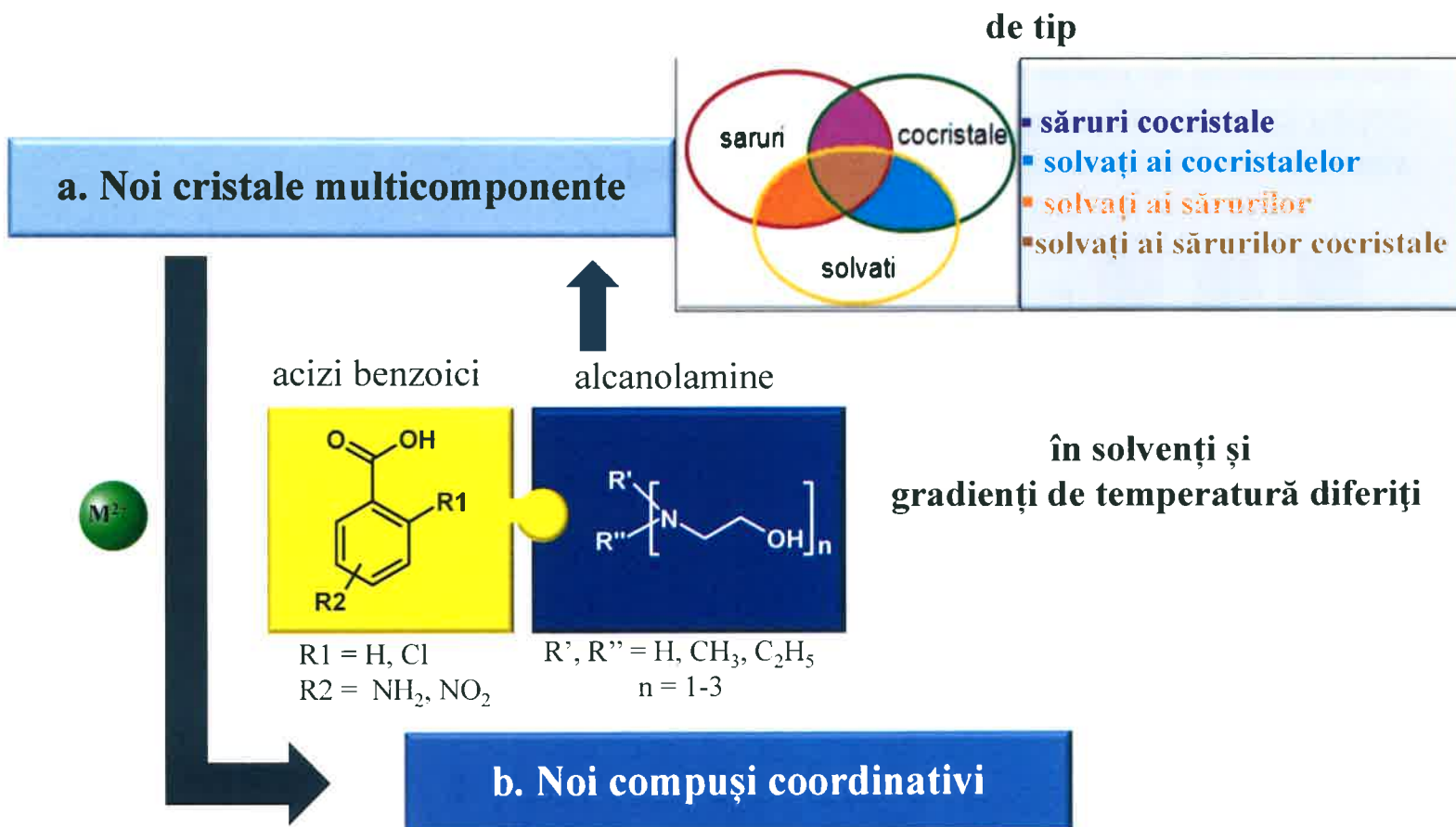
- S-au obținut suporturi de tip sită moleculară de silice mezoporoasă cu proprietăți texturale controlate prin utilizarea diferiților surfactanți și agenți de expandare a volumului porilor (mesitilen, butil benzen și 1-fenil-decan).
- Studiile proprietăților de adsorbție/desorbție ale CO<sub>2</sub>, au arătat rezultate foarte bune pe compozitele de silice grefate cu amine la 50 °C, atât pentru capacitatea de adsorbție (3,58 mmol CO<sub>2</sub>/g SiO<sub>2</sub>), cât și pentru eficiența grupărilor amino (0,99 mmol CO<sub>2</sub>/ mmol NH<sub>2</sub>).



- Prepararea unor heteropolioxometalați cu activitate catalitică de tipul Cs<sub>x</sub>H<sub>3-x</sub>PW doate cu 0.25 Pd/KU au condus la materiale cu model de microstructură Pd<sub>y</sub>Cs<sub>x</sub>H<sub>3-x</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub> care constă dintr-un miez de cristalite Cs<sub>3</sub>PW acoperite cu straturi de Pd<sub>y</sub>PW.

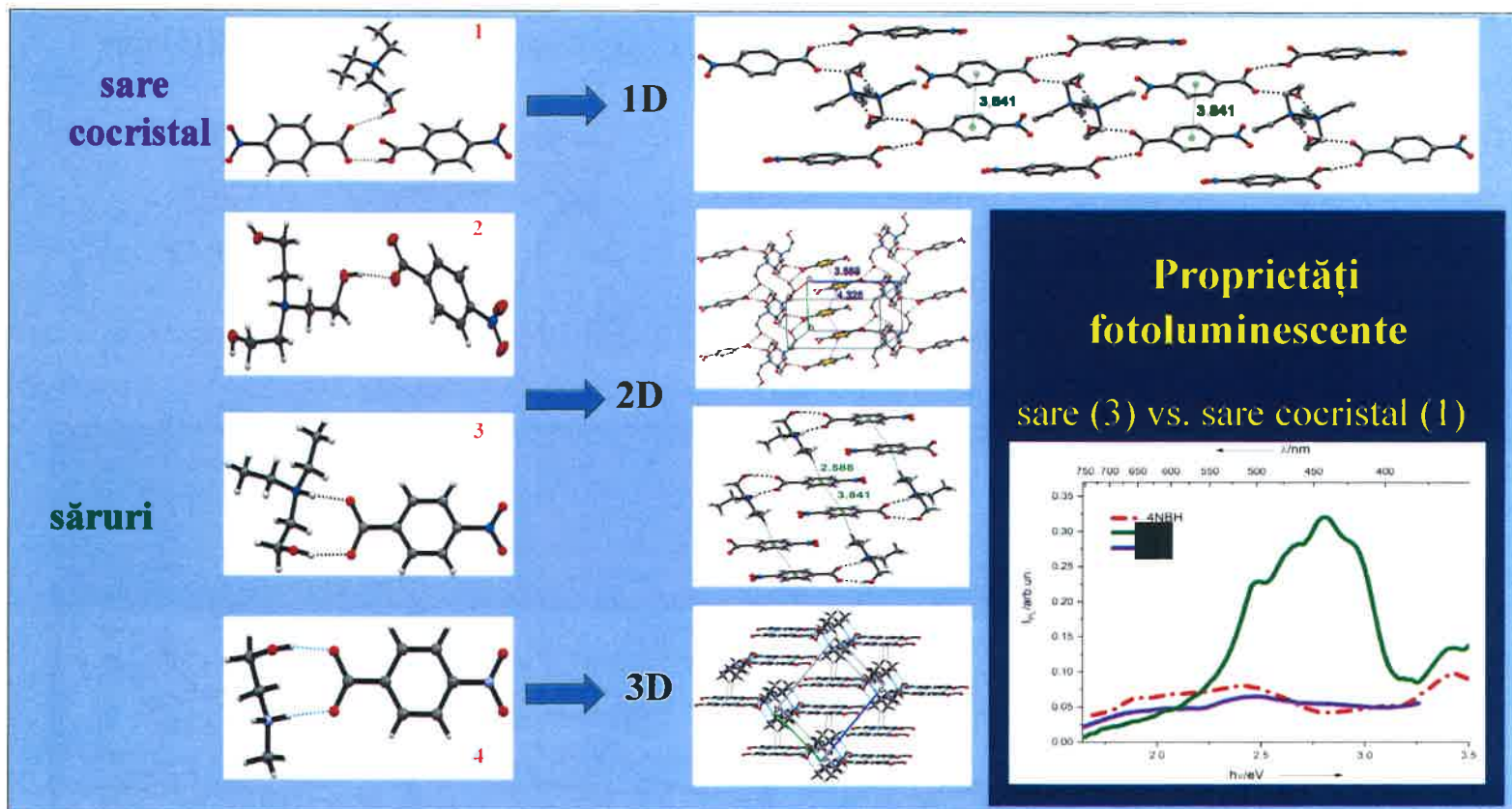
Popa A., et al., *J Porous Mater* 28, 143–156, 2021, FI= 2.496  
 Verdes O. et al., *Catal. Today*, 366, 123-132, 2021, FI= 6.766

# TEMA 5. Sisteme multicomponente fotoluminiscente, dr. Manuela E. Crișan





## a. Cristale multicomponente organice - arhitecturi supramoleculare

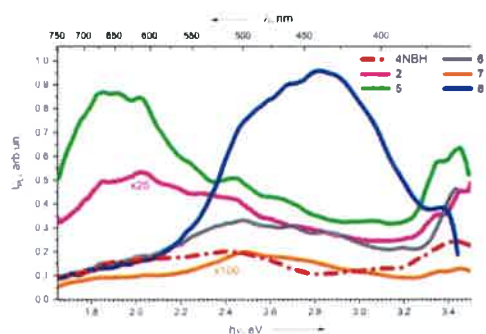
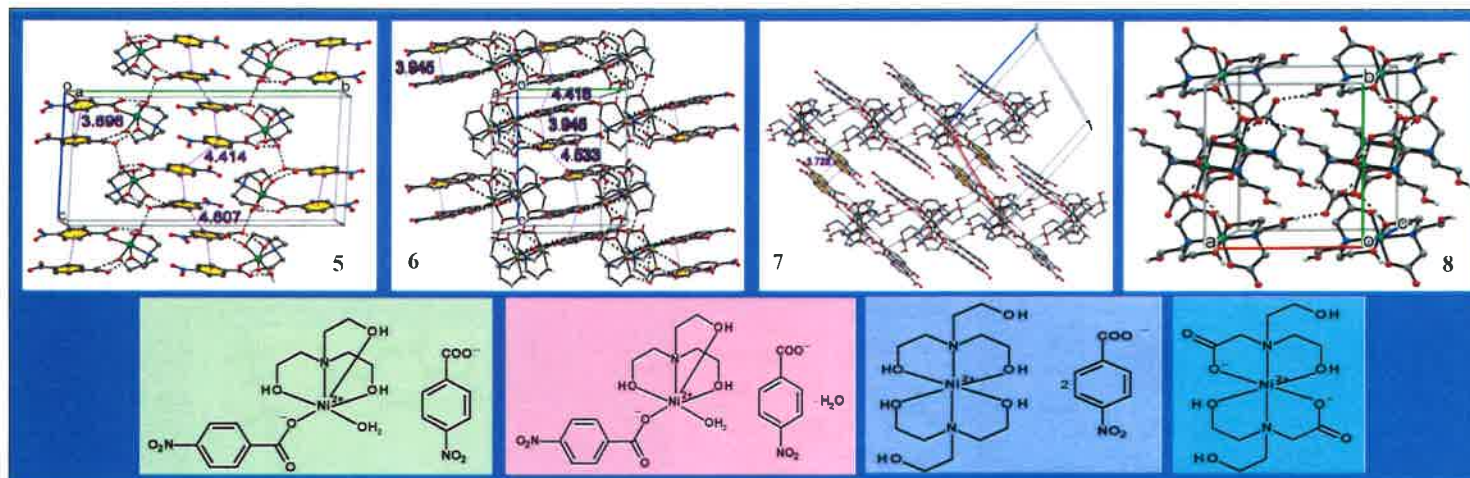


M. Crișan\* et al. *J. Therm. Anal. Calorim.*, **2021**, doi: 10.1007/s10973-020-10438-y, F.I. = 4.626

M. Crișan\* et al. *J. Therm. Anal. Calorim.*, **2020**, 141, 973-979, F.I. = 4.626;

M. Crișan\* et al. *J. Therm. Anal. Calorim.*, **2020**, 142, 191-201, F.I. = 4.626

## b. Compuși coordinativi Ni<sup>2+</sup> – arhitecturi supramoleculare



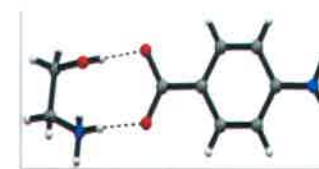
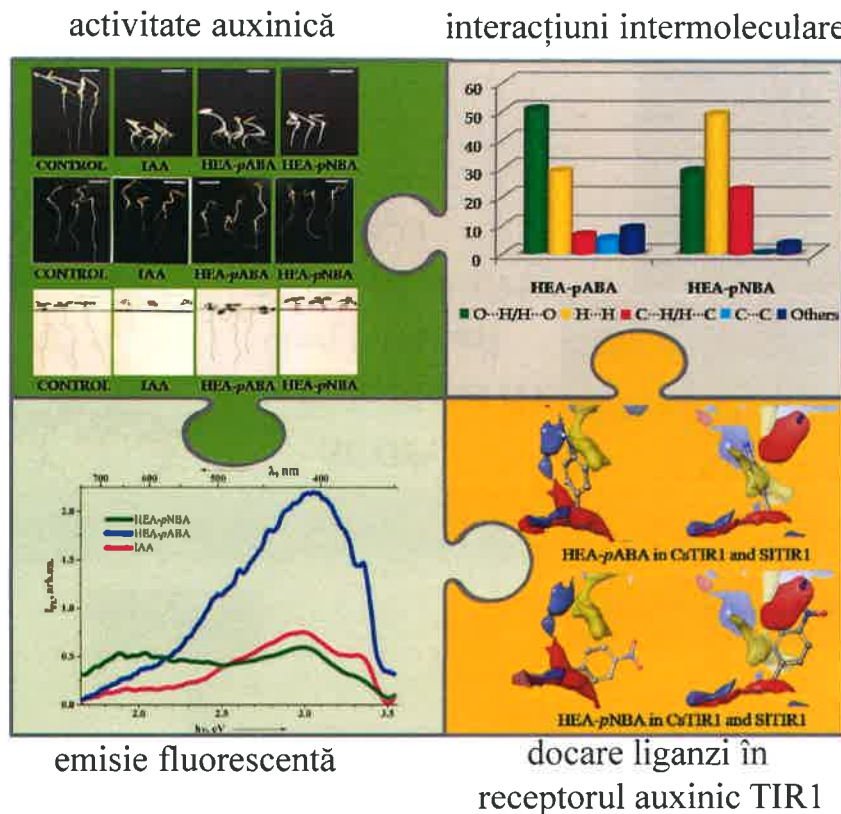
sare organică (2) vs. compleși Ni<sup>2+</sup> (5-8)

### Proprietăți fotoluminescente

Interacțiunile  $\pi$ - $\pi$  și modul de coordinare a liganzilor la metal modulează proprietățile fotoluminescente

M. Crișan et al., *Polyhedron*, **2021**, 193, 114893, F.I. = 3.052

**c. Aplicații: Sistemele multicomponente - reglatori de creștere non-toxici pentru o agricultură sustenabilă (exemplu: reglatorii de tip auxinic)**



**HEA-pABA**

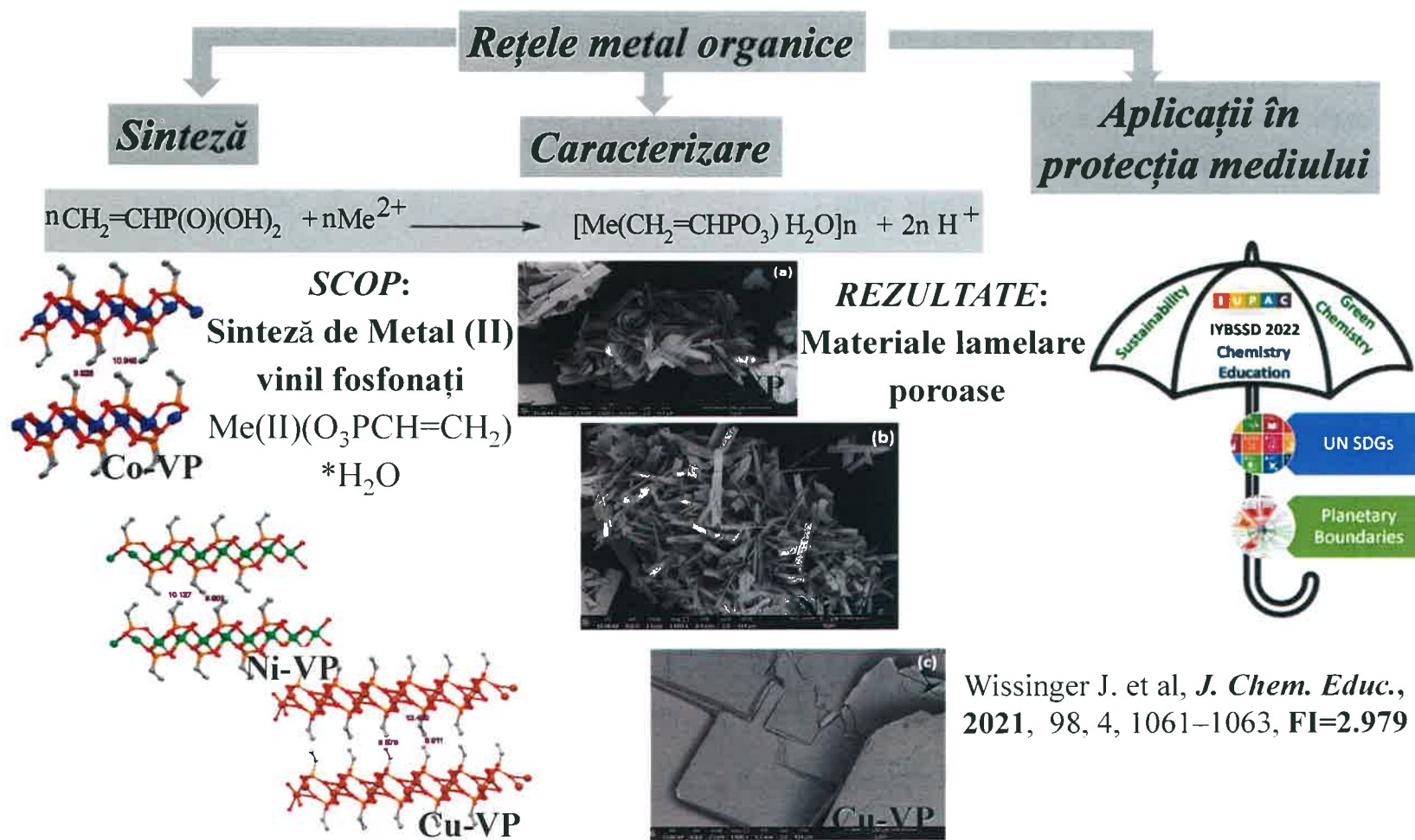
(*p*-aminobenzoatul de etanolamonium)

-un compus cu emisie fluorescentă puternică și cu activitate biologică asemănătoare auxinelor

- mai eficient decât auxina naturală IAA (acidul indol-3-acetic) în planta etalon *Arabidopsis thaliana* și în cele mai comercializate două legume în Europa, castravete (*Cucumis sativus*) și roșie (*Solanum lycopersicum*)

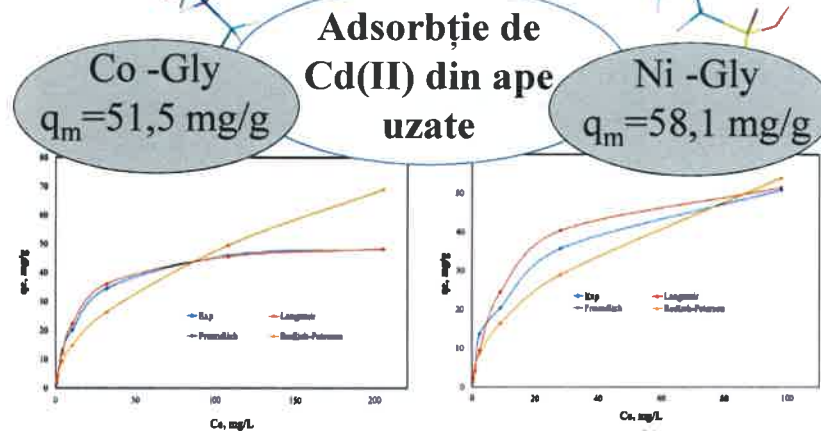
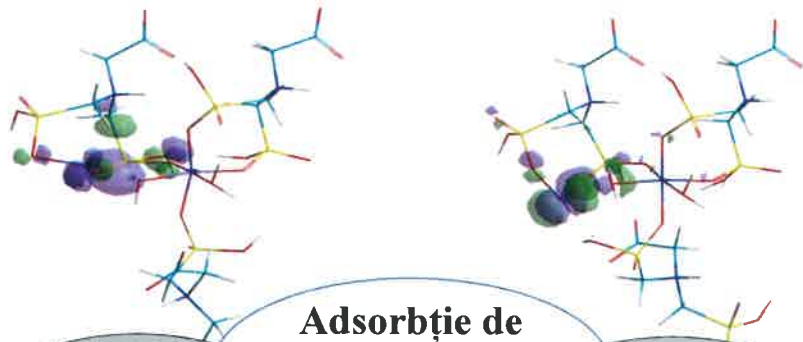
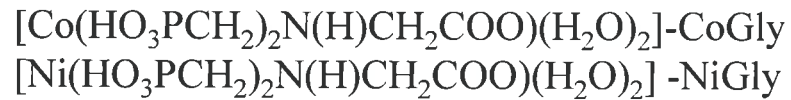
- M. Crișan\* et al. *Int. J. Mol. Sci.*, **2021**, 22, 2797, **F.I. = 5.923**
- M. Crișan\* et al. *Molecules*, **2020**, 25(7), 1635-1649, **F.I.= 4.411**

# TEMA 6. Rețele metal organice: diversitatea structurilor și a aplicațiilor, dr. Aurelia Vișa

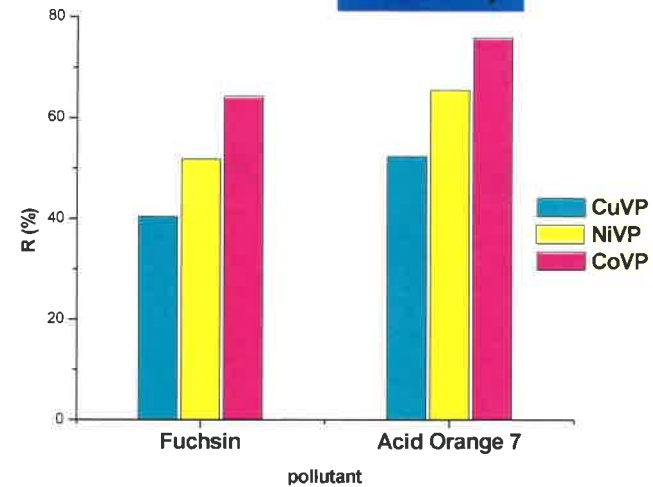


## Proprietăți adsorbante

### Metale grele



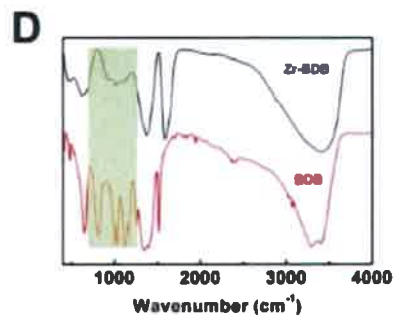
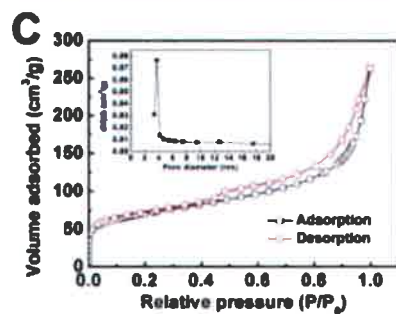
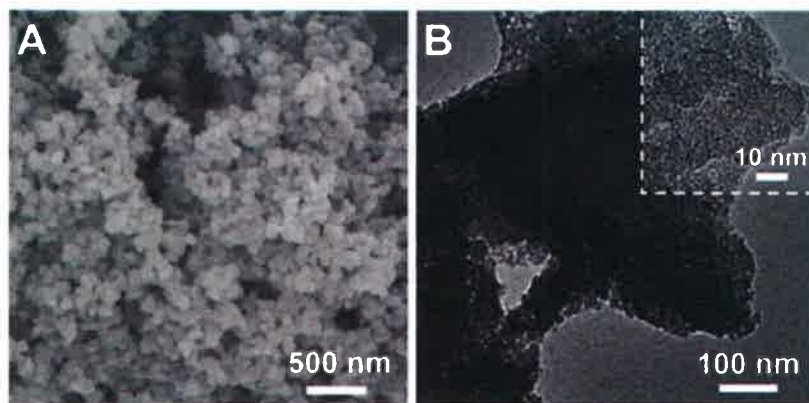
### Coloranți



Soluție colorant înainte de adsorbție(a) și după adsorbție cu (b) CuVP, (c) NiVP

- A.Visa et al, *Nanomaterials*, 2020, 10(5), Article number 899,FI=5.076 (d) CoVP
- A. Visa\* et al, *Appl. Organomet. Chem.* 34, e5939, 2020, FI= 4.105

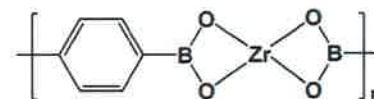
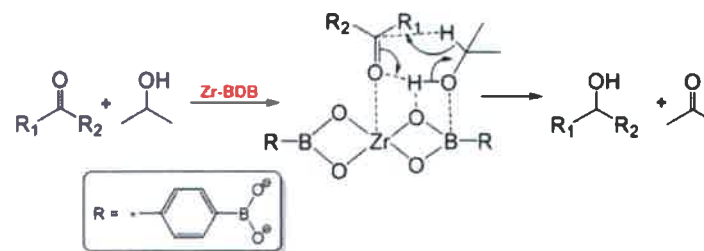
## Proprietăți catalitice



Caracterizarea Zr-BDB → compus poros  
(A) SEM, (B) TEM, (C) Isotherme N<sub>2</sub> de  
adsorptie-desorptie (271 m<sup>2</sup>/g), (D) FT-IR

✓ **SCOP:** activitate catalitica a noi rețele metal organice pe bază de zirconiu in reacția Meerwein-Ponndorf-Verley (MVP)

✓ **REZULTATE:** catalizatorii pentru reducerea selectivă a esterilor acidului levulinic, aldehide și cetone. Eficiență ridicată: Conversie: 99.5 %, Randament 98.4 %.

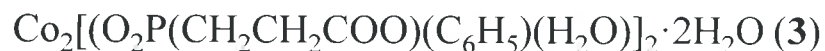
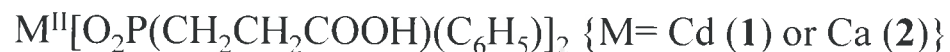


Catalizator eterogen Zr-BDB

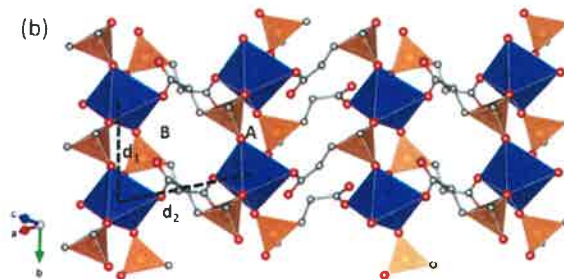
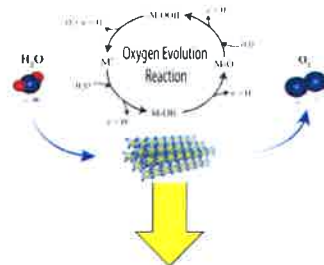
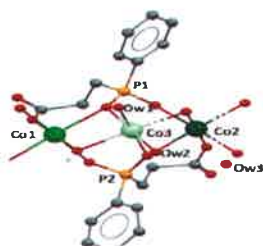
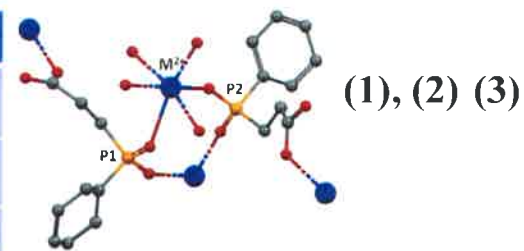
➤ Song J. et al, *Green. Chem.*, 2021, 23, 1259-1265, FI=10.182

## Proprietăți catalitice

- ✓ **SCOP:** sinteza de noi rețele metal organice pornind de la acidul 2-carboxietil (fenil)fosfinic cu  $Me^{2+}$  și testarea activității electrocatalitice



	1	2	3
Grup spațial	$P2_1/n$	$Pn$	$P2_1/a$ (a)
Formula chimică	$C_{18}H_{20}O_8P_2Cd$	$C_{18}H_{20}O_8P_2Ca$	$C_{36}H_{52}O_{24}P_4Co_4$
M ( $g \cdot mol^{-1}$ )	538.71	466.37	1228.41



- ✓ **REZULTATE:** *Derivații de cobalt (3)* pirolizați prezintă o activitate catalitică comparabilă cu a altor material pe baza de cobalt studiate în literatură pentru reacții electrocatalitice (suprapotențial de 339 mV, la o densitate de curent de  $10 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$  și o pantă Tafel inferioară de  $51.7 \text{ mV} \cdot \text{dec}^{-1}$ )

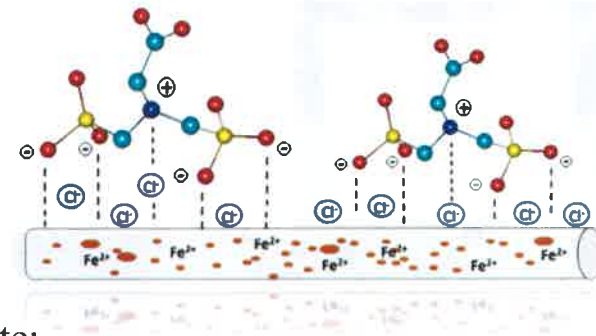
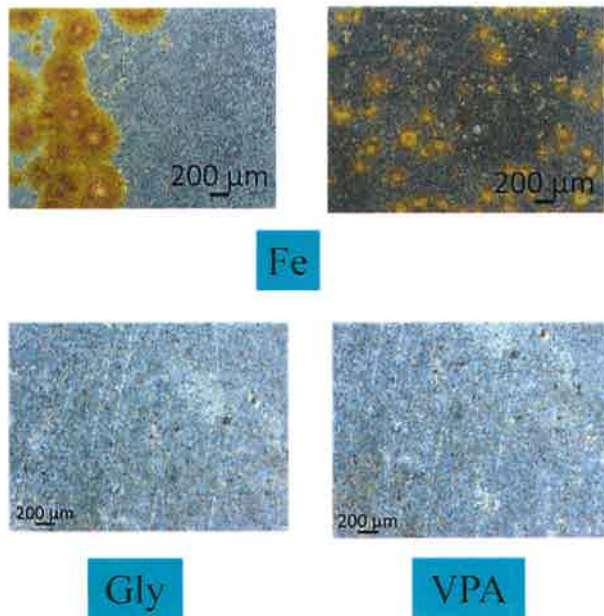
➤ A. Visa\* et al. *Dalton Transactions*, 2021, 50, 6539-6548, FI= 4.390

## TEMA 7. Metode electrochimice aplicate în caracterizarea suprafeței materialelor și filmelor nanocompozite, dr. ing. Nicoleta PLEȘU

SCOP: Investigarea proprietăților anticorozive a unor compuși organici pentru oțeluri

Compuși de tipul:

Acizi monofosfonici N,N-bis(fosfonometil)glicină (PMG) și acid vinilfosfonic (VA)



Rezultate:

- VPA interacționează cu suprafața Fe prin dubla legătură, grupurile P=O și P-OH
- imobilizare, confirmată de ATR-FTIR și  $\Delta G^{\circ}_{ads}$ ,
- Adsorbție fizică predominantă.
- Efectul sinergic al Cl<sup>-</sup>
- Gly inhibă procesul de coroziune până la ~97%

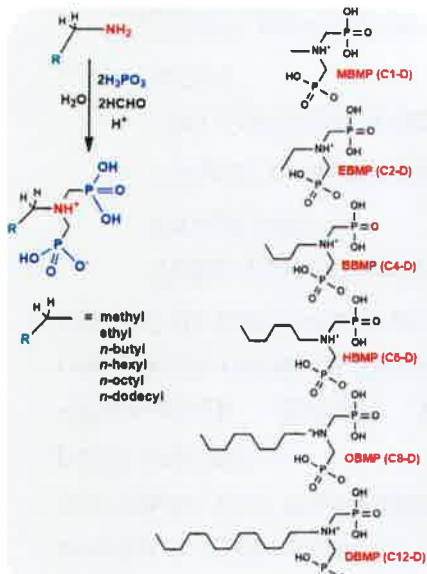
N.Pleșu\* et al, *Molecules*, 2021 26, 135,. FI = 4.411



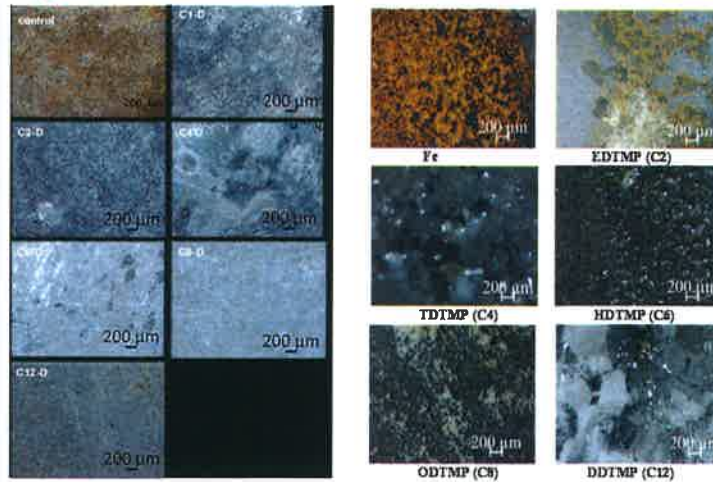
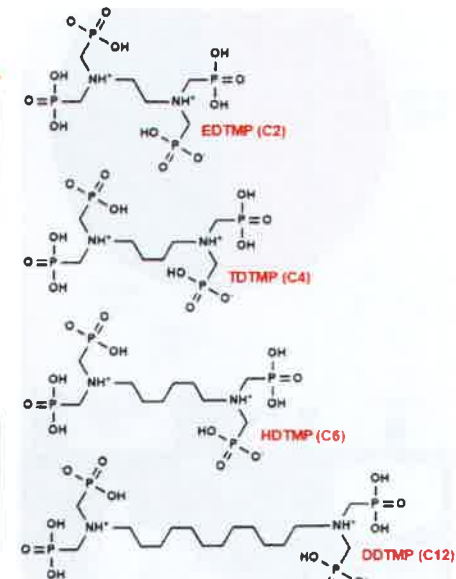
## Agenți anticorozivi pentru oțeluri

Eficiența de inhibare a coroziunii  
peste 95%

Acizi difosfonici



Acizi tetrafosfonici



- Lungimea lanțului alchil afectează atât gradul de acoperire, cât și gradul de împachetare a filmului format pe suprafața metalică.
- Difosfonații prezintă viteze mici de coroziune și o împachetare bună pentru moleculele cu lanț alchil lung (C8-D și C12-D), tetrafosfonați, pentru moleculele cu lanț alchil de lungime medie (C4 și C6)

A. Moschona, et al, *Chem. Eng. J.*, 2021 405, Art. Nr.126864., FI = 13.273

## TEMA 8. Knowledge management centre for illuminating the drugable genome (IDG), dr. S. Avram

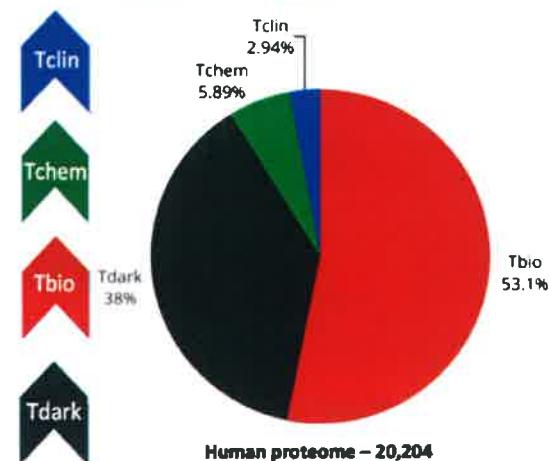
▪ **Finanțare** : SUA - National Institute of Health (NIH) prin programul U54 - **Target Central Resource Database (TCRD)** derulat la University of New Mexico. – SCOPUL: descoperirea de potențiale ține medicamentoase din rândul proteinelor umane mai puțin studiate.

▪ **Preambul:** **Target Development Level (TDLs)** clasifică proteomul uman în funcție de gradul de avansare/cunoaștere către statutul de ținta pentru medicamente, astfel:

- **Tclin**: proteine prin care acționează medicamente conform **DrugCentral**
- **Tchem**: proteine pentru care există compuși activi
- **Tbio**: proteine a căror funcție se cunoaște dar fără compuși activi
- **Tdark**: proteine nestudiate (**38% din proteomul uman**)



Din 2019, **Institutul de Chimie “Coriolan Drăgulescu”** contribuie la **TCRD** prin identificarea și reclassificarea țintelor în **Tclin**



**DrugCentral** <https://drugcentral.org/>



Contributia ICT:

- Menținerea și dezvoltarea **DrugCentral**, o **bază de date online cu informații despre medicamente** aprobate pe trei continente America de Nord, Europa și Asia

- Identificarea anuală a noilor ținte umane pentru medicamente aprobate

Echipa din ICT – România

Sorin Avram (PI)  
Ramona Curpăn  
Liliana Halip  
Alina Bora



Volume 49, Issue D1

### DrugCentral 2021 supports drug discovery and repositioning

Sorin Avram, Cristian G Bologa, Jayme Holmes, Giovanni Bocci, Thomas B Wilson, Dac-Trung Nguyen, Ramona Curpan, Liliana Halip, Alina Bora, Jeremy J Yang ... Show more  
Author Notes

*Nucleic Acids Research*, Volume 49, Issue D1, 8 January 2021, Pages D1160-D1169, <https://doi.org/10.1093/nar/gkaa997>

### Off-Patent Drug Repositioning

Sorin Avram, Ramona Curpan, Liliana Halip, Alina Bora, and Tudor I. Oprea\*

Cite this: *J. Chem. Inf. Model.* 2020, 60, 12, 5746–5753

Publication Date: September 2, 2020



### nature reviews drug discovery

BIOBUSINESS BRIEFS | 06 April 2021

## Novel drug targets in 2020

Sorin Avram, Liliana Halip, Ramona Curpan & Tudor I. Oprea

*Nature Reviews Drug Discovery* 20, 333 (2021)

doi: <https://doi.org/10.1038/d41573-021-00057-z>

### nature reviews drug discovery

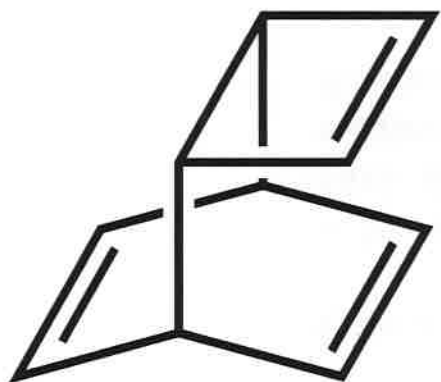
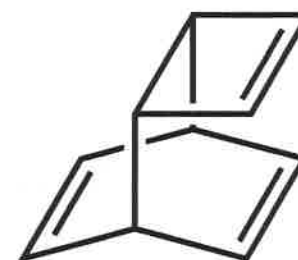
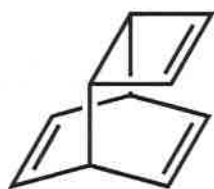
BIOBUSINESS BRIEFS | 09 April 2020

## Novel drug targets in 2019

Sorin Avram, Liliana Halip, Ramona Curpan & Tudor I. Oprea

*Nature Reviews Drug Discovery* 19, 300 (2020)

doi: <https://doi.org/10.1038/d41573-020-00052-w>



**Centrul de Chimie Organică  
„Costin D. Nenițescu”**

**Centrul de Chimie Organică**  
**“C. D. Nenițescu”**

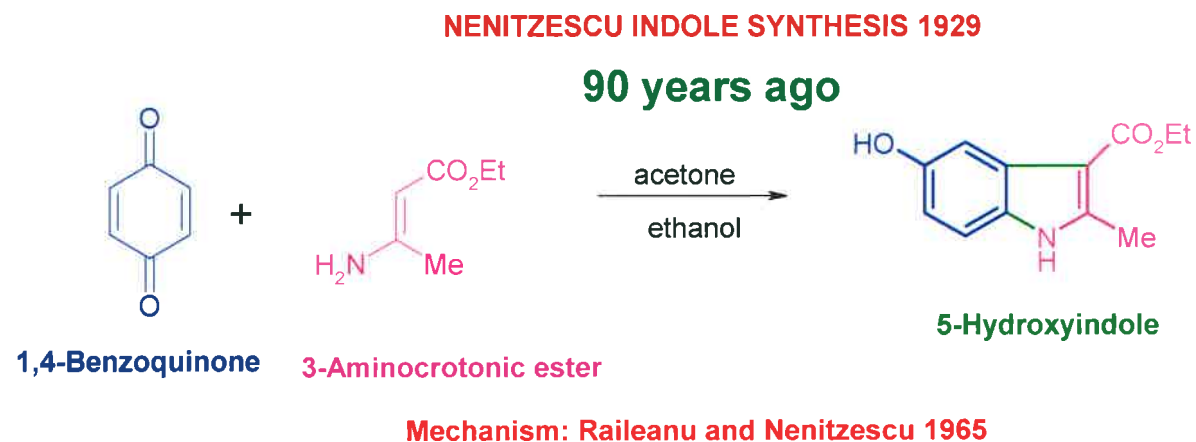
# Grupul de CHIMIE ORGANICĂ

## 90 de ani de la Reacția Nenitzescu (1929-2019) de sinteză a 5-hidroxi-indolilor

Compuși  
heterociclici

Cercetarile din ultimii 30 de ani referitoare la reacția Nenitzescu constand din reacția dintre p-benzochinone și esteri β-aminocrotonici au fost publicate în monografia Adv. Heterocycl. Chem. Sunt prezentate posibilitățile sintetice și aplicațiile în medicina și știința materialelor a compusilor rezultați prin reacția Nenitzescu. Arbidolul, antiviralul controversat în tratamentul Covid-19, a fost sintetizat plecând de la reacția Nenitzescu.

Mecanismul de formare a 5-hidroxi-indolilor cunoscut și sub numele de mecanismul Raileanu-Nenitzescu de formare a 5-hidroxi-indolilor a fost propus în 1965 și îmbunătățit în 1971.



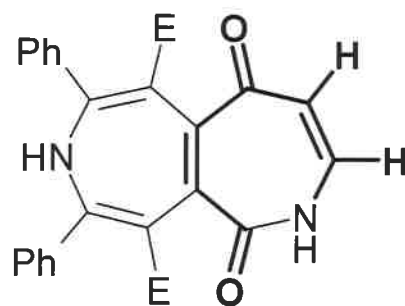
[Dumitrascu, F.](#); Ilies, M.A. Adv. Heterocycl. Chem. 2021, 133, 65–157. Recent advances in the Nenitzescu indole synthesis (1990–2019).

# Grupul de CHIMIE ORGANICĂ

## 90 de ani de la Reacția Nenitzescu (1929-2019) de sinteză a 5-hidroxi-indolilor

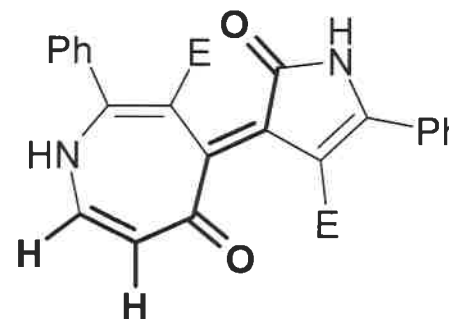
Compuși  
heterociclici

Sinteza Nenitzescu este o reacție complexă. Formarea unor compuși cu structură neașteptată în reacția Nenitzescu a fost ilustrată prin elucidarea prin difracția raze X a unei structuri propuse în 1988 de către Dan Raileanu un colaborator apropiat al profesorului Nenitzescu. Compusul 13 a fost obținut prin reacția dintre p-benzochinona și ester  $\beta$ -aminocinamic când s-a lucrat în alcool.



8

Proposed structure



13

Revised structure

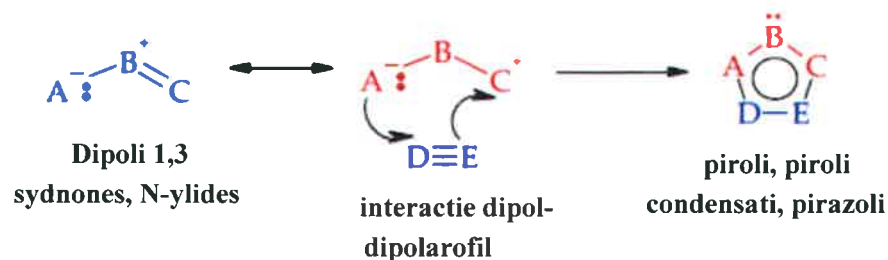
B.C. Ivan, M. R. Caira, [Dumitrascu, F.](#); Rev. Chim. 2020, 71, 51. Nenitzescu Indole Synthesis: 1929-2019 Unexpected Formation of a Pyrrole-Azepine Hybrid in the Nenitzescu Indole Synthesis: A Reinvestigation.

# Grupul de CHIMIE ORGANICĂ

## Reacții de cicloadiție 1,3-dipolară

### Cicloadiția Huisgen

Au fost aduse contribuții la reacțiile de cicloadiție 1,3-dipolară dintre dipolarofili acetilenici și unor dipoli de tip alilic: sydnonele și N-ylidele heteroaromatice. În urma cicloadițiilor s-au obținut serii (librării) de piroli, piroli condensati și pirazoli. În scopul stabilirii activității biologice pentru noii compuși sintetizați au fost efectuate calcule computaționale și evaluată citotoxicitatea acestora (Molecules 2021).



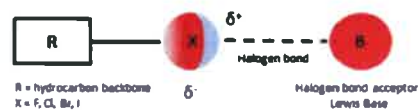
1. [Popa, M.M.](#); Shova, S.; Hrubaru, [M.](#); [Barbu, L.](#); [Draghici, C.](#); [Dumitrascu, F.](#); [Dumitrescu, D.E.](#), RSC Adv. 2020, 10, 15656–15664. Introducing chirality in halogenated 3-arylsydnone and corresponding 1-arylpurazoles obtained by 1,3-dipolar cycloaddition.
2. [Dumitrescu, D.](#); Shova, S.; [Draghici, C.](#); [Popa, M.M.](#); [Dumitrascu, F.](#), Molecules 2021, 26, 3693. Synthesis of 1-(2-Fluorophenyl)pyrazoles by 1,3-Dipolar Cycloaddition of the Corresponding Sydnone.
3. Ivan, B.-C.; [Dumitrascu, F.](#); Anghel, A.I.; Ancuceanu, R.V.; Shova, S.; [Dumitrescu, D.](#); [Draghici, C.](#); Olaru, O.T.; Nitulescu, G.M.; Dinu, M.; Barbuceanu, S.-F. Molecules 2021, 26, 6435. Synthesis and Toxicity Evaluation of New Pyrroles Obtained by the Reaction of Activated Alkynes with 1-Methyl-3-(cyanomethyl)benzimidazolium Bromide.
4. [A. Nicolescu](#), E. Georgescu, [F. Dumitrascu](#), F. Georgescu, F. Teodorescu, [C. Draghici](#), M. R. Caira, [C. Deleanu](#), “Exocyclic Enamines of Pyrrolo[1,2-a]quinoxalines Generated by 1,3-dipolar Cycloaddition Reactions of Benzimidazolium Ylides to Activated Alkynes”, Rev. Chim., 2020, 71, 197-209
5. E. Georgescu, F. Georgescu, [F. Dumitrascu](#), [C. Draghici](#), [A. Nicolescu](#), D. Marinescu, [C. Deleanu](#), “Microwave-assisted multicomponent synthesis of benzo[f]pyrrolo[1,2- $\alpha$ ]quinoline derivatives”, Rev. Roum. Chim. 2020, 65, 97-102.



# Grupul de CHIMIE ORGANICĂ

## Interacții supramoleculare în cristale și în soluție

### Legatura de halogen



Schematic representation of the halogen bond.

La ora actuala un subiect de varf in chimie si in particular in chimia supramoleculara si ingineria cristalelor (crystal engineering) este legatura de halogen. Aceasta este o interactiune necovalenta stabilita intre un atom de halogen si o baza Lewis. Plecand de la derivati halogenati din clasa sydnonelor si pirazolilor au fost puse investigate si puse in evidenta prezenta legaturii de halogen in stare solida si in solutie. Pentru 5-iodopirazoli datele obtinute prin difractie si raze X, calcule computationale si in solutie au relevat existenta unor legaturi de halogen comparabile cu cele mai puternice descrise in literatura pentru acest tip de legaturi.

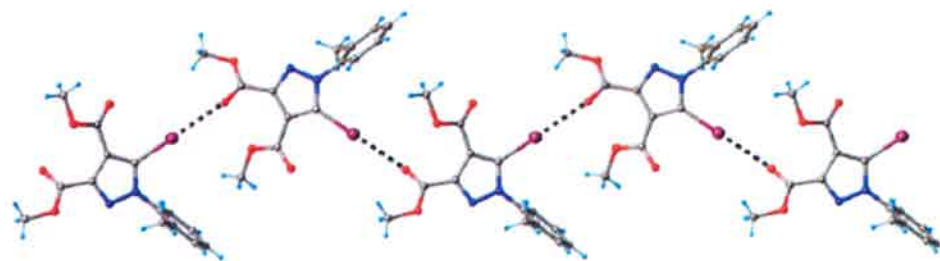


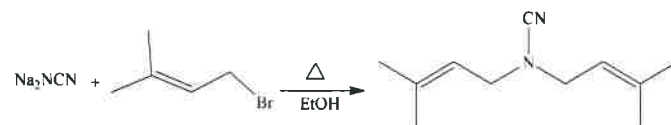
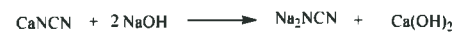
Figure 4. Partial view of the 1D chain formed through C-I...O halogen bonds in the crystal structure of **1**. Halogen bond parameters: [C8-I1...O3] C8-I1 2.075(3) Å, I1...O3(1 - x, 2 + y, 1.5 - z) 2.993(3) Å,  $\angle$ C8I1O3 175.2(1)°.

- [Dumitrescu, D.; Shova, S.; Man, I.C.; Caira, M.R.; Popa, M.M.; Dumitrascu, F.](#) Crystals 2020, 10, 1149, 5-Iodo-1-Arylpyrazoles as Potential Benchmarks for Investigating the Tuning of the Halogen Bonding.
- [Dumitrescu, D.; Shova, S.; Draghici, C.; Popa, M.M.; Dumitrascu, F.](#) Molecules 2021, 26, 3693. Synthesis of 1-(2-Fluorophenyl)pyrazoles by 1,3-Dipolar Cycloaddition of the Corresponding Sydnones.
- [Popa, M.M.; Man, I.C.; Draghici, C.; Shova, S.; Caira, M.R.; Dumitrascu, F.; Dumitrescu, D.](#) Cryst Eng Comm 2019, 21, 7085. Halogen bonding in 5-iodo-1-arylpyrazoles investigated in the solid state and predicted by solution <sup>13</sup>C-NMR spectroscopy. 2.

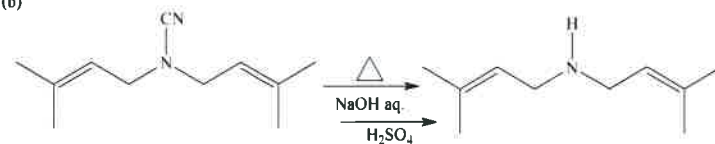
# Grupul de CHIMIE ORGANICĂ

Sinteze de carbamați  
cu activitate  
biologică

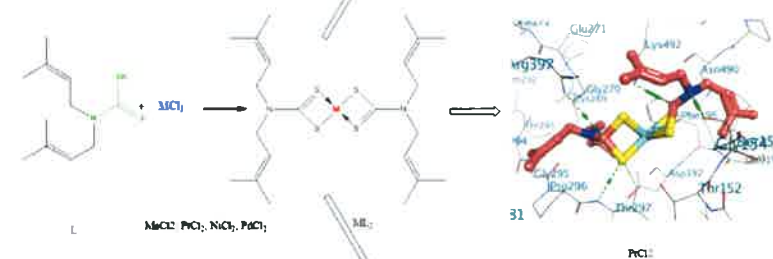
(a)



(b)



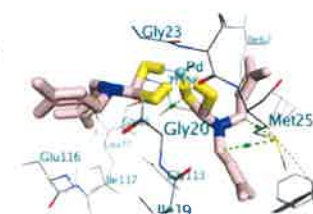
Ni(II), Pd(II) and Pt(II) complexes of N,N-bis(3,3-dimethyl-allyl)dithiocarbamate: Synthesis, spectroscopic characterization, antimicrobial and molecular docking studies, <sup>1</sup>Madalina M. Hrubaru\*, <sup>1</sup>Emeric Bartha, <sup>2</sup>Anthony C. Ekennia\*, <sup>3</sup>Sunday N. Okafor, <sup>4</sup>Carmellina Daniela Badiceanu, <sup>5</sup>Damian C. Onwudiwe, <sup>7</sup>Sergiu Shova, <sup>1</sup>Constantin Draghici, Journal of Molecular Structure, 1250 (2022) 131649.



NiL<sub>2</sub>

Interaction of NiL<sub>2</sub> docked to DNA gyrase

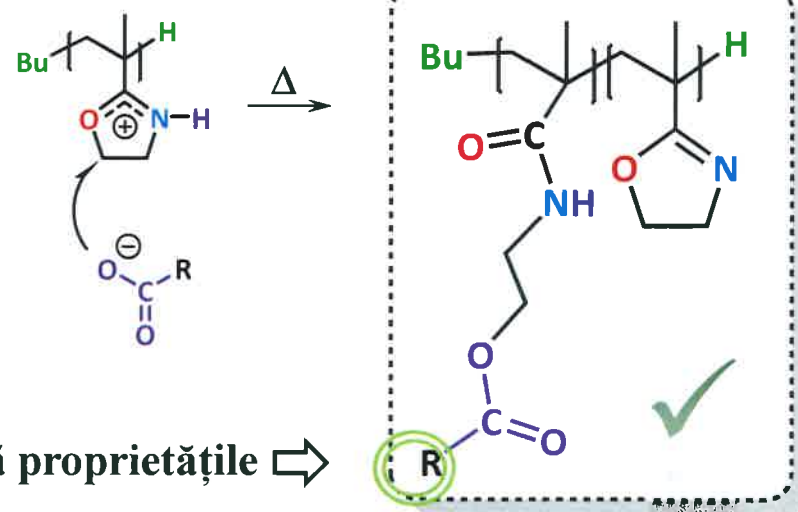
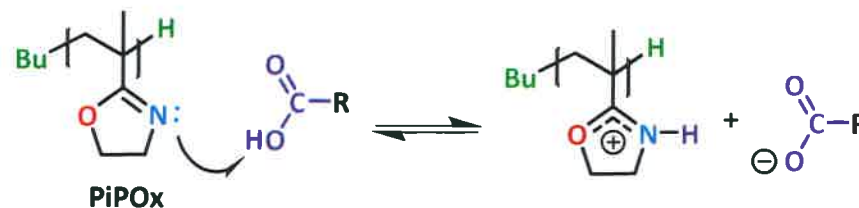
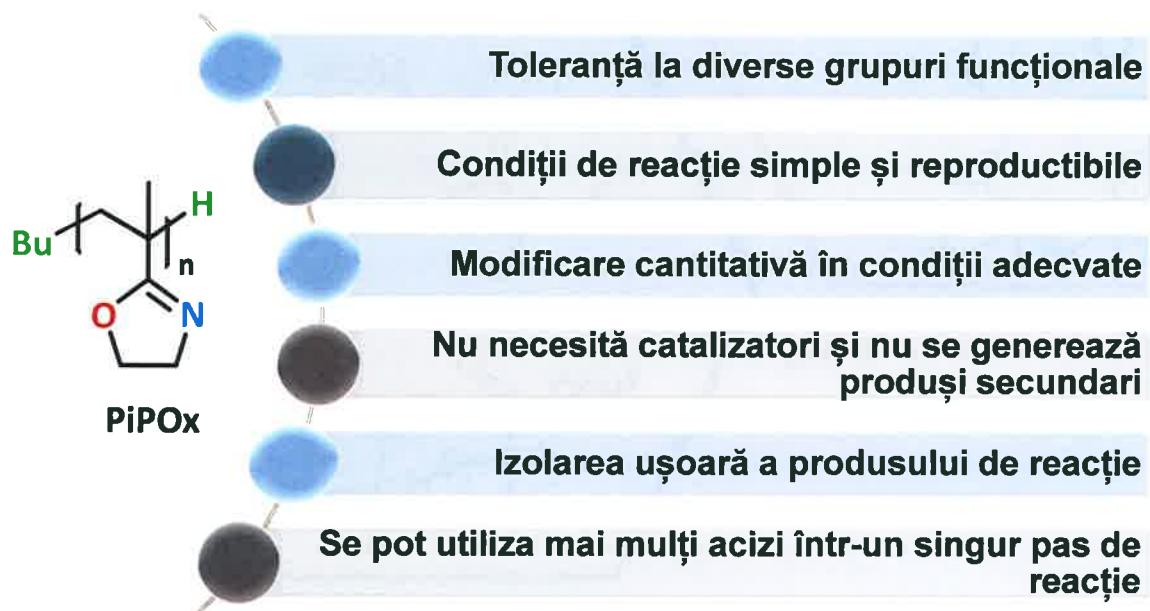
PtL<sub>2</sub>



PdL<sub>2</sub>

# Grupul de MATERIALE ORGANICE INTELIGENTE

## Poli(2-izopropenil-2-oxazolina) – Platformă versatilă pentru sinteza de materiale avansate

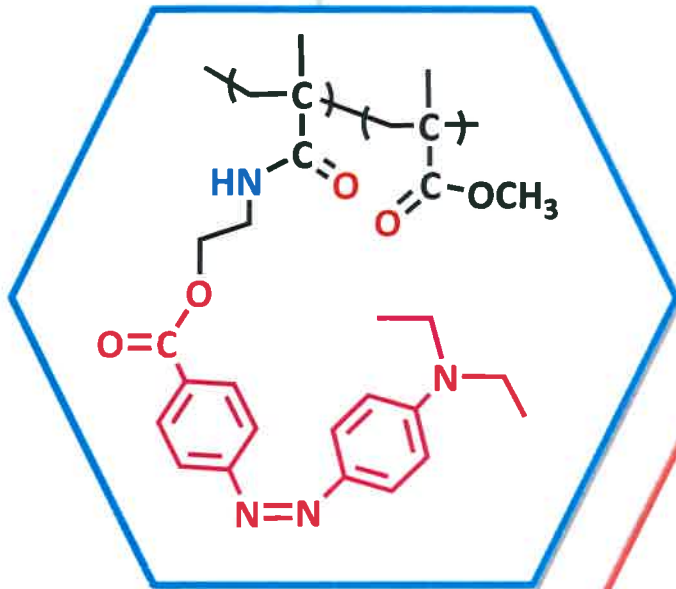


! Natura chimică a substituentului R dictează proprietățile  $\Rightarrow$

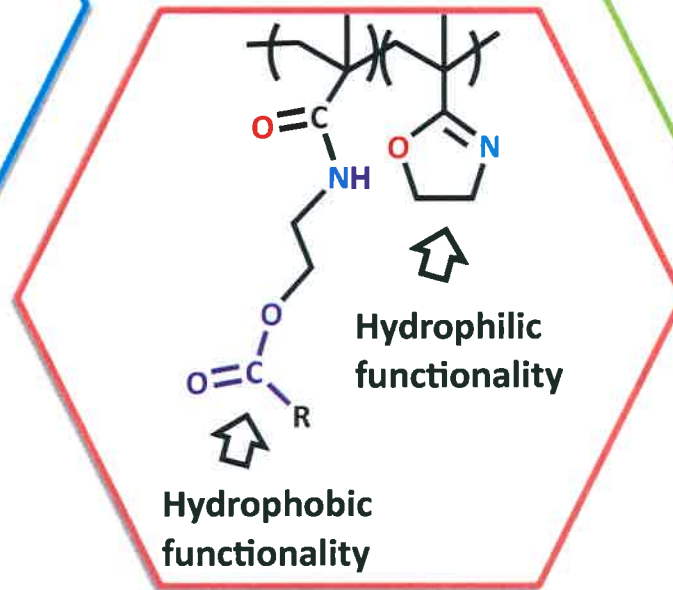
# Grupul de MATERIALE ORGANICE INTELIGENTE

## Poli(2-izopropenil-2-oxazolina) – Aplicații

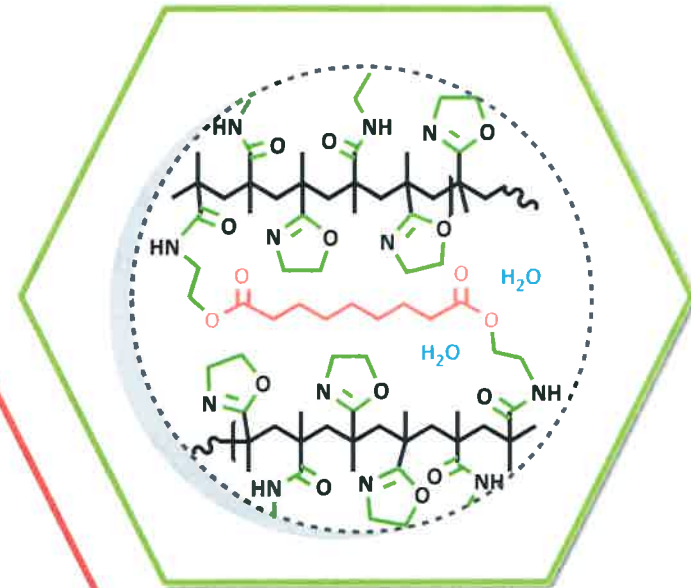
### Stocare optică de date



### Polimeri termo-sensibili

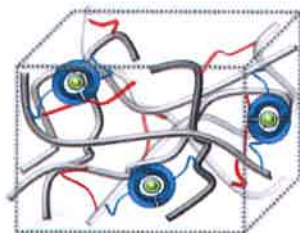


### Hidrogeluri



# Grupul de MATERIALE ORGANICE INTELIGENTE

## Materiale tridimensionale

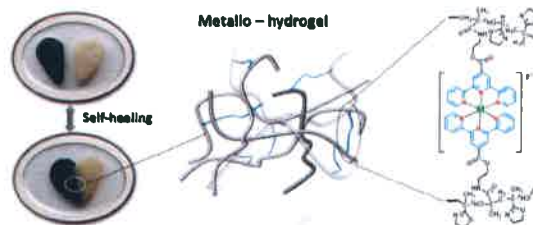
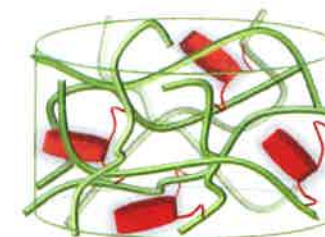


Hidrogeluri hibride, reticulate atât prin interacțiuni covalente, cât și fizice, ce prezintă rezistență la compresiune și duritate remarcabile, precum și auto-refacere rapidă fără a necesita stimuli externi.

X. Xu, [F.A. Jerca](#), [V.V. Jerca](#), R. Hoogenboom. Covalent Poly(2-Isopropenyl-2-Oxazoline) Hydrogels with Ultrahigh Mechanical Strength and Toughness through Secondary Terpyridine Metal-Coordination Crosslinks. *Advanced Functional Materials* **2019**, 29, 1904886

Hidrogeluri cu structură controlată și proprietăți mecanice îmbunătățite pentru purificarea apei, obținute prin reticulare cu macrocicluri rigide (e.g., pilar[5]arene).

X. Xu, [F.A. Jerca](#), K. Van Hecke, [V.V. Jerca](#), R. Hoogenboom. High compression strength single network hydrogels with pillar[5]arene junction points. *Materials Horizons* **2020**, 7, 566-573.



Hidrogeluri supramoleculare cu proprietăți de auto-refacere obținute folosind chimia coordinativă metal-ligand.

X. Xu, [F.A. Jerca](#), [V.V. Jerca](#), R. Hoogenboom. Self-Healing and Moldable Poly(2-isopropenyl-2-oxazoline) Supramolecular Hydrogels Based on a Transient Metal Coordination Network. *Macromolecules* **2020**, 53, 6566-6575.

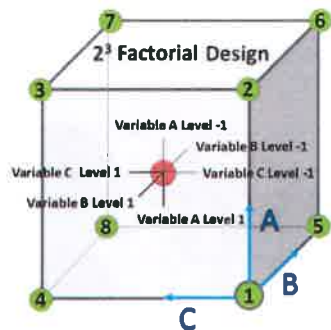
Polimeri imprentați molecular pentru eliberarea controlată a agenților anti-tumorali.

M. Ceglowski, [F.A. Jerca](#), [V.V. Jerca](#), R. Hoogenboom. Reduction-Responsive Molecularly Imprinted Poly(2-isopropenyl-2-oxazoline) for Controlled Release of Anticancer Agents. *Pharmaceutics* **2020**, 12, 1-15.



# Grupul de MATERIALE ORGANICE INTELIGENTE

**Materiale avansate multifuncționale cu design și proprietăți ajustabile**



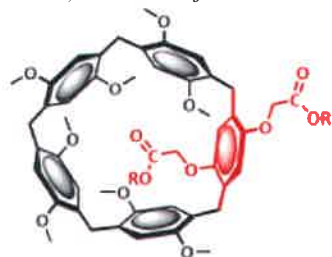
Dezvoltarea de microparticule polimere pentru industria (bio)medicală folosind proiectarea statistică a experimentelor (experiment factorial).

T.V. Iordache, [N.D. Banu](#), E.D. Giol, [D.M. Vuluga](#), [F.A. Jerca](#), [V.V. Jerca](#). Factorial Design Optimization of Polystyrene Microspheres Obtained by Aqueous Dispersion Polymerization in the Presence of Poly(2-ethyl-2-oxazoline) Reactive Stabilizer. *Polymer International* **2020**, 69, 1122-1129.



Senzori polimerici de temperatură ce folosesc detecția optică prin transfer de energie de rezonanță Förster (FRET).

R. Merckx, T. Swift, R. Rees, J.F.R. Van Guyse, E. Schoolaert, K. De Clerck, H. Ottevaere, H. Thienpont, [V.V. Jerca](#), R. Hoogenboom. Förster Resonance Energy Transfer in Fluorophore Labeled Poly(2-Ethyl-2-Oxazoline)s. *Journal of Materials Chemistry C*, **2020**, 8, 14125-14137.

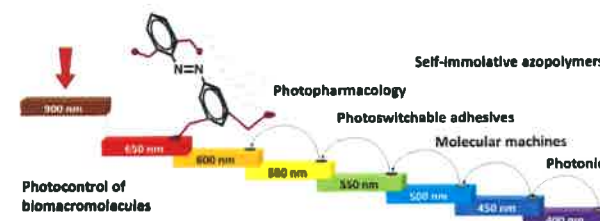


Evoluții recente în domeniul moleculelor macrociclice ce au la bază pilar[n]arene.

X. Xu, [V.V. Jerca](#), R. Hoogenboom. Structural Diversification of Pillar[n]arene Macrocycles. *Angewandte Chemie International Edition*, **2020**, 59(16), 6314-6316.

Progrese în dezvoltarea azobenzenilor fotoconmutabili cu lumină roșie și aplicații emergente în fotofarmacologie, adezivi fotoconmutabili și sisteme biodegradabile pentru livrarea medicamentelor.

[F.A. Jerca](#), [V.V. Jerca](#), R. Hoogenboom. Advances and opportunities in the exciting world of azobenzenes. *Nature Reviews Chemistry*, **2021**, accepted.



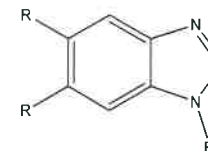
# Grupul de METABOLOMICĂ ȘI CHIMIA COMPUȘILOR DE ORIGINE SAU INSPIRAȚIE NATURALĂ

Sisteme naturale  
sau de  
inspirație naturală

Studiul unor heterociclii de inspirație naturală

Materiale cu aplicații biomedicale și re folosirea deșeurilor

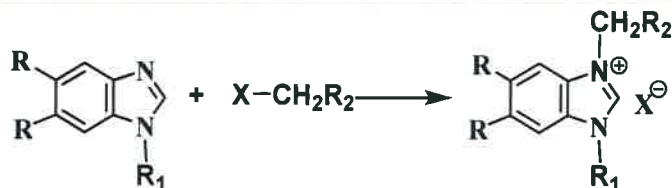
Diagnosticul bolilor metabolice rare



COLABORĂRI  
interacademice CCO-ICMPP      interinstituționale CCO-UPB



# Grupul de METABOLOMICĂ ȘI CHIMIA COMPUȘILOR DE ORIGINE SAU INSPIRAȚIE NATURALĂ



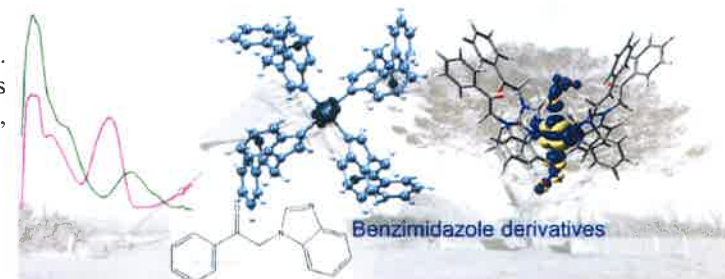
Sărurile de benzimidazoliu sunt motive importante în structura compușilor biologici activi și reprezintă sintoni importanți în reacțiile 2+3 dipolare.

A.-M. Macsim, E. Georgescu, F. Georgescu, [P. Filip](#), [A. Nicolescu](#), [C. Deleanu](#), "Benzimidazolium salts as starting materials or intermediates in 1,3-dipolar cycloadditions", *Monatsh. Chem.*, **2021**, 152(7), 845-852. DOI: 10.1007/s00706-021-02795-7

Sinteza și caracterizarea unor complecși cu cobalt și nichel ai unui ligand polidentat derivat de la benzimidazol

M.D. Stanescu, C. Stefanov, F. Albota, [A. Hirtopeanu](#), O.C. Oprea, N. Stanica, M. Ferbinteanu, "Synthesis and structural analysis of complexes based on alpha-amino ketone derived from benzimidazole", *J. Mol. Struct.*, **2021**, 1228, Art. No. 129716, DOI:10.1016/j.molstruc.2020.129716

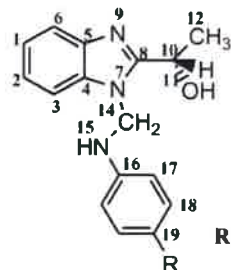
Electronic spectra  
Ligand Field scheme  
Metal complexes  
Crystal structure  
DFT and TD-DFT calculations



Sintează organică și analiză structurală



B, M-1, M-2



M-3-M-5

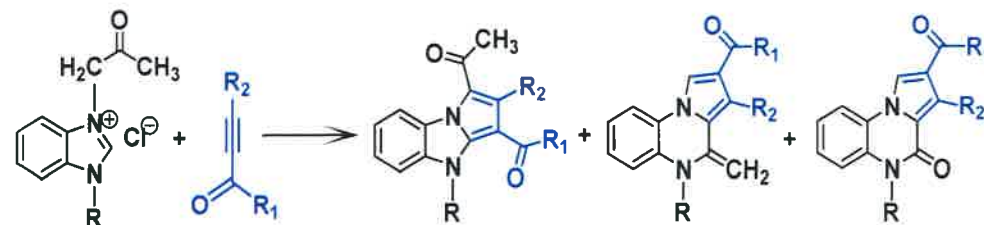
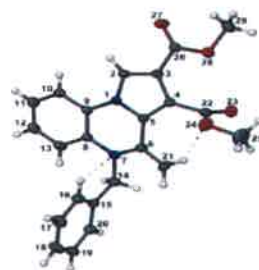
R: NO<sub>2</sub>, COOH

Sinteza, studii structurale și calculul orbitalilor moleculari HOMO/LUMO la derivați benzimidazolici.

M. Marinescu, L.O. Cintează, G.I. Marton, M.C. Chifiriuc, M. Popa, I. Stănculescu, C.-M. Zălaru, [Cristina Stavarache](#), "Synthesis, Density Functional Theory Study and In Vitro Antimicrobial Evaluation of New Benzimidazole Mannich bases", *BMC Chemistry*, **2020**, 14, 45. DOI: 10.1186/s13065-020-00697-z

O nouă metodă de sinteză a enaminelor exociclice.

[A. Nicolescu](#), E. Georgescu, F. Dumitrascu, F. Georgescu, F. Teodorescu, C. Draghici, M.R. Caira, [C. Deleanu](#), "Exocyclic enamine of pyrrolo[1,2-a]quinoxalines generated by 1,3-dipolar cycloaddition reactions of benzimidazolium ylides to activated alkynes", *Rev. Chim.*, **2020**, 71(3), 197-209. DOI: 10.37353/RC.20.3.7989.

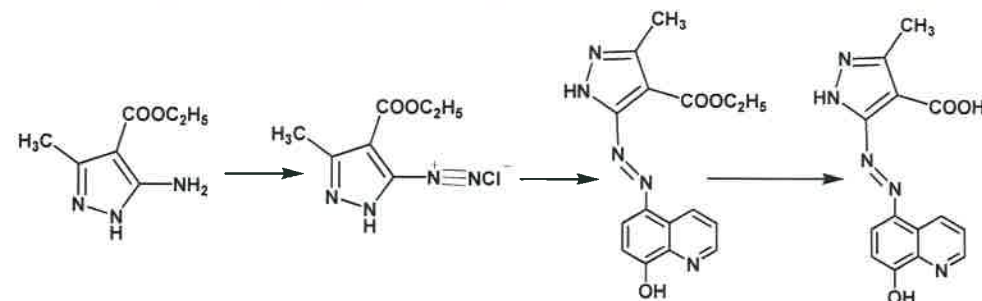




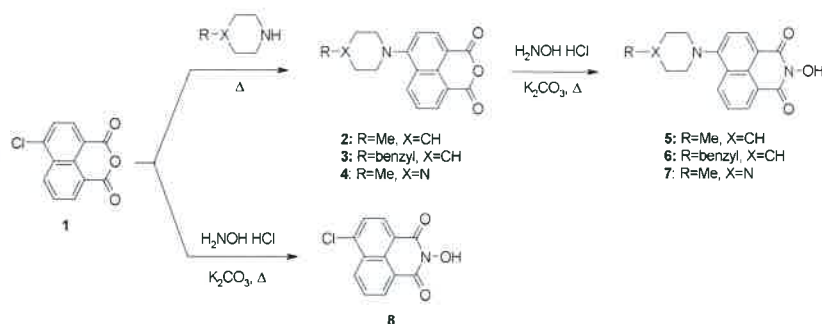
# Grupul de METABOLOMICĂ ȘI CHIMIA COMPUȘILOR DE ORIGINE SAU INSPIRAȚIE NATURALĂ

Sinteza și caracterizare unor noi azoderivați dublu substituiți cu heterociclii cu azot.

I. Burca, V. Badea, [C. Deleanu](#), V.-N. Bercean, "5-((8-Hydroxyquinolin-5-yl)diazenyl)-3-methyl-1H-pyrazole-4-carboxylic acid", *Molbank*, **2021**, 2021 (2), Art. No. M1238. DOI: 10.3390/M1238



Sintează organică și analiză structurală



Sinteza, caracterizarea și studii fotochimice la compuși cu activitate biologică.

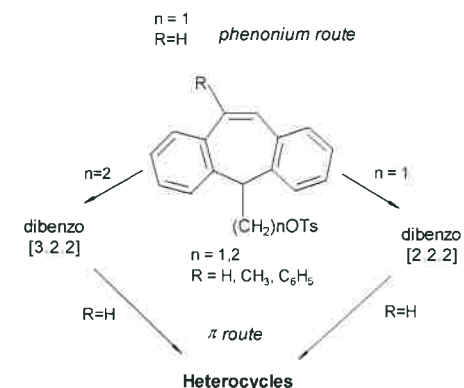
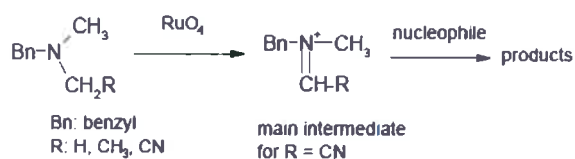
[A. Nicolescu](#), A. Airinei, E. Georgescu, F. Georgescu, R. Tigoianu, F. Oancea, [C. Deleanu](#), "Synthesis, photophysical properties and solvatochromic analysis of some naphthalene-1,8-dicarboxylic acid derivatives", *J. Molec. Liq.*, **2020**, 303, Art. No. 112626. DOI: 10.1016/j.molliq.2020.112626.

Review al lucrarilor de pionerat din colectivul Profesorului Costin D. Nenitescu.

[A. Hirtopeanu](#), [C. Florea](#), M.D. Stănescu, "Stereochemistry – key role in the rearrangements of dibenzo C8- and C9 derivatives", *Rev. Roum. Chim.* **2021**, 66(2), 105-117, DOI: 10.33224/rch.2021.66.2.01

Studiul efectelor stereoelectronice in oxidarea catalizata de RuO4 a aminelor terciare de tipul PhCH2-NMe-CH2R (R = H, Me, CN)

[H. Petride](#), [C. Florea](#), [A. Hirtopeanu](#), [Cristina Stavarache](#), "RuO4-Mediated Oxidation of Tertiary Amines, Stereoelectronic Effects", *Rev. Roum. Chim.*, **2020**, 65(1), 89-96, DOI: 10.33224/rch.2020.65.1.10



# Grupul de METABOLOMICĂ ȘI CHIMIA COMPUȘILOR DE ORIGINE SAU INSPIRAȚIE NATURALĂ

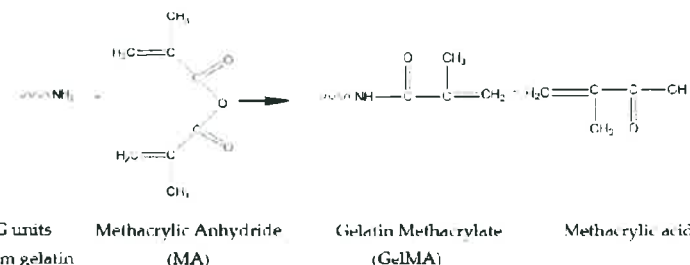


Dezvoltarea și caracterizarea unor sisteme cu eliberarea controlată a substanței active pe bază de polimeri biocompatibili.

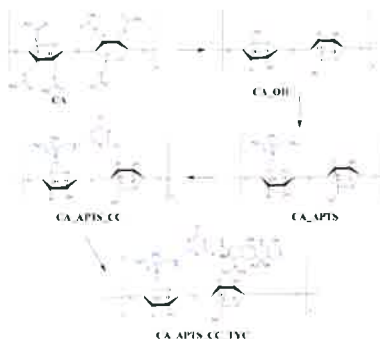
[Cristina Stavarache](#), A. Ghebaur, S. Dinescu, I. Samoila, E. Vasile, G.M. Vlasceanu, H. Iovu, S.A. Gârea, "5-Aminosalicylic Acid loaded chitosan-carrageenan hydrogel beads with potential application for the treatment of inflammatory bowel disease", *Polymers*, **2021**, 13 (15), 2463, DOI: 10.3390/polym13152463

Materiale polimerice pentru obținerea de scaffold-uri prin printare 3D cu aplicații în domeniul ingineriei tisulare.

R.L. Alexa, H. Iovu, J. Ghitman, A. Serafim, [Cristina Stavarache](#), M.-M. Marin, R. Ianchis, "3D-Printed gelatin methacryloyl-based scaffolds with potential application in tissue engineering." *Polymers*, **2021**, 13 (5), 727. DOI:10.3390/polym13050727



**Materiale organice de  
inspirație naturală și  
refolosirea deșeurilor**

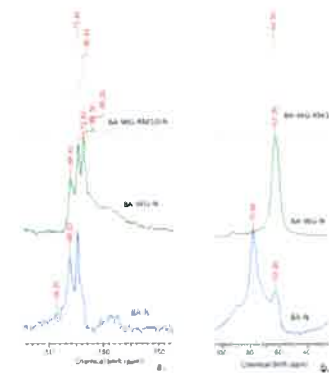


Membrane cu structură modificată pentru îndepărtarea antibioticelor din soluții apoase.

A.M. Pandele, H. Iovu, C. Orbeci, C. Tuncel, F. Miculescu, A. Nicolescu, [C. Deleanu](#), S.I. Voicu "Surface Modified Cellulose Acetate Membranes for the Reactive Retention of Tetracycline", *Sep. Purif. Technol.*, **2020**, 249, Art. No. 117145, DOI: 10.1016/j.seppur.2020.117145.

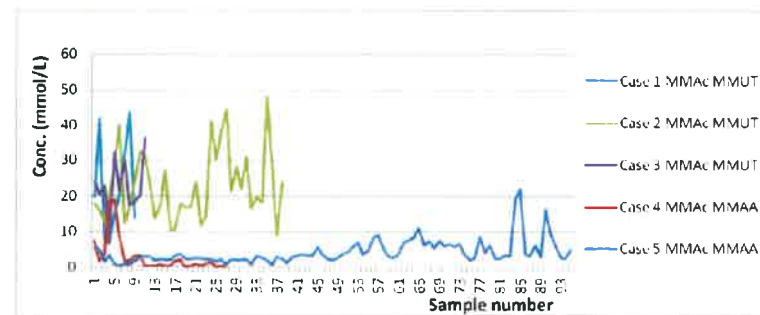
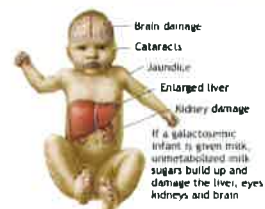
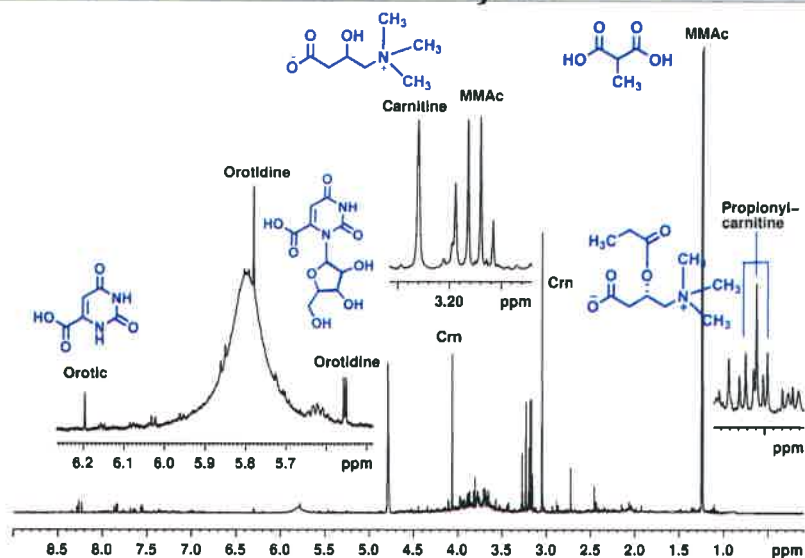
Studii  $^{29}\text{Si}$  și  $^{27}\text{Al}$  MAS RMN la compozite geopolimere bazate pe deșeuri din industria sticlei și a bauxitei

C. Bobiriță, C. Orbeci, L. Bobiriță, P. Palade, [C. Deleanu](#), C.M. Pantilimon, C. Pîrnu, I.C. Radu, "Influence of red mud and waste glass on the microstructure, strength, and leaching behavior of bottom ash-based geopolymer composites", *Sci. Rep.*, **2020**, 10, Art. No. 19827. DOI: 10.1038/s41598-020-76818-4



# Grupul de METABOLOMICĂ ȘI CHIMIA COMPUȘILOR DE ORIGINE SAU INSPIRAȚIE NATURALĂ

Metabolomica unor sisteme biologice complexe



Diagnosticul unor boli metabolice rare la noul-născuți.

[A. Nicolescu](#), D. Blanita, C. Boiciuc, V. Hlistun, M. Cristea, D. Rotaru, L. Pinzari, A. Oglinda, A. Stamati, I. Tarcomnicu, A. Tutulan-Cunita, D. Stambouli, S. Gladun, N. Revenco, N. Usurelu, [C. Deleanu](#), "Monitoring methylmalonic aciduria by NMR urinomics", *Molecules*, **2020**, 25 (22), art 5312. DOI:10.3390/molecules25225312.

[A. Nicolescu](#), N. Revenco, S. Gladun, M. Stratila, N. Usurelu, [C. Deleanu](#), "Diagnosis of inborn metabolic disorders assisted by NMR spectroscopy – recent cases from Institute of Mother and Child Chisinau", *Bul. Perinatol.*, **2020**, 86(1), 107-111.

R. Vulturar, A. Chis, M. Baizat, A. Cozma, R. Suharoschi, [A. Nicolescu](#), [C. Deleanu](#), "A severe neonatal argininosuccinic aciduria case investigated by <sup>1</sup>H NMR spectroscopy", *Rev. Chim.*, **2020**, 71 (3), 210-218. DOI: 10.37358/RC.20.3.7990

M. Scurtul, C. Boiciuc, D. Blăniță, V. Sacară, I. Tarcomnicu, D. Stambouli, [A. Nicolescu](#), [C. Deleanu](#), S. Gladun, N. Ușurelu, "Classical galactosemia - A case report", *Bul. Perinatol.*, 2021, 1(90), 76-80.

V. Hlistun, E. Efremov, D. Blanita, C. Boiciuc, D. Munteanu, V. Lupu, A. Oglinda, A. Casian, I. Casian, [A. Nicolescu](#), [C. Deleanu](#), N. Usurelu, "Amino acids profile in the diagnosis of inborn errors of metabolism", *Bul. Perinatol.*, 2021, 1(90), 53-56.

# Grupul de BIORESURSE ȘI CHIMIE ORGANICĂ SUSTENABILĂ

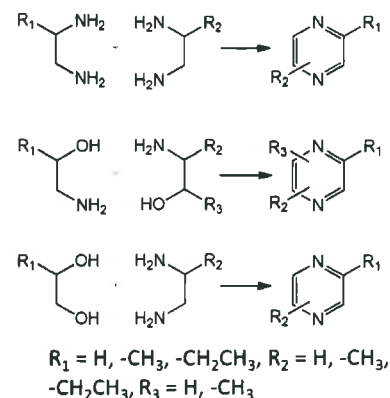
Valorificarea  
resurselor provenite  
din biomasă  
(ulei de fuzel)



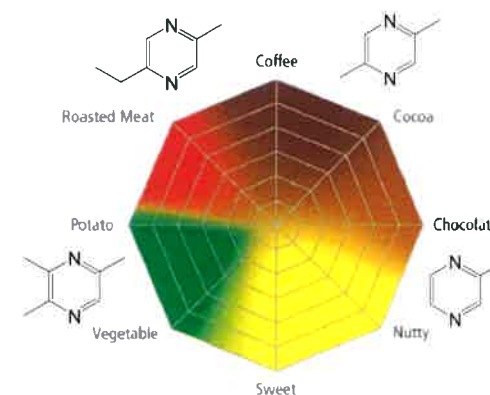
Obținerea de pirazine „identice naturale” folosind metode de laborator

[F. Teodorescu, A. I. Slabu, O. D. Pavel, R. Zăvoianu.](#) A comparative study on the catalytic activity of ZnAl, NiAl, and CoAl mixed oxides derived from LDH obtained by mechanochemical method in the synthesis of 2-methylpyrazine. *Catalysis Communications*, **2020**, 133, 105829.

[F. Teodorescu, A. I. Slabu, O. D. Pavel.](#) Vapor phase synthesis of alkylpyrazines over ZnAl mixed oxide derived from layered double hydroxides obtained by the mechanochemical method. *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis*, **2021**, 133 (2), 863-877.

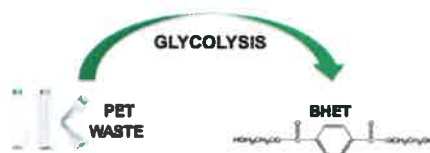


Analiza senzorială descriptivă a amestecurilor de pirazine



# Grupul de BIORESURSE ȘI CHIMIE ORGANICĂ SUSTENABILĂ

## Reciclarea chimică a deșeurilor de PET



Transformarea deșeurilor de PET în poliester-polioli pentru obținerea de materiale izolatoare termic

M.M. Duldner, [E. Bartha](#), S. Căpitanu, S. Nica, A.E. Coman, [R. Țincu](#), A. Sârbu, P.I. Filip, S. Apostol, S. Gârea, “Attempts to Upcycle PET Wastes into Bio-based Long-lasting Insulating Materials” *Revista de Chimie*, 2019, 70(7), 2301-2307.

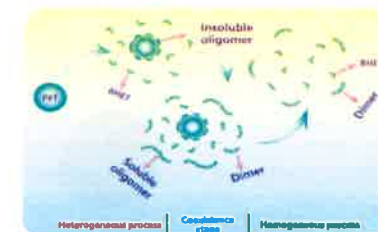
### Obținerea de precursori pentru diferite tipuri de spume poliuretanică, din deșeurile de PET

M.M. Duldner, S. Căpitanu, B. Cursaru, A. Sârbu, S. Apostol, [E. Bartha](#), [S.F. Ion](#), S.A. Gârea, M. Ionescu, “Oligoester-polioli din deșeurile de polietilentereftalat și materiale regenerabile, procedeu de obținere a acestora, și compoziție pentru spume poliuretanică stropite, încorporând respectivii oligoesteri-polioli”, *RO 133049 B1*, 30.03.2021

M.M. Duldner, S. Iancu, S. Căpitanu, [E. Bartha](#), [S. Nica](#), A. Sârbu, M. Ionescu, S.A. Gârea, “Oligoester-polioli aromatic-aromatic alifatici din deșeurile de polietilentereftalat și monomeri provenind din resurse regenerabile, și procedeu de obținere a acestora”, *RO 131976 B1*, 30.06.2021

M.M. Duldner, A.M. Coman, T.V. Iordache, A. Sârbu, [E. Bartha](#), [R. Țincu](#), A. Ghebur, C.M. Damian, G. Surdu, A. Savastre, “Compozite politer-eter polioli/montmorilonit pentru spume poliuretanică semiflexibile (nano)compozite și procedeu de obținere a acestora”, *RO 135061 A2*, 30.06.2021

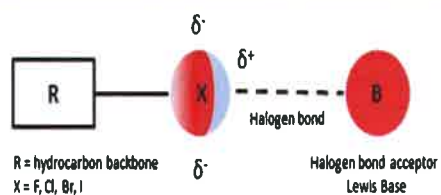
M.M. Duldner, A.M. Coman, T. V. Iordache, A. Sârbu, [E. Bartha](#), [F. Teodorescu](#), A. Ghebur, V. I. Chițulescu, G. Surdu, S. Popa “Polioli cu structura poliester-amidică conținând unități structurale mezogene pentru spume poliuretanică semiflexibile și procedeu de obținere a acestora”, *RO 135066 A2*, 30.06.2021



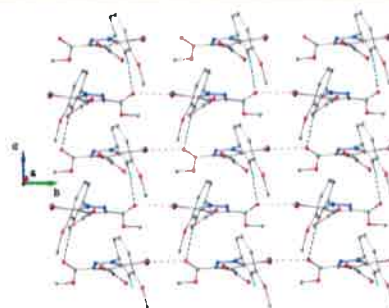
# Grupul de CHIMIE ORGANICĂ TEORETICĂ

Legături de halogen prezise prin tehnici  $^{13}\text{C}$  – RMN in solutie confirmate in stare solida prin cristalografie de raze X

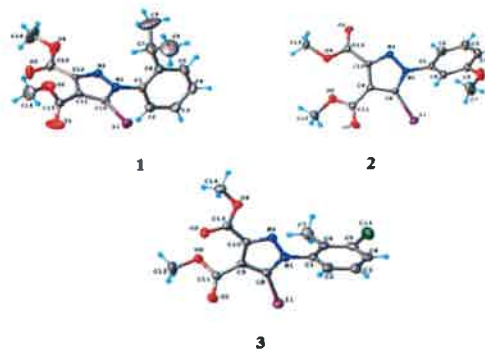
Reprezentarea legaturii de halogen



Structura supramoleculara 2D

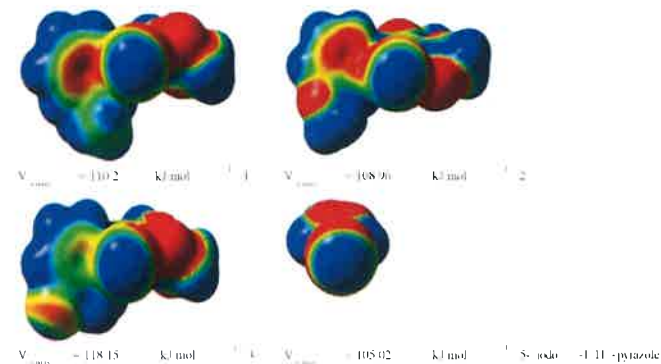


Molecule de baza

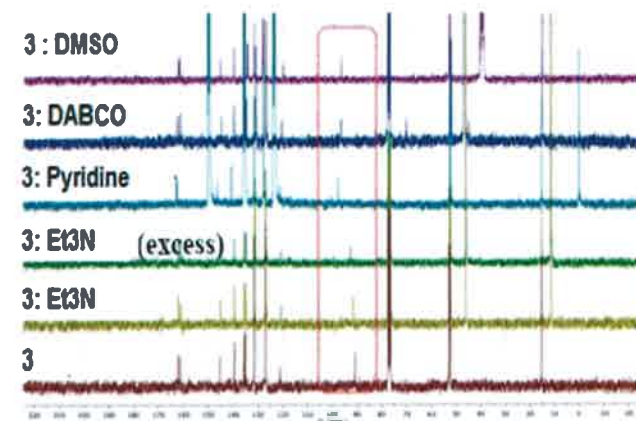


[M. M. Popa](#), [I. C. Man](#), [C. Draghici](#), [S. Shova](#), [M. R. Caira](#), [F. Dumitrascu](#) and [D. Dumitrescu](#). Halogen bonding in 5-iodo-1-arylpzazoles investigated in the solid state and predicted by solution  $^{13}\text{C}$ -NMR spectroscopy. *CrystEngComm*, **2019**, 21, 7085

Energia legaturii de halogen calculata la nivel DFT/B3LYP-D3/def2tzvp



Semnale RMN generate de legaturi de halogen



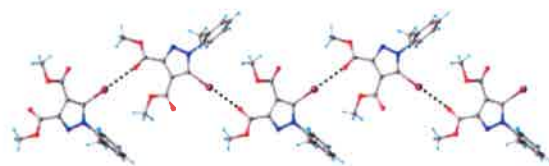
Structuri supramoleculare generate de legături de halogen

# Grupul de CHIMIE ORGANICĂ TEORETICĂ

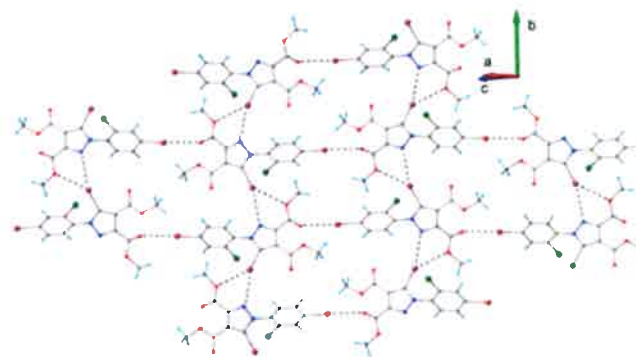
Utilizarea 5-Iodo-Arilpirazolilor ca potientiale etaloane pentru investigarea si reglarea legaturilor de halogen pentru generarea de structuri supramoleculare 1D, 2D si 3D

Structuri  
supramoleculare  
generate de legături de  
halogen

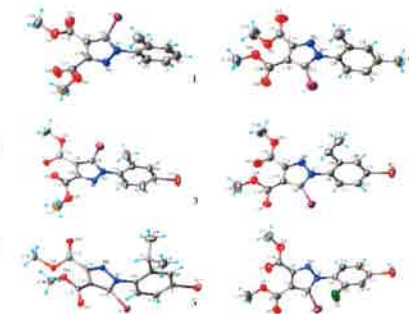
Structura 1D



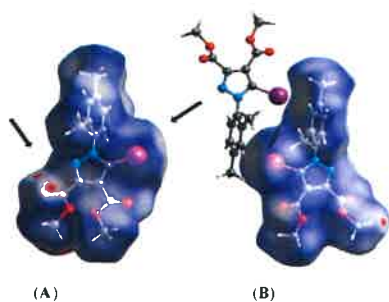
Structura 2D



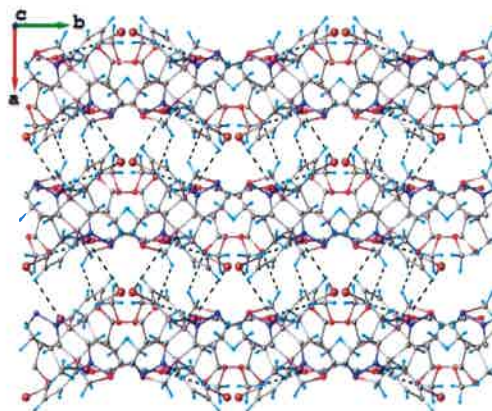
Basic molecular scaffolds



Analiza de suprafete Hirshfeld

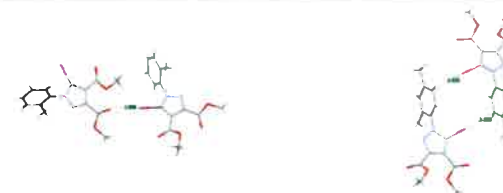


Structuri 3D



D. Dumitrescu, S. Shova, [I. C. Man](#), M. R. Caira, [M. M. Popa](#) si [F. Dumitrascu](#), 5-Iodo-1-Arylpyrazoles as Potential Benchmarks for Investigating the Tuning of the Halogen Bonding. *Crystals* **2020**, 10, 1149

Calculare de nivel DFT/B3LYP-D3/def2tzvp pentru energia legaturilor de halogen



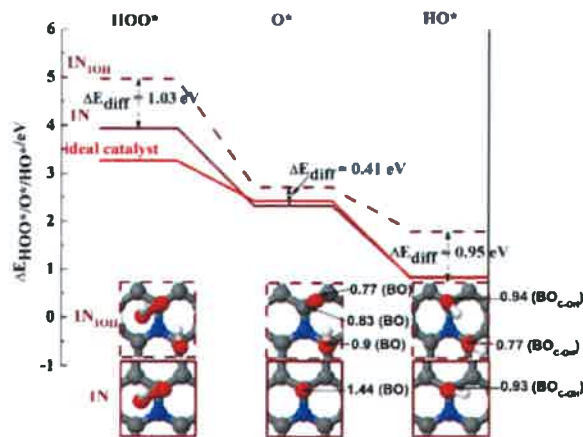




# Grupul de CHIMIE ORGANICĂ TEORETICĂ

Studii teoretice privind reducerea oxigenului pe grafena dopata cu N: impactul concentratiei N, a pozitiei N si a co-adsorbatului

I. C. Man, S.G. Soriga, I. Tranca. First principle studies of oxygen reduction reaction on N doped graphene: Impact of N concentration, position and co-adsorbate effect. *Applied Surface Science*, 2020, 510, 145470.

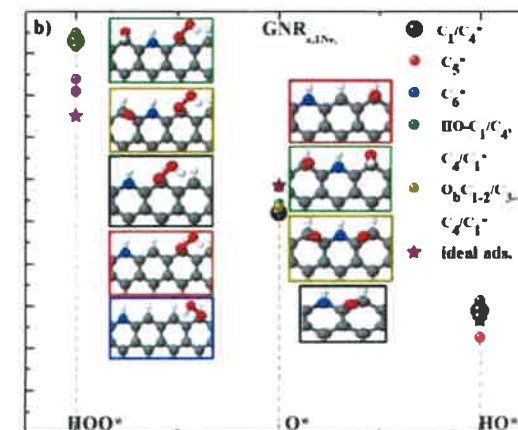
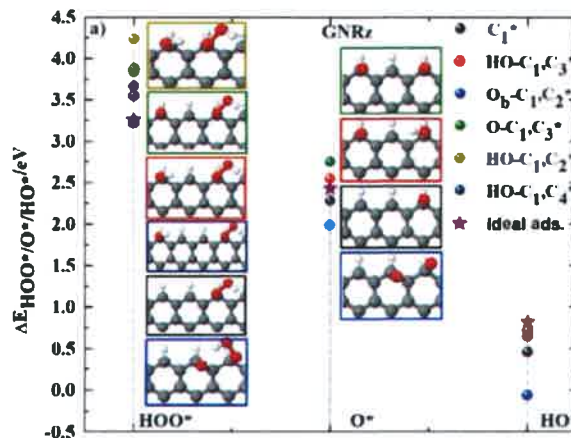


Variatia energiei de adsorbție pentru HOO\*, O\*, HO\* pe suprafața 1N fara HO\* coadsorbit (linie maro plina) si fara 1HO\* coadsorbit (1N1HO – linie maro punctata). Linia rosie plina – energia de adsorbție corespunzatoare catalizatorului ideal. Modelare la nivel DFT

**Material grafenice.  
Structură și aplicații**

Cum afecteaza coadsorbati activitatea marginilor grafenei nedopate si dopate in reactia de reducere a oxigenului. Modelare DFT.

I. C. Man, S. G. Soriga, D.L. Isac. How Do the Coadsorbates Affect the Oxygen Reduction Reaction Activity of Undoped and N-Doped Graphene Nanoribbon Edges? A DFT Study. *Journal of physical Chemistry C*, 2020, 124, 42, 23177-23189.

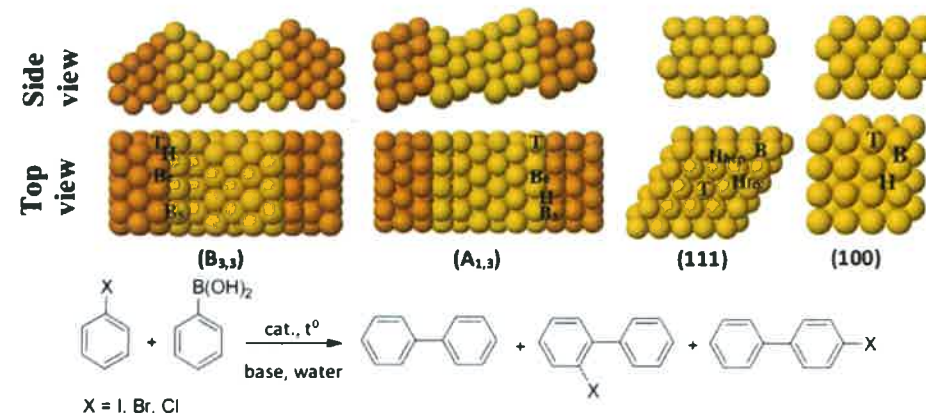


# Grupul de CHIMIE ORGANICĂ TEORETICĂ

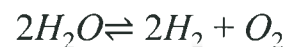
## Nanostructuri de aur în interacțiune cu molecule organice

Studiu teoretic a nanostructurilor de aur în reacția de cuplare C-C

I.C. Man, S.G.Soriga. A theoretical study of the influence of gold nanoplatelets sites in CC coupling reaction. *Molecular Catalysis*. 2020, 485(6), 110845.

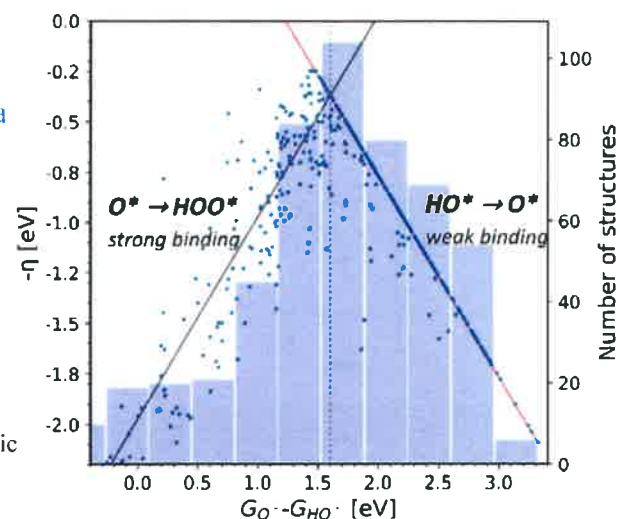


Reacția de degajare a oxigenului: perspectiva asupra unui deceniu de simulare la scara atomica



## Oxidarea apei pentru producere de hidrogen

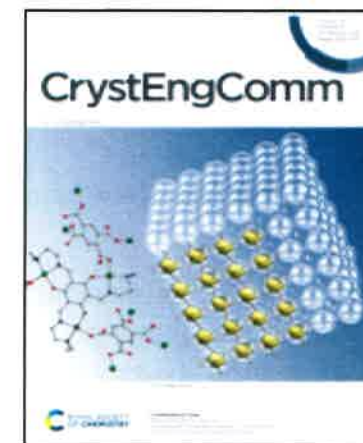
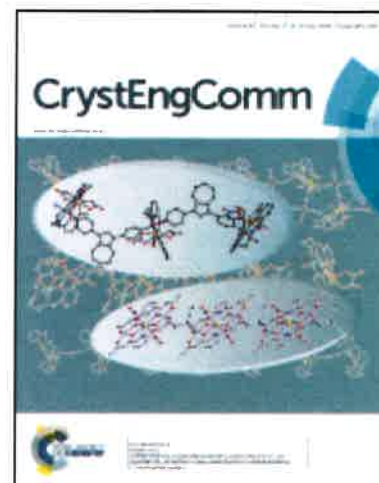
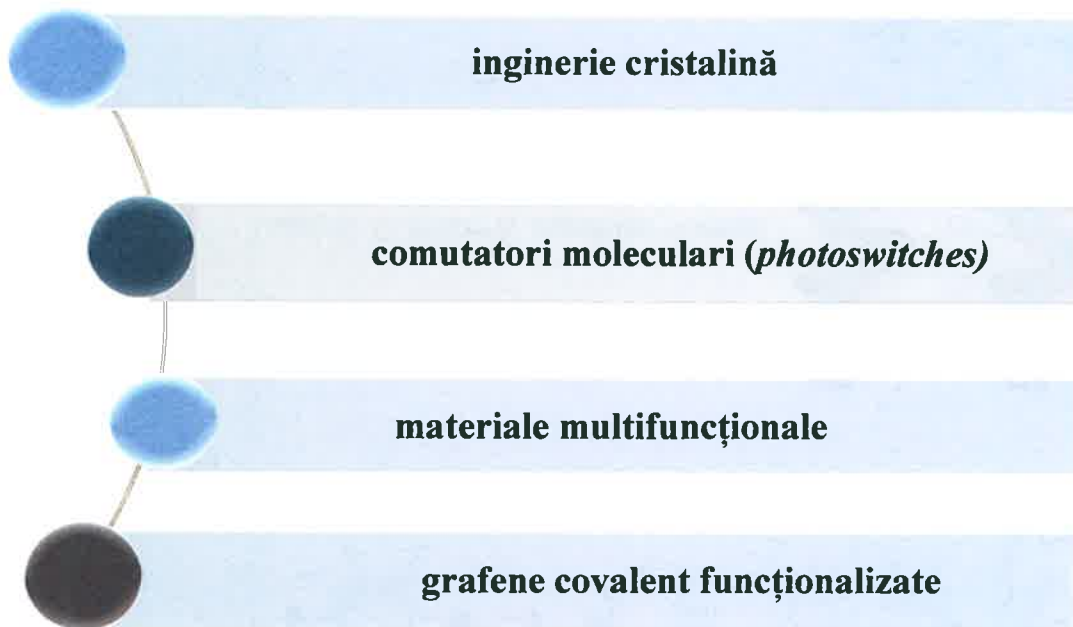
S. Divanis, T. Kutlusoy, I.M. Boye, I.C. Man, J. Rossmeisl. Oxygen Evolution Reaction: A perspective on a decade of atomic scale simulations. *Chemical Science*, 2020, 11, 2943.



Activity Volcano. The weak binding leg (red) of the Volcano is relatively more populated, as it is shown at the histogram, than the strong binding leg (gray), indicating that the doped structures do not enhance binding of  $\text{O}^*$  intermediate on the tested surfaces.

# Grupul de **CHIMIE METALOSUPRAMOLECULARĂ ȘI INGINERIE CRISTALINĂ**

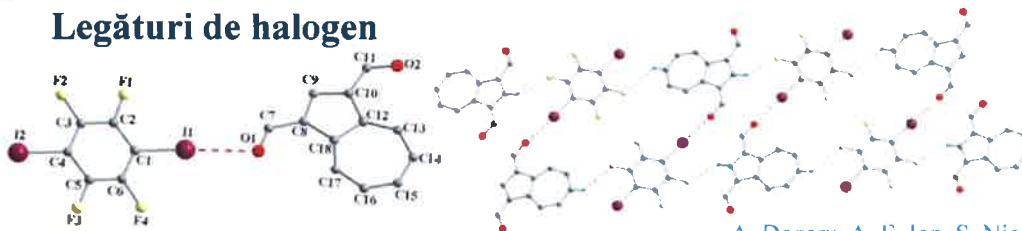
What we do?



# Grupul de CHIMIE METALOSUPRAMOLECULARĂ ȘI INGINERIE CRISTALINĂ

## Inginerie cristalină

### Legături de halogen

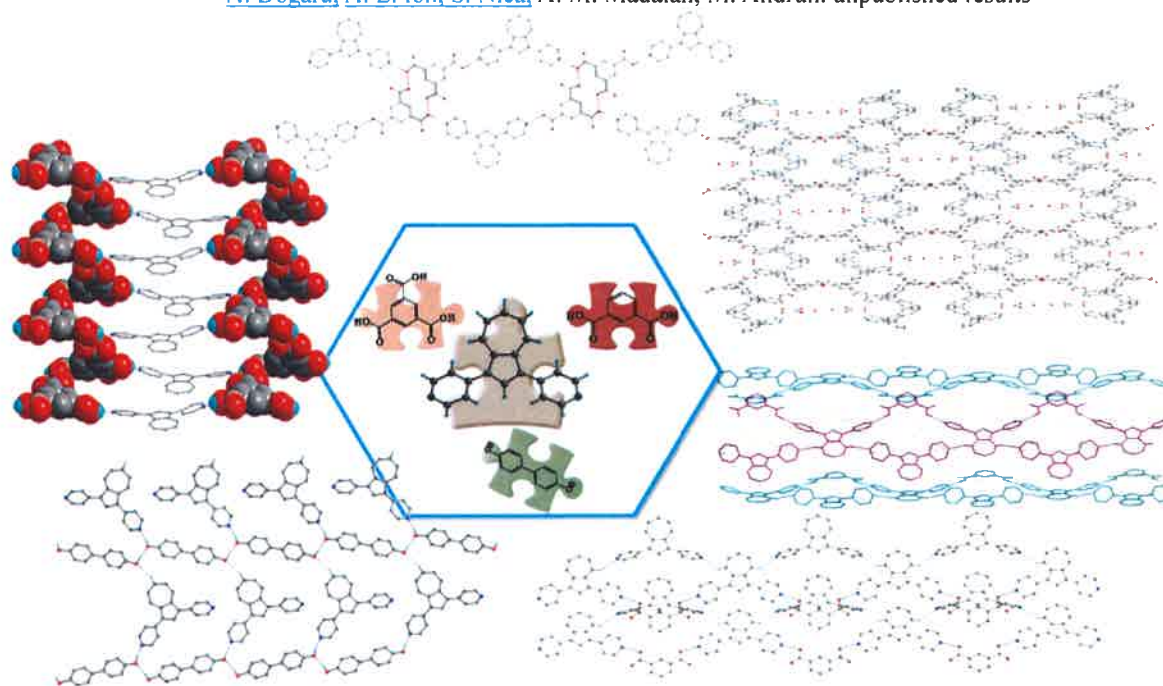


sintoni CHO...I și CH...F rezultați prin asamblarea 1,3-diformilazulenei cu diiodotetrafluorobenzeni

[A. Dogaru](#), [A. E. Ion](#), [S. Nica](#), A. M. Madalan, M. Andruh. unpublished results

### Legături de hidrogen

sintoni COOH...N asamblați pornind de la 1,3-bis(4-pyridyl)azulena

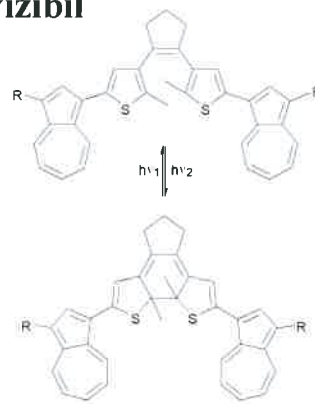
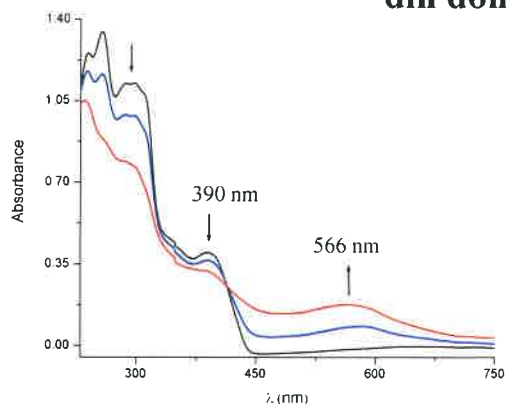


[A. E. Ion](#), [A. Dogaru](#), S. Shova, A. M. Madalan, O. Akintola, S. Ionescu, M. Voicescu, [S. Nica](#), A. Bucholz, W. Plass, M. Andruh. Organic co-crystals of 1,3-bis(4-pyridyl) azulene with a series of hydrogen-bond donors. *CrystEngComm* **2018**, 20, 4463-4484.

# Grupul de CHIMIE METALOSUPRAMOLECULARĂ ȘI INGINERIE CRISTALINĂ

Ditienilciclopentene funcționalizate rațional pentru inducerea reacției de fotociclizare folosind acțiunea luminii din domeniul vizibil

Comutatori organici (photoswitch)



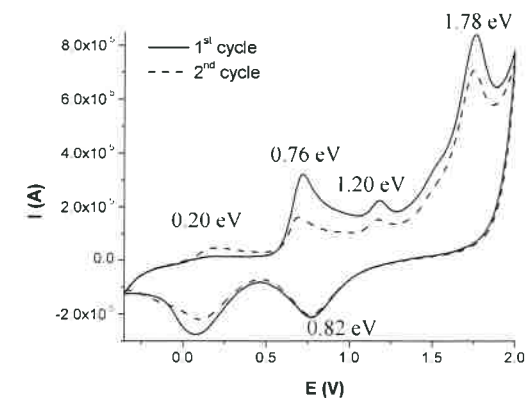
- fotociclizare indusă prin iradiere cu  $\lambda = 405$  nm
- proces reversibil prin expunerea la lumină din domeniul vizibil

comutatori de fluorescență

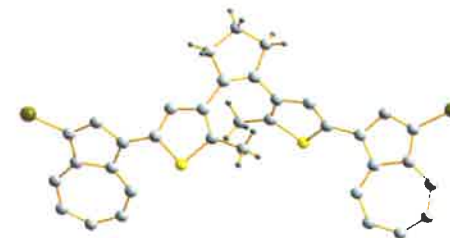
stingerea fluorescenței în urma iradierii funcție de substituția cromoforilor azulenici

- R = H → 20 % stingere
- R = CHO → 38 % stingere
- R = Br → stingere completă

comutatori electrochimici

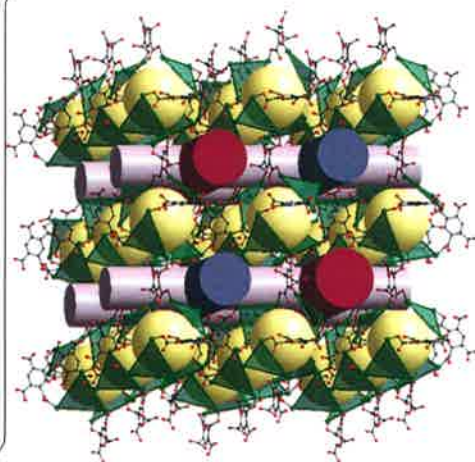


- ciclizare indusă prin oxidare electrochimică



- orientare antiparalelă a grupărilor metil, favorabilă fotociclizării
- distanța între centrii activi de 3.453 Å (max 4.2 Å)

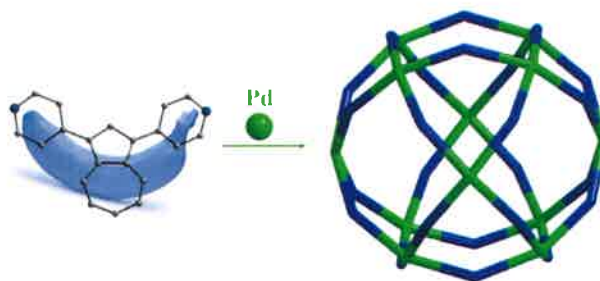
**Materiale avansate multifuncționale cu design și proprietăți ajustabile**



## Rețele metal-organice

Dezvoltarea de rețele metal-organice (*metal-organic framework*) folosind noduri trinucleare și acizi organici policarboxilici. În acest scop se folosesc baze Schiff tricompartimentate obținute prin condensarea 2,4,6-triformilfloroglucinolului cu N,N-dimetiletilediamina

A. S. Dinca, [A. Dogaru](#), [A. E. Ion](#), [S. Nica](#), D. Dumitrescu, S. Shova, F. Lloret, M. Julve, M. Andruh. An original 3D coordination polymer constructed from trinuclear nodes and tetracarboxylato spacers. *CrystEngComm* **2021**, 23, 1332-1335.



## Cuști electroactive metal-organice

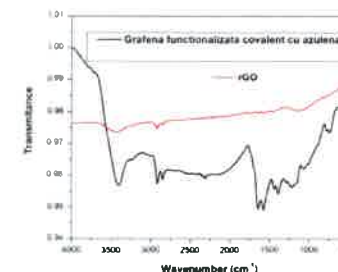
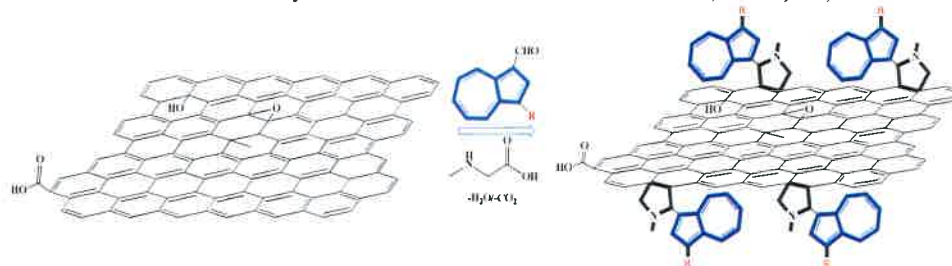
Folosind 1,3-bis(4-piridil) azulena ca ligand organic și  $[Pd(en)(NO_3)_2]$ , se vor asambla cuști discrete conform unui algoritm cunoscut. Datorită proprietăților redox ale cromoforului azulenic care face legătura între unitățile piridinice, aceste cuști reprezintă exemple rare de asambluri supramoleculare discrete electroactive.

[S. Nica \(Ion\)](#). Stimuli-responsive molecular cages constructed with electroactive organic modules. Proiect PN-III-P4-PCE-2021-1377, **2021**, în evaluare.

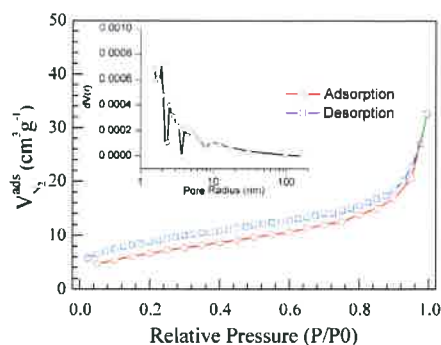
## Grafene covalent funcționalizate

Obținerea de oxid de grafenă redus funcționalizat rațional pentru electroactivitate mărită, utilizabil în fabricarea de pile de combustibil tip PEM.

A. Marinoiu, M. Raceanu, M. Andrulevicius, A. Tamuleviciene, T. Tamulevicius, [S. Nica](#), D. Balea, M. Varlam  
Low-cost preparation method of well dispersed gold nanoparticles on reduced graphene oxide and electrocatalytic stability in PEM fuel cell. *Arabian J. Chem*, 2020, 13, 3585-3600.

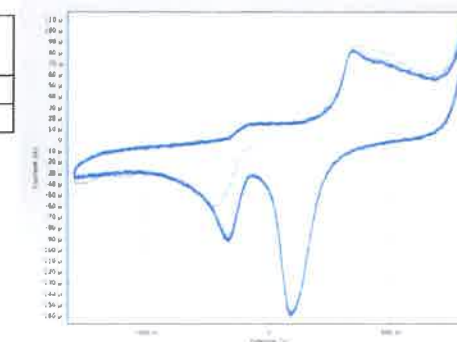


Fabricarea de grafene-funcționalizate covalent cu azulene folosind protocolul reacției de cicloadiție 1,3-dipolară la dubla legătura a oxidului de grafenă redus, cu formarea de oxid de grafenă pirolidino-azulenil-funcționalizat.



Samples	$S_{BET}$ ( $m^2 g^{-1}$ )	BJH Pore volume ( $cm^3 g^{-1}$ )	BJH Pore Radius (nm)
rGO	420	1.629	1.9691
rGO-Az	25	0.040	1.9634

- izoterma de adsorbție specifică unei structuri mezoporoase (tip IV);
- diametrul porilor indică o structură poroasă ierarhică: i) micropori pentru reacția în volum; ii) mezopori pentru procesul de difuzie controlat cinetic și iii) macropori pentru canale de absorbție a gazelor.



✓ Stabilitate electrochimică crescută, păstrând 95 % din activitatea electrochimică la peste 100 de cicluri, adecvată pentru înglobarea în *design*-ul de electrozi inovativi pentru PEM fuel cell

