

**RECEPȚIONAT**

Agenția Națională pentru Cercetare

și Dezvoltare \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ 2024

**AVIZAT**

Secția AȘM \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ 2024

## **RAPORT ȘTIINȚIFIC ANUAL**

### **pentru etapa 2023**

**privind implementarea proiectului din cadrul**

**Programului de Stat (2020–2023)**

Proiectul Implementarea principiilor ingineriei cristalelor și cristalografiei cu raze X pentru designul și crearea materialelor hibride organice/anorganice cu proprietăți avansate fizice și biologice active funcționale

Cifrul proiectului ANCD 20.80009.5007.15

Prioritatea Strategică Competitivitate economică și tehnologii inovative

Rectorul USM

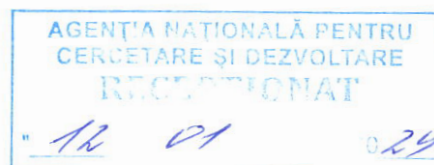
ȘAROV Igor

Consiliul științific

ȘIKIMAKA Olga

Conducătorul proiectului

KRAVTOV Victor



L.Ș.

Chișinău 2024

## CUPRINS:

1.	Scopul și obiectivele etapei 2023	2
2.	Acțiunile planificate și realizate în 2023	3
3.	Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect 2023 în limba română	5
4.	Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect 2023 în limba engleză	6
5.	Rezultatele obținute	7
6.	Impactul științific/social și/sau economic al rezultatelor științifice obținute	11
7.	Colaborare la nivel național și internațional în cadrul implementării proiectului	11
8.	Dificultățile în realizarea proiectului	12
9.	Diseminarea rezultatelor obținute în proiect 2023:	
9.1.	Lista publicațiilor științifice 2023	12
9.2.	Lista participărilor la conferințe	21
9.3.	Promovarea rezultatelor cercetărilor obținute în proiect în mass-media	21
10.	Diseminarea rezultatelor obținute în proiect în formă de prezentări la foruri științifice	22
11.	Teze de doctorat / postdoctorat susținute și confirmate în anul 2023 de membrii echipei proiectului	22
12.	Concluzii	22
13.	Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2023 (Anexa nr. 1)	24
14.	Lista publicațiilor științifice 2023 (Anexa nr. 2)	27
15.	Executarea devizului de cheltuieli (Anexa 3)	37
16.	Componența echipei proiectului pentru anul 2023 (Anexa 4)	38

## 1. Scopul și obiectivele etapei 2023

### 1.1. Scopul etapei 2023 conform proiectului depus la concurs (obligatoriu)

Dezvoltarea protocoalelor pentru fabricarea direcționată a materialelor metalorganice ale metalelor s, s-d, d, f, d-d', d-f și supramoleculare cu proprietăți avansate fizice și activitate biologică. Studiul corelației structură-proprietăți

### 1.2. Obiectivele etapei 2023 (obligatoriu)

- Elaborarea conceptului de selectare a liganzilor organici, ionilor metalici pentru proiectarea și obținerea materialelor cu proprietăți scontate în baza analizei datelor din literatură, a bazei de date structurale Cambridge (BDSC) și a rezultatelor obținute în etapele anterioare ale proiectului.
- Stabilirea condițiilor optime de obținere a materialelor noi, variind atât sărurile și solvenții, cât și condițiile reacțiilor. Analiza prealabilă a modurilor de coordinare posibile ale liganzilor cu mai mulți atomi donori, forma poliedrelor de coordinare ale metalelor, generatori de compuși coordinativi având ca scop obținerea clusterilor cu nuclearitate superioară cu nucleul {Fe/Ln}, {Mn/Ln}, {Co/Ln} și polimerilor coordinativi cu liganzi ce conțin în setul de atomi donori azot și oxigen.
- Determinarea structurii cristaline a compușilor noi obținuți, a purității fazelor având ca scop studiul proprietăților posibile ale acestora: a clusterilor polinucleari homometalici și heterometalici cu metale de tip 3d și 4f, a compușilor coordinativi cu metale de tip s antrenând ca liganzi alcoolamine și acizi carboxilici, a compușilor coordinativi ce conțin Cu(II), Co(II), Ni(II), Zn(II) și Cd(II) și liganzi având în setul de atomi donori doar N.
- Studiul cu raze X și analiza structurii, în cadrul colaborării științifice, a unui șir de compuși în fază monocristalină, inclusiv a cristalelor compușilor bioactivi, sintetizați în alte centre științifice naționale, în special la Institutul de Chimie și la Facultatea de Chimie și Tehnologie Chimică ale USM, la facultatea de Biologie și Chimie a UPSC.
- Investigații experimentale ale proprietăților magnetice ale materialelor noi (în colaborare cu echipa din Germania) și calcule teoretice referitor la interacțiunile magnetice din clusterii nanodimensionali: {Mn<sub>2</sub>Ln<sub>2</sub>, Ln=Gd, Tb, Dy}, {Mn<sub>7</sub>Dy<sub>2</sub>}, {Mn<sub>26</sub>Ln<sub>6</sub>, Ln=Dy, Tb}, {Fe<sub>18</sub>Dy<sub>6</sub>}, {Co<sub>x</sub>Ln<sub>y</sub>, x=2-4, y=2-4}. Calculul și analiza suprafețelor Hirshfeld pentru un șir de compuși ai hexaminei de trichlorură de Co(III), ai unor compuși coordinativi ai metalelor de tranziție cu 4,4'-diaminodifenilmetan, 4,4'-diaminodifeniletan s. a.
- Studiul luminiscentei pentru compușii multicompenți organici și polimeri coordinativi ai Cu(II), Co(II), Ni(II), Zn(II) și Cd(II) cu liganzi ce conțin în setul donor atomii N/O. Studiul influenței solvent din porii cristalelor asupra luminiscentei.
- Elaborarea tezelor de doctor (3 în lucru), master (2).
- Publicarea rezultatelor sub formă de articole, brevete, rezumate la foruri științifice ori la saloane de inventică.

## 2. Acțiunile planificate și realizate în 2023

### 2.1. Acțiunile planificate pentru realizarea scopului și obiectivelor etapei 2023 (obligatoriu)

- Se va elabora un concept de selectare a liganzilor organici și ionilor metalici pentru proiectarea și obținerea materialelor cu proprietăți scontate, utilizând datele din literatură, baza de date structurale Cambridge (BDSC) și rezultatele obținute în etapele anterioare ale proiectului.
- Se va elabora designul și se vor obține clusteri polinucleari homometalici și heterometalici cu metale de tip 3d și 4f, inclusiv ce conțin în nucleu {Fe/Ln}, {Mn/Ln} și {Co/Ln} antrenând ca liganzi alcoolamine și acizi carboxilici. Se vor investiga proprietățile spectroscopice, structurale, termice și magnetice ale acestor clusteri. Se vor efectua calcule teoretice cuanto-chimice ce vor evidenția interacțiunile magnetice din clusterii de dimensiuni nano: {Mn<sub>2</sub>Ln<sub>2</sub>, Ln=Gd, Tb, Dy}, {Mn<sub>7</sub>Dy<sub>2</sub>}, {Mn<sub>26</sub>Ln<sub>6</sub>, Ln=Dy, Tb}, {Fe<sub>18</sub>Dy<sub>6</sub>}, {Co<sub>x</sub>Ln<sub>y</sub>, x=2-4, y=2-4}.
- Se vor calcula și analiza suprafețele Hirshfeld pentru clasa de compuși coordinativi obținuți în baza hexaminei de tricolorură de Co(III), având ca scop determinarea stabilității legăturilor de hidrogen și cuantificarea intercontactelor dintre componentele cristalelor.
- Se vor obține compuși coordinativi cu metale de tip s (K/ Ca) antrenând ca liganzi alcoolamine și acizi carboxilici și se va efectua studiul luminiscentei, toxicității, ș.a. proprietăți.
- Se vor obține și studia din punct de vedere structural compuși coordinativi ai metalelor de tranziție Cu(II), Co(II), Ni(II), Zn(II) și Cd(II) cu liganzi ce conțin în setul donor atomii N (4,4'-diaminodifenilmetan, 4,4'-diaminodifeniletan, ș.a. ).
- Se va încerca sinteza unor baze Schiff și fabricarea compușilor coordinativi noi cu metale 3d în baza lor.
- Se va efectua studiul cu raze X al compușilor coordinativi heterometalici de tip polimer în baza sistemelor [Mn(II)-Ba(II)] și [Mg(II)-Ca(II)] cu liganzi carboxilici, al compușilor coordinativi ai metalelor d etranziție cu noi baze Schiff.
- Va fi finisată determinarea structurii cristaline a compușilor coordinativi ai Cu(II), Co(III) și Ni(II) în baza liganzilor tetraazamacrociclici, a compușilor coordinativi ai Cd(II) și Zn(II) de tip polimer cu diferită dimensionalitate obținuți în baza diferitor liganzi azinici ce conțin suplimentar dicarboxilat.
- Se va efectua studiul cu raze X pentru un șir de liganzi noi tiosemicarbazonici și a compușilor lor cu metale de tranziție 3d, materialele fiind cu activitate farmacologică.
- Se va lucra la tezele de doctor și master ce se vor realiza în laborator.

### 2.2. Acțiunile realizate (obligatoriu)

- Au fost analizate datele din BDSC referitor la compușii metalelor de tranziție homo- și heterometalici cu un șir de liganzi organici polidentati cu atomi donori ce conțin doar N, precum și acizi carboxilici, cu derivați ai piridinei, tiosemicarbazone, ș.a.. Din literatura de specialitate au fost analizate structurile unor compuși din clasele respective, au fost identificate particularitățile de coordinare ale liganzilor în funcție de natura metalelor și a solvenților utilizați, forma poliedrelor de coordinare ale metalelor și blocurile moleculare ce pot fi utilizate la obținerea clusterilor cu nuclearitate superioară ori a polimerilor

coordinativi. Un studiu special ține de sistemele multicomponente organice, ce conțin amine alifatiche și derivați ai acidului benzoic.

- A fost elaborat designul și au fost sintetizați clusteri polinucleari homometalici și heterometalici cu metale de tip 3d și 4f, inclusiv ce conțin ca nucleu {Fe/Ln}, {Mn/Ln} și {Co/Ln} antrenând alcoolamine și acizi carboxilici. Au fost investigate unele proprietăți ale acestor clusteri, în special corelația structura - interacțiuni magnetice din clusterii magnetici de dimensiuni nano: {Mn<sub>2</sub>Ln<sub>2</sub>, Ln=Gd, Tb, Dy}, {Mn<sub>7</sub>Dy<sub>2</sub>}, {Mn<sub>26</sub>Ln<sub>6</sub>, Ln=Dy, Tb}, {Fe<sub>18</sub>Dy<sub>6</sub>}, {Co<sub>x</sub>Ln<sub>y</sub>, x=2-4, y=2-4}.
- În baza calculelor și a analizei suprafețelor Hirshfeld pentru un șir de compuși coordinativi obținuți în baza hexaminei de triclorură de Co(III) a fost evidențiată tăria legăturilor de hidrogen și au fost cuantificate intercontactele dintre componentele cristalelor.
- S-au efectuat încercări de a obține compuși coordinativi cu metale de tip s (K și Ca) antrenând ca liganzi alcoolamine și acizi carboxilici, variind raportul componentelelor și solvenții utilizați. Se planifică de a efectua studiul luminiscentei, toxicității, ș.a. proprietăți.
- Au fost obținuți și studiați din punct de vedere structural un șir de compuși coordinativi noi ai Cu(II), Co(II), Ni(II), Zn(II) și Cd(II) cu liganzi ce conțin în setul donor atomi N (4,4'-diaminodifenilmetan, 4,4'-diaminodifeniletan, ș.a. ).
- Au fost efectuate sinteze având ca scop crearea a noi baze Schiff și fabricarea compușilor coordinativi noi cu metale 3d în baza lor.
- A fost efectuat studiul cu raze X al compușilor coordinativi heterometalici de tip polimer în baza sistemelor [Mn(II)-Ba(II)] și [Mg(II)-Ca(II)] cu liganzi carboxilici, al unor noi baze Schiff și a compușilor lor, a fost finisat studiul cu raze X al compușilor coordinativi noi cu baze Schiff cunoscute (lucrări în colaborare).
- A fost determinată structura cristalină a compușilor coordinativi ai Cu(II), Co(III) și Ni(II) în baza liganzilor tetraazamacrociclici, a compușilor coordinativi ai Cd(II) și Zn(II) de tip polimer cu diferită dimensionalitate obținuți în baza diferitor liganzi azinici ce conțin suplimentar dicarboxilat (în colaborare).
- A fost efectuat studiul cu raze X pentru un șir de liganzi noi tiosemicarbazonici și a compușilor lor cu metale de tranziție 3d, materiale cu activitate farmacologică (în colaborare).
- A fost finisată o teză de master (Vaveriță Anastasia, USPC), se lucrează în continuare la o teză de master ce va fi finisată în 2024 (Craciun Nicoleta), se efectuează investigații și se finisează unele cercetări în cadrul celor 3 teze de doctor (Stati D., Podgornii D., Darii M.). Au fost publicate 17 articole în reviste cu IF, 17 articole în culegeri, 10 teze.

### 3. Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect 2023 în limba română

Etapa patru a proiectului, în conformitate cu programul de activități pentru 2023, a fost axată pe dezvoltarea protocoalelor de proiectare și fabricare a materialelor hibride cristaline organice/anorganice noi care includ polimeri și nanoclusteri coordinativi, complecși mononucleari, sisteme multicomponente supramoleculare organice sau organice/anorganice cu proprietăți fizice și biologice avansate care utilizează abordarea principiilor ingineriei cristalului și metoda cristalografică cu raze X. În calitate de componente anorganice au fost utilizate o gamă largă de metale s, s-d, d, f, d-d', d-f, iar ca liganzi s-au utilizat molecule organice cunoscute ori noi sintetizate. Structurile cristaline a mai mult de 70 de materiale cristaline noi au fost studiate prin difracția cu raze X pe monocristal, iar cele mai promițătoare dintre ele au fost investigate prin metode fizice sau testări biologice. Dintre clusterii heterometalici obținuți, cel mai remarcabil este clusterul heteronuclear nanodimensional în formă de roată cu un miez care conține 24 de nuclee metalice  $\{\text{Fe}_{18}\text{Tb}_6\}$ , asamblat prin utilizarea liganzilor de pivalat și trietanolamină, având compoziția  $\text{C}_{234}\text{H}_{462}\text{N}_{30}\text{O}_{102}\text{Fe}_{18}\text{Tb}_6$ . Asamblarea acestora creează în cristal canale infinite care ocupă 26% din volumul cristalului. Heteroclusterii cu nuclee metalice  $\{\text{Co}_2^{\text{III}}\text{Dy}_4^{\text{III}}\}$  și  $\{\text{Mn}_6^{\text{III}}\text{Mn}^{\text{IV}}\text{Dy}_2^{\text{III}}\}$  au o structură extinsă bazată pe subunități triunghiulare și cubane și prezintă proprietățile unui magnet molecular, care oferă potențial pentru calculul cuantic. Principiile ingineriei cristalului au fost folosite pentru a crea materiale poroase polimerice cristaline cu diferite dimensiuni și funcționalitate a pereților porilor, oferind selectivitate de adsorbție diferitor molecule. Au fost obținuți și caracterizați structural compuși coordinativi fără precedent, inclusiv polimeri poroși 1D și 2D de Co, Ni, Zn și Cd cu ligandul 4,4'-diaminodifeniletan. Rețelele metalorganice de Zn(II) și Cd(II) cu pori funcționalizați cu azină au fost obținute și studiate în ceea ce privește structurile cristaline, fotoluminiscenta, schimbul de solvenți și modelarea moleculară a situsurilor de legare a dioxidului de carbon. Schimbarea esențială a spectrelor de luminescență la includerea moleculelor de nitrobenzen în structura poroasă a unui astfel de cristal a indicat la potențialele proprietăți de senzor. Promițător pentru implementare în sectorul agricol al Republicii Moldova este un compus multicomponent care conține cationul de hexaamină Co(III) și 1,10-fenantrolină, care prezintă proprietăți inhibitoare împotriva dezvoltării cancerului la vița de vie, testat la Institutul Științifico-Practic de Horticultură și Tehnologie Alimentare. Au fost obținute și studiate, din punct de vedere al bioactivității lor inclusiv cu proprietăți inhibitoare HIV/SIDA, un șir de cristale supramoleculare multicomponente cu cationul de hexaamină cobalt(III) și diverse molecule ce conțin atomi donori S, O, N. Studiul cu raze X a fost realizat și pentru o serie de materiale noi obținute în diverse centre științifice din țară și străinătate în cadrul lucrărilor de colaborare. În 2023 au fost publicate 20 articole științifice în reviste științifice, 17 fiind în reviste prestigioase cu factor de impact ridicat; membrii echipei au participat la 9 conferințe științifice internaționale și naționale, 4 saloane de inventică, la care au publicat 17 lucrări (proceedings) și 10 rezumate. Au fost obținute 6 brevete, rezultatele fiind menționate cu medalii de aur, argint, bronz și cu o diplomă de excelență. Au fost susținute o teză de doctorat și o teză de master, iar trei teze de doctorat și una de master sunt în curs de realizare.

#### 4. Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect 2023 în limba engleză

The 4-th stage of the project in accordance with the program of activities for 2023 was focused on development of protocols for design and fabrication of novel crystalline hybrid organic/inorganic materials involving coordination polymers, nanoclusters, mononuclear complexes, multicomponent organic or organic/inorganic supramolecular systems with advanced physical and biological properties utilizing crystal engineering approach and X-ray crystallographic method. A wide range of s, s-d, d, f, d-d', d-f metals were used as inorganic components, and known and newly synthesized organic molecules as ligands. Crystal structures of more than 70 new crystalline materials have been studied by single crystal X-ray diffraction and most promising of them were investigated by physical methods or biological testing. Among the heterometallic clusters obtained in the project, the most remarkable is the nanosized heteronuclear wheel-shaped cluster with a 24-nuclear metal core  $\{\text{Fe}_{18}\text{Tb}_6\}$ , assembled using pivalate and triethanolamine ligands and having composition  $\text{C}_{234}\text{H}_{462}\text{N}_{30}\text{O}_{102}\text{Fe}_{18}\text{Tb}_6$ . The packing of nanosized wheels creates in the crystal infinite channels occupied 26% of crystal volume. The heteroclusters with metal cores  $\{\text{Co}_2^{\text{III}}\text{Dy}_4^{\text{III}}\}$  and  $\{\text{Mn}_6^{\text{III}}\text{Mn}^{\text{IV}}\text{Dy}_2^{\text{III}}\}$  have an extended structure based on triangular and cubane subunits and have the properties of a single-molecule magnet, which provides potential for quantum computing. The principles of crystal engineering have been used to create crystalline polymer porous materials with various dimensions and functionality of pore walls providing selectivity of adsorption of various molecules. Unprecedented coordination compounds including 1D and 2D porous polymers of Co, Ni, Zn and Cd with a 4,4'-diaminodiphenylethane ligand, have been prepared and structurally characterized. The Zn(II) and Cd(II) metal-organic frameworks with azine-functionalized pores were prepared and studied in terms of crystal structures, photoluminescence, solvent exchange, and molecular modeling of carbon dioxide binding sites. The essential shift of luminescence spectra upon inclusion of nitrobenzene molecules in porous structure of such crystal indicated their potential sensor properties. Promising for implementation in the agricultural sector of the Republic of Moldova is a multicomponent compound containing Co(III) hexaammine cation and 1,10-phenanthroline, which exhibits inhibitory properties against the development of grapevine cancer and is being tested at the Scientific-Practical Institute of Horticulture and Food Technology. A number of supramolecular multicomponent crystals with cobalt(III) hexaammine cation and various molecules containing S, O, N donor atoms were obtained and studied in view point of their bioactivity including with Hiv/Aids inhibitory properties. The X-ray study was also carried out for a series of new materials obtained in various scientific centers in the country and abroad in the frameworks of collaboration. In 2023, 20 scientific articles were published in scientific journals, including 17 in the most prestigious ones with high impact factors; team members took part in 9 international and national scientific conferences, 4 exhibitions, and published 17 proceedings, 10 abstracts. 6 patents were obtained and awarded with Gold, Silver, and Bronze medals and Diploma of excellence. One doctor, one master theses have been defended and three doctor and one master theses are in realization.

## 5. Rezultatele obținute (descriere narativă 3-5 pagini) (obligatoriu)

În cadrul etapei a patra a proiectului s-au obținut noi materiale cristaline cu proprietăți de magnet molecular (SMM), polimeri coordinativi poroși cu proprietăți senzoriale și polimeri cu liganzi noi obținuți și compuși bioactivi care au fost caracterizați din punct de vedere structural și a proprietăților lor, precum și corelația structură-proprietăți.

un comportament de SMM cu o încărcătură energetică eficientă de 15,2 K și  $\tau_0 = 1,4 \times 10^{-7}$  s. (Un nou cluster heterometalic nanonuclear  $[\text{Fe}_{18}\text{Tb}_6(\text{piv})_{12}(\text{tea})_6(\text{Htea})_{18}(\text{N}_3)_6] \cdot n(\text{solvent})$  (**1**) (Hpiv = acid pivalic) în formă de roată a fost sintetizat prin reacția dintre precursorul pivalat de Fe(III) oxo-trinuclear și nitratul de terbiu(III) cu trietanolamină ( $\text{H}_3\text{tea}$ ) și azidă de sodiu în amestec de etanol și acetonitril sub iradiere cu ultrasunet. Studiul structural a stabilit că în cristal 18 ioni de Fe(III) și 6 ioni de Tb(III) definesc un inel și sunt legați prin 6 liganzi de pivalat și 24 de trietanolamină. Sfera de coordinare a atomilor de metal este completată de șase anioni de pivalați și șase azide. Diametrul exterior al roții  $\{\text{Fe}_{18}\text{Tb}_6\}$  este de cca. 3,5 nm, iar interior - 1,0 nm, grosimea roții moleculare fiind cca. 1,3 nm. În structura cristalină, împachetarea acestor clusteri voluminoși rezultă în canale infinite în care sunt localizate molecule de solvent. La îndepărtarea moleculelor de solvent, această structură dezvăluie un volum de cca. 26% per unitate de volum al celulei elementare. (6<sup>th</sup> Int. Conf. on Nano techn. and Biomed. Eng. ICNBME 2023. IFMBE Proceedings, 2024. vol 91. p. 80–87.)

Compusul coordinativ de tip cluster  $[\text{Co}_2\text{Dy}_4(\text{OH})_2(\text{ib})_8(\text{bdea})_2(\text{NO}_3)_4(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{MeCN}$  (**2**) a fost auto-asamblat în rezultatul reacției cu un randament ridicat de izobutirat de cobalt(II) cu  $\text{Dy}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  și N-butildietanolamină ( $\text{H}_2\text{bdea}$ ) în aer. Nucleul clusterului  $\{\text{Co}_2\text{Dy}_4\}$  prezintă două triunghiuri  $\{\text{CoDy}_2(\mu_3\text{-OH})\}$ , unite între ele prin pozițiile a doi atomi de Dy, punți  $\mu\text{-O}$  și  $\mu\text{-carboxilat}$ . Ca rezultat se obține un schelet metalic planar,  $\text{Dy}_4$  fiind în formă zig-zag, spre deosebire de clusterii hexanucleari  $\{\text{Co}_2\text{Ln}_4(\mu_3\text{-OH})_2\}$ , care prezintă o combinație mai condensată din două triunghiuri  $\{\text{CoLn}_2(\mu_3\text{-OH})\}$ , în care  $\text{Dy}_4$  formează un romb. Conform măsurătorilor susceptibilității AC, această rearanjare în **2** reduce tunelul cuantic al magnetizării și, prin urmare, transferă apariția semnalelor pronunțate defazate în câmpul de polarizare zero la 14 K, o schimbare semnificativă față de structurile mai condensate  $\{\text{Co}_2\text{Dy}_4\}$ . Așa cum este binecunoscut că interacțiunile intermoleculare dintre clusterii coordinativi în stare solidă influențează și caracteristicile SMM, au fost efectuate și analizele comparative a suprafețelor Hirshfeld. (*Crys. Growth Des.* 2023, nr. 1(23), pp. 395—402).

Iradierea cu ultrasunet și prezența aminoalcoolului în reacția dintre  $\text{Mn}(\text{piv})_2$  cu  $\text{Dy}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  un amestec de  $\text{CH}_2\text{Cl}_2/\text{MeOH}$  favorizează formarea unui cluster heterometalic nonanuclear (**3**) cu o valență mixtă fără precedent, în care nucleul  $\{\text{Mn}_6^{\text{III}}\text{Mn}^{\text{IV}}\text{Dy}_2^{\text{III}}\}^{28+}$  constă dintr-o partajare a nodurilor  $\{\text{Mn}_4^{\text{III}}\text{Mn}^{\text{IV}}\text{Dy}_2^{\text{III}}\text{O}_8\}$  în formă de dublu-cuban, decorat suplimentar cu doi atomi de  $\text{Mn}^{\text{III}}$ . Este primul exemplu de formare a unui așa tip de compus cu punte Mn-4f. Analiza suprafeței Hirshfeld și diagramele de amprentă 2D au fost utilizate pentru a cuantifica interacțiunile intermoleculare prezente în **3** și pentru a obține informații suplimentare asupra relațiilor structură-proprietate prin maparea funcțiilor locale adecvate pe suprafețele metalice (Mn și Dy). Rezultatele analizei suprafeței Hirshfeld au arătat că contactele  $\text{H} \cdots \text{H}$  și  $\text{O} \cdots \text{H}/\text{H} \cdots \text{O}$  sunt interacțiuni dominante intermoleculare, responsabile de stabilizarea procesului de auto-asamblare. Calculele structurii electronice a clusterului arată că transferul de sarcină metalică are loc în special prin ligand de la orbitalii 3d ai ionilor de Mn la orbitalii 4f ai ionilor de Dy, conducând la o scădere a momentelor lor magnetice de spin. Studiul magnetic

arată că compusul **3** prezintă proprietăți de magnet monomolecular. (*Crystal Growth & Design*, 2023, nr. 9(23), pp. 6944—6952).

Derivații de acid sulfobenzoic cu grupări funcționale atractive pentru controlul orientării interacțiunilor intermoleculare din cristale pot participa la legarea hidrogenului, în care grupul funcțional carboxilic sau sulfonic este potențialul *site* de interacțiune. Au fost obținuți compuși multicompenți noi cu formulele  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}(3\text{-sb})\cdot\text{H}_2\text{O}$  (**4**) și  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]_2\text{Cl}_2(3\text{-sb})(\text{SO}_4)\cdot 7\text{H}_2\text{O}$  (**5**), în care cationul complex  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$  este unitatea structurală de bază pentru încorporarea anionilor sulfobenzoici la construcția compușilor noi prin intermediul legăturilor de hidrogen. Pentru aceștia s-a realizat determinarea structurilor cristaline și au fost efectuate calcule teoretice referitor la interacțiunile intermoleculare în raport cu cationul complex din cristale, investigându-se rolul acizilor organici și a cationului complex de hexaamina de cobalt(III). În baza calculelor și a analizei suprafețelor Hirshfeld a fost evidențiată tăria legăturilor de hidrogen și au fost cuantificate intercontactele dintre componentele cristalelor. Cationul  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$  cu stabilitate ridicată, are un număr mare de grupuri donore N-H, sarcină pozitivă ridicată (+3) și prezintă activitate antivirală și antibacteriană. Privind dezvoltarea de noi solide multi-componente cu proprietăți biologice au fost studiați trei noi compuși care conțin cationul  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$  și liganzi cu fragmente N,O- și O-donore. Această serie include:  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6](\text{pys})_3\cdot\text{Hpys}$  (**6**),  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6](\text{pys})_2\text{Cl}\cdot 2\text{CH}_3\text{CN}$  (**7**) și  $\{\text{K}_2[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}(\text{sb})_2\}_n$  (**8**) (Hpys = acid piridin sulfonic; H<sub>2</sub>sb = acid 4-sulfobenzoic). Pentru a studia interacțiunile noncovalente ale  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$  cu mono- și dianionii respectivi în acești compuși, a fost efectuată analiza de descompunere a energiei de interacțiune intermoleculară ( $E_{\text{int}}$ ) pentru perechi de cationi și anioni complecși, care sunt legați prin legături de hidrogen, care a evidențiat că energia de legare calculată este minimă pentru compusul **6** (valorile absolute ale lui  $E_{\text{int}}$  scad în următoarea ordine  $E_8 > E_7 > E_6$ ). În perechile selectate de **6-8**, termenul electrostatic domină în energia de legare calculată urmată de interacțiunea de inducție, în timp ce pentru **8** se observă ordinea inversă. Energia de legare minimă din compușii studiați indică faptul că în **6** atât cationul, cât și anionul ar putea afecta activitatea biologică a acestui. Așa cum  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$  a prezentat proprietăți antivirale remarcabile împotriva virusului Sindbis, adenovirusului, virusului imunodeficienței umane (HIV) și tulpinii Ebola Zaire, au fost sintetizați și testați referitor la potențialul lor de a inhiba replicarea HIV-1 (tulpina IIIB) și HIV-2 (tulpina ROD) în celulele MT-4 infectate acut, cu determinare paralelă a toxicității lor patru compuși multicompenți cu  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$  și diferiți liganzi N-, O- și N,O-donori  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3\cdot 2(\text{phen})\cdot 3\text{H}_2\text{O}$  (**9**),  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2(\text{Hpht})\cdot 3\text{H}_2\text{O}$  (**10**),  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}(\text{Hpht})_2\cdot 3\text{H}_2\text{O}$  (**11**) și  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6][\text{Co}(\text{pdc})_2(\text{H}_2\text{O})_4]\text{Cl}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$  (**12**) (phen = 1,10-fenantrolină; H<sub>2</sub>pht = acid o-ftalic; H<sub>2</sub>pdc = acid 3,5-piridindicarboxilic). Compusul **9** a prezentat cea mai bună activitate din aceste testări cu IC<sub>50</sub> de 0,46 mg/mL.

În rezultații interacțiunii ligandului ditopic 4,4'-diaminodifeniletan conformațional flexibil cu diferite săruri metalice (nitrați, sulfați, tetrafluoroborați și perclorați) au fost obținuți șapte compuși coordinativi noi ce includ doi complecși mononucleari  $[\text{Cd}(2,2'\text{-bpy})_3](\text{ClO}_4)_2(\text{dadpe})(4,4'\text{-bpy})$  (**13**) și  $[\text{Ni}(\text{dadpe})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{SO}_4)\cdot\text{H}_2\text{O}$  (**14**), doi polimeri coordinativi unidimensionali  $\{[\text{Zn}(\text{NO}_3)(\text{dadpe})(\text{dmf})_2](\text{NO}_3)\}_n$  (**15**),  $\{[\text{Cd}(2,2'\text{-bpy})_2(\text{dadpe})](\text{ClO}_4)_2\}_n$  (**16**) și trei polimeri coordinativi bidimensionali,  $\{[\text{Cd}(4,4'\text{-bpy})_2(\text{H}_2\text{O})_2](\text{ClO}_4)_2(\text{dadpe})(\text{EtOH})_2\}_n$  (**17**),  $\{[\text{Co}(4,4'\text{-bpy})_2(\text{H}_2\text{O})_2](\text{BF}_4)_2(\text{dadpe})(\text{EtOH})_2\}_n$  (**18**), și  $\{[\text{Cd}(\text{adi})(\text{dadpe})](\text{H}_2\text{adi})\}_n$  (**19**), în care dadpe=4,4'-diaminodifeniletan, 2,2'-bpy=2,2'-bipiridină, 4,4'-bpy=4,4'-bipiridină, H<sub>2</sub>adi=acid adipic. Compușii sintetizați au fost caracterizați

cu ajutorul razelor X pe monocristal și spectroscopiei FTIR. Studiul structural relevă că în cristalele complexului mononuclear **13** și a polimerilor coordinativi **16** și **18** ligandul dadpe joacă rol de oaspete, iar în compusul **14** doi liganzi dadpe coordinează într-un mod monodentat și ocupă două trans-poziții în cationul complex octaedric  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{dadpe})_2]^{2+}$ . Polimerii coordinativi **15** și **16** reprezintă lanțuri generate prin dadpe care servește drept linker bidentat. Posibilitățile donore ale grupărilor amino din dadpe au fost valorificate în interconectarea lanțurilor de coordinare în rețelele supramoleculare legate prin legături de hidrogen de tipul  $\text{NH}(\text{NH}_2)\cdots\text{O}$ . Polimerii coordonativi izostructurali **17** și **18** includ grile pătrate cationice similare  $[\text{M}(4,4'\text{-bpy})_2(\text{H}_2\text{O})_2]^{2+}$  [ $\text{M}=\text{Cd}$ ,  $\text{M}=\text{Co}$ ], cu topologie sql echilibrată de anionii ce compensează sarcina, în timp ce dadpe și EtOH vin ca oaspeți neutri și sunt situați în spațiul interstrat. Rețeaua coordinativă 2D neutră din **19** cu topologia sql e creată atât de linkerii adi, cât și de liganzi dadpe cu funcție punte bidentată, iar moleculele  $\text{H}_2\text{adi}$  neutre sunt incluse ca molecule oaspete în rețea cristalină. Impactul diferitelor tipuri de interacțiuni intermoleculare a fost evaluat de Analiza suprafeței Hirshfeld. (*Crystals*. 2023, nr. 2(13), 289-1—289-14)

Patru rețele metalo-organice neutre  $\{[\text{Zn}(\text{bpdc})(3\text{-bpmhz})] 1.5\text{dmf}\}_n$  (**20**),  $\{[\text{Zn}(\text{bpdc})(3\text{-bpmhz})] \text{dmf}\cdot 0.5\text{Py}\}_n$  (**21**),  $\{[\text{Zn}(\text{bpdc})(4\text{-bpmhz})] \text{MeOH}\cdot 0.5\text{H}_2\text{O}\}_n$  (**22**),  $\{[\text{Cd}(\text{bpdc})(\text{bda}4\text{bPy})] 2.5\text{dmf}\}_n$  (**23**), ( $\text{bpdc} = 4,4'$ -bifenildicarboxilat,  $3\text{-bpmhz} = 1,2\text{-bis}(1\text{-piridin-3-il)etiliden)hidrazină}$ ,  $3\text{-bphz} = 1,2\text{-bis}(1\text{-piridin-3-ilmetilen)hidrazină}$ ,  $4\text{-bpmhz} = 1,2\text{-bis}(1\text{-piridin-4-il)etiliden)hidrazină}$  și  $\text{bda}4\text{bPy} = \text{N1,N4-bis}(1\text{-piridin-4-ilmetilen)-benzen-1,4-diamină}$ ) cu topologii dia și pcu au fost studiate cu raze X pe monocristal. MOF-urile au demonstrat grade diferite de întrepătrundere și capacități de solvenți, volumele accesibile solvenților variind de la 30,1% până la 43,7%, respectiv. MOF **25** cu cei mai mari pori a evidențiat un schimb eficient de solvenți cu captarea nitrobenzenului (NB) înregistrată prin metode spectroscopice și confirmată prin studii cu raze X pe monocristal. Toți compușii au dezvăluit proprietăți de fotoluminescență bazate pe ligand și înregistrate în regiunile albastre și verzi ale spectrului vizibil. Cel mai poros MOF **23** a emis foarte aproape de lumina albă standard și în regiunea portocalie atunci când este încărcat cu NB. Teoria perturbației adaptată la simetrie a arătat avantajele porilor funcționalizați cu azină în MOF-urile studiate pentru captarea eficientă a moleculelor de  $\text{CO}_2$  de pe pereții porilor. Lucrări în colaborare cu **Institutul de Chimie, USM**. (*Crystal Growth & Design*. 2023, nr. 5(23), pp. 3171—3185.)

Infecțiile umane cauzate de bacteriile Gram+ sau Gram- reprezintă o problemă de sănătate publică, cauzând probleme grave de sănătate și o povară economică pentru sistemul de sănătate. Stabilirea de noi compuși cu efecte antibacteriene, fie ca tratamente de sine stătătoare, fie combinate cu antibiotice existente, a devenit un accent constant în cercetarea științifică. Un rezultat ține de studiul unei sări de alcanolamoniu  $(\text{HMMEA})(2\text{Cl}5\text{NB})$  (**24**) și un polimer coordinativ 2D  $[\text{K}(2\text{Cl}5\text{NB})(\text{H}_2\text{O})]_n$  (**25**) (MMEA - metiletanolamină;  $2\text{Cl}5\text{NBH}$  - acid 2-clor-5-nitrobenzoic) ce au fost sintetizate și caracterizate prin difracția cu raze X și spectroscopie IR, rezultatele fiind comparate cu cel pentru  $2\text{Cl}5\text{NBH}$ . Ambii compuși generează sisteme supramoleculare asamblate prin legături de hidrogen și interacțiuni  $\pi\text{-}\pi$  în sarea organică și legături de hidrogen fine în polimer. Activitățile lor antibacteriene au fost testate împotriva bacteriilor Gram+ (*Staphylococcus aureus*, *S. aureus* MRSA) și Gram- (*Salmonella typhimurium*, *Escherichia coli*) ca tulpini standardizate și tulpini izolate de la pacienții spitalizați. Au fost determinate concentrația minimă de inhibiție, viabilitatea celulelor bacteriene și rata de inhibare a formării biofilmului. Rezultatele au arătat că compușii noi au prezentat un efect bacteriolitic sau bacteriostatic în funcție de concentrația testată și de tulpina bacteriană studiată,

cu cea mai mare sensibilitate înregistrată în bacteriile Gram+ comparativ cu Gram-. Scăderea concentrației compușilor testați duce la scăderea efectului antibacterian. Lucrări în colaborare cu **Institutul de Chimie “Coriolan Drăgulescu”, Timișoara.**

A fost efectuat studiul structural cu ajutorul razelor X al unor noi tiosemicarbazone și a compușilor coordinativi ale acestora cu proprietăți antioxidante, antibacteriene/anticanceroase și alte proprietăți biologice. Aici se poate menționa N<sup>4</sup>-aliltiosemicarbazona HL (**26**) și complexul [Cu(L)Cl] (**27**). Studiul structural a determinat că la complexarea cu Cu(II), ligandul suferă o schimbare conformațională în fragmentul tiosemicarbazidic prin rotație pentru a adopta *cis*-configurația a atomilor donori S și N favorabilă modului de coordinare tridentat chelat. Atomul de metal este tetra-coordinat și are o înconjurare plan-pătratică. Ligandul de izotiosemicarbazonă tridentat coordinează la atomul central în forma monodeprotonată folosind setul SNN de atomi donori. O altă tiosemicarbazonă pentru care a fost stabilită structura este N<sup>4</sup>,S-dialilistiosemicarbazona HL<sup>2</sup> (HL<sup>2</sup>: R=CH<sub>3</sub>) (**28**), iar complexul studiat din punct de vedere structural este [Cu(L<sup>1</sup>)(CH<sub>3</sub>COO)(H<sub>2</sub>O)]·1.75H<sub>2</sub>O. (HL<sup>1</sup>: R=H) (**29**). Ionul Cu(II) este pentacoordinat, iar poliedrul de coordinare al acestui reprezintă o piramidă tetragonală. Ligandul de izotiosemicarbazonă tridentat coordinează la atomul central în forma monodeprotonată, folosind set de atomi donori N<sub>3</sub>, și formează două metalacicluri conjugate. A fost stabilită și structura unui compus al Fe(III) cu 2-hidroxibenzaldehida 4,S-dialilizotiosemicarbazonei și ca rezultat a fost stabilit că s-a format un compus ionic cu formula [Fe(L)<sub>2</sub>]NO<sub>3</sub> (**30**) ce include un cation complex mononuclear și un anion azotat în sfera externă. Lucrări în colaborare cu **Universitatea de Stat din Moldova, Facultatea de Chimie și Tehnologie Chimică.** (*Inorganics*. 2023, nr. 5(11), pp. 195-1—195-17, *J Chem. Res.* 2023, nr. 47(6), pp. 1—8, *Acta Chim. Slov.* 2023, nr. 1(70), pp. 122—130.)

Un alt rezultat ține de studiul cu raze X al unui nou compus de tip polimer heterometalic coordinativ [Mn<sup>II</sup>-Ba<sup>II</sup>] cu ligandul 2,3-piridindicarboxilic cu aplicare ca unica sursă pentru acces la oxidul de perovskit BaMnO<sub>3</sub>. În rezultat a fost stabilit că structura acestui este de tip polimer coordinativ 3D cu formula {[MnBa(2,3-pdc)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>5</sub>]·3H<sub>2</sub>O}<sub>n</sub> (**31**). Cei doi liganzi organici simetric independenți dublu deprotonați dezvăluie diferite funcții structurale ale grupărilor lor carboxilice. Ca rezultat unul din ei este pentadentat și acționează ca ligand cu funcție punte μ<sub>4</sub> și unește doi cationi de bariu și doi de mangan datorită modului de coordinare μ<sub>2</sub>-η<sup>1</sup>:η<sup>1</sup> și μ<sub>3</sub>-η<sup>1</sup>:η<sup>2</sup> al grupărilor carboxilice. Celălalt ligand servește ca punte μ<sub>2</sub> și leagă cationii de bariu și mangan prin modul de coordinare η<sup>1</sup> monodentat al ambelor grupări carboxilice. Lucrări în colaborare cu **Institutul de Chimie, USM.** (*J Solid State Chem.* 2023, 324, pp. 124108-1—124108-7)

A fost determinată structura cristalină a compușilor coordinativi ai Cu(II), Co(III) și Ni(II) în baza liganzilor tetraazamacrociclici primiți la condensarea 2,6-diacetilpiridinei cu 2,6-piridindicarbohidrazidă cu formulele [Cu(HL)Cl]·1.35H<sub>2</sub>O (**32**), [Cu(HL)Br]·CH<sub>3</sub>OH (**33**), [Cu(L)(H<sub>2</sub>O)]·4H<sub>2</sub>O (**34**), [Co(HL)Cl<sub>2</sub>]·CH<sub>3</sub>OH (**35**), (H<sub>3</sub>O)[Co(HL)Cl<sub>2</sub>]<sub>2</sub>Cl·H<sub>2</sub>O (**36**), [Co(HL)(SCN)<sub>2</sub>]·CH<sub>3</sub>OH (**37**), [Ni(L)]·3H<sub>2</sub>O (**38**) and (H<sub>3</sub>O)[Ni(L)]Cl·H<sub>2</sub>O (**39**). Studiul structural a stabilit că ligandul macrociclic din 14 atomi adoptă o configurație planară și este tetradentat, formând în rezultatul coordinerii patru cicluri metalice conjugate, două din cinci atomi și două din șase, cu modul alternant 5-6-5-6 în **32** - **39** și 5-5-6-6- în **39**. În funcție de modul de deprotonare și tautomerie a ligandului s-au înregistrat patru forme ale ligandului. Lucrări în colaborare cu **Institutul de Chimie, USM.**

**6. Impactul științific, social și/sau economic al rezultatelor științifice obținute** în cadrul proiectului (obligatoriu). Principalul impact științific este determinat de rezultatele fundamentale obținute în etapa a patra a proiectului, publicate în reviste științifice internaționale de top, ce se pot utiliza la dezvoltarea protocoalelor pentru proiectarea și fabricarea de noi materiale hibride organice/anorganice cristaline, inclusiv polimeri coordinativi, nanoclusteri, compuși mononucleari și sisteme organice multicomponente, sisteme supramoleculare cu proprietăți fizice și biologice evidențiate, precum și de depunerea datelor structurale obținute în BDSC, care devin vizibile pentru comunitatea științifică. Unele materiale hibride organice/anorganice obținute în cadrul lucrărilor de cercetare sunt atractive pentru agricultura și farmacologia din R. Moldova. Rezultatele studiului cu raze X efectuat în laborator ce a permis de a stabili univoc compoziția, structura compușilor și omogenitatea substanțelor au un impact asupra cunoașterii. Impactul prezumat al rezultatelor obținute ține și de motivarea eficientă și asigurarea continuității studiilor în domeniul științelor exacte, fapt important pentru atragerea tineretului la studii în acest domeniu. Rezultatele obținute sunt antrenate la cursul de cristalochimie ținut atât la USM, cât și la UPSC, oferind studenților o pregătire extinsă în tehnicile relevante de cercetare, iar lucrările de cercetare cu implicarea tinerilor, care planifică teze de licență, master și de doctor țin de dezvoltarea abilităților lucrărilor cu substanțe chimice și metodele de sinteză. Ca urmare tinerii primesc cunoștințe necesare pentru a proiecta și a efectua experimente, precum și a analiza și interpreta date, a prezenta rezultate, a scri rapoarte științifice și, de asemenea, a dezvoltarea și alte abilități legate de muncă, cum ar fi comunicarea și relațiile în colectivul de muncă.

**7. Colaborare la nivel național și internațional** în cadrul implementării proiectului (după caz)

- Institutul de Chimie, USM, Laboratoarele: Chimie Coordinativă, Chimie Bioanorganică și Biocompozite, Chimie Fizică și Cuantică;
- Universitatea de Stat din Moldova, Facultatea de Chimie și Tehnologie Chimică, Facultatea de Fizică și Inginerie;
- Universitatea Pedagogică de Stat “Ion Creangă”, Facultatea de Biologie și Chimie;
- Institutul de Microbiologie și Biotehnologie, UTM;
- Institutul Științifico-Practic de Horticultură și Tehnologie Alimentară;
- Institutul de Fizică Aplicată, USM, Laboratorul Fizica Compușilor Semiconductori “Sergiu Rădăușan”, Laboratorul Materiale pentru Fotovoltaică și Fonică, Laboratorul de Optoelectronică „Andrei Andrieș”. Institutul de Chimie „Coriolan Dragulescu”, Timișoara, România;
- Universitatea de Vest din Timișoara, Timișoara, România;
- Institutul de Chimie Macromoleculară Petru Poni, Iași, România;
- Universitatea Națională de Medicină din Odesa, Odesa, Ucraina;
- Departamentul de Chimie, Biochimie și a Științelor Farmaceutice, Universitatea din Bern, Elveția
- Institutul de Științe Chimice și Tecnologice “Giulio Natta”, Milan, Italia;
- Universitatea Tehnică din Gebze, Centru de Cercetare Nanotehnologică din Gebze, Turcia;
- Institutul de Chimie Anorganică, RWTH Universitatea din Aachen, Aachen, Germania.
- Universitatea Highlands New Mexico, Las Vegas, NM, USA.

## 8. Dificultățile în realizarea proiectului (financiare, organizatorice, legate de resursele umane etc.) (după caz)

1. Lipsa accesului la noi publicații în reviste științifice internaționale de top;
2. Metoda de procurare a consumabilelor durează în timp și substanțele chimice planificate se procură cu întârziere. Achizițiile în parte în cadrul proiectului sunt mult mai eficiente.
3. Finanțarea deplasărilor de serviciu la conferințe internaționale.
4. Posibilitatea angajării tinerilor pe jumătate de normă (cumul extern).

## 9. Diseminarea rezultatelor obținute în proiect în formă de publicații (obligatoriu)

### 9.1. Lista publicațiilor științifice

#### 9.1.1. Monografii

-

#### 9.1.2. Capitole în monografii naționale/internaționale

1. **CRACIUN, N., CHISCA, D., MELNIC, E., FONARI, M.S.** Unprecedented coordination compounds with 4,4'-diaminodiphenylethane as a supramolecular agent and ditopic ligand: Synthesis, crystal structures and Hirshfeld surface analysis. In: *Synthesis, Crystal Structures and Hirshfeld Surface Analysis of Coordination Compounds (Volume II)*, pp. 129-142. Ed.: Waldemar Maniukiewicz, MDPI: Basel, 2023, ISBN 978-3-0365-7929-0.

#### 9.1.3. Editori în reviste, culegere de articole, materiale ale conferințelor naționale/internaționale

- dr. **Kravțov Victor**, revista Moldavian Journal of the Physical Sciences / membru al colegiului de redacție.
- **Fonari Marina**, revista *Molecules* ((ISSN 1420-3049, MDPI) / Guest Editor of special issue „**Zn(II) and Cd(II) Coordination Polymers: Advances and Perspectives**” [https://www.mdpi.com/journal/molecules/specialissues/Zn\\_Cd\\_CoordinationPolymers](https://www.mdpi.com/journal/molecules/specialissues/Zn_Cd_CoordinationPolymers).
- **Croitor Lilia**, revista *Crystals*. [https://www.mdpi.com/journal/crystals/special\\_issues/multicomponent\\_molecular\\_crystals](https://www.mdpi.com/journal/crystals/special_issues/multicomponent_molecular_crystals).

#### 9.1.4. Articole în reviste științifice

➤ în reviste din bazele de date Web of Science și SCOPUS

1. **DARII, M., VAN LEUSEN, J., KRAVTSOV, V.CH., CHUMAKOV, Y., KRÄMER, K., DECURTINS, S., LIU, SH.-X., KÖGERLER, P., BACA, S.G.** {Mn<sup>III</sup>Mn<sup>IV</sup>Dy<sup>III</sup>} Single-Molecule Magnet Based on Cubane Subunits. In: *Crystal Growth & Design*. 2023, nr. 9(23), pp. 6944—6952. ISSN 1528-7483. DOI:10.1021/acs.cgd.3c00783 (IF: 3,8).
2. **BEGEÇ, S., YUKSEL, F., CHUMAKOV, Y., ALATAŞ, S., KILIÇ, A.** Phenolysis of 2, 2'-Biphenoxy Thiophosphinic Chloride: Crystal Structures and DFT Calculations of 2, 2'-Biphenyl 4-Tert-Butylphenyl Thiophosphinate and 2, 2'-Biphenyl 3,4-di-Methylphenyl Thiophosphinate. In: *Polycyclic Aromatic Compounds*. 2023, nr. 8(43), pp. 7426—7438. ISSN 1563-5333. DOI:10.1080/10406638.2022.2136721 (IF: 2,4).

3. AVERKIEV, B.B., CASTAÑEDA, R., **FONARI, M.S.**, JUCOV, E.V., TIMOFEEVA, T.V. Additive controlled packing polymorphism in a series of halogen-substituted dithieno[3,2-a:2',3'-c]phenazine derivatives. In: *CrystEngComm*. 2023, nr. 28(25), pp. 4076—4088. ISSN 1466-8033. DOI:10.1039/D3CE00387F (IF: 3,756).
4. TERENTI, N., **MELNIC, E.**, FRUTH, V., NEDELKO, N., ALESHKEVYCH, P., LEWINSKA, S., SLAWSKA-WANIEWSKA, A., **KRAVTSOV, V.CH.**, LAZARESCU, A., LOZAN, V. Synthesis and microstructure of BaMnO<sub>3</sub> oxide obtained from coordination precursor. In: *Journal of Solid State Chemistry*. 2023, 324, pp. 124108-1—124108-7. ISSN 0022-4596. DOI:10.1016/j.jssc.2023.124108 (IF: 3,656).
5. MARQUEZ, J., NOVIKOV, E., RIGIN, S., **FONARI, M.S.**, CASTAÑEDA, R., KORNILOVA, T., TIMOFEEVA, T.V. Exploiting Supramolecular Synthons in Cocrystals of Two Racetams with 4-Hydroxybenzoic Acid and 4-Hydroxybenzamide Cofomers. In: *Chemistry*. 2023, nr. 2(5), pp. 1089—1100. ISSN 2624-8549. DOI:10.3390/chemistry5020074 (IF: 2,1)
6. LOZOVAN, V., **KRAVTSOV, V.CH.**, CHUMAKOV, Y.M., COSTRIUCOVA, N.V., SIMINEL, N., PETUHOV, O., VLASE, T., VLASE, G., BARBA, A., **FONARI, M.S.** Zn(II) and Cd(II) Metal–Organic Frameworks with Azine-Functionalized Pores: Crystal Structures, Photoluminescence, Solvent Exchange, and Molecular Simulations of Carbon Dioxide Binding Sites. In: *Crystal Growth & Design*. 2023, nr. 5(23), pp. 3171—3185. ISSN 1528-7483. DOI:10.1021/acs.cgd.2c01345 (IF: 4,01).
7. GRAUR, V., USATAIA, I., GRAUR, I., GARBUZ, O., **BOUROSH, P.**, **KRAVTSOV, V.**, LOZAN-TIRSU, C., BALAN, G., FALA, V., GULEA, A. Novel Copper(II) Complexes with N<sup>4</sup>,S-Diallylisothiosemicarbazones as Potential Antibacterial/Anticancer Drugs. In: *Inorganics*. 2023, nr. 5(11), pp. 195-1—195-17. ISSN 2304-6740. DOI:10.3390/inorganics11050195 (IF: 3,149).
8. GRAUR, V., MARDARI, A., **BOUROSH, P.**, **KRAVTSOV, V.**, USATAIA, I., ULCHINA, I., GARBUZ, O., GULEA, A. Novel Antioxidants Based on Selected 3d Metal Coordination Compounds with 2-Hydroxybenzaldehyde 4,S-Diallylisothiosemicarbazone. In: *Acta Chimica Slovenica*. 2023, nr. 1(70), pp. 122—130. ISSN 1580-3155. DOI:10.17344/acsi.2022.7885 (IF: 1,524).
9. BULHAC, I., URECHE, D., **KRAVTSOV, V.**, **BOUROSH, P.** Synthesis and Structure of Heterometallic Compounds with Dimethyl Pyridine-2,6-dicarboxylate. In: *Russian Journal of Coordination Chemistry*. 2023, nr. 2(49), pp. 77—85. ISSN 1070-3284. DOI:10.1134/S1070328422700245 (IF: 1,814).
10. **BOUROSH, P.**, COCU, M., DANILESCU, O., BULHAC, I. Binuclear Vanadium(V) Complex with the Ligand Based on Isonicotinic Acid Hydrazide and 1-Phenyl-1,3-Butanedione: Synthesis and Crystal Structure. In: *Russian Journal of Coordination Chemistry* 2023, nr. 4(49), 195—205. ISSN 1070-3284. DOI:10.1134/S1070328423700409 (IF: 1,814).
11. **CRACIUN, N.**, **CHISCA, D.**, **MELNIC, E.**, **FONARI, M.S.** Unprecedented Coordination Compounds with 4,40-Diaminodiphenylethane as a Supramolecular Agent and Ditopic Ligand: Synthesis, Crystal Structures and Hirshfeld Surface Analysis. In: *Crystals*. 2023, nr. 2(13), 289-1—289-14. ISSN 2073-4352. DOI:10.3390/cryst13020289 (IF: 2,67).
12. COLIBABA, G.V., RUSNAC, D., **COSTRIUCOVA, N.**, SHIKIMAKA, O., MONAICO, E.V. Low-temperature sintering of ZnO:Al ceramics by means of chemical vapor

- transport. In: *The Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 2023, nr. 2(34), 82. ISSN 0957-4522. DOI:10.1007/s10854-022-09458-1 (IF: 2,779).
13. **FONARI, M.S.**, RIGIN, S., LESSE, D., TIMOFEEVA, T.V. Co-crystals of polynuclear aromatic hydrocarbons and 9H-carbazole with 2,3-dichloro-5,6-dicyano-1,4-benzoquinone acceptor: varieties in crystal packing, Hirshfeld surface analysis and quantum-chemical studies. In: *Journal of Molecular Structure*. 2023, 1278, pp. 134900-1—134900-11. ISSN 1872-8014. DOI:10.1016/j.molstruc.2023.134900 (IF: 3,841).
  14. **STATI, D.**, VAN LEUSEN, J., AHMED, N., **KRAVTSOV, V.CH.**, KÖGERLER, P., **BACA, S.G.** A  $\{Co^{III}_2Dy^{III}_4\}$  Single-Molecule Magnet with an Expanded Core Structure. In: *Crystal Growth & Design*. 2023, nr. 1(23), pp. 395—402. ISSN 1528-7483. DOI:10.1021/acs.cgd.2c01085 (IF: 4,01).
  15. GRAUR, I., BESPALOVA, T., GRAUR, V., TSAPKOV, V., GARBUZ, O., MELNIC, E., BOUROSH, P., GULEA, A. A new thiosemicarbazone and its 3d metal complexes: Synthetic, structural, and antioxidant studies. In: *Journal of Chemical Research*. 2023, nr. 47(6), pp. 1—8. ISSN 1747-5198. DOI:10.1177/17475198231216422 (IF: 1,4).
  16. CENGIZ, A., GOREN, S., SONMEZ, A., ŞALE, Y., OKUMUŞ, E., KIRBAŞ, C., CHUMAKOV, Y.M., SEYDOV, M.-H.Y. Modification of the optical and elastic properties of TiGaSe2 layered semiconductor produced by the memory effect. *Phys Scripta*. 2023, 98(12), 125006. DOI:10.1088/1402-4896/ad0082 (IF: 2,9).
  17. RUSNAC, R., GARBUZ, O., CHUMAKOV, Y., TSAPKOV, V., HUREAU, CH., ISTRATI, D., GULEA, A. Synthesis, Characterization, and Biological Properties of the Copper(II) Complexes with Novel Ligand: N-[4-({2-[1-(pyridin-2-yl)ethylidene]hydrazinecarbothioyl}amino)phenyl]acetamide. *Inorganics*. 2023, 11(10), 408-1—408-17. DOI:10.3390/inorganics11100408 (IF: 3,149).

➤ în alte reviste din străinătate recunoscute

1. ЛИТВИНЧУК, І.В., **ФОНАРЬ, М.С.**, **КРАВЦОВ, В.Х.**, ГЕЛЬМБОЛЬДТ, В.О. Експериментальне дослідження перетворення 2-амінофенілоцтової кислоти гексафторосилікату на 2-оксіндол у м'яких умовах. В: *Фармацевтичний журнал*. 2023, nr. 2(78), pp. 15—19. ISSN 0367-3057. DOI:10.32352/0367-3057.2.23.02.

➤ în reviste din Registrul National al revistelor de profil, cu indicarea categoriei

1. TALMACI, N., DRAGANCEA, D., GORINCIOI, E., **BOUROSH, P.**, **KRAVTSOV, V.** Crystal Structure and NMR Spectroscopic Characterization of 1,5-Bis(2-Hydroxy-3-Methoxybenzylidene)Carbonohydrazide. In: *Chemistry Journal of Moldova. General, Industrial and Ecological Chemistry*. 2023, nr. 2(18), pp. 53-60, ISSN 2345-1688. DOI: 10.19261/cjm.2023.1074. (Categoria A)

### 9.1.5. Articole în culegeri științifice naționale/internaționale

➤ culegeri de lucrări științifice editate peste hotare

1. **PODGORNII, D.**, SHOVA, S., **KRAVTSOV, V.C.**, **BACA, S.G.** A Nanosized Heteronuclear  $\{Fe_{18}Tb_6\}$  Coordination Wheel Based on Pivalate and Triethanolamine

Ligands. In: Sontea, V., Tiginyanu, I., Railean, S. (eds) In: *6<sup>th</sup> International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering. ICNBME 2023. IFMBE Proceedings*, 2024. vol 91. p. 80–87. Springer, Cham. DOI:10.1007/978-3-031-42775-6\_9.

#### 7.1.6. Articole în materiale ale conferințelor științifice

➤ în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

1. ȚAPU, D., MELNIC, E., CHIȘCA, D. Interacțiuni intermoleculare din cocristalele organice ale acidului 2-nitroterifalic și diferiți liganzi piridinici. In: Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 40—46. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023. P. 40-46.
2. STATI, D. Sinteza și caracterizarea structurală a clusterului heterometalic  $\{Co_3Yb_3\}$  izobutirat în baza n-butildietanolaminei. In: Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 47—49. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023. P. 47-49.
3. URECHE, D., BULHAC, I., BOUROȘ, P. Compuși hetero-bimetalici ai Ba(II) ce conțin ligand O,N,O-donor și anion  $[Co(NCS)_4]^{2-}$ . In: Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 50—52. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023. P. 50-52.
4. URECHE, D., BULHAC, I., BOUROȘ, P. Sinteza și structura unui compus binuclear al Mn(II) cu dianilinglioxima și acidul izoftalic. In: Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 53—55. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023. P. 53-55.
5. BELEAEV, E. Evaluarea legăturilor intermoleculare de hidrogen în compuși multicompenți ai  $[Co(NH_3)_6]^{3+}$  cu acid 3-sulfobenzoic prin analiza suprafeței Hirshfeld. In: Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 56—60. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023.p56-60.
6. COCU, M., BOUROȘ, P., KRAVTSOV, V., DANILESCU, O., BULHAC, I. Compuși coordinativi mononucleari ai nichelului(II) și cuprului(II) cu ligandul bază Schiff derivat al S-metilzotiosemicarbazonei acetilacetonei și 8-chinolinaldehidei. In: Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 83—85. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023.p83-85.

7. **CRACIUN, N., MELNIC, E., CHIȘCA, D.** Analiza suprafeței Hirshfeld. Investigarea interacțiunilor intermoleculare în cristalul compusului ionic de 2,4-diamino-6-fenil-1,3,5-triazină și acid malonic. In: *Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a*, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 102—105. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023.p102-105.
8. **DANILESCU, O., CROITOR, L., BULHAC, I., BOUROȘ, P., KULIKOVA, O.** Liganzi dihidrazonici ai 2,6-diacetilpiridinei – chemosenzori în detectarea  $Cd^{2+}$ . In: *Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a*, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 106—108. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023.p106-108.
9. **COROPCEANU, E., BOUROȘ, P., VEVERIȚA, A.** Structura cristalină a cloro-bis(dimetilglioximato)cobalt(III) cu derivați ai piridinei. In: *Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a*, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 269—271. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023.p269-271.
10. **LOZOVAN, V., BULHAC, I., BOUROȘ, P., KRAVȚOV, V.** Structura cristalină și studiul spectroscopic IR al complexilor macrociclici  $[Cu(HL)Cl]$  și  $[Cu(HL)Br]$ . In: *Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a*, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 306—308. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023.p306-308.
11. **KRAVȚOV, V., SIMINEL, N., FONARI, M., LUCENTI, E.** Crystal structure and photoluminescence properties of  $[Nd(NO_3)_3(H_2O)_4](iso-C_9H_6N_6)_2(H_2O)$ . In: *Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a*, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 309—311. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023.p309-311.
12. **BULHAC, I., ȘTEFÎRȚĂ, A., COROPCEANU, E., BRÎNZĂ, L., BOUROȘ, P.** Coordinative compounds and chemical compositions with antioxidant properties / compuși coordinativi și compoziții chimice cu proprietăți antioxidante. *INTERNATIONAL CONGRESS RESEARCH – INNOVATION – INNOVATIVE ENTREPRENEURSHIP*, 13-14 October 2023, Republic of Moldova. p.308-314. DOI:10.46727/c.13-14-10-2023.p308-314

### 9.1. 7. Teze ale conferințelor științifice

➤ în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

1. **Haidu, D., GOROBET, A., CARABA, M.N., CARABA, I.V., BOUROȘ, P., CROITOR, L., CRISAN, M.** Supramolecular Systems of 2-Chloro-5-Nitrobenzoic Acid with Antibacterial Activity. In: *Abstracts. Conference “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”, 15<sup>th</sup> Edition*, online, September 21-22, 2023, Timisoara, Romania, p. 112.

2. DANILESCU, O., BULHAC, I., **BOUROSH, P.** 1D and 2D Coordination Polymer of Cd(II) based on polydentate Schiff base ligand. In: *Abstracts. Conferința Facultății de Chimie, IasiCHEM 2023*. 26-27 octombrie 2023. Iași, România. PI-02. p. 18.
  3. LYTUVYNCHUK I.V., **FONARI M.S., KRAVTSOV V.CH., GELMBOLDT V.O.** Unexpected conversion of 2-aminophenylacetic acid hexafluorosilicate to 2-oxindol under mild conditions. In: *Abstracts. Conference Materials of the International Internet Conference 'Modern chemistry of medicines'*, May 18, 2023, Kharkiv, Ukraine, p. 50
- în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională
1. **CAPBĂTUT, O., SULTANOVA, O., KRAVTSOV, V., BACA, S.** Biological Activity of Polynuclear Cu(II) Isobutyrate Against Tumor Growth in Grapevine. Institute of Applied Physics, MSU, Chisinau, Moldova. In: *Conferința științifică națională cu participare internațională „Științele naturii în dialogul generațiilor”, a VI-a ediție*. Abstract Book. p. 203. Chișinău, 13-15 septembrie 2023.
  2. **CRACIUN, N., MELNIC, E., CHISCA, D., FONARI, M.** Synthesis and Crystal Structure of a New Co(II) Metal-Organic Compound With The Bent Ditopic 4,4'-Diaminodiphenylmethane Ligand. Institute of Applied Physics, MSU, Chisinau, Moldova. In: *Conferința științifică națională cu participare internațională „Științele naturii în dialogul generațiilor”, a VI-a ediție*. Abstract Book. p. 208. Chișinău, 13-15 septembrie 2023.
  3. **DARII, M., KRAVTOV, V., MACAEV, F., BACA, S.** Cobalt Complexes with Hiv/ Aids Inhibitory Properties. Institute of Applied Physics, MSU, Chisinau, Moldova. In: *Conferința științifică națională cu participare internațională „Științele naturii în dialogul generațiilor”, a VI-a ediție*. Abstract Book. p. 209. Chișinău, 13-15 septembrie 2023.
  4. **BELEAEV, E., CHUMAKOV, Yu., BACA, S.** Theoretical Study of Binding Energy in Multi-Component Compounds Involving Hexaammine Cobalt(III) Cation. Institute of Applied Physics, MSU, Chisinau, Moldova. In: *Conferința științifică națională cu participare internațională „Științele naturii în dialogul generațiilor”, a VI-a ediție*. Abstract Book. p. 201. Chișinău, 13-15 septembrie 2023.
  5. **PODGORNII, D., BACA, S.G., KRAVTSOV, V.CH.** A New Octanuclear Propeller-Like Aminoalcohol-Supported Iron(III) Pivalate Cluster. Institute of Applied Physics, MSU, Chisinau, Moldova. In: *Conferința științifică națională cu participare internațională „Științele naturii în dialogul generațiilor”, a VI-a ediție*. Abstract Book. p. 218. Chișinău, 13-15 septembrie 2023.
  6. **STATI, D., KRAVTSOV, V., BACA, S.** Synthesis and Structural Characterization of Tetranuclear {Co(III)<sub>2</sub>Y(III)<sub>2</sub>} Isobutyrate Cluster with N-Butyldiethanolamine. Institute of Applied Physics, MSU, Chisinau, Moldova. In: *Conferința științifică națională cu participare internațională „Științele naturii în dialogul generațiilor”, a VI-a ediție*. Abstract Book. p. 221. Chișinău, 13-15 septembrie 2023.
  7. COCU, M., **BOUROSH, P., KRAVTSOV, V., DANILESCU, O., BULHAC, I.** Mononuclear Nickel(II) and Copper(II) Complexes with Schiff Base Ligands Derived from Quinoline-8-Aldehyde and S-Methylisothiosemicarbazones. In: *Scientific seminar Advanced Materials to reduce the impact of toxic chemicals on the environment and health*. Chisinau. 21 septembrie 2023. <http://dx.DOI.org/10.19261/>.

### 9.1. 8. Alte lucrări științifice (recomandate spre editare de o instituție acreditată în domeniu)

-

### 9.1.9. Brevete de invenții și alte obiecte de proprietate intelectuală, materiale la saloanele de invenții

#### ➤ Brevete de invenții

1. BULHAC, I., URECHE, D., CILOCI, A., **BOUROȘ, P.**, TIURINA, J., LABLIUC, S. *Tetra(izotiocianat)cobaltat(II) de tris(dimetil piridin-2,6-dicarboxilat)stronțiu cu proprietăți de biostimulator al activității lipolitice pentru tulpina de fungi Rhizopus arrhizus CNMN FD 03.* Brevet de invenție MD 4831 C1 2023.06.30.
2. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROȘ, P.**, CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., MATROI, A. *Nitrat de 2,6-diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-bis(aqua)fier(III)-hidrat(1/2,5) cu proprietăți de stimulator al sintezei lipazelor exocelulare pentru tulpina de fungi Rhizopus arrhizus CNMN FD 03 și mediu nutritiv pentru cultivare.* Brevet de invenție MD 4827 C1 2023.05.31.
3. BULHAC, I., URECHE, D., **BOUROȘ, P.**, COCU, M., CILOCI, A., CONDRUC, V., DVORNINA, E. *Tris(2,6-dimetil piridindicarboxilat-1kONO)-di-m-(izotiocianato-1,2kN)-(diizotiocianato-2kN)bariu(II)cobalt(II) cu proprietăți de stimulator al sintezei principiilor biologice active la fungi.* Brevet de invenție MD 4847 C1 2023.09.30.
4. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROȘ, P.**, CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., MATROI, A. *Perclorat de 2,6-diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-bis(aqua)fier(III)-hidrat(1/2,5) cu proprietăți de stimulator al sintezei lipazelor exocelulare pentru tulpina de fungi Rhizopus arrhizus CNMN FD 03.* Brevet de invenție MD 4874 B1 2023.11.30.
5. BULHAC, I., URECHE, D., **BOUROȘ, P.**, DANILESCU, O., CILOCI, A., CLAPCO, S. *Tetra(izotiocianat)cobaltat(II) de tris(dimetil piridin-2,6-dicarboxilat)calciu cu proprietăți de stimulator al activității lipolitice la tulpina de fungi Rhizopus arrhizus CNMN FD 03.* Brevet de invenție MD 4853 C1 2023.11.30.
6. DANILESCU, O., BULHAC, I., **CROITOR, L.**, **BOUROȘ, P.**, KULICOVA, O. *Nitrat de 2,6-diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-(aqua)(nitrat)cadmiu(II)-monohidrat cu proprietăți fotoluminescente.* Hotărâre de acordare brevet de invenție. C07F 3/08, C07D 213/86, C09K 11/06, C09K 11/54. Institutul de Chimie, USM. Institutul de Fizică Aplicată, USM. Nr. depozit a 2022 0015. Data depozit 2022.03.24. Publicat 2023.09.23. In: BOPI. 2023, nr. 9.

#### ➤ Materiale la saloanele de invenții

1. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROȘ, P.**, CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., DVORNINA, E. *Perchlorate of 2,6-diacetylpyridine-bis(picolinoilhidrazon)-bis(aqua)iron(III)-hidrat(1/2,5) with stimulating properties on exocellular lipase syntethis for Rhizopus arrhizus CNMN FD 03 fungal strain.* In: *Proceedings of The 15 Edition of EUROINVENT 2023*, European Exhibition of Creativity and Innovation, 2023, May 13, România.

2. DANILESCU, O., BULHAC, I., **CROITOR, L., BOUROSH, P.**, KULICOVA, O. Nitrate of 2,6-diacetylpyridine-bis(picolinoylhydrazone) - (aqua)(nitrate)cadmium(II) - monohydrate with photoluminescence properties. In: *Salonul Internațional de Invenții, Inovații „Traian Vuia”, ediția IX*. Timișoara, 15-17 June 2023. p. 138.
3. **VITIU, A.**, CHIȘCA, D., GORINCIOI, E., COROPCEANU, E., **BOUROSH, P.** Polymeric Coordination Compound of zinc with novel condensation ligand exhibiting antifungal and antibacterial activity. In: *Salonul Internațional de Invenții, Inovații „Traian Vuia”, ediția IX*. Timișoara, 15-17 June 2023.
4. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROSH, P.**, CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., DVORNINA, E. Perchlorate of 2,6-diacetylpyridine-bis(picolinoylhydrazone)-bis(aqua)iron(III)-hidrat(1/2,5) with stimulating properties on exocellular lipase syntethis for *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03 fungal strain. In: *Salonul Internațional de Invenții, Inovații „Traian Vuia”, ediția IX*. Timișoara, 15-17 June 2023. p. 139.
5. BULHAC, I., URECHE, D., CILOCI, A., **BOUROSH, P.**, TIURINA, J., LABLIUC, S. Tris(dimethylpyridine-2,6-dicarboxylates)strontium tetra(isothiocyanate)cobalte(II) with lipolytic activity boistimulatory properties for the fungal strain *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03. In: *Salonul Internațional de Invenții, Inovații „Traian Vuia”, ediția IX*. Timișoara, 15-17 June 2023. p.139.
6. BULHAC, I., URECHE, D., **BOUROSH, P.**, DANILESCU, O., CILOCI, A., CLAPCO, S. Tris(dimethylpyridine-2,6-dicarboxylates)calcium tetra(isothiocyanate)cobalte(II) with boistimulatory properties of lipolytic activity for the fungal strain *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03. In: *Salonul Internațional de Invenții, Inovații „Traian Vuia”, ediția IX*. Timișoara, 15-17 June 2023. p.138.
7. URECHE, D., Bulhac, I., **BOUROȘ, P.**, ROȘCA, D., LUPAȘCU, L. Bis-(N,N'-bis(4-tolyl) diaminoglixim-4-methylaniline thrihydrate for use as an antibacterial remedy in agriculture. In: *International Salon of Invention and Innovative Entrepreneurship. „Ion Creanga” State Pedagogical University*. 12-13 October 2023, Chisinau.
8. BULHAC, I., URECHE, D., **BOUROSH, P.**, DANILESCU, O., CILOCI, A., CLAPCO, S. Tris(dimethyl pyridine-2,6-dicarboxylate)calcium tetra(isothiocyanate)cobaltate(II) with biostimulatory properties of lipolytic activity for the fungal strain *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03. In: *International Salon of Invention and Innovative Entrepreneurship. „Ion Creanga” State Pedagogical University*. 12-13 October 2023, Chisinau.
9. BULHAC, I., URECHE, D., CILOCI, A., **BOUROSH, P.**, TIURINA, J., LABLIUC, S. Tris(dimethyl pyridine-2,6-dicarboxylate)strontium tetra(isothiocyanate)cobaltate(II) with lipolytic activity biostimulatory properties for the fungal strain *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03. In: *International Salon of Invention and Innovative Entrepreneurship. „Ion Creanga” State Pedagogical University*. 12-13 October 2023, Chisinau.
10. DANILESCU, O., **BOUROȘ, P.**, PETUHOV, O., BULHAC, I., ȘOVA, S. Coordination polymer 2,6-diacetylpyridine bis(izonicotinoylhydrazonato)(2-)cobalt(II)-aqua(1/5.75) which manifest adsorptive properties. In: *International Salon of Invention and Innovative Entrepreneurship. „Ion Creanga” State Pedagogical University*. 12-13 October 2023, Chisinau.
11. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROSH, P.**, CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., MATROI, A. Nitrate of 2,6-diacetylpyridine-bis(picolinoylhydrazone)-

- bis(aqua)iron(III)–hydrate(1/2.5) with stimulating properties on exocellular lipase synthesis for the *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03 fungal strain and nutrient medium for cultivation. In: *International Salon of Invention and Innovative Entrepreneurship. „Ion Creanga” State Pedagogical University*. 12-13 October 2023, Chisinau.
12. LOZOVAN, V., FONARI, M., KRAVȚOV, V., SIMINEL, N., COROPCEANU, E., KULIKOVA, O., COSTRIUCOVA, N. Polimer unidimensional al cadmiului(II) în baza liganzilor 1,2-bis(piridin-4-ilmetilen)hidrazină și acid 2-aminobenzoic, care manifestă activitate fotoluminescentă și capacitate de schimb a moleculelor de solvent / one-dimensional coordination polymer of cadmium(I) based on 1,2-bis (pyridin-4-ylmethylene) hydrazine and 2-aminobenzoic acid ligands, which shows photoluminescent activity and the ability to exchange solvent molecules. In: *International Salon of Invention and Innovative Entrepreneurship. „Ion Creanga” State Pedagogical University*. 12-13 October 2023, Chisinau.
  13. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., BOUROȘ, P., CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., MATROI, A. Nitrat de 2,6-diacetilpiridin(bis(picolinoilhidrazon)bis(aqua) fier(II)-hidrat(1/2,5) cu proprietăți de stimulator al sintezei lipazelor exocelulare pentru tulpina de fungi rhizopus arrhizus cnmn FD 03 și mediu nutritiv pentru cultivare / nitrate of 2-diacetylpyridine(bis(picolinoylhydrazone)-(bis(aqua)iron(iii)-hydrate(1/2,5) with stimulating properties on exocellular lipase synthesis for the rhizopus arrhizus cnmn FD 03 fungal strain and nutrient medium for cultivation. In: *Expoziția Internațională Specializată „INFOINVENT 2023”*. 22-24 noiembrie 2023, Chișinău, Republica Moldova. I.A.9. pp. 35-35. <https://infoinvent.md/assets/files/catalog/catalog-2023.pdf>
  14. DANILESCU, O., BULHAC, I., CROITOR, L., BOUROȘ, P., KULICOVA, O. Nitrat de 2,6- diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-(aqua)(nitrato)cadmiu(II)–monohidrat cu proprietăți fotoluminescente. In: *Expoziția Internațională Specializată „INFOINVENT 2023”*. 22-24 noiembrie 2023, Chișinău, Republica Moldova. I.A.17. pp. 39-40. <https://infoinvent.md/assets/files/catalog/catalog-2023.pdf>
  15. BULHAC, I., URECHE, D., CILOCI, A., BOUROȘ, P., TIURINA, J., LABLIUC, S. Tetra (izotiocianat)cobaltat(II) de tris(dimetil piridin-2,6-dicarboxilat) stronțiu cu proprietăți de biostimulator al activității lipolitice pentru tulpina de fungi rhizopus arrhizus CNMN FD 03 / tris(dimethyl pyridine-2,6-dicarboxylate)strontium tetra (isothiocyante) cobaltate(II) with lipolytic activity biostimulatory properties for the fungal strain rhizopus arrhizus cnmn FD 03. In: *Expoziția Internațională Specializată „INFOINVENT 2023”*. 22-24 noiembrie 2023, Chișinău, Republica Moldova. IV.15. pp. 278-278. <https://infoinvent.md/assets/files/catalog/catalog-2023.pdf>
  16. BULHAC, I., URECHE, D., BOUROȘ, P., DANILESCU, O., CILOCI, A., CLAPCO, S. Tetra(izotiocianat)cobaltat(II) de tris(dimetil piridin-2,6-dicarboxilat) calciu cu proprietăți de biostimulator al activității lipolitice pentru tulpina de fungi *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03 /tris(dimethyl pyridine-2,6-dicarboxylate)calcium tetra (isothiocyante) cobaltate(II) with biostimulatory properties of lipolytic activity for the fungal strain rhizopus arrhizus CNMN FD 03. In: *Expoziția Internațională Specializată „INFOINVENT 2023”*. 22-24 noiembrie 2023, Chișinău, Republica Moldova. IV.16. pp. 278-279. <https://infoinvent.md/assets/files/catalog/catalog-2023.pdf>
  17. LOZOVAN, V., FONARI, M., KRAVȚOV, V., SIMINEL, N., COROPCEANU, E., KULIKOVA, O., COSTRIUCOVA, N. Polimer unidimensional al cadmiului(II) în baza

liganzilor 1,2-bis(piridin-4-ilmetilen)hidrazină și acid 2-aminobenzoic, care manifestă activitate fotoluminescentă și capacitate de schimb a moleculelor de solvent / one-dimensional coordination polymer of cadmium(I) based on 1,2-bis (pyridin-4-ylmethylene) hydrazine and 2-aminobenzoic acid ligands, which shows photoluminescent activity and the ability to exchange solvent molecules. In: *Expoziția Internațională Specializată „INFOINVENT 2023”*. 22-24 noiembrie 2023, Chișinău, Republica Moldova. IV.17. pp. 279-279. <https://infoinvent.md/assets/files/catalog/catalog-2023.pdf>

#### 9.1.10. Lucrări științifico-metodice și didactice

- manuale pentru învățământul preuniversitar (aprobate de ministerul de resort)  
-
- manuale pentru învățământul universitar (aprobate de consiliul științific /senatul instituției)  
-
- alte lucrări științifico-metodice și didactice  
-

#### 9.2. Lista participărilor la conferințe

1. *Conferința științifico-practică internațională „Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă”* Ediția a X-a, 18-19 martie 2023, R. Moldova
2. *International Internet Conference ‘Modern chemistry of medicines’*, May 18, 2023, Kharkiv, Ukraine
3. *Conferința științifică națională cu participare internațională „Științele naturii în dialogul generațiilor”, a VI-a ediție*. Chișinău, 13-15 septembrie 2023
4. *6<sup>th</sup> International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering*, September 20–23, 2023, Chisinau, R. Moldova
5. *Conference “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”, 15<sup>th</sup> Edition*, online, September 21-22, 2023, Timisoara, Romania
6. *Scientific seminar Advanced Materials to reduce the impact of toxic chemicals on the environment and health*. Chisinau. 21 septembrie 2023
7. *International congress research – innovation – innovative entrepreneurship*, Chisinau, R. Moldova, 13-14 October 2023
8. Conferința Facultății de Chimie, *IasiCHEM 2023*, 26-27 octombrie 2023. Iași, România
9. *Conferința științifică națională cu participare internațională „Integrare prin cercetare și inovare” dedicată Zilei internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare*. Universitatea de Stat din Moldova 9-10 noiembrie 2023. Chișinău.

#### 9.3. Promovarea rezultatelor cercetărilor obținute în proiect în mass-media (Opțional):

- Emisiuni radio/TV de popularizare a științei  
-
  - Articole de popularizare a științei
1. Krane, S., Hiscock, J., Preuss, K., and Steed, J.W. Women Researchers at the Forefront of Crystal Engineering. *Crystal Growth & Design*, 2023, 23 (6), pp. 3917-3930. DOI: 10.1021/acs.cgd.3c00609

**10. Diseminarea rezultatelor obținute în proiect în formă de prezentări la foruri științifice.**  
(comunicări, postere – pentru cazurile când nu au fost publicate în materialele conferințelor)

1. **CAPBĂTUT, O., KRAVȚOV, V., BACA, S.** Polimer coordinativ uni-dimensional de Cu(II) în baza acidului izobutiric și pirazină: sinteza și structura. *Conferința științifică națională cu participare internațională „INTEGRARE PRIN CERCETARE ȘI INOVARE” dedicată Zilei internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare.* HR Excellence in research Universitatea de Stat din Moldova. 9-10 noiembrie 2023. Chișinău.
2. **BELEAEV, E., KRAVȚOV, V., BACA, S.** Analiza suprafeței Hirshfeld ale interacțiunilor intermoleculare în co-cristale de  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$  și acid 3-sulfobenzoic. *Conferința științifică națională cu participare internațională „INTEGRARE PRIN CERCETARE ȘI INOVARE” dedicată Zilei internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare.* HR Excellence in research Universitatea de Stat din Moldova. 9-10 noiembrie 2023. Chișinău.
3. **DANILESCU, O., CROITOR, L., BOUROȘ, P., KULIKOVA, O., COCU, M., BULHAC, I., CHUMAKOV, Iu.** Sinteza polimerului coordinativ heterometalic Mn(II)/Cd(II), studiul structural și al fotoluminescenței. *Conferința științifică națională cu participare internațională „INTEGRARE PRIN CERCETARE ȘI INOVARE” dedicată Zilei internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare.* HR Excellence in research Universitatea de Stat din Moldova. 9-10 noiembrie 2023. Chișinău.
4. **PODGORNÎI, D., KRAVTSOV, V.Ch., BACA, S.G.** Sinteza și caracterizarea carboxilaților heptanucleari ai fierului(III) pe bază de derivați ai dietanolaminei. *Conferința științifică națională cu participare internațională „INTEGRARE PRIN CERCETARE ȘI INOVARE” dedicată Zilei internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare.* HR Excellence in research Universitatea de Stat din Moldova. 9-10 noiembrie 2023. Chișinău.
5. **STATI, D., KRAVȚOV, V., BACA, S.** Sinteza și caracterizarea structurală a complexului heterometalic  $\{\text{Co}_2\text{La}_2\}$  izobutirat în baza n-butildietanolaminei. *Conferința științifică națională cu participare internațională „INTEGRARE PRIN CERCETARE ȘI INOVARE” dedicată Zilei internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare.* HR Excellence in research Universitatea de Stat din Moldova. 9-10 noiembrie 2023. Chișinău.

**11. Teze de doctorat / postdoctorat susținute și confirmate în anul 2023 de membrii echipei proiectului (opțional)**

URECHE, D., „Sinteza, studiul proprietăților și arhitecturii moleculare ale compușilor coordinativi ai metalelor de tip „s” și „d” cu liganzi polifuncționali”. Teză de doctorat în științe chimice. 2021. *Conducător științific în cotutelă: BOUROȘ Pavlina*, doctor în științe chimice, conferențiar cercetător.

**13. Concluzii**

Proiectul a fost realizat și finalizat cu succes folosind competențele științifice ale angajaților, tinerii talentați și cooperarea extinsă cu multe echipe de cercetare din țară și din străinătate. Baza infrastructurii include un difractometru cu raze X Xcalibur E modern utilizat pentru studiul structural al monocristalelor și un difractometru cu raze X MiniFlex 600 pentru studiul materialelor policristaline, Baza de Date Structurală Cambridge, Baza de Date pentru

Policristale, balanțe analitice, cuptor automat pentru sinteza solvotermală, băi cu ultrasunete, microscopie optice, sisteme software pentru determinarea, precizarea și vizualizarea structurilor cristaline. Au fost proiectate și create noi compuși mono- și polinucleari în fază cristalină cu diferită dimensionalitate de la 0D la 3D, ce conțin metale s, d și f. Structurile cristaline a mai mult de 70 materiale noi au fost studiate prin difracția cu raze X pe monocristal, iar cele mai promițătoare dintre ele au fost investigate prin metode fizice sau testări biologice. Au fost identificate materiale promițătoare cu proprietăți de magnet molecular, cu porozitate ridicată, proprietăți adsorbitive, luminescente, de senzor și cu o gamă largă de proprietăți biologice. Studiul cu raze X a fost realizat și pentru o serie de materiale noi obținute în diverse centre științifice din țară și străinătate în cadrul lucrărilor de colaborare.

Conducătorul de proiect

Data: 3.01.2024

LȘ



 / KRAVTOV Victor

## Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2023

Implementarea principiilor ingineriei cristalelor și cristalografiei cu raze X pentru designul și crearea materialelor hibride organice/anorganice cu proprietăți avansate fizice și biologice active funcționale

### Cifrul proiectului ANCD 20.80009.5007.15

Etapa patru a proiectului, în conformitate cu programul de activități pentru 2023, a fost axată pe dezvoltarea protocoalelor de proiectare și fabricare a materialelor hibride cristaline organice/anorganice noi care includ polimeri și nanoclusteri coordinativi, complecși mononucleari, sisteme multicomponente supramoleculare organice sau organice/anorganice cu proprietăți fizice și biologice avansate care utilizează abordarea principiilor ingineriei cristalului și metoda cristalografică cu raze X. În calitate de componente anorganice au fost utilizate o gamă largă de metale s, s-d, d, f, d-d', d-f, iar ca liganzi s-au utilizat molecule organice cunoscute ori noi sintetizate. Structurile cristaline a mai mult de 70 de materiale cristaline noi au fost studiate prin difracția cu raze X pe monocristal, iar cele mai promițătoare dintre ele au fost investigate prin metode fizice sau testări biologice. Dintre clusterii heterometalici obținuți, cel mai remarcabil este clusterul heteronuclear nanodimensional în formă de roată cu un miez care conține 24 de nuclee metalice  $\{Fe_{18}Tb_6\}$ , asamblat prin utilizarea liganzilor de pivalat și trietanolamină, având compoziția  $C_{234}H_{462}N_{30}O_{102}Fe_{18}Tb_6$ . Asamblarea acestora creează în cristal canale infinite care ocupă 26% din volumul cristalului. Heteroclusterii cu nuclee metalice  $\{Co_2^{III}Dy_4^{III}\}$  și  $\{Mn_6^{III}Mn^{IV}Dy_2^{III}\}$  au o structură extinsă bazată pe subunități triunghiulare și cubane și prezintă proprietățile unui magnet molecular, care oferă potențial pentru calculul cuantic. Principiile ingineriei cristalului au fost folosite pentru a crea materiale poroase polimerice cristaline cu diferite dimensiuni și funcționalitate a pereților porilor, oferind selectivitate de adsorbție diferitor molecule. Au fost obținuți și caracterizați structural compuși coordinativi fără precedent, inclusiv polimeri poroși 1D și 2D de Co, Ni, Zn și Cd cu ligandul 4,4'-diaminodifeniletan. Rețelele metalorganice de Zn(II) și Cd(II) cu pori funcționalizați cu azină au fost obținute și studiate în ceea ce privește structurile cristaline, fotoluminescența, schimbul de solvenți și modelarea moleculară a situsurilor de legare a dioxidului de carbon. Schimbarea esențială a spectrelor de luminescență la includerea moleculelor de nitrobenzen în structura poroasă a unui astfel de cristal a indicat la potențialele proprietăți de senzor. Promițător pentru implementare în sectorul agricol al Republicii Moldova este un compus multicomponent care conține cationul de hexaamină Co(III) și 1,10-fenantrolină, care prezintă proprietăți inhibitoare împotriva dezvoltării cancerului la vița de vie, testat la Institutul Științifico-Practic de Horticultură și Tehnologii Alimentare. Au fost obținute și studiate, din punct de vedere al bioactivității lor inclusiv cu proprietăți inhibitoare HIV/SIDA, un șir de cristale supramoleculare multicomponente cu cationul de hexaamină cobalt(III) și diverse molecule ce conțin atomi donori S, O, N. Studiul cu raze X a fost realizat și pentru o serie de materiale noi obținute în diverse centre științifice din țară și străinătate în cadrul lucrărilor de colaborare. În 2023 au fost publicate 20 articole științifice în reviste științifice, 17 fiind în reviste prestigioase cu factor de impact ridicat; membrii echipei au participat la 9 conferințe științifice internaționale și naționale,

4 saloane de inventică, la care au publicat 17 lucrări (proceedings) și 10 rezumate. Au fost obținute 6 brevete, rezultatele fiind menționate cu medalii de aur, argint, bronz și cu o diplomă de excelență. Au fost susținute o teză de doctorat și o teză de master, iar trei teze de doctorat și una de master sunt în curs de realizare.

The 4-th stage of the project in accordance with the program of activities for 2023 was focused on development of protocols for design and fabrication of novel crystalline hybrid organic/inorganic materials involving coordination polymers, nanoclusters, mononuclear complexes, multicomponent organic or organic/inorganic supramolecular systems with advanced physical and biological properties utilizing crystal engineering approach and X-ray crystallographic method. A wide range of s, s-d, d, f, d-d', d-f metals were used as inorganic components, and known and newly synthesized organic molecules as ligands. Crystal structures of more than 70 new crystalline materials have been studied by single crystal X-ray diffraction and most promising of them were investigated by physical methods or biological testing. Among the heterometallic clusters obtained in the project, the most remarkable is the nanosized heteronuclear wheel-shaped cluster with a 24-nuclear metal core  $\{\text{Fe}_{18}\text{Tb}_6\}$ , assembled using pivalate and triethanolamine ligands and having composition  $\text{C}_{234}\text{H}_{462}\text{N}_{30}\text{O}_{102}\text{Fe}_{18}\text{Tb}_6$ . The packing of nanosized wheels creates in the crystal infinite channels occupied 26% of crystal volume. The heteroclusters with metal cores  $\{\text{Co}_2^{\text{III}}\text{Dy}_4^{\text{III}}\}$  and  $\{\text{Mn}_6^{\text{III}}\text{Mn}^{\text{IV}}\text{Dy}_2^{\text{III}}\}$  have an extended structure based on triangular and cubane subunits and have the properties of a single-molecule magnet, which provides potential for quantum computing. The principles of crystal engineering have been used to create crystalline polymer porous materials with various dimensions and functionality of pore walls providing selectivity of adsorption of various molecules. Unprecedented coordination compounds including 1D and 2D porous polymers of Co, Ni, Zn and Cd with a 4,4'-diaminodiphenylethane ligand, have been prepared and structurally characterized. The Zn(II) and Cd(II) metal-organic frameworks with azine-functionalized pores were prepared and studied in terms of crystal structures, photoluminescence, solvent exchange, and molecular modeling of carbon dioxide binding sites. The essential shift of luminescence spectra upon inclusion of nitrobenzene molecules in porous structure of such crystal indicated their potential sensor properties. Promising for implementation in the agricultural sector of the Republic of Moldova is a multicomponent compound containing Co(III) hexaammine cation and 1,10-phenanthroline, which exhibits inhibitory properties against the development of grapevine cancer and is being tested at the Scientific-Practical Institute of Horticulture and Food Technology. A number of supramolecular multicomponent crystals with cobalt(III) hexaammine cation and various molecules containing S, O, N donor atoms were obtained and studied in view point of their bioactivity including with Hiv/Aids inhibitory properties. The X-ray study was also carried out for a series of new materials obtained in various scientific centers in the country and abroad in the frame works of collaboration. In 2023, 20 scientific articles were published in scientific journals, including 17 in the most prestigious ones with high impact factors; team members took part in 9 international and national scientific conferences, 4 exhibitions, and published 17 proceedings, 10 abstracts. 6 patents were obtained and awarded with Gold, Silver, and Bronze medals and Diploma of excellence. One doctor, one master theses have been defended and three doctor and one master



**Lista lucrărilor științifice, științifico-metodice și didactice  
publicate în anul 2023 în cadrul proiectului din Programul de Stat**

Implementarea principiilor ingineriei cristalelor și cristalografiei cu raze X pentru designul și  
crearea materialelor hibride organice/anorganice cu proprietăți avansate fizice și biologice  
active funcționale

1. **Monografii** (recomandate spre editare de consiliul științific/senatul organizației din domeniile cercetării și inovării)
  - 1.1. monografii internaționale
    -
  - 1.2. monografii naționale
    -
2. **Capitole în monografii naționale/internaționale**
  1. **CRACIUN, N., CHISCA, D., MELNIC, E., FONARI, M.S.** Unprecedented coordination compounds with 4,4'-diaminodiphenylethane as a supramolecular agent and ditopic ligand: Synthesis, crystal structures and Hirshfeld surface analysis. In: *Synthesis, Crystal Structures and Hirshfeld Surface Analysis of Coordination Compounds (Volume II)*, pp. 129-142. Ed.: Waldemar Maniukiewicz, MDPI: Basel, 2023, ISBN 978-3-0365-7929-0.
3. **Editori în reviste, culegere de articole, materiale ale conferințelor naționale/internaționale**
  - **Dr. Kravțov Victor**, revista Moldavian Journal of the Physical Sciences / membru al colegiului de redacție.
  - **Dr. Fonari Marina**, revista Molecules ((ISSN 1420-3049, MDPI) / Guest Editor of special issue „**Zn(II) and Cd(II) Coordination Polymers: Advances and Perspectives**” [https://www.mdpi.com/journal/molecules/specialissues/Zn\\_Cd\\_CoordinationPolymers](https://www.mdpi.com/journal/molecules/specialissues/Zn_Cd_CoordinationPolymers).
  - **Dr. Croitor Lilia**, revista Crystals. <https://www.mdpi.com/journal/crystals/special issues/multicomponent molecular crystals>.
4. **Articole în reviste științifice**
  - 4.1. în reviste din bazele de date Web of Science și SCOPUS (cu indicarea factorului de impact IF)
    1. **DARII, M., VAN LEUSEN, J., KRAVTSOV, V.CH., CHUMAKOV, Y., KRÄMER, K., DECURTINS, S., LIU, SH.-X., KÖGERLER, P., BACA, S.G.** {Mn<sup>III</sup>Mn<sup>IV</sup>Dy<sup>III</sup>} Single-Molecule Magnet Based on Cubane Subunits. In: *Crystal Growth & Design*. 2023, nr. 9(23), pp. 6944—6952. ISSN 1528-7483. DOI:10.1021/acs.cgd.3c00783 (IF: 3,8).
    2. BEGEÇ, S., YUKSEL, F., **CHUMAKOV, Y.**, ALATAŞ, S., KILIÇ, A. Phenolysis of 2, 2'-Biphenoxy Thiophosphinic Chloride: Crystal Structures and DFT Calculations of 2, 2'-Biphenyl 4-Tert-Butylphenyl Thiophosphinate and 2, 2'-Biphenyl 3,4-di-Methylphenyl Thiophosphinate. In: *Polycyclic Aromatic Compounds*. 2023, nr. 8(43), pp. 7426—7438. ISSN 1563-5333. DOI:10.1080/10406638.2022.2136721 (IF: 2,4).

3. AVERKIEV, B.B., CASTAÑEDA, R., **FONARI, M.S.**, JUCOV, E.V., TIMOFEEVA, T.V. Additive controlled packing polymorphism in a series of halogen-substituted dithieno[3,2-a:2',3'-c]phenazine derivatives. In: *CrystEngComm*. 2023, nr. 28(25), pp. 4076—4088. ISSN 1466-8033. DOI:10.1039/D3CE00387F (IF: 3,756).
4. TERENTI, N., **MELNIC, E.**, FRUTH, V., NEDELKO, N., ALESHKEVYCH, P., LEWINSKA, S., SLAWSKA-WANIEWSKA, A., **KRAVTSOV, V.CH.**, LAZARESCU, A., LOZAN, V. Synthesis and microstructure of BaMnO<sub>3</sub> oxide obtained from coordination precursor. In: *Journal of Solid State Chemistry*. 2023, 324, pp. 124108-1—124108-7. ISSN 0022-4596. DOI:10.1016/j.jssc.2023.124108 (IF: 3,656).
5. MARQUEZ, J., NOVIKOV, E., RIGIN, S., **FONARI, M.S.**, CASTAÑEDA, R., KORNILOVA, T., TIMOFEEVA, T.V. Exploiting Supramolecular Synthons in Cocrystals of Two Racetams with 4-Hydroxybenzoic Acid and 4-Hydroxybenzamide Cofomers. In: *Chemistry*. 2023, nr. 2(5), pp. 1089—1100. ISSN 2624-8549. DOI:10.3390/chemistry5020074 (IF: 2,1)
6. LOZOVAN, V., **KRAVTSOV, V.CH.**, CHUMAKOV, Y.M., COSTRIUCOVA, N.V., SIMINEL, N., PETUHOV, O., VLASE, T., VLASE, G., BARBA, A., **FONARI, M.S.** Zn(II) and Cd(II) Metal–Organic Frameworks with Azine-Functionalized Pores: Crystal Structures, Photoluminescence, Solvent Exchange, and Molecular Simulations of Carbon Dioxide Binding Sites. In: *Crystal Growth & Design*. 2023, nr. 5(23), pp. 3171—3185. ISSN 1528-7483. DOI:10.1021/acs.cgd.2c01345 (IF: 4,01).
7. GRAUR, V., USATAIA, I., GRAUR, I., GARBUZ, O., **BOUROSH, P.**, **KRAVTSOV, V.**, LOZAN-TIRSU, C., BALAN, G., FALA, V., GULEA, A. Novel Copper(II) Complexes with N<sup>4</sup>,S-Diallylisothiosemicarbazones as Potential Antibacterial/Anticancer Drugs. In: *Inorganics*. 2023, nr. 5(11), pp. 195-1—195-17. ISSN 2304-6740. DOI:10.3390/inorganics11050195 (IF: 3,149).
8. GRAUR, V., MARDARI, A., **BOUROSH, P.**, **KRAVTSOV, V.**, USATAIA, I., ULCHINA, I., GARBUZ, O., GULEA, A. Novel Antioxidants Based on Selected 3d Metal Coordination Compounds with 2-Hydroxybenzaldehyde 4,S-Diallylisothiosemicarbazone. In: *Acta Chimica Slovenica*. 2023, nr. 1(70), pp. 122—130. ISSN 1580-3155. DOI:10.17344/acsi.2022.7885 (IF: 1,524).
9. BULHAC, I., URECHE, D., **KRAVTSOV, V.**, **BOUROSH, P.** Synthesis and Structure of Heterometallic Compounds with Dimethyl Pyridine-2,6-dicarboxylate. In: *Russian Journal of Coordination Chemistry*. 2023, nr. 2(49), pp. 77—85. ISSN 1070-3284. DOI:10.1134/S1070328422700245 (IF: 1,814).
10. **BOUROSH, P.**, COCU, M., DANILESCU, O., BULHAC, I. Binuclear Vanadium(V) Complex with the Ligand Based on Isonicotinic Acid Hydrazide and 1-Phenyl-1,3-Butanedione: Synthesis and Crystal Structure. In: *Russian Journal of Coordination Chemistry* 2023, nr. 4(49), 195—205. ISSN 1070-3284. DOI:10.1134/S1070328423700409 (IF: 1,814).
11. **CRACIUN, N.**, **CHISCA, D.**, **MELNIC, E.**, **FONARI, M.S.** Unprecedented Coordination Compounds with 4,40-Diaminodiphenylethane as a Supramolecular Agent and Ditopic Ligand: Synthesis, Crystal Structures and Hirshfeld Surface Analysis. In: *Crystals*. 2023, nr. 2(13), 289-1—289-14. ISSN 2073-4352. DOI:10.3390/cryst13020289 (IF: 2,67).
12. COLIBABA, G.V., RUSNAC, D., **COSTRIUCOVA, N.**, SHIKIMAKA, O., MONAICO, E.V. Low-temperature sintering of ZnO:Al ceramics by means of chemical vapor

- transport. In: *The Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 2023, nr. 2(34), 82. ISSN 0957-4522. DOI:10.1007/s10854-022-09458-1 (IF: 2,779).
13. **FONARI, M.S.**, RIGIN, S., LESSE, D., TIMOFEEVA, T.V. Co-crystals of polynuclear aromatic hydrocarbons and 9H-carbazole with 2,3-dichloro-5,6-dicyano-1,4-benzoquinone acceptor: varieties in crystal packing, Hirshfeld surface analysis and quantum-chemical studies. In: *Journal of Molecular Structure*. 2023, 1278, pp. 134900-1—134900-11. ISSN 1872-8014. DOI:10.1016/j.molstruc.2023.134900 (IF: 3,841).
  14. **STATI, D.**, VAN LEUSEN, J., AHMED, N., **KRAVTSOV, V.CH.**, KÖGERLER, P., **BACA, S.G.** A  $\{Co^{III}_2Dy^{III}_4\}$  Single-Molecule Magnet with an Expanded Core Structure. In: *Crystal Growth & Design*. 2023, nr. 1(23), pp. 395—402. ISSN 1528-7483. DOI:10.1021/acs.cgd.2c01085 (IF: 4,01).
  15. GRAUR, I., BESPALOVA, T., GRAUR, V., TSAPKOV, V., GARBUZ, O., MELNIC, E., BOUROSH, P., GULEA, A. A new thiosemicarbazone and its 3d metal complexes: Synthetic, structural, and antioxidant studies. In: *Journal of Chemical Research*. 2023, nr. 47(6), pp. 1—8. ISSN 1747-5198. DOI:10.1177/17475198231216422 (IF: 1,4).
  16. CENGIZ, A., GOREN, S., SONMEZ, A., ŞALE, Y., OKUMUŞ, E., KIRBAŞ, C., CHUMAKOV, Y.M., SEYDOV, M.-H.Y. Modification of the optical and elastic properties of TiGaSe2 layered semiconductor produced by the memory effect. *Phys Scripta*. 2023, 98(12), 125006. DOI:10.1088/1402-4896/ad0082 (IF: 2,9).
  17. RUSNAC, R., GARBUZ, O., CHUMAKOV, Y., TSAPKOV, V., HUREAU, CH., ISTRATI, D., GULEA, A. Synthesis, Characterization, and Biological Properties of the Copper(II) Complexes with Novel Ligand: N-[4-({2-[1-(pyridin-2-yl)ethylidene]hydrazinecarbothioyl}amino)phenyl]acetamide. *Inorganics*. 2023, 11(10), 408-1—408-17. DOI:10.3390/inorganics11100408 (IF: 3,149).

#### 4.2. în alte reviste din străinătate recunoscute

1. ЛИТВИНЧУК, І.В., **ФОНАРЬ, М.С.**, **КРАВЦОВ, В.Х.**, ГЕЛЬМБОЛЬДТ, В.О. Експериментальне дослідження перетворення 2-амінофенілоцтової кислоти гексафторосилікату на 2-оксіндол у м'яких умовах. В: *Фармацевтичний журнал*. 2023, nr. 2(78), pp. 15—19. ISSN 0367-3057. DOI:10.32352/0367-3057.2.23.02.

#### 4.3. în reviste din Registrul National al revistelor de profil, cu indicarea categoriei

1. TALMACI, N., DRAGANCEA, D., GORINCIROI, E., **BOUROSH, P.**, **KRAVTSOV, V.** Crystal Structure and NMR Spectroscopic Characterization of 1,5-Bis(2-Hydroxy-3-Methoxybenzylidene)Carbonohydrazide. In: *Chemistry Journal of Moldova. General, Industrial and Ecological Chemistry*. 2023, nr. 2(18), pp. 53-60, ISSN 2345-1688. DOI: 10.19261/cjm.2023.1074. (Categoria A)

### 5. Articole în culegeri științifice naționale/internaționale

#### 5.1. culegeri de lucrări științifice editate peste hotare

1. **PODGORNII, D.**, SHOVA, S., **KRAVTSOV, V.C.**, **BACA, S.G.** A Nanosized Heteronuclear  $\{Fe_{18}Tb_6\}$  Coordination Wheel Based on Pivalate and Triethanolamine

Ligands. In: Sontea, V., Tiginyanu, I., Railean, S. (eds) In: *6<sup>th</sup> International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering. ICNBME 2023. IFMBE Proceedings*, 2024. vol 91. p. 80–87. Springer, Cham. DOI:10.1007/978-3-031-42775-6\_9.

## 5.2 culegeri de lucrări științifice editate în Republica Moldova

-

### 6. Articole în materiale ale conferințelor științifice

#### 6.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

-

#### 6.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

1. ȚAPU, D., MELNIC, E., CHIȘCA, D. Interacțiuni intermoleculare din cocristalele organice ale acidului 2-nitroterifalic și diferiți liganzi piridinici. In: Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 40—46. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023. P. 40-46.
2. STATI, D. Sinteza și caracterizarea structurală a clusterului heterometalic  $\{Co_3Yb_3\}$  izobutirat în baza n-butildietanolaminei. In: Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 47—49. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023. P. 47-49.
3. URECHE, D., BULHAC, I., BOUROȘ, P. Compuși hetero-bimetalici ai Ba(II) ce conțin ligand O,N,O-donor și anion  $[Co(NCS)_4]^{2-}$ . In: Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 50—52. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023. P. 50-52.
4. URECHE, D., BULHAC, I., BOUROȘ, P. Sinteza și structura unui compus binuclear al Mn(II) cu dianilinglioxima și acidul izofteralic. In: Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 53—55. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023. P. 53-55.
5. BELEAEV, E. Evaluarea legăturilor intermoleculare de hidrogen în compușii multicompenți ai  $[Co(NH_3)_6]^{3+}$  cu acid 3-sulfobenzoic prin analiza suprafeței Hirshfeld. In: Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 56—60. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023.p56-60.
6. COCU, M., BOUROȘ, P., KRAVTSOV, V., DANILESCU, O., BULHAC, I. Compuși coordinativi mononucleari ai nichelului(II) și cuprului(II) cu ligandul bază Schiff derivat al S-metilzotiosemicarbazonei acetilacetonei și 8-chinolinaldehidei. In: Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională

„INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 83—85. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023.p83-85.

7. **CRACIUN, N., MELNIC, E., CHIȘCA, D.** Analiza suprafeței Hirshfeld. Investigarea interacțiunilor intermoleculare în cristalul compusului ionic de 2,4-diamino-6-fenil-1,3,5-triazină și acid malonic. In: *Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a*, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 102—105. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023.p102-105.
8. **DANILESCU, O., CROITOR, L., BULHAC, I., BOUROȘ, P., KULIKOVA, O.** Liganzi dihidrazonici ai 2,6-diacetilpiridinei – chemosenzori în detectarea  $Cd^{2+}$ . In: *Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a*, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 106—108. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023.p106-108.
9. **COROPCEANU, E., BOUROȘ, P., VEVERIȚA, A.** Structura cristalină a cloro-bis(dimetilgliximato)cobalt(III) cu derivați ai piridinei. In: *Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a*, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 269—271. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023.p269-271.
10. **LOZOVAN, V., BULHAC, I., BOUROȘ, P., KRAVȚOV, V.** Structura cristalină și studiul spectroscopic IR al complexilor macrociclici  $[Cu(HL)Cl]$  și  $[Cu(HL)Br]$ . In: *Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a*, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 306—308. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023.p306-308.
11. **KRAVȚOV, V., SIMINEL, N., FONARI, M., LUCENTI, E.** Crystal structure and photoluminescence properties of  $[Nd(NO_3)_3(H_2O)_4](iso-C_9H_6N_6)_2(H_2O)$ . In: *Volumul I. Realizări contemporane în științe ale naturii. Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a*, 18-19 martie 2023, Republica Moldova, p. 309—311. ISBN: 978-9975-46-717-9. DOI:10.46727/c.v1.18-19-03-2023.p309-311.
12. **BULHAC, I., ȘTEFÎRȚĂ, A., COROPCEANU, E., BRÎNZĂ, L., BOUROȘ, P.** Coordinative compounds and chemical compositions with antioxidant properties / compuși coordinativi și compoziții chimice cu proprietăți antioxidante. *INTERNATIONAL CONGRESS RESEARCH – INNOVATION – INNOVATIVE ENTREPRENEURSHIP*, 13-14 October 2023, Republic of Moldova. p.308-314. DOI:10.46727/c.13-14-10-2023.p308-314

6.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

-

6.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

-

## 7. Teze ale conferințelor științifice

7.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

1. HAIDU, D., **GOROBET, A.**, CARABA, M.N., CARABA, I.V., **BOUROSH, P.**, **CROITOR, L.**, CRISAN, M. Supramolecular Systems of 2-Chloro-5-Nitrobenzoic Acid with Antibacterial Activity. In: *Abstracts. Conference "New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection", 15<sup>th</sup> Edition*, online, September 21-22, 2023, Timisoara, Romania, p. 112.
2. DANILESCU, O., BULHAC, I., **BOUROSH, P.** 1D and 2D Coordination Polymer of Cd(II) based on polydentate Schiff base ligand. In: *Abstracts. Conferința Facultății de Chimie, IasiCHEM 2023*. 26-27 octombrie 2023. Iași, România. PI-02. p. 18.
3. LYTUVYNCHUK I.V., **FONARI M.S.**, **KRAVTSOV V.CH.**, GELMBOLDT V.O. Unexpected conversion of 2-aminophenylacetic acid hexafluorosilicate to 2-oxindol under mild conditions. In: *Abstracts. Conference Materials of the International Internet Conference 'Modern chemistry of medicines'*, May 18, 2023, Kharkiv, Ukraine, p. 50

7.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

-

7.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

1. **CAPBĂTUT, O.**, SULTANOVA, O., **KRAVTSOV, V.**, **BACA, S.** Biological Activity of Polynuclear Cu(II) Isobutyrate Against Tumor Growth in Grapevine. Institute of Applied Physics, MSU, Chisinau, Moldova. In: *Conferința științifică națională cu participare internațională „Științele naturii în dialogul generațiilor”, a VI-a ediție*. Abstract Book. p. 203. Chișinău, 13-15 septembrie 2023.
2. **CRACIUN, N.**, **MELNIC, E.**, CHISCA, D., **FONARI, M.** Synthesis and Crystal Structure of a New Co(II) Metal-Organic Compound With The Bent Ditopic 4,4'-Diaminodiphenylmethane Ligand. Institute of Applied Physics, MSU, Chisinau, Moldova. In: *Conferința științifică națională cu participare internațională „Științele naturii în dialogul generațiilor”, a VI-a ediție*. Abstract Book. p. 208. Chișinău, 13-15 septembrie 2023.
3. **DARII, M.**, **KRAVTOV, V.**, MACAEV, F., **BACA, S.** Cobalt Complexes with Hiv/ Aids Inhibitory Properties. Institute of Applied Physics, MSU, Chisinau, Moldova. In: *Conferința științifică națională cu participare internațională „Științele naturii în dialogul generațiilor”, a VI-a ediție*. Abstract Book. p. 209. Chișinău, 13-15 septembrie 2023.
4. **BELEAEV, E.**, **CHUMAKOV, Yu.**, **BACA, S.** Theoretical Study of Binding Energy in Multi-Component Compounds Involving Hexaammine Cobalt(III) Cation. Institute of Applied Physics, MSU, Chisinau, Moldova. In: *Conferința științifică națională cu participare internațională „Științele naturii în dialogul generațiilor”, a VI-a ediție*. Abstract Book. p. 201. Chișinău, 13-15 septembrie 2023.
5. **PODGORNII, D.**, **BACA, S.G.**, **KRAVTSOV, V.CH.** A New Octanuclear Propeller-Like Aminoalcohol-Supported Iron(III) Pivalate Cluster. Institute of Applied Physics, MSU, Chisinau, Moldova. In: *Conferința științifică națională cu participare internațională „Științele naturii în dialogul generațiilor”, a VI-a ediție*. Abstract Book. p. 218. Chișinău, 13-15 septembrie 2023.
6. **STATI, D.**, **KRAVTSOV, V.**, **BACA, S.** Synthesis and Structural Characterization of

Tetranuclear  $\{Co(III)_2Y(III)_2\}$  Isobutyrate Cluster with N-Butyldiethanolamine. Institute of Applied Physics, MSU, Chisinau, Moldova. In: *Conferința științifică națională cu participare internațională „Științele naturii în dialogul generațiilor”, a VI-a ediție*. Abstract Book. p. 221. Chișinău, 13-15 septembrie 2023.

7. COCU, M., **BOUROSH, P., KRAVTSOV, V., DANILESCU, O., BULHAC, I.** Mononuclear Nickel(II) and Copper(II) Complexes with Schiff Base Ligands Derived from Quinoline-8-Aldehyde and S-Methylisothiosemicarbazones. In: *Scientific seminar Advanced Materials to reduce the impact of toxic chemicals on the environment and health*. Chisinau. 21 septembrie 2023. <http://dx.DOI:.org./10.19261/>.

## 8. Alte lucrări științifice (recomandate spre editare de o instituție acreditată în domeniu)

8.1. cărți (cu caracter informativ)

-

8.2. enciclopedii, dicționare

-

8.3. atlase, hărți, albume, cataloage, tabele etc. (ca produse ale cercetării științifice)

-

## 9. Brevete de invenții și alte obiecte de proprietate intelectuală, materiale la saloanele de invenții

9.1 . Brevete de invenții

1. BULHAC, I., URECHE, D., CILOCI, A., **BOUROȘ, P.**, TIURINA, J., LABLIUC, S. *Tetra(izotiocianat)cobaltat(II) de tris(dimetil piridin-2,6-dicarboxilat)stronțiu cu proprietăți de biostimulator al activității lipolitice pentru tulpina de fungi Rhizopus arrhizus CNMN FD 03*. Brevet de invenție MD 4831 C1 2023.06.30.
2. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROȘ, P.**, CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., MATROI, A. *Nitrat de 2,6-diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-bis(aqua)fier(III)-hidrat(1/2,5) cu proprietăți de stimulator al sintezei lipazelor exocelulare pentru tulpina de fungi Rhizopus arrhizus CNMN FD 03 și mediu nutritiv pentru cultivare*. Brevet de invenție MD 4827 C1 2023.05.31.
3. BULHAC, I., URECHE, D., **BOUROȘ, P.**, COCU, M., CILOCI, A., CONDRUC, V., DVORNINA, E. *Tris(2,6-dimetil piridindicarboxilat-1kONO)-di-m-(izotiocianato-1,2kN)-(diizotiocianato-2kN)bariu(II)cobalt(II) cu proprietăți de stimulator al sintezei principiilor biologice active la fungi*. Brevet de invenție MD 4847 C1 2023.09.30.
4. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROȘ, P.**, CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., MATROI, A. *Perclorat de 2,6-diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-bis(aqua)fier(III)-hidrat(1/2,5) cu proprietăți de stimulator al sintezei lipazelor exocelulare pentru tulpina de fungi Rhizopus arrhizus CNMN FD 03*. Brevet de invenție MD 4874 B1 2023.11.30.
5. BULHAC, I., URECHE, D., **BOUROȘ, P.**, DANILESCU, O., CILOCI, A., CLAPCO, S. *Tetra(izotiocianat)cobaltat(II) de tris(dimetil piridin-2,6-dicarboxilat)calciu cu proprietăți de stimulator al activității lipolitice la tulpina de fungi Rhizopus arrhizus CNMN FD 03*. Brevet de invenție MD 4853 C1 2023.11.30.
6. DANILESCU, O., BULHAC, I., **CROITOR, L., BOUROȘ, P.**, KULICOVA, O. *Nitrat de 2,6-diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-(aqua)(nitrato)cadmium(II)-monohidrat cu*

*proprietăți fotoluminescente*. Hotărâre de acordare brevet de invenție. C07F 3/08, C07D 213/86, C09K 11/06, C09K 11/54. Institutul de Chimie, USM. Institutul de Fizică Aplicată, USM. Nr. depozit a 2022 0015. Data depozit 2022.03.24. Publicat 2023.09.23. In: BOPI. 2023, nr. 9.

## 9.2. Materiale la saloanele de invenții

1. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROSH, P.**, CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., DVORNINA, E. Perchlorate of 2,6-diacetylpyridine-bis(picolinoylhidrazone)-bis(aqua)iron(III)-hidrat(1/2,5) with stimulating properties on exocellular lipase syntethis for *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03 fungal strain. In: *Proceedings of The 15 Edition of EUROINVENT 2023*, European Exhibition of Creativity and Innovation, 2023, May 13, România.
2. DANILESCU, O., BULHAC, I., **CROITOR, L.**, **BOUROSH, P.**, KULICOVA, O. Nitrate of 2,6-diacetylpyridine-bis(picolinoylhidrazone) - (aqua)(nitrato)cadmium(II) - monohydrate with photoluminescence properties. In: *Salonul Internațional de Invenții, Inovații „Traian Vuia”*, ediția IX. Timișoara, 15-17 June 2023. p. 138.
3. **VITIU, A.**, CHIȘCA, D., GORINCIOL, E., COROPCEANU, E., **BOUROSH, P.** Polymeric Coordination Compound of zinc with novel condensation ligand exhibiting antifungal and antibacterial activity. In: *Salonul Internațional de Invenții, Inovații „Traian Vuia”*, ediția IX. Timișoara, 15-17 June 2023.
4. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROSH, P.**, CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., DVORNINA, E. Perchlorate of 2,6-diacetylpyridine-bis(picolinoylhidrazone)-bis(aqua)iron(III)-hidrat(1/2,5) with stimulating properties on exocellular lipase syntethis for *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03 fungal strain. In: *Salonul Internațional de Invenții, Inovații „Traian Vuia”*, ediția IX. Timișoara, 15-17 June 2023. p. 139.
5. BULHAC, I., URECHE, D., CILOCI, A., **BOUROSH, P.**, TIURINA, J., LABLIUC, S. Tris(dimethylpyridine-2,6-dicarboxylates)strontium tetra(isothiocyanate)cobalte(II) with lipolytic activity boistimulatory properties for the fungal strain *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03. In: *Salonul Internațional de Invenții, Inovații „Traian Vuia”*, ediția IX. Timișoara, 15-17 June 2023. p.139.
6. BULHAC, I., URECHE, D., **BOUROSH, P.**, DANILESCU, O., CILOCI, A., CLAPCO, S. Tris(dimethylpyridine-2,6-dicarboxylates)calcium tetra(isothiocyanate)cobalte(II) with boistimulatory properties of lipolytic activity for the fungal strain *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03. In: *Salonul Internațional de Invenții, Inovații „Traian Vuia”*, ediția IX. Timișoara, 15-17 June 2023. p.138.
7. URECHE, D., Bulhac, I., **BOUROȘ, P.**, ROȘCA, D., LUPAȘCU, L. Bis-(N,N'-bis(4-tolyl) diaminoglixim-4-methylaniline thrihydrate for use as an antibacterial remedy in agriculture. In: *International Salon of Invention and Innovative Entrepreneurship. „Ion Creanga” State Pedagogical University*. 12-13 October 2023, Chisinau.
8. BULHAC, I., URECHE, D., **BOUROSH, P.**, DANILESCU, O., CILOCI, A., CLAPCO, S. Tris(dimethyl pyridine-2,6-dicarboxylate)calcium tetra(isothiocyanate)cobaltate(II) with biostimulatory properties of lipolytic activity for the fungal strain *Rhizopus arrhizus* CNMN

- FD 03. In: *International Salon of Invention and Innovative Entrepreneurship. „Ion Creanga” State Pedagogical University*. 12-13 October 2023, Chisinau.
9. BULHAC, I., URECHE, D., CILOCI, A., **BOUROSH, P.**, TIURINA, J., LABLIUC, S. Tris(dimethyl pyridine-2,6-dicarboxylate)strontium tetra(isothiocyanate)cobaltate(II) with lipolytic activity biostimulatory properties for the fungal strain *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03. In: *International Salon of Invention and Innovative Entrepreneurship. „Ion Creanga” State Pedagogical University*. 12-13 October 2023, Chisinau.
  10. DANILESCU, O., **BOUROȘ, P.**, PETUHOV, O., BULHAC, I., ȘOVA, S. Coordination polymer 2,6-diacetylpyridine bis(isonicotinoylhydrazonato)(2-)cobalt(II)–aqua(1/5.75) which manifest adsorptive properties. In: *International Salon of Invention and Innovative Entrepreneurship. „Ion Creanga” State Pedagogical University*. 12-13 October 2023, Chisinau.
  11. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROSH, P.**, CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., MATROI, A. Nitrate of 2,6-diacetylpyridine-bis(picolinoylhydrazone)-bis(aqua)iron(III)–hydrate(1/2.5) with stimulating properties on exocellular lipase synthesis for the *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03 fungal strain and nutrient medium for cultivation. In: *International Salon of Invention and Innovative Entrepreneurship. „Ion Creanga” State Pedagogical University*. 12-13 October 2023, Chisinau.
  12. LOZOVAN, V., **FONARI, M.**, **KRAVȚOV, V.**, SIMINEL, N., COROPCEANU, E., KULIKOVA, O., **COSTRIUCOVA, N.** Polimer unidimensional al cadmiului(II) în baza liganzilor 1,2-bis(piridin-4-ilmetilen)hidrazină și acid 2-aminobenzoic, care manifestă activitate fotoluminescentă și capacitate de schimb a moleculelor de solvent / one-dimensional coordination polymer of cadmium(I) based on 1,2-bis (pyridin-4-ylmethylene) hydrazine and 2-aminobenzoic acid ligands, which shows photoluminescent activity and the ability to exchange solvent molecules. In: *International Salon of Invention and Innovative Entrepreneurship. „Ion Creanga” State Pedagogical University*. 12-13 October 2023, Chisinau.
  13. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROȘ, P.**, CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., MATROI, A. Nitrat de 2,6-diacetilpiridin(bis(picolinoilhidrazon)bis(aqua) fier(II)-hidrat(1/2,5) cu proprietăți de stimulator al sintezei lipazelor exocelulare pentru tulpina de fungi rhizopus arrhizus cnmn FD 03 și mediu nutritiv pentru cultivare / nitrate of 2-diacetylpyridine(bis(picolinoylhydrazone)-(bis(aqua)iron(iii)-hydrate(1/2,5) with stimulating properties on exocellular lipase synthesis for the rhizopus arrhizus cnmn FD 03 fungal strain and nutrient medium for cultivation. In: *Expoziția Internațională Specializată „INFOINVENT 2023”*. 22-24 noiembrie 2023, Chișinău, Republica Moldova. I.A.9. pp. 35-35. <https://infoinvent.md/assets/files/catalog/catalog-2023.pdf>
  14. DANILESCU, O., BULHAC, I., **CROITOR, L.**, **BOUROȘ, P.**, KULICOVA, O. Nitrat de 2,6- diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-(aqua)(nitrato)cadmiu(II)–monohidrat cu proprietăți fotoluminescente. In: *Expoziția Internațională Specializată „INFOINVENT 2023”*. 22-24 noiembrie 2023, Chișinău, Republica Moldova. I.A.17. pp. 39-40. <https://infoinvent.md/assets/files/catalog/catalog-2023.pdf>
  15. BULHAC, I., URECHE, D., CILOCI, A., **BOUROȘ, P.**, TIURINA, J., LABLIUC, S. Tetra (izotiocianat)cobaltat(II) de tris(dimetil piridin-2,6-dicarboxilat) stronțiu cu proprietăți de biostimulator al activității lipolitice pentru tulpina de fungi rhizopus arrhizus CNMN FD 03 / tris(dimethyl pyridine-2,6-dicarboxylate)strontium tetra (isothiocyanate) cobaltate(II)

with lipolytic activity biostimulatory properties for the fungal strain *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03. In: *Expoziția Internațională Specializată „INFOINVENT 2023”*. 22-24 noiembrie 2023, Chișinău, Republica Moldova. IV.15. pp. 278-278. <https://infoinvent.md/assets/files/catalog/catalog-2023.pdf>

16. BULHAC, I., URECHE, D., **BOUROȘ, P.**, DANILESCU, O., CILOCI, A., CLAPCO, S. Tetra(izotiocianat)cobaltat(II) de tris(dimetil piridin-2,6-dicarboxilat) calciu cu proprietăți de biostimulator al activității lipolitice pentru tulpina de funghi *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03 /*tris(dimethyl pyridine-2,6-dicarboxylate)calcium tetra (isothiocyanate) cobaltate(II) with biostimulatory properties of lipolytic activity for the fungal strain rhizopus arrhizus CNMN FD 03*. In: *Expoziția Internațională Specializată „INFOINVENT 2023”*. 22-24 noiembrie 2023, Chișinău, Republica Moldova. IV.16. pp. 278-279. <https://infoinvent.md/assets/files/catalog/catalog-2023.pdf>
17. LOZOVAN, V., **FONARI, M.**, **KRAVȚOV, V.**, SIMINEL, N., COROPCEANU, E., KULIKOVA, O., **COSTRIUCOVA, N.** Polimer unidimensional al cadmiului(II) în baza liganzilor 1,2-bis(piridin-4-ilmetilen)hidrazină și acid 2-aminobenzoic, care manifestă activitate fotoluminescentă și capacitate de schimb a moleculelor de solvent / one-dimensional coordination polymer of cadmium(I) based on 1,2-bis (pyridin-4-ylmethylene) hydrazine and 2-aminobenzoic acid ligands, which shows photoluminescent activity and the ability to exchange solvent molecules. In: *Expoziția Internațională Specializată „INFOINVENT 2023”*. 22-24 noiembrie 2023, Chișinău, Republica Moldova. IV.17. pp. 279-279. <https://infoinvent.md/assets/files/catalog/catalog-2023.pdf>

## 10. Lucrări științifico-metodice și didactice

10.1. manuale pentru învățământul preuniversitar (aprobate de ministerul de resort)

-

10.2. manuale pentru învățământul universitar (aprobate de consiliul științific)

-

10.3. alte lucrări științifico-metodice și didactice

**Executarea devizului de cheltuieli,  
conform anexei nr. 2.3 din contractul de finanțare pentru anul 2023**

**Cifrul proiectului:** ANCD 20.80009.5007.15

Cheltuieli, mii lei				
Denumirea	Cod		Anul de gestiune	
	Eco (k6)	Aprobat	Modificat +/-	Precizat
Remunerarea muncii angajaților conform statelor	211180	1751,0		1751,0
Contribuții de asigurări de stat obligatorii	212100	420,2		420,2
Indemnizații pentru incapacitatea temporară de muncă achitate din mijloace financiare ale angajatului.	273500	3,5		3,5
Servicii informaționale	222210	6,0		6,0
Procurarea materialelor pentru scopuri didactice, științifice și alte scopuri	335110	20,0		20,0
Alte prestații sociale ale angajatorilor	273900		+60,0	60,0
<b>Total</b>		<b>2200,7</b>	<b>60,0</b>	<b>2260,7</b>

Rector USM

 / ȘAROV Igor

Contabil șef

 / COJOCARU Liliana

Conducătorul de proiect

 / KRAVTOV Victor

Data: 3.01.2024

LȘ

### Componența echipei conform contractului de finanțare 2023

Cifrul proiectului ANCD 20.80009.5007.15

Echipa proiectului conform contractului de finanțare (la semnarea contractului) pentru 2023						
Nr	Nume, prenume (conform contractului de finanțare)	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării	Data eliberării
1.	Kravțov Victor	1952	dr. șt. fiz.- mat.	1,00	03.01.2023	31.12.2023
2.	Baca Svetlana	1961	dr. șt. chim.	1,00	03.01.2023	31.12.2023
3.	Bouroș Pavlina	1959	dr. șt. chim.	1,00	03.01.2023	31.12.2023
4.	Ciumacov Iurii	1952	dr. șt. fiz.- mat.	1,00	03.01.2023	31.12.2023
5.	Fonari Marina	1959	dr. șt. chim.	1,00	03.01.2023	31.12.2023
6.	Melnic Elena	1979	dr. șt. fizice	1,00	03.01.2023	31.12.2023
7.	Croitor Lilia	1984	dr. șt. chim.	1,00	03.01.2023	31.12.2023
8.	Botezat Olga	1985	dr. șt. chim.	1,00	03.01.2023	31.12.2023
9.	Vitiu Aliona	1985	dr. șt. chim.	1,00	03.01.2023	31.12.2023
10.	Costrucova Natalia	1946		1,00	03.01.2023	31.12.2023
11.	Darii Mariana	1990		0,50	03.01.2023	31.12.2023
12.	Gorobeț Anastasia	1994		1,00	03.01.2023	31.12.2023
13.	Podgornii Daniel	1995		1,00	03.01.2023	31.12.2023
14.	Stati Dumitru	1995		0,50	03.01.2023	31.12.2023
15.	Beleaev Ecaterina	1997		1,00	03.01.2023	31.12.2023
16.	Capbătut Olga	1997		1,00	03.01.2023	31.12.2023

Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor conform contractului de finanțare **37,5%**

Rector USM



/ ȘAROV Igor

Contabil șef

/ COJOCARU Liliana

Conducătorul de proiect

/ KRAVȚOV Victor

Data: 3.01.2024

LȘ