RECEPȚIONAT

Agenția Națională pentru Cercetare și Dezvoltare _____

___ _____ 2024

AVIZAT

Secția AȘM _____

___ _____ 2024

RAPORT ȘTIINȚIFIC FINAL

pentru perioada 2020-2023
privind implementarea proiectului din cadrul Programului de Stat (2020-2023)

Proiectul **"Materiale noi în baza combinațiilor complexe a metalelor cu liganzi polifuncționali în calitate de polimeri poroși, catalizatori, substanțe biologic active și compuși nanostructurați".**

Cifrul proiectului **20.80009.5007.04**

Prioritatea Strategică ***V. Competitivitate economică și tehnologii inovative***

Rectorul/Directorul organizației	ȘAROV Igor	_____
Consiliul științific/Senatul	ARÎCU Aculina	_____
Conducătorul proiectului	LOZAN Vasile	_____

L.Ș.

Chișinău 2024

CUPRINS:

1. Scopul, obiectivele și rezultatele planificate și realizate pe parcursul anilor 2020-2023
2. Impactul științific, social și/sau economic al rezultatelor științifice obținute
3. Diseminarea rezultatelor obținute în proiect 2020-2023
4. Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în limba română (Anexa nr. 1)
5. Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în limba engleză (Anexa nr. 1)
6. Lista publicațiilor științifice pentru perioada 2020-2023 (Anexa nr. 2)
7. Volumul total al finanțării proiectului pentru perioada 2020-2023 (Anexa nr. 3)
8. Componența echipei pe parcursul anilor 2020-2023 (Anexa nr. 4)
9. Raportarea indicatorilor (Anexa nr. 5)

1. **Scopul proiectului**

Sinteza și studiul complex al liganzilor conținând atomi donor O,S, N, P și al combinațiilor complexe noi a metalelor de tranziție 3d și 4f, metalelor de tip s, cu proprietăți de potențiali adsorbanți ai moleculelor mici, substanțe fiziologic active, magneți moleculari, catalizatori specifici pentru cataliza eterogenă, materiale nanostructurate și înalt poroase

1. **Obiectivele proiectului 2020–2023** Obiectivele proiectului constau în sinteza liganzilor polifuncţionali conținând atomi donori (N, O, S, P) și a combinațiilor complexe mono- și polinucleare ale metalelor de tranziție 3d sau 4f și metalelor de tip s cu liganzii indicați;
2. Caracterizarea structurală și fizico-chimică a compuşilor noi sintetizați și testarea proprietăților catalitice, sorbtive și/sau activității biologice ale acestora.
3. Elementele originale constau în utilizarea liganzilor polifuncționali pentru stabilirea corelației între: compoziţie-structură-parametrii porilor și proprietățile sorbtive pentru un set larg de polimeri coordinativi poroși (PCP); compoziţie-structura-activitate biologică pentru combinațiile complexe ale metalelor cu liganzii de tipul bazelor Schiff; compoziția carboxi-clusterilor homo- și heteronucleari ai Fe, ca precursori ai nanooxizilor magnetici micști cu o stoichiometrie programată.
4. Concepția de bază a cercetărilor planificate constă în obținerea în condițiile de laborator a compuşilor ce modelează cît mai adecvat sistemele tehnologice și naturale de interes.
5. Proiectul corespunde poziției “de la idee la aplicare”, iar cercetarea are un caracter interdisciplinar, conținând elemente din domeniile chimiei anorganice, chimiei organice, chimiei fizice și fizicii corpului solid. În echipa de lucru sunt implicați specialiști din diverse domenii ale chimiei dintre care tinerii până la 40 de ani constituie 31%.

2. **Rezultate planificate** conform proiectului depus

1. Realizarea sintezei liganzilor: baze Schiff derivând de la 2,6-diformil-4-t-Bu-fenol cu tio- și izotiosemicarbazidă, tiosemicarbazona acidului 4-formil-3-hidroxi-2-naftoic, 3,3',5,5'-tetrakis(4-carboxifenil)-2,2',4,4',6,6'-hexametil-1,1'-bifenil, mesitil-1,3,5-tri-p-fenilfosfonic, derivaţii 4,4'-bis-imidazolil-bis(fenilenă), acidul 1-N-(4carboxifenil)-4-carboxil-5-metil-triazol, acidul 2′,3′,5′,6′-tetrametil-[1,1′:4′,1″-terfenil]-4,4″-dicarboxilic, acidul 1-N-(4carboxi-fenil)-4-carboxil-5-metil-pirazol, acidul 5-(4-carboxi-5-metil-1H-1,2,3-triazol-1-il)izoftalic, carboxi-bifenil-fosfonic.

2. Realizarea sintezei complecşilor mono- și polinucleari ai metalelor de tranziție 3d, de tip s și f cu liganzii menționați, precum și acidul sebacic, fenantrolina, acidul salicilic și derivaţii lui, a nanoparticulelor de oxizi de fier reeșind din carboxilații trinucleari;

3. Optimizarea condițiilor reacțiilor: solventul, concentrațiilor sărurilor metalelor planificate și liganzilor, raportul lor, regimul de temperatură și timpul interacțiunii, valoarea pH,

atmosfera reacției, concentrația precursorilor de obținere a nanoparticulelor oxizilor metalelor cu morfologii variate etc;

4. Purificarea produselor obținute și optimizarea condițiilor de creștere a monocristalelor a complecșilor sintetizați;
5. Determinarea structurii geometrice a combinațiilor coordinative obținute sub formă de monocristale, utilizînd difracția cu raze-X;
6. Caracterizarea combinațiilor complexe sintetizate cu metodele fizice și fizico-chimice de studiu: Spectroscopia în IR și UV/Vis, RMN, RES, Ciclo-Voltamperometria(CVA), spectroscopia laser, magnetochimia, termogravimetria, spectroscopia de masă;
7. Caracterizarea nanoparticulelor obținute cu diferite metode ale microscopiei electronice (TEM, SEM, EDX, ESEM) Spectroscopia Raman;
8. Determinarea proprietăților sorbtive ale complecșilor sintetizați de tip MOFs.

3. **Rezultatele obținute** (descriere narativă 3-5 pagini)

În scopul obținerii complecșilor bioactivi de cupru cu semicarbazone și tiosemicarbazone, au fost realizate sinteza și testările antimicrobiene ale unor compuși coordinativi hidrosolubili Astfel au fost sintetizați la scară de câteva grame următorii precursori: 2,6-bis(S-metilizotio-semicarbazidometiliden)-4-metilfenol (H_3L1); 2,6- bis(semicarbazidometiliden)-4-metilfenol (H_3L2) și S-metil-izotiosemicarbazona aldehidei 4-metil-6-formilsalicilice(H_2L3). În baza aceștor au fost sintetizați compuși coordinativi dimeri cu clorura sau acetatul de cupru. În baza datelor de analiză și spectrelor IR sau propus formulele $[Cu_2(L2)\text{-}\mu\text{-}CH_3COO]\cdot 3H_2O$ și $[Cu_2(L2)\text{-}\mu OH]\cdot 4H_2O$. Liganzii H_3L2, H_2L3 și complecșii de cupru(II) au fost supuși testărilor privind activitatea antimicrobiană contra unui șir de bacterii și fungi fitopatogeni (*Erwinia carotovora, Xantomonas campestris, Candida albicans, Saccharomyces cerevisiae*) prin metoda diluțiilor succesive duble în soluții apoase. Rezultatele testării relevă că dimerii de cupru, pe bază de bis(semicarbazona) 2,6-diformil-4-metilfenolului, posedă o activitate antimicrobiană nepronunțată. Liganzii bis (semicarbazona)-2,6-diformil-4-metilfenolului și S-metilizotiosemicarbazona aldehidei 2,6-formil-4-metilsalicilice nu posedă o activitate biologică față de microorganismele sus-menționate.

În baza acidului salicilic ($SalH_2$) a fost obținut un compus cu compoziția $[Fe_4O_2(Sal)_4(H_2O)_6]\cdot 4DMA\cdot 0.75H_2O$. Studiul cu raze X indică faptul că compusul conține patru atomi de fier(III) și reprezintă o entitate tetranucleară de tip "fluture" în care patru atomi de fier sunt fixați cu două centre μ_3-oxo și zece liganzi (4 salicilici și 6 molecule de apă). La interacțiunea NH_4Sal cu nitrat de fier, în amestec de solvenți organici a fost obținut complexul $[Fe_3O(SalH)_7]\cdot 4DMA\cdot 2H_2O$, structura căruia a fost confirmată prin difracția cu raze-X. În structura cristalină se conține nucleul planar central $[Fe_3(\mu_3\text{-}O)]^{7+}$ și liganzii salicilici, care se află deasupra și sub acest plan, iar cei trei ioni de Fe^{3+} ocupă vârfurile triunghiului isoscel.

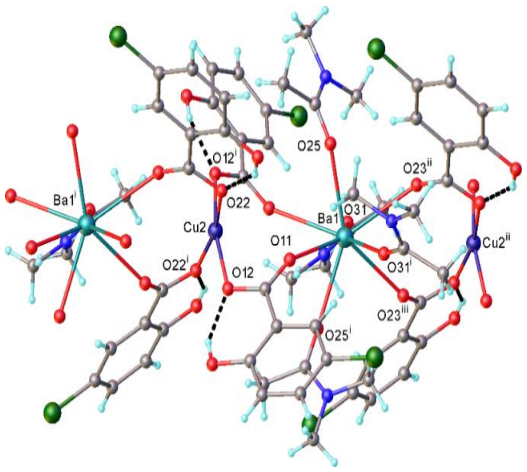

Fig 1. Structura moleculară a complexului [CuBa(5-ClSalH)$_4$(DMA)$_4$]

În baza acidului 5-clorsalicilic (5-clorSalH), din amestecul de solvenți CH_3OH:DMA:H_2O (5:1:5) a fost obținut un compus heteronuclear de culoare albastră, cu compoziția [CuBa(5-ClSalH)$_4$(DMA)$_4$]. Caracterizarea compusului dat prin spectroscopia în IR denotă ca acidul 5-clorSalH coordinează în modul punte bidentată. Analiza prin difracția cu raze X a dovedit că compusul este heteronuclear și conține ioni de Cu^{2+} și Ba^{2+} cu compoziția [CuBa(5-ClSalH)$_4$(DMA)$_4$]. Structura cristalină a compusului binuclear este prezentată în Figura 1. Raportul Cu:Ba:5-ClSalH:DMA în compus este 1:1:4:4, unde grupa carboxilică a acidului 5-ClSalH este bideprotonată, iar grupa OH este protonată și nu participă la coordinare.

Modurile variate de coordinare a acizilor carboxilici au determinat alegerea acidului dicarboxilic cu compoziția HOOC-(CH_2)$_8$-COOH, în calitate de ligand polidentat. La interacțiunea metalelor tranziționale și anume sărurilor de Mn(II), Ni(II) și Co(II) cu acidul sebacic (H_2Seb) în prezență de fenantrolină (o-phen) prin metoda solvotermală a fost sintetizat un compus polimeric tridimensional cu compoziția [Ni_3(seb)$_3$(phen)$_2$]$_n$, unde o-phen = $C_{12}H_8N_2$; Seb = OOC-C_8H_{16}-COO. Conform datelor obținute în baza analizei cu raze X pe monocristal, compusul este izostructural cu compusul de cobalt raportat anterior. În structura cristalină a compusului, trei atomi de nichel(II) sunt uniți prin șase punți carboxilice ale acidului sebacic.

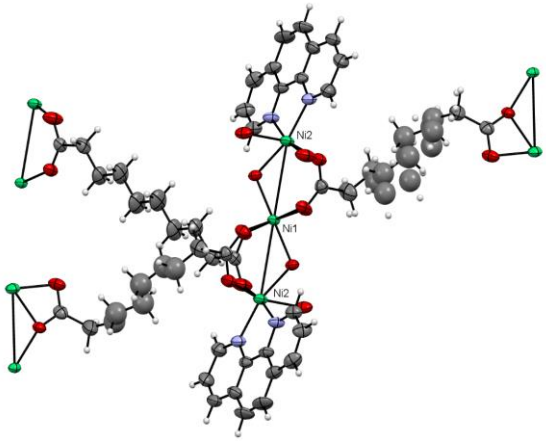

Fig. 2. Structura cristalografică pentru [Ni_3(seb)$_3$(phen)$_2$]n

Patru grupări carboxilice joacă rolul de punți bidentate de tip μ2-η1:η1 iar celelalte două grupări carboxilice joacă rolul de punți bidentate de tip μ2-η2:η1. Totodată atomii de nichel terminali coordonează cu câte o moleculă de fenantrolină. Astfel atomul de metal central are o înconjurare octaedrică formată din 6 atomi de oxigen ce provin din grupele carboxilice, iar atomii de nichel terminali au o înconjurare octaedrică distorsionată formată de 6 oxigeni de tip carboxilic și 2 atomi de azot fenantrolinic. Structura cristalografică a compusului obținut este prezentată în Figura 2.

Astfel în baza ligandului 2′,3′,5′,6′-tetrametilterfenil-4,4″-dicarboxilic(H_2L) au fost sintetizați 6 polimeri coordinativi ai Zn(II) și Co(II) cu liganzi de punte de tipul 1D, 2D și 3D, și caracterizați prin spectroscopia IR, termogravimetrie și difracția cu raze X pe monocristal. Ligandul dicarboxilic formează cu Zn(II) și Co(II) structuri în formă de zigzag, polimeri în formă de roată cu palete (paddle-wheel). Astfel, ligandul terfenilic leagă blocurile secundare într-o rețea (4,4) 2D, care este suplimentar conectată cu liganzi aminici pentru a oferi structuri 3D cu strat de coloane și rețele interpenetrate. Polimerii coordinativi cu formula generală [Ln_3L_4(NO_3)(DMF)x

$(H_2O)]_n$ (x = 2 sau 3, Ln = La(III), Ce(III), Nd(III), Sm(III), Tb(III) și Dy(III)) au fost obținuți printr-o reacție solvotermală modulată cu acid azotic, care a fost condusă la 120 ° C într-un amestec DMF-etanol. Conform cristalografiei cu raze X, compoziția chimică și echilibrul sarcinii pentru compușii Ln(III) sunt în acord cu formula generală $[Ln_3L_4(NO_3)(DMF)_x(HO)]_n$ (x = 2 sau 3). Rezultatul studiului difracției cu raze X este ilustrat în Figura 3.

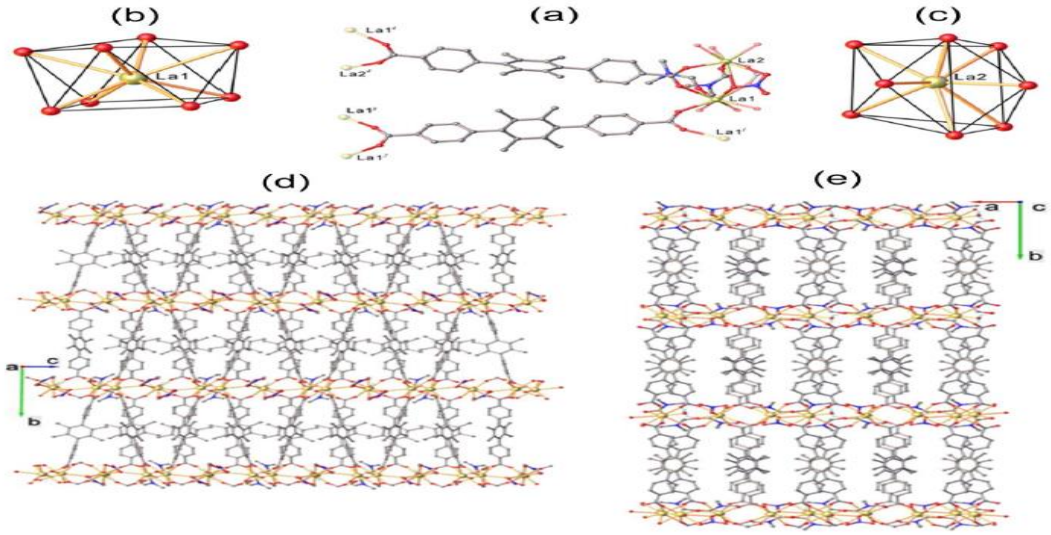

Fig. 3. (a) O vedere a părții asimetrice care prezintă modul de coordinare al atomilor de La. (b) poliedrul de coordinare al atomului de La1; (c) poliedrul de coordinare al atomului La2; (d) o vedere parțială a împachetării în cristal de-a lungul axei **a**; (e) o vedere parțială a împachetării în cristal de-a lungul axei **c**.

Partea asimetrică (Figura 3a) cuprinde doi ioni de La(III) și două molecule de ligand deprotonate L^{2-}. Unul dintre atomii La ocupă o poziție generală cu ocuparea completă a amplasamentului, în timp ce al doilea are o ocupare fracționată de 0,5, așa cum este dezordonat între două poziții echivalente peste centrul de inversie. În plus modul de coordinare al atomilor de Ln implică două molecule DMF ca liganzi monodentați și un anion NO_3^- coordinat în modul μ_2-κ^3O,O':O tridentat. În concordanță cu pozițiile atomului La, una dintre moleculele DMF și anionul nitrat ocupă două poziții simetrice cu un factor de ocupare de 0,5. Ambii linkeri cristalografic independenți L^{2-} se comportă ca liganzi tetradentați al căror grupe carboxilice sunt coordinate în modul κ^2O,O' bidentat de punte. Deși ambii atomi prezintă la fel numărul de coordinare (adică 8), poliedrul lor de coordinare este diferit. Înconjurarea atomului de La1 poate fi descrisă ca o antiprismă tetragonală ușor distorsionată (Figura 3b), în timp ce coordinarea poliedrului atomului de La2, care este format din opt atomi de oxigen (Figura 3c). În cristal, liganzii ditopici L^{2-} cu site-uri de coordinare similare sunt legați de atomii de La în mod linear generând o rețea de coordinare 3D densă. Punctele de vedere parțiale ale împachetărilor în cristal, care arată topologia acestor polimeri de coordonare 3D sunt ilustrate în Figurile 3d și 3e.

7 noi rețele metal-organice (MOF) cu Lantanide (Ln(III), Ce(III), Nd(III), Eu(III), Gd(III), Dy(III) și Ho(III)] și ligandul 1,3,5-tris (4-carboxifenil)-2,4,6-trimetilbenzen au fost sintetizate în condiții solvotermale și pe deplin caracterizate. Analiza difracției cu raze X a confirmat formarea

rețelelor 3D ale $[LnL(H_2O)_2]_n \cdot xDMF \cdot yH_2O$ pentru Ln = La, Ce și Nd. Din experimentele de adsorbție s-a demonstrat că compușii posedă porozitate permanentă cu suprafețe de adsorbție (BET) de aproximativ 400 m^2/g și stabilitate termică până la 500°C. Testările activității catalitice a polimerilor coordinativi Ln-MOF sintetizați în calitate de catalizatori în cataliza eterogenă la reacția de conversie a 2-naftol în acetat 2-naftil cu $(CH_3COO)_2O$ au demonstrat o activitate sporită în acest proces sporind randamentul conversiei până la 96-98%.

Patru noi rețele metal-organice 3D și supramoleculare bazate pe ligandul 3,3', 5,5'-tetrakis (4-carboxifenil)-2,2',4,4',6,6'-hexametil-1,1'-bifenil (H_4BF) cu metalele s (Na, Mg și Ca) au fost obținute și complet caracterizate. Ligandul policarboxilat acționează ca o punte între patru ioni de Na^+pentru a forma o rețea extinsă de coordonare 3D cu topologie (4,4). În compusii cu Mg^{2+}, doi cationi complecși $[Mg(H_2O)_6]^{2+}$ și trei molecule de ligand formează o rețea supramoleculară 3D consolidată printr-un sistem multiplu de legături de hidrogen. Structura cristalină a compusului cu Ca^{2+} include trei entități moleculare $[Ca(H_2L)(H_2O)_{4.5}(DMF)_{0.5}]$ și o catenă elicoidală de coordonare-polimerică $[Ca(H_2L)(H_2O)_5]_n$. Structura cristalină a compusului este descrisă ca o arhitectură supramoleculară. Deasemenea, au fost efectuate sinteze solvotermale cu ligandul H_4BF și săruri ale Mn(II), Co(II), Cu(II) și Zn(II) folosind ca solvent DMF sau DEF. În toate cazurile au fost obținute produse microcristaline și s-a reușit obținerea monocristalelor. Studiul cu raze X a demonstrat obținerea unor polimeri coordinativi 3D ai Mn(II), Co(II), Cu(II) și Zn(II) în baza ligandului H_4BF. Structura acestora reprezintă o rețea coordinativă, cu goluri mari, fără molecule de cristalizare. În Fig. 4 sunt prezentați fragmentul rețelei coordinative (a) și proiecția structurii cristaline a complexului CoTCMES (b). Toti patru compuși au fost caracterizati și prin spectroscopia IR.

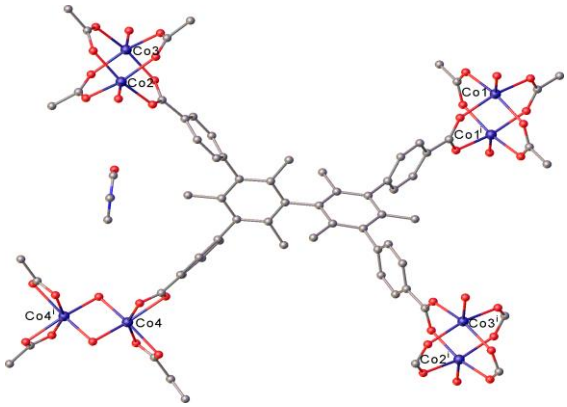

Fig. 4a. Fragment al rețelei coordinative din complexului de cobalt.

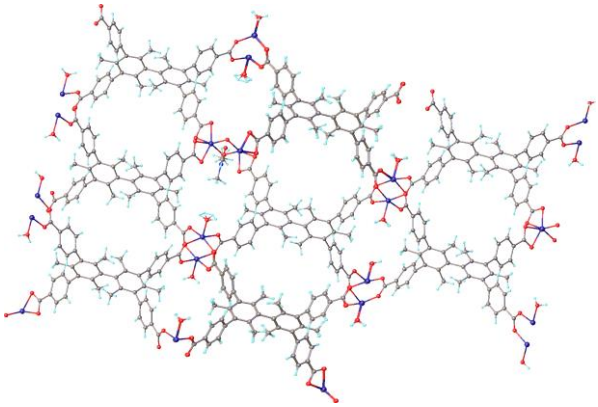

Fig. 4b. Proiecția structurii cristaline a complexul de cobalt.

La interacțiunea salicilatului de calciu(II) cu nitrat de fier(III) au fost izolate cristale de culoare roșie sub formă de prisme rectangulare. Compusul a fost caracterizat prin spectroscopia IR. Prin difracție de raze X pe monocristal a fost stabilită compoziția compusului $\{[FeCa_2(Sal)_2(SalH)_3(DMA)_2(CH_3OH)_2]\}_n$.

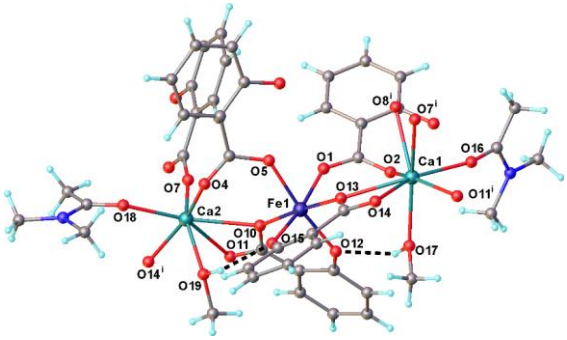

Figura 5. Structura polimerică a compusului $\{[FeCa_2(Sal)_2(SalH)_3(DMA)_2(CH_3OH)_2]\}_n$

Ionul de fier(III) are înconjurare octaedrică, cu numărul de coordinare 6, iar ionii de calciu au numărul de coordinare (NC) diferit: Ca1 are NC=8, iar Ca2 are NC=7. (Fig. 5)

O serie de sinteze solvotermale au fost efectuate folosind *acidul 5-(4-carboxi-5-metil-1H-1,2,3-triazol-1-il)izoftalic*) (LT) și săruri de metale ($Cd(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$, $Cu(NO_3)_2 \cdot 3H_2O$, $Co(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$) în amestec de solvenți. Astfel au fost izolate monocristale de Cd de culoare alb-gălbui, care au fost caracterizate prin spectroscopia în IR. Structura cristalină a polimerului de coordinare al LT cu cadmiu(II) a fost stabilită prin difracție cu raze X pe monocristal, care a confirmat că compusul are structură polimerică 3D cu compoziția $[(Cd_3L_2(H_2O)_6] \cdot 1.5H_2O$, în care cei trei ioni de cadmiu(II) sunt uniți prin punți carboxilice (Figura 6).

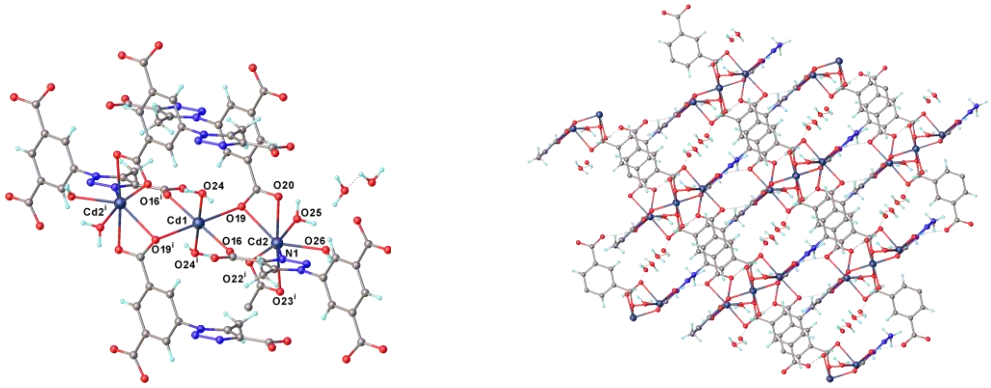

Figura 6. Structura polimerică a compusului $[(Cd_3L_2(H_2O)_6] \cdot 1.5H_2O$

Folosind LT și nitratul de cobalt(II) în amestecul de LiOH și H_2O au fost izolate monocristale de culoare vișiniu aciculare. Compusul a fost caracterizat prin spectroscopia IR. Datele analizei difracției cu raze X pe monocristal a demonstrat că compusul are o structură polimerică 3D cu compoziția $\{[(Co_4(L)_2(H_2O)_2] \cdot 3H_2O\}_n$ în care fragmentul tetranuclear de cobalt $\{Co_4(OH)_2\}$ și acidul 5-(4-carboxi-5-metil-1*H*-1,2,3-triazol-1-il)izoftalic deprotonat sunt legați unul de celălalt prin intermediul grupelor carboxilice (Fig. 7). Grupele hidroxil de la inelul izoftalic formează punți între ionii Co1(II) și Co2(II), iar un atom de azot și un atom de oxigen de la grupa carboxil a triazolului formează legătură de tip chelat cu ionul de Co1(II) (Figura 7).

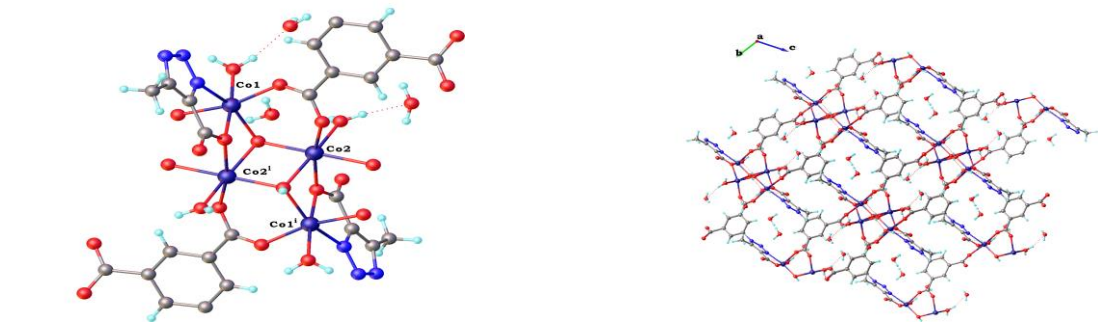

Figura 7. Structura polimerică a compusului $[(Co_2(L)_2(H_2O)_2] \cdot 3H_2O$

La interactiunea metalelor tranziționale Cd(II), Zn(II), Cu(II), Co(II) și a lantanidelor Ce(III), Nd(III), Eu(III), Gd(III) cu acidul 5-(4-carboxifenil)1-fenil-1H-pirazol-3-carboxilic (H_2L) prin metoda solvotermală au fost obținuți unii compușii polimerici tridimensionali. În

calitate de solvenți au fost folosiți: DMF, DEtFM, CH_3OH, CH_3CH_2OH, H_2O, DMSO, LiOH în diferite rapoarte. În calitate de modulator s-a utilizat acidul azotic sau acidul acetic.

Compușii coordinativi poroși cu compoziția $[Ln(HL)(L)]\cdot 20H_2O$ s-au obținut la interacțiunea sărurilor de azotat de lantanide (Ln = Eu, Ho, Tb și Gd) cu H_2L în amestecul de solvenți DMF/apă în prezența modulatorului acidul azotic la temperatura de 120 °C. Analiza cristalelor prin difracția cu raze X pe monocristal a demonstrat, că ligandul coordinează tridentat în care o grupă carboxilică coordinează în mod chelat, iar cealaltă în mod punte, în timp ce atomul de azot liber nu participă la formarea legăturilor coordinative (Fig. 8). Numărul de coordinare a ionului metalic este opt, fiind generat de opt atomi de oxigen a grupelor carboxilice ce provin de la patru molecule de ligand, datorită căruia se formează rețeaua coordinativă tridimensională. Structura compușilor obținuți este caracteristică unei rețele metal-organice cu pori voluminoși (după cum poate fi observat în orientarea după axa c), care ar putea genera o porozitate mare a compusului respectiv și o capacitate mare de adsorbție a gazelor.

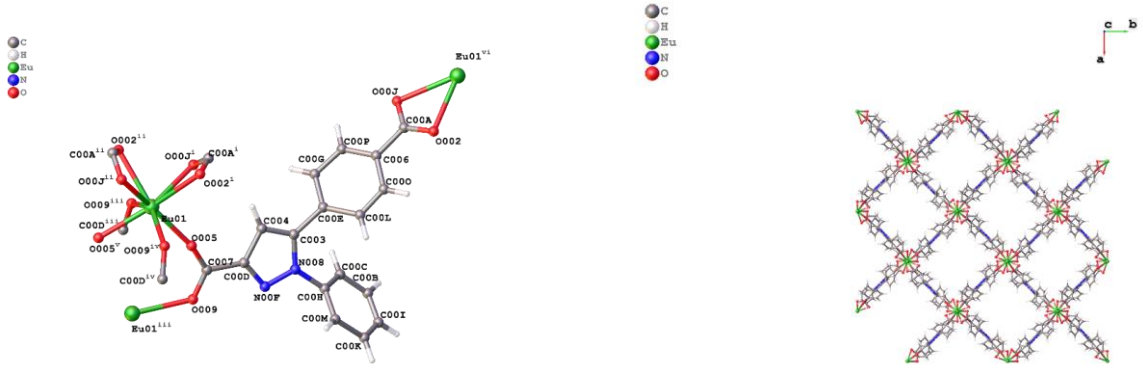

Fig. 8. Structura compusului $[Eu(HL)(L)]\cdot 20H_2O$ (mod de coordinare și orientare după axa *c*)

Compusul $[Cd(L)(H_2O)_2]\cdot nH_2O$ s-a sintetizat din amestecul de solvenți DMF/apă, în prezența modulatorului acid azotic, la temperatura de 80 °C timp de 24 ore. Conform datelor obținute în baza analizei cu raze X pe monocristal (Fig. 9), în structură sunt prezenți doi atomi de Cd cu numere de coordinare diferite, Cd cu numărul de coordinare opt, fiind înconjurat de patru grupe carboxilat chelate și Cd1 cu numărul de coordinare șase fiind înconjurat de doi atomi de azot a două molecule de ligand, doi atomi de oxigen a două grupări carboxilice monodentat punte, și două molecule de apă (Fig. 9).

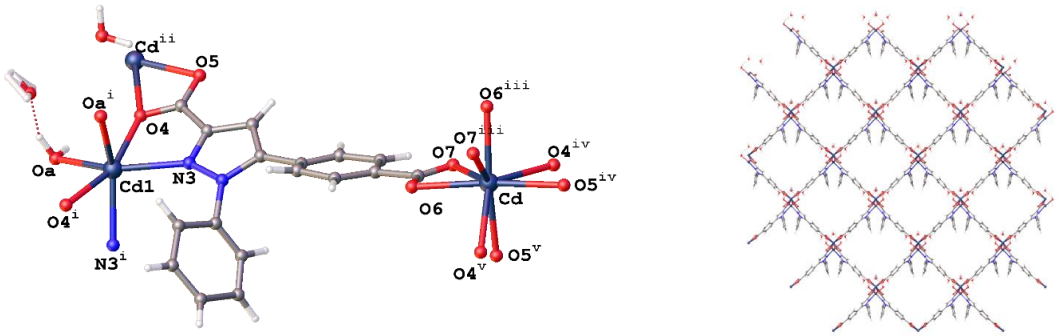

Fig. 9. Structura compusului $[Cd(L)(H_2O)_2]\cdot nH_2O$ (mod de coordinare și orientare după axa a)

4. **Impactul științific**, **social și/sau economic al rezultatelor științifice obținute** în cadrul proiectului

Impactul științific/tehnologic urmărit constă în elucidarea principiilor de construire în condiții de laborator a polimerilor coordinativi poroși, hidrolitic și termic stabili cu diverși liganzi, care conțin diverse grupe funcționale (carboxilat, triazoli, pirazoli, fosfonați, etc.). Cunoașterea acestor principii v-a duce la crearea mostrelor pentru realizarea proceselor de stocare a gazelor (hidrogenul, metanul, oxidul și bioxidul de carbon) importante pentru energetica viitorului și rezolvarea problemelor ecologice ce țin de arderea combustibilului fosil. **Impactul social** în realizarea proiectului constă în atragerea tinerilor în activități de cercetare și inovare necesare la etapa actuală. În proiect activează 4 tineri specialiști (31% din echipa din proiect o constituie tinerii sub 40 ani). În cadrul proiectului au fost sustinute patru teze de master, o teză de doctor și o teză de doctor habilitat. **Impactul economic** se poate regăsi la nivelul utilizării combinațiilor complexe în calitate de inhibitori ai coroziunii oțelurilor, a unor noi catalizatori specifici pentru cataliza eterogenă în baza polimerilor coordinativi poroși, a complecșilor cu Baze Schiff și nanoparticulelor ca catalizatori în procese biologice sau substanțe fiziologic active

5. **Infrastructura de cercetare utilizată în cadrul proiectului (opțional)**

Spectroscopia în IR, UV/Vis, RMN, RES, analiza elementală, Difracția cu raze X pe pulbere și monocristal, termogravimetria, Ciclo-Voltamperometria, magnetochimia, spectroscopia electronică SEM, TEM, EDAX, Autosorber, Determinarea punctului de topire.

6. **Colaborare la nivel național/ internațional în cadrul implementării proiectului (după caz)**

Colaborarea internaţională:

- Universitatea din Dusseldorf (Germania)
- Universitatea din New Castel (Anglia)
- Universitatea din Saragoza (Spania)
- Universitatea din Viena (Austria)
- Centrul National pentru Cercetări Științifice, Grenoble (Franța)
- Institutul de Chimie Macromoleculară „*Petru Poni*” din Iaşi (România)
- Universitatea „*Alexandru Ioan Cuza”* din Iaşi (România),

Colaborarea naţională:

- Facultatea de Chimie şi Tehnologie Chimică al USM;
- Iniversitatea ”Ion Creangă” din Chișinău,
- Institutul de Microbiologie şi Biotehnologie;
- Institutul de Fizică Aplicată al USM

- Universitatea de Medicină „*N.Testimeţeanu”*din Chișinău

7. **Dificultățile în realizarea proiectului,** Financiare, organizatorice, legate de resursele umane etc. (după caz)
   - O dificultate importanta este atragerea tineretului în activități de cercetare și inovare, cauza majoră fiind salariile mici și condiții de trai dificile.
   - Tergiversarea deschiderii finanțării instituționale și în consecință lipsa reagenților pentru realizarea obiectivelor conform planului de activitate a proiectului.
   - Lipsa atelierului de sticlărie atât pentru reparații a sticlăriei chimice deteriorate, cât și pentru a face veselă chimică specială pentru microtehnici de laborator (sinteză, separare)

8. **Diseminarea rezultatelor obținute în proiect în formă de publicații** (obligatoriu)

Lista publicațiilor pentru anii 2020-2023 în care se reflectă doar rezultatele obținute în proiect, perfectată conform cerințelor față de lista publicațiilor (a se vedea Anexa nr.2)

Notă: Lista va include și brevetele de invenții și alte obiecte de proprietate intelectuală, materiale la saloanele de invenții (conform Anexei 2)

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

➢ Manifestări științifice internaționale (în străinătate)

1. MÎNDRU, A.; MALAESTAN, I.; DRAGANCEA, D.; SHOVA, S. Synthesis and crystal structure of a hetrometallic hexanuclear [Ni4Dy2] complex. XXVIII Международная Чугаевская конференция по Координационной химии, 03 - 08 октября 2021 года, Туапсе, Ольгинка, Краснодарский край, Россия, Сборник тезисов, p. 331.
2. TALMACI, N., DRAGANCEA, D., SHOVA, S., ZELLERB, M., ADDISON, A.W. Heterobimetallic potassium-dioxovanadium(V) carbo- and thiocarbohydrazone based coordination networks. 12th International Vanadium Symposium, 3-5 november 2021 (online).

➢ Manifestări științifice internaționale (în Republica Moldova)

1. DRUȚĂ, V., LOZAN, V. New Functionalized Derivatives of Bimesitylene as Precursor for Obtaining of Polyfunctional Ligands. In: Proceedings of the International Conference MODERN TECHNOLOGIES IN THE FOOD INDUSTRY–2022 (MTFI – 2022), 20–22 October, 2022, Chişinău, Republic of Moldova, p.81

➢ Manifestări științifice naționale

1.DZÎGOVSCHII, C.; DRUȚĂ, V. Sinteza și studiul compușilor coordinativi polimerici ai metalelor de tranziție cu ligandul acidul 4′-(2H-tetrazol-5-il) bifenil-4-carboxilic și ligandul acidul 1-(4-carboxifenil)-5-metil-1H-1,2,3-triazol-4-carboxilic. Conferința Științifică a Studenților și Masteranzilor „Viitorul ne aparține", ediția a X-a. Chișinău, 20 mai 2020, p.74.

- Manifestări științifice cu participare internațională

1.POPA, T. Sinteza și studiul combinațiilor complexe ale unor metale 3d cu liganzi în baza tiosemicarbazidei și 2,6-diformil-4-metilfenolului", Conferința Științifică a studenților și masteranzilor cu participare internațională cu genericul „Viitorul ne aparține'', ediția a X-a, Chișinău, 2020, p. 80

2.SÎRBU, T.: TIMUȘ, I.; GORINCIOI, V.; MOLDOVAN, C.; ȚURCAN, O. Impactul Nanoparticulelor de Fe2CuO4 și Fe2ZnO4 asupra micetelor din genul Trichoderma. Simpozionul 9 Științific Internațional "Protecția plantelor – realizări și perspective" 27-28 octombrie 2020, Chișinău. p.35-39.

3.SÎRBU, T.; GORINCIOI, V.; MOLDOVAN, C.; ȚURCAN, O.; TIMUȘ, I. Studiul viabilității tulpinilor de micromicete cultivate pe medii cu nanoparticule, Conferința științifică națională cu participare internațională. Integrare prin cercetare și inovare. Universitatea de Stat. 11-12 noiembrie 2020, Chișinău., p.138-140.

4.SÎRBU, T.; MOLDOVAN, C.; ȚURCAN, O.; TIMUȘ, I.; GORINCIOI, V. Activitatea antifungică a micromicetelor după lifilizare și conservare în prezența nanoparticulelor. Simpozion Științific Național cu participare Internațională . Biotehnologii moderne – Soluíi pentru provocările lumii contemporane. Institutul de Microbiologie și Biotehnologie. Chișinău, 2021, 20-21 mai (ONLINE) https://doi.org/10.52757/imb21.056

Seminar științific cu participare internațională, în regim online, cu genericul: *"Omagiu academicianului Constantin Turtă - 80 ani de la naștere",* organizat în cadrul proiectului cu titlul: "Materiale noi în baza combinațiilor complexe a metalelor cu liganzi polifuncționali în calitate de polimeri poroși, catalizatori, substanțe biologice și compuși nanostructurați" 20.80009.5007.04, Program de stat (2020-2023), 20 decembrie 2020 (în calitate de organizator). https://us02web.zoom.us/j/82786430485.

10. Aprecierea și recunoașterea rezultatelor obținute în proiect (premii, medalii, titluri, alte aprecieri).

1. JOVMIR T.; POPA T.; LUPAȘCU L.; BĂLAN G.; BURDUNIUC O.; GULEA A.; LOZAN V. Water-soluble dicopper complex having selective antimicrobian activity against medical and agricultural pathogenes. Medalie de aur în cadrul Expoziției internaționale EUROINVENT-2020, ediția a 12 (21-23 mai, Iași, România)
2. GORINCHOY, V.; LOZAN, V.; BURDUNIUC, O.; BALAN, G.; TSAPCOV, V.; GULEA, A. Iron polynuclear salicylate complex as inhibitor of the proliferation of fungi

of the species Cryptococcus neoformans. Medalie de argint în cadrul Expoziției internaționale EUROINVENT-2020, ediția a 12 (21-23 mai, Iași, România) Poste

3. GORINCHOY, V.; LOZAN, V.; BURDUNIUC, O.; BALAN, G.; TSAPCOV, V.; GULEA, A. Inhibitor of the proliferation of fungi of the species Cryptococcus Neoformans. Medalie de argint în cadrul Expoziției internaționale EUROINVENT-2020, ediția a 12 (21-23 mai, Iași, România)
4. Medalie de aur și Diplomă de performanță la Expoziția Internațională INVENTICA de la Iași 29-31 iulie, 2020, pentru posterul: JOVMIR T.; POPA T.; BĂLAN G.; BURDUNIUC O.; LUPAȘCU, L.; DRUȚĂ, V.; GULEA A.; LOZAN V. Complex binuclear de cupru hidrosolubil în calitate de remediu antimicrobian pentru domeniul medicinii și agriculturii.
5. GULEA, A.; GORINCIOY, V.; BURDUNIUC, O.; TSAPCOV, V.; BALAN, G.;LOZAN, V. Inhibitors of the proliferation of fungi of the species Cryptococcus neoformans. Medalie de aur la Expoziția Internațională INVENTICA de la Iași 29-31 iulie, 2020,
6. JOVMIR T.; POPA T.; BĂLAN G.; BURDUNIUC O.; LUPAȘCU, L.; DRUȚĂ, V.; GULEA A.; LOZAN V. Complex binuclear de cupru hidrosolubil în calitate de remediu antimicrobian pentru domeniul medicinii și agriculturii. Medalie de aur la Salonul Internațional de Invenții și Inovații ,,Traian Vuia,,Timișoara, 13-15 octombrie 2020, România
7. GORINCHOY, V.; LOZAN, V.; BURDUNIUC, O.; BALAN, G.; TSAPCOV, V.; GULEA, A. Inhibitor of the proliferation of fungi of the species Cryptococcus neoformans. Medalie de aur la Salonul Internațional de Invenții și Inovații ,,Traian Vuia,,Timișoara, 13-15 octombrie 2020, România,
8. LOZAN, V., PARSHUTIN, Vl., COVALI, Al., JOVMIR, T. Process for corrosion protection of steel in water. Medalie de Aur la Expoziția Internațională EUROINVENT, ediția a 13-a, 20-22 mai, 2021, Iași, România.
9. JOVMIR, T., POPA, T., BĂLAN, G., BURDUNIUC, O., LUPAȘCU, L., DRUȚĂ, V., GULEA, A., LOZAN, V. Complex binuclear de cupru hidrosolubil cu activitate antimicrobiană. Catalogul Salonului cercetării ştiinţifice, inovării şi inventicii ProInvent, Ediţia a XIX-a , Cluj-Napoca, România, 20 – 22 octombrie 2021, Cluj, România, p.123. Premiul special "Constantin Marin Antohi" la Salonul cercetării ştiinţifice, inovării şi inventicii ProInvent, Ediţia a XIX-a, 2021, Cluj-Napoca, România.
10. Druta V. Diploma de Recunoștință a Prezidiului Academiei de Științe a Moldovei (04 iunie 2021)
11. STAFI, R., ŞOVA, S., NOVIȚCHI, Gh., DRAGANCEA, D. Medalie de Aur . Nitrat de aquametanolnitrato- bis (izonicotinoilhidrazon)-2,6-diacetilpiridindisproziu(III) monohidrat, care manifestă proprietăţi de magnet monomolecular. Salonul Internațional de Invenții și Inovații ”Traian Vuia”, 12-14 octombrie 2021, Timișoara (online).
12. STAFI, R., ŞOVA, S., NOVIȚCHI, Gh., DRAGANCEA, D. Medalie de bronz. Nitrat de aquametanolnitrato- bis (izonicotinoilhidrazon)-2,6-diacetilpiridindisproziu(III)

monohidrat, care manifestă proprietăţi de magnet monomolecular. Expoziția Internațională Specializată „INFOINVENT”, 17-20 noiembrie 2021, Chișinău.

13. LOZAN, V., PARSHUTIN, Vl., COVALI, Al., JOVMIR, T. Medalie de Argint. Procedeu de protectie a otelului de coroziune in apa. Expoziția Internațională Specializată „INFOINVENT”, 17-20 noiembrie 2021, Chișinău.
14. Diploma de Excelență ANACEC acordata D-lui Lozan Vasile, pentru lucrarea de doctor habilitat în științe chimice Studiul compușilor coordinativi macrociclici și cu contur deschis ai unor metale în baza 2,6-diformiltiofenolului.
15. LOZAN, V., PARSHUTIN, Vl., COVALI, Al., JOVMIR, T. Medalie de Aur. Process for corrosion protection of steel in water. Expoziția Internațională EUROINVENT, ediția a 14-a, 27-28 mai, 2022, Iași, România.
16. LOZAN, V., PARSHUTIN, Vl., COVALI, Al., JOVMIR, T. Medalie de Aur. „Procedeu de protecție a oțelurilor contra coroziunii în apă” Salonul Internațional de Invenții și Inovații „Traian Vuia„Timișoara, ediția a VIII-a, 08-10 octombrie 2022, România.
17. LOZAN, V., PARSHUTIN, Vl., COVALI, Al., JOVMIR, T. „Process for corrosion protection of steel in water” Medalie de Aur la Expoziția Internațională de Creativitate și Inovare EUROINVENT, ediția a 15-a, 11-13 mai, 2023, Iași, România
18. LOZAN, V., PARSHUTIN, Vl., COVALI, Al., JOVMIR, T. „Process for corrosion protection of steel pipes in water” **Premiul Special al Universității “Titu Maiorescu”, București**, România, la Salonul Internațional de Invenții și Inovații „Traian Vuia”, ediția a 9-a, 16-18 iunie, 2023, Timișoara, România,
19. GORINCHOY, V., LOZAN, V., BURDUNIUC, O., BALAN, G., TSAPCOV, V., GULEA, A. Compartimentul I Secțiunea A.Inhibitors of the proliferation of fungi of the species Cryptococcus neoformans. Medalie de Aur La Expoziția „INFOINVENT”, ediția a XVII-a, din 22-24 noiembrie 2023: Chișinau, R.Moldova, pag. 37.
20. GORINCIOI Viorina, DIPLOMĂ DE ONOARE a Ministerului Educației și Cercetării, pentru rezultate remarcabile obținute în cercetare-inovare cu prilejul Zilei Științei în Republica Moldova.
21. GORINCIOI, Viorina, **Diploma de Excelență ANACEC,** pentru lucrarea de doctor.
22. LOZAN, Vasile. **Diploma de Excelență ANACEC** consultant stiintific.

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

Nu s-au efectuat

12. Teze de doctorat / postdoctorat susținute și confirmate pe parcursul anilor 2020-2023 de membrii echipei proiectului

Lozan Vasile, Studiul compușilor coordinativi macrociclici și cu contur deschis ai unor metale în baza 2,6-diformiltiofenolului, **Teză de doctor habilitat** în științe chimice (susținută la 20 ianuarie 2021)

Gorincioi Viorina, Sinteza și studiul combinațiilor complexe polinucleare ale metalelor –s și – d cu acidul salicilic și derivații lui. **Teză de doctorat**. Consultant științific: Doct hab. științe chimice, Lozan Vasile (2022)

13. Materializarea rezultatelor obținute în proiect (cu specificarea aplicării în practică)

Au fost pregătite și susținute 3 teze de masterat:

1. DZÎGOVSCHII Cristina. Sinteza și studiul compușilor coordinativi polimerici ai metalelor de tranziție cu liganzi policarboxilici. Chisinau, USDC, 2020, 54 p.

2. POPA TATIANA, Sinteza şi studiul combinațiilor complexe ale unor metale 3d culiganzi în baza tiosemicarbazidei și 2,6-diformil-4-metilfenolului Chisinau, USDC, 2020, 65 p.

3. CEBAN ANA „Compuși coordinativi ai Dy(III), Er(III) și Eu(III) cu liganzi în baza semicarbazidei", Universitatea de Stat "Dimitrie Cantemir", Chișinău, 2020, 62 p.

14. Informație suplimentară referitor la activitățile membrilor echipei

1. Președinte la Comisia de Stat pentru susținerea tezelor de licență și masterat a Universității de Stat din Moldova, iunie 2020, 2021, 2022. (Dr.hab. Lozan V.)
2. Referent oficial și membru al Consiliului Științific de susținere a tezei de doctor Rusnac Roman USM (Lozan Vasile)
3. Referent oficial și membru al Consiliului Științific de susținere a tezei de doctor:
   - Usataia Irina,Universitatea de Stat din Moldova (Dr.hab. Lozan Vasile)
   - Ureche Dumitru, Institutul de Chimie (Dr.hab. Lozan Vasile)
4. Președinte al Consiliului Științific de susținere a tezei de doctor a D-nei POPA Nelea (Dr.hab. Lozan V.).
5. Expert ANCD (Dr.hab. Lozan V.)
6. Membru al colegiului de redacție al revistei Chemistry Journal of Moldova, (Dr.hab. Lozan V.)
7. Membru al Comitetului de organizare al Conferinței Naționale cu participare internațională "Materiale Avansate în Biofarmaceutică și Tehnică", Chișinău, 26 mai 2021. (Lozan, V.)
8. Membru al Consiliul Științific de susținere al tezei de doctor, Melnic E. (Lozan, V.).
9. Expert la seminarul de profil la prezentarea tezei de doctor. V.Gorincioi. (Melnic S.)

15. Recomandări, propuneri. --

- O dificultate importanta este atragerea tineretului în activități de cercetare și inovare, cauza majoră fiind salariile mici și condiții de trai dificile.
- Tergiversarea deschiderii finanțării instituționale și în consecință lipsa reagenților pentru realizarea obiectivelor conform planului de activitate 2023.

- Lipsa utilajului modern de laborator pentru realizarea unor operaţii chimice, aşa ca încălzirea avansată cu ajitare magnetică, rotovaporizare etc.
- Lipsa atelierului de sticlărie atât pentru reparaţii a sticlăriei chimice deteriorate, cât şi pentru a face veselă chimică specială pentru microtehnici de laborator (sinteză, separare)

16. Concluzi

• Au fost obţinuţi polimeri coordinativi poroşi noi ai unor elemente 3d, s şi lantanide (52 compuşi) în baza liganzilor ce conţin grupe carboxilice şi/sau atomi de azot donori, cu porozitate permanentă, hidrolitic şi termic stabili. Aceştea pot fi utilizaţi ca potenţiali sorbenţi pentru realizarea procesului de stocare a gazelor şi în calitate de catalizatori în procesele eterogene de acilare. Investigarea proprietăţilor luminiscente a polimerilor coordinativi ai lantanidelor au demonstrat, că compuşii care conţin La^{3+}, Nd^{3+} şi Gd^{3+} posedă doar emisia asociată cu ligandul organic, iar polimerii care conţin Eu^{3+} şi Tb^{3+} prezintă radiaţii pure centrate pe metal, în timp ce reţelele polimerice care conţin Dy^{3+} şi Sm^{3+} prezintă luminiscenţă dual centrată pe metal şi ligand

• A fost realizată sinteza combinaţiilor complexe polinucleare a unor metale 3d şi s (21 compuşi) în baza liganzilor ce conţin atomii donor S, C, O, N şi de tip Baze Schiff. Aceştea posedă proprietăţi sporite antibacteriene faţă de bacterii şi fungi, proprietăţi inhibitoare al proliferării fungilor în procese biologice şi pot servi ca potenţiali catalizatori ai proceselor redox sau în calitate de magneţi moleculari.

• Combinaţiile complexe heteronucleare ale manganului(II), nichelului(II) şi cobaltului(II) în baza acidului sebacic şi o-fenantrolină, caracterizaţi prin difracţia cu raze X posedă proprietăţi feromagnetice şi antiferomagnetice.

• Combinaţiile complexe heteronucleare ale cuprului(II) în baza acidului salicilic caracterizaţi prin difracţia cu raze X posedă proprietăţi antimicrobiene sporite la diverse microorganizme patogene

•Nanoparticulele în bază de oxizi micşti sintetizate din carboxilaţii trinucleari micşti caracterizate prin microscopia electronică, posedă proprietăţi antimicrobiene şi au o influienţă sporită biosintetică asupra culturilor de Trichoderma.

• În cadrul proiectului, au fost publicate 14 articole ştiinţifice în reviste prestigioase cu factori de impact, 4 articole în reviste naţionale categoria A, membrii echipei au participat la 3 conferinţe ştiinţifice internaţionale şi naţionale (on-line) şi au publicat 3 rezumate, au obţunut 11 brevete si s-au depus 3 cereri de brevet. La saloanele de inventică brevetele au fost premiate cu medalii de aur, argint şi bronz. A fost susţinută o teză de doctor habilitat şi o teză de doctor, este în curs de realizare 1 teză de doctor.

Conducătorul de proiect Lozan Vasile _____

Data: 18 decembrie 2023

LŞ

Anexa nr. 1

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect perioada 2020-2023

Proiectul **”Materiale noi în baza combinațiilor complexe a metalelor cu liganzi polifuncționali în calitate de polimeri poroși, catalizatori, substanțe biologic active și compuși nanostructurați”, în cadrul „Programului de stat 2020-2023”**

Cifrul proiectului **20.80009.5007.04**

Limba română

- Au fost obținuți polimeri coordinativi poroși noi ai unor elemente 3d, s și lantanide (52 compuși) în baza liganzilor ce conţin grupe carboxilice şi/sau atomi de azot donori, cu porozitate permanentă, hidrolitic și termic stabili. Aceștea pot fi utilizați ca potențiali sorbenți pentru realizarea procesului de stocare a gazelor și în calitate de catalizatori în procesele eterogene de acilare. Investigarea proprietăților luminiscente a polimerilor coordinativi ai lantanidelor au demonstrat, că compușii care conțin La^{3+}, Nd^{3+} și Gd^{3+} posedă doar emisia asociată cu ligandul organic, iar polimerii care conțin Eu^{3+} și Tb^{3+} prezintă radiații pure centrate pe metal, în timp ce rețelele polimerice care conțin Dy^{3+} și Sm^{3+} prezintă luminiscență dual centrată pe metal și ligand

- A fost realizată sinteza combinațiilor complexe polinucleare a unor metale 3d și s (21 compuși) în baza liganzilor ce conțin atomii donor S, C, O, N și de tip Baze Schiff. Aceștea posedă proprietăți sporite antibacteriene față de bacterii și fungi, proprietăți inhibitoare al proliferării fungilor în procese biologice și pot servi ca potențiali catalizatori ai proceselor redox sau în calitate de magneți moleculari.

- Combinațiile complexe heteronucleare ale manganului(II), nichelului(II) și cobaltului(II) în baza acidului sebacic și o-fenantrolină, caracterizați prin difracția cu raze X posedă proprietăți feromagnetice și antiferomagnetice.

- Combinațiile complexe heteronucleare ale cuprului(II) în baza acidului salicilic caracterizați prin difracția cu raze X posedă proprietăți antimicrobiene sporite la diverse microorganizme patogene

- Nanoparticulele în bază de oxizi micști sintetizate din carboxilații trinucleari micști caracterizate prin microscopia electronică, posedă proprietăți antimicrobiene și au o influiență sporită biosintetică asupra culturilor de Trichoderma.

- În cadrul proiectului, au fost publicate 14 articole științifice în reviste prestigioase cu factori de impact, 5 articole în reviste naționale categoria A, membrii echipei au participat la 11 conferințe științifice internaționale și naționale (on-line) și au publicat 9 rezumate, au obținut 11 brevete si s-au depus 3 cereri de brevet. La saloanele de inventică brevetele au fost premiate cu medalii de aur, argint, bronz și premii speciale. A fost susținută o teză de doctor habilitat și o teză de doctor, este în curs de realizare 1 teză de doctor.

Limba engleză

• New porous coordination polymers of some 3d, s and lanthanide elements (52 compounds) were obtained based on ligands containing carboxylic groups and/or donor nitrogen atoms, with permanent porosity, hydrolytically and thermally stable. They can be used as potential sorbents for gas storage and as catalysts in heterogeneous acylation processes. The investigation of the luminescent properties of coordination polymers of lanthanides demon-strated that the compounds containing La^{3+}, Nd^{3+} and Gd^{3+} possess only the emission associated with the organic ligand, and the polymers containing Eu^{3+} and Tb^{3+} show pure metal-centered radiation, while the polymer networks containing Dy^{3+} and Sm^{3+} exhibits dual metal- and ligand-centered luminescence

• The synthesis of polynuclear complex combinations of some 3d and s metals (21 compounds) based on ligands containing donor atoms S, C, O, N and Schiff bases was carried out. They possess enhanced antibacterial proper-ties against bacteria and fungi, inhibitory properties of fungal proliferation in biological processes and can serve as potential catalysts of redox processes or as molecular magnets.

• Heteronuclear complex combinations of manganese(II), nickel(II) and cobalt(II) based on sebacic acid and o-phenanthroline, characterized by X-ray diffraction, possess ferromagnetic and antiferromagnetic properties.

• Heteronuclear complex combinations of copper(II) based on salicylic acid characterized by X-ray diffraction possess enhanced antimicrobial properties to various pathogenic microorganisms

• Nanoparticles based on small oxides synthesized from small trinuclear carboxylates characterized by electron microscopy, possess antimicrobial properties and have an increased biosynthetic influence on Trichoderma cultures.

• Within the project, 14 scientific articles were published in prestigious journals with impact factors, 5 articles in national journals, category A, team members participated in 11 international and national scientific conferences (on-line) and published 9 abstracts, have obtained 11 patents and submitted 3 patent applications. At the invention salons, the patents were awarded with gold, silver, bronze medals and special prizes. A habilitation doctoral thesis and a doctoral thesis were support, 1 doctoral thesis is in progress.

Anexa nr. 2

Lista lucrărilor științifice, științifico-metodice și didactice publicate pentru anii 2020-2023 în cadrul proiectului din Programul de Stat

”Materiale noi în baza combinațiilor complexe a metalelor cu liganzi polifuncționali în calitate de polimeri poroși, catalizatori, substanțe biologic active și compuși nanostructurați”

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. BEJAN, D.;, BAHRIN, L.-G.; SHOVA, S.; MARANGOCI, N.L.; KOKCAM-DEMIR, U.;LOZAN, V.; JANIAK, C. New microporous lanthanide organic frameworks. Synthesis,structure, luminescence, sorption, and catalytic acylation of 2-naphthol. Molecules. 2020,25, 3055; doi:10.3390/molecules25133055 (IF 3.267)
2. CUZAN-MUNTEANU, O.; SIRBU, D.; GIORGI, M.; SHOVA, S.; GIBSON, E.A.; RÉGLIER, M.; ORIO, M.; MARTINS, L.M.D.R.S.; BENNISTON, A.C. Neutral Lipophilic Palladium(II) Complexes and their Applications in Electrocatalytic Hydrogen Production and C-C Coupling Reactions. European Journal of Inorganic Chemistry. 2020,10, 813-822. ISSN 1099-0682. doi: 10.1002/ejic.201901283 (IF: 2.578).
3. LOZAN V.; MAKHLOUFI G.; DRUTA V.; BOUROSH P.; KRAVTSOV V.; MARANGOCI N.; HEERING C.; JANIAK Ch. Synthesis and structure of zinc(II) and cobalt(II) coordination polymers involving the elongated 2’, 3’, 5’, 6’ tetramethylterphenyl-4, 4”-dicarboxylate ligand. Inorgcanica Chimica Acta, 2020, 506, 119500. doi.org/10.1016/j.ica.2020.119500 (IF: 2,433).
4. BRATANOVICI, B.-I.; NICOLESCU, A.; SHOVA, S.; DASCĂLU, I.-A.;ARDELEANU, R.; LOZAN, V.; ROMAN, Gh. Design and synthesis of novel ditopic ligands with a pyrazole ring in the central unit. Research on Chemical Intermediates. 2020, 46, 1587–1611. (I.F. 2,064) https://doi.org/10.1007/s11164-019-04052-3.
5. BAHRIN, L.-G.; BEJAN. D.; SHOVA, S.; GDANIEC, M.; FRONC, M.; LOZAN, V.; JANIAK, C. Alkali- and alkaline-earth metal–organic networks based on a tetra(4-Carboxy-phenyl) bimesitylene-linker, Polyhedron, 2019, 173, 114128, https://doi.org/10.1016/j.poly.2019.114128 (I.F. 2.343)
6. DASCĂLU, I.-A., MIKHALYOVA, E., SHOVA, S., BRATANOVICI, B.I., ARDELEANU, R., MARANGOCI, N.L., LOZAN, V., ROMAN, G. Synthesis, crystal structure and luminescent properties of isoreticular lanthanide–organic frameworks based on a tetramethyl-substituted terphenyldicarboxylic acid. In: Polyhedron, 2021, nr. 194. ISSN 0277-5387, DOI:10.1016/j.poly.2020.114929 (IF = 2.88)
7. BRATANOVICI, B.-I., SHOVA, S., LOZAN, V., DASCALU, I.-A., ARDELEANU, R.,

ROMAN, G. 1-(4-Carboxyphenyl)-5-methyl-1H-1,2,3-triazole-4-carboxylic acid – A versatile ligand for the preparation of coordination polymers and mononuclear complexes. In: Polyhedron, v.200, 15 May 2021, https://doi.org/10.1016/j.poly.2021.115115. (IF = 2.88)

8. CUBA, L.; GORINCIOI, E.; DRAGANCEA, D.; SHOVA, S.; BOUROSH, P. Noncovalent Interactions in the Architectures with Substituted Salicylaldehyde Semicarbazones. In: Russian Journal of Coordination Chemistry/Koordinatsionnaya Khimiya. 2021, nr. 7(47), pp.488-501, DOI: 10.1134/S1070328421070034 (IF = 1,168)
9. DRAGANCEA, D., NOVITKI, Gh., MADALAN, A.M., ANDRUH, M. New cyanido-bridged heterometallic 3d-4f 1D coordination polymers: Synthesis, crystal structures and magnetic properties. In: Magnetochemistry. 2021, nr. 5(7), pp. 1-14. ISSN 2312-7481, DOI:10.3390/magnetochemistry7050057. (IF = 2,193)
10. GULEA, A., GRAUR, V.O., ULCHINA, I., BOUROSH, P., SMAGLII, V., GARBUZ, O., TSAPKOV, V.I. Synthesis, Structure, and Biological Activity of Mixed-Ligand Amine-Containing Copper(II) Coordination Compounds with 2-(2-Hydroxybenzylidene)-N-(prop-2-en-1-yl)hydrazinecarbothioamide. In: Russian Journal of General Chemistry. 2021, nr. 1(91), pp. 98-107. ISSN 1070-3632, DOI: 10.1134/S1070363221010114. (IF = 0,81)
11. ARAUZO, A., BARTOLOME, B., LUZON, J., ALONSO-GUTIÉRREZ, P., VLAD, A., CAZACU, M., ZALTARIOV, M.-F., SHOVA, S., BARTOLOME, J., TURTA, C. In: Molecules. Basel, Switzerland. 2021, nr. 18(26), pp. 1-26. , DOI: 10.3390/molecules26185626. (IF = 4,411)
12. TSYMBAL, L.V., ANDRIICHUK, I.L., LOZAN, V., SHOVA, S., LAMPEKA, Y.D. Synthesis and crystal structure of diaqua(1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane) zinc(II) bis(hydrogen-4-phosphonato-biphenyl-40-carboxylato)(1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane) zinc(II). In: Acta Cryst. 2022. E78, 625–628.https://doi.org/10.1107/S2056989022004534.
13. CUZAN,O.; SHOVA, S.; NOVITCHI, G.; LOZAN, V. Synthesis, characterization and magnetochemical study of cobalt, nickel and manganese coordination polymers, Inorganica Chimica Acta, 2023, 553, pp. 121526. ISSN 0020-1693, DOI: 10.1016/j.ica.2023.121526 (IF: 3.118)
14. 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 BaMnO3 oxide obtained from coordination precursor. Journal of Solid State Chemistry V.324, August 2023, 124108 https://doi.org/10.1016/j.jssc.2023.124108 (IF: 3,656)

4.3. în reviste din Registrul National al revistelor de profil, categoria A

1. GORINCHOY, V. Synthesis and structural caracterization of the tetranuclear

iron(III)cluster with salicylic acid. : *Chemistry Journal of Moldova*, 2020, vol. 15, nr. 2, pp.62–68. ISSN 1857–1727. Disponibil: http://dx.doi.org/10.19261/cjm.2020.758. *(Categoria A).*

2. GORINCHOY, V., CUZAN, O., MELNIC, S., PETUHOV, O., SHOVA, S. Synthesis and characterisation of new {Fe2CrO} heterotrinuclear iron-chromium clusters. In: Chemistry Journal of Moldova, 2021, v.16, Nr.2. p. 66-75.
3. VODA, I. A new 2D coordination polymer based on zinc(II), 1,2,3-benzenetricarboxylic acid and 4,4′-bis(imidazol-1-ylmethyl)biphenyl: synthesis and crystal structure" Chemistry Journal of Moldova http://doi.org/10.19261/cjm.2022.1021.
4. ПАРШУТИН, В. В., КОВАЛЬ, А. В., ГОРИНЧОЙ, В. В., ЛОЗАН, В. И. Влияние гетероядерного салицилатного комплекса $\{[FeSr_2(SalH)_2(Sal)_2(NO_3)(DMA)_4]\}_n$ на коррозию стали Ст. 3 в воде, In: *Электронная обработка материалов*. 2023, v. 59, pp. 47-59. https://doi.org/10.52577/eom.2023.59.1.47,

5. Articole în culegeri ştiinţifice naționale/internaționale

6. Articole în materiale ale conferințelor științifice

6.3. în lucrările conferinţelor ştiinţifice naţionale cu participare internaţională

1. LOZAN, V. Combinații complexe macrociclice în baza hexaazaditiofenolaților cu transfer de sarcină. În culegerea "Materiale avansate în biofarmaceutică și tehnică". ISBN 978-9975-89-216-2. Chișinău, mai 2021, p.163-177

7. Teze ale conferințelor ştiinţifice

7.1. în lucrările conferinţelor ştiinţifice internaţionale (peste hotare)

VODA, I., PETUHOV, O., ROTARU, A., LOZAN, V. Thermal analysis of two new coordination polymers based on 4,4′-bis(1H-imidazol-1-ylmethyl)biphenyl. 7th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry (CEECTAC7), 28-31 August 2023, Brno, Czech Republic, p. 193.

7.2. în lucrările conferinţelor ştiinţifice internaţionale (Republica Moldova)

1. DRUȚĂ, V., LOZAN, V. New Functionalized Derivatives of Bimesitylene as Precursor for Obtaining of Polyfunctional Ligands. In: Proceedings of the International Conference MODERN TECHNOLOGIES IN THE FOOD INDUSTRY–2022 (MTFI – 2022), 20–22 October, 2022, Chişinău, Republic of Moldova, p.81

7.3. în lucrările conferinţelor ştiinţifice naţionale cu participare internaţională

1. DZÎGOVSCHII, C.; DRUȚĂ, V. Sinteza și studiul compușilor coordinativi polimerici ai metalelor de tranziție cu ligandul acidul 4′-(2H-tetrazol-5-il) bifenil-4-carboxilic și ligandul acidul 1-(4-carboxifenil)-5-metil-1H-1,2,3-triazol-4-carboxilic. Conferința Științifică a Studenților și Masteranzilor cu participare internațională cu genericul „Viitorul ne aparține”, ediția a X-a. Chișinău, 20 mai 2020, p.74.

2. POPA, T. Sinteza și studiul combinațiilor complexe ale unor metale 3d cu liganzi în baza tiosemicarbazidei și 2,6-diformil-4-metilfenolului”, Conferința Științifică a studenților și masteranzilor cu participare internațională cu genericul „Viitorul ne aparține’’, ediția a X-a,Chișinău, 2020, p. 80

3. SÎRBU, T.: TIMUȘ, I.; GORINCIOI, V.; MOLDOVAN, C.; ȚURCAN, O. Impactul Nano-particulelor de Fe2CuO4 și Fe2ZnO4 asupra micetelor din genul Trichoderma. Simpozionul 9 Științific Internațional “Protecția plantelor – realizări și perspective” 27-28 octombrie 2020, Chișinău. p.35-39.

4. SÎRBU, T.; GORINCIOI, V.; MOLDOVAN, C.; ȚURCAN, O.; TIMUȘ, I. Studiul viabilității tulpinilor de micromicete cultivate pe medii cu nanoparticule, Conferința științifică națională cu participare internațională. Integrare prin cercetare și inovare. Universitatea de Stat. 11-12 noiembrie 2020, Chișinău., p.138-140

9. Brevete de invenţii şi alte obiecte de proprietate intelectuală, materiale la saloanele de invenţii

1. LUPAŞCU, L.; JOVMIR, T.; POPA, T.; LOZAN, V. Aplicare a 2,6-bis(S-metilizotiosemicarbazidometiliden)-4-metilfenolato- tricloro- dicupru hidrat în calitate de remediu contra bacteriilor fitopatogene. Brevet de invenție MD 4663. 2019-12-31.
2. JOVMIR, T.; BURDUNIUC, O.; POPA, T.; DRUŢĂ, V.; GULEA, A.; LOZAN, V. Compus hidrosolubil 2,6- bis (S-metilizotiosemicarbazidometiliden)-4-metilfenolato-tricloro- dicupru- hidrat pentru utilizare în calitate de remediu antimicotic. Brevet de invenție MD 4696, B1.2019.04.04, BOPI 5/2020, p. 67.
3. JOVMIR, T.; BĂLAN, G.; POPA, T.; DRUŢĂ, V.; GULEA, A.; LOZAN, V. Compus hidrosolubil 2,6- bis(S-metilizotiosemicarbazidometiliden)-4-metilfenolato-tricloro- dicupru-hidrat pentru utilizare în calitate de remediu farmaceutic selectiv contra bacteriilor Gram-pozitive. Brevet de invenție MD

4687 B1, 2019.04.04, BOPI nr. 04/2020, p. 41.

4. GORINCHOY, V.; LOZAN, V.; BURDUNIUC, O.; BALAN, G.; TSAPCOV, V.; GULEA A. Utilizarea tetrasalicilatului de bariu-cupru în calitate de inhibitor al proliferării fungilor din specia Cryptococcus Neoformans. BOPI nr.9/2020, 4712 B1 (2020.09.30).
5. JOVMIR, T., BĂLAN, G., POPA, T., DRUȚĂ, V., GULEA, A., LOZAN V. *Compus hidrosolubil 2,6-bis(S-metilizotiosemicarbazidometilen)-4-metilfenolato-tricloro-dicupru hidrat în calitate de remediu farmaceutic selectiv contra bacteriilor Gram-pozitive.* Brevet de invenție MD4687 C1, data eliberării 2021.01.31.
6. JOVMIR, T.,BURDUNIUC, O.,POPA, T., DRUȚĂ, V., GULEA, A., LOZAN, V. MD4696 C1, *Compus hidrosolubil 2,6-bis(S- metilizotiosemicarbazidometilen)-4-metilfenolato-tricloro-dicupru hidrat în calitate de remediu antimicotic*. Brevet de invenție MD4696 C1, data eliberării 2021.02.28
7. LOZAN V., JOVMIR T.; PARȘUTIN Vl., COVALI Al. Procedeu de protecția a oțelului de coroziune în apă. Brevet de invenție MD1615 Y; Data publicării: 2021-04-30.
8. LOZAN, V., PARȘUTIN, Vl., COVALI, Al., JOVMIR, T. Procedeu de protecție a oțelurilor contra coroziunii în apă. Brevet de invenție MD1534 Z; data eliberării 2021.12.31.
9. GULEA, A., GRAUR, V., ȚAPCOV, V., BĂLAN, G., LOZAN, V. Utilizarea cloro-{*N*-prop-2-en-1-il-*N*'-[1-(piridin-2-il)etilidencarbamohidrazontioato}cupru în calitate de inhibitor al proliferării bacteriilor din specia *Acinetobacter baumannii*. Brevet de invenție MD nr. 4810. Publicat BOPI. Nr. 6/2022. P. 50
10. LOZAN, V., PARSHUTIN, Vl., COVALI, Al., JOVMIR, T. Procedeu de protecție a oțelului de coroziune în apă. Brevet de invenție, MD 1726 Y 2023.11.30. BOPI nr.11/2023
11. GULEA, A., GRAUR, V., BALAN, G., ȚAPCOV, V., TODERAȘ, I., LOZAN, V. Nitrato- (N-(prop-2-en-1-il)-N'-(1-(piridin-2-il)-etiliden)carbamohidrazontio) cupru, care manifestă activitate antimicrobiană față de bacteriile din specia Streptococcus pneumoniae. Brevet de inventie, MD4842 C1 2023.01.31 BOPI nr.1/2023

Anexa nr. 3

Volumul total al finanțării proiectului 2020-2023

Cifrul proiectului: 20.80009.5007.04

Anul	Finanțarea planificată (mii lei)	Finanțarea Executată (mii lei)	Cofinanțare (mii lei)
2020	*1284,4*	*1206,6*	-
2021	*1347,9*	*1304,4*	-
2022	*1545,1*	*1541,5*	-
2023	*1642.5*	*1633,4*	-
Total	***5819,9***	***5685,9***	-

Conducătorul de proiect LOZAN Vasile

Data: 18 decembrie 2023

LȘ

Anexa nr. 4

Componența echipei pe parcursul anilor 2020-2023

Lista executorilor, potențialul științific, inclusiv indicarea modificărilor echipei de cercetare pe durata Programului de stat *(funcţia în cadrul proiectului, titlul ştiinţific, semnătura executorilor la data de 31 decembrie 2023)*

Cifrul proiectului 20.80009.5007.04

Echipa proiectului conform contractului de finanțare 2020-2023						
Nr	**Nume, prenume (conform contractului de finanțare)**	**Anul nașterii**	**Titlul științific**	**Norma de muncă conform contractului**	**Data angajării**	**Data eliberării**
1.	Lozan Vasile	1957	Dr. Hab. în Chimie	1,0	01.01.20	-
2.	Druță Vadim	1971	Doctor în Chimie	1,0	01.01.20	-
3.	Melnic Silvia	1973	Doctor în Chimie	0,5	01.01.20	-
4.	Cuzan Olesea	1989	Doctor în Chimie	1,0	01.01.20	-
5.	Țapcov Victor	1958	Doctor în Chimie	0,5	01.01.20	-
6.	Șova Sergiu	1958	Doctor în Chimie	0,5	01.01.20	-
7.	Lozan Raisa	1957	Doctor în Chimie	0,5	01.01.21	-
8.	Dragancea Diana	1974	Doctor în Chimie	1,0	01.01.20	-
9.	Jovmir Tudor	1952	-	1,0	01.01.20	-
10.	Gorincioi Viorina	1978	Doctor în Chimie	1,0	01.01.20	-
11.	Vodă Irina	1986	-	0,5	01.01.20	-
12.	Neguța Elena	1993	-	1,0	15.10.21	-
13.	Derivolcov Ion	1999	-	1,0	01.07.21	-

Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor conform proiectului **31%**
Modiicări de personal în cadrul proiectului nu s-au făcut

Conducătorul de proiect LOZAN Vasile

Data: 18 decembrie 2023

LȘ

Anexa nr. 5

Formular privind raportarea indicatorilor în cadrul proiectului Programe de Stat pentru perioada 2020 – 2023, *cifrul* 20.80009.5007.04

Indicator 1	Rezultat				Indicator 2	Rezultat				Indicator 3	Rezultat			
	2020	2021	2022	2023		2020	2021	2022	2023		2020	2021	2022	2023
Nr. de cereri de brevete în registrate în cadrul proiectului de cercetare finanțat	2	1	2	3	**Nr. de brevete** obținute în cadrul proiectului de cercetare finanțat	4	2 -	1	2	Procentul lucrărilor științifice **aplicate în practică, din totalul lucrărilor publicate** în cadrul proiectului de cercetare finanțat	-	-	-	-
Total	2	1	2	3		4	2	1	2					

Conducător de proiect Dr.hab.LOZAN Vasile

Data 18 decembrie 2023

LS