

RECEȚIONAT

Agenția Națională pentru Cercetare
și Dezvoltare _____

_____ 2021

AVIZAT

Secția AȘM _____

_____ 2021

RAPORT ANUAL

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

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, ANCD 20.80009.5007.15

Prioritatea Strategică: Competitivitate economică și tehnologii inovative

Conducătorul proiectului

_____ KRAVȚOV Victor _____



Directorul organizației

_____ MACOVEI Mihai _____



Consiliul științific/Senatul

_____ COJOCARU Ion _____

L.S.



Chișinău 2021

1. Scopul etapei anuale conform proiectului depus la concurs

Obținerea și studiul structural al materialelor metalorganice luminescente, magnetice și bioactive (antivirale, antibacteriene, biostimulatori) ale metalelor 3d și 4f și ale compușilor nanocomponenți cu hexaamincobalt(III) și derivați de sulfonat.

2. Obiectivele etapei anuale

1. Stabilirea structurii atomice și cristaline cu ajutorul razelor X a compușilor obținuți în cadrul proiectului și în centrele științifice din R.Moldova.
2. Elaborarea designului și crearea clusterilor coordinativi ai Co(II,III) și Fe(II,III) și a polimerilor, inclusiv coordinativi în baza acestora cu lantanide, dezvoltarea clasei de compuși ai Cu(II), Co(II,III), inclusiv a hexaamincobaltului(III) cu derivați ai sulfonatului.
3. Obținerea a noi materiale metalorganice ale Fe(II,III), Mn(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II) și/sau Cd(II) cu liganzi polidentati ce conțin diferit set de atomi donori (în special N, O, S), cu diverse baze Schiff, a compușilor Eu(III) și altor lantanide cu liganzi N-polidentati.
4. Stabilirea proprietăților compușilor în funcție de structura lor în baza măsurărilor magnetice, a spectrelor de luminiscentă, măsurărilor legate de diverse activități biologice (antivirale și antibacteriene, de biostimulatori ai sintezei enzimelor).
5. Investigarea corelației structură–proprietate luminiscentă pentru studiul fenomenelor de emisie indus de agregare (AIE) și a factorilor ce le determină în stare cristalină.
6. Studiul corelației rezultatelor structurale, analizelor termogravimetrice și cinetice primite pentru unii compuși organici cu componente biologice active, crearea compușilor coordinativi ai Ni(II) și Cu(II) în baza acestora, studiul iminofosforanilor și investigarea proprietăților lor utile (luminescente, biologice).
7. Realizarea tezelor de doctor (2), master (2) și licență (2).

3. Acțiunile planificate pentru realizarea scopului și obiectivelor etapei anuale

1. Selectarea informației ce se referă la materialele publicate pentru a evita orice repetare în lucrările planificate utilizând rezultate din Baza de Date Structurale Cambridge.
2. Încercarea și analiza condițiilor de obținere a materialelor prin variația raportului reactanților, solvenților, sărurilor, a timpului, temperaturii și presiunii utilizate la sinteză.
3. Pentru a mări nuclearitatea clusterilor, ori pentru a crea polimeri coordinativi, la realizarea designului compușilor se va ține cont de modul de coordinare al liganzilor selectați, forma poliedrului de coordinare și numărul de coordinare al atomului central de metal.
4. Se vor lua în considerație legăturile de hidrogen și alte interacțiuni fine ce pot influența modul de împachetare a componentelor în cristal pentru a prezice structura cristalină.
5. Se vor optimiza cele mai promițătoare metode de sinteză.

5. Efectuarea experimentului cu raze X pentru monocristalele și pulberile compuşilor noi obţinuţi utilizând difractometrele corespunzătoare, cât și utilizarea complexelor de program pentru prelucrarea datelor experimentale primite și ilustrarea rezultatelor.
6. Analiza rezultatele măsurărilor spectroscopice (IR, UV-vis), investigarea proprietăţilor adsorptive și de luminiscentă ale solidelor noi în vederea corelaţiei lor cu rezultatele structurale.
7. Publicarea rezultatelor în formă de articole în reviste de specialitate, cu sau fără FI, în formă de rezumate ale comunicărilor științifice orale sau poster.
9. Antrenarea tinerilor cercetători la discuția rezultatelor și elaborarea tezelor de doctor, master și licență.

4. Acțiunile realizate pentru atingerea scopului și obiectivelor etapei anuale

1. Concluziile analizei riguroase a rezultatelor din Baza de Date Structurale Cambridge și literatura de specialitate, cât și al “know-how“-ul echipei au fost utilizate intens la crearea noilor compuși.
2. Au fost selectați liganzi adecvați pentru sinteza noilor compuși atât comercial procurați, cât și obţinuţi în laborator.
3. Pentru prepararea materialelor cristaline noi au fost diferențiate atât sărurile de metal folosite, solvenții sau amestecul de solvenți, cât și o atenție mare a fost acordată temperaturii de cristalizarea ceea ce a permis stabilirea concretă a condițiilor de obținere a compuşilor în fază monocristalină.
4. La sinteza cristalelor au fost aplicate tehnici moderne de obținere, precum sinteza hidro(solvo)termală ultrasonificarea, metode de difuzie și recristalizare a componentelor.
5. La baza creării materialelor cristaline au stat principiile ingineriei cristalelor, care presupun luarea în considerație a numărului de coordinare al atomului de metal generator, modul de coordonarea a liganzilor, ținând cont de posibilele preferințe în coordonarea ultimilor în baza concurenței atomilor donori, a unui șir de aproximații cum sunt “*node and spacer*”, “*bloc molecular de construcție*”, “*blocuri secundare de asamblare*” și “*sinton supramolecular*”, ș.a..
6. Experimentele cu raze X pe monocristale și pe pulbere pentru compușii preparați în cadrul proiectului au fost obținute utilizând difractometrele „Xcalibur E” și DRON din laborator, iar la calculele structurale s-au antrenat complexele de programe existente în laborator pentru prelucrarea datelor experimentale SHELX, OLEX-2, MERCURY, PLATON, Crystal Explorer ș.a..
7. În cadrul acestui proiect a fost efectuat experimentul cu raze X pentru un șir de materiale obținute în cadrul altor proiecte în diverse centre științifice atât din țară (Institutul de Fizică Aplicată, Institutul de Chimie, Universitatea de Stat din Moldova, Universitatea de Stat din Tiraspol, Institutul de Inginerie Electronică și Nanotehnologii „D. Ghițu”, Institutul de Geologie

și Seismologie, ș.a.), cât și de peste hotare cu care se colaborează intens (Institutul de Chimie „Coriolan Drăgulescu”, Timișoara, România; Institutul de Chimie Macromoleculară “Petru Poni”, Iași, România; centrele științifice din Ucraina, Elveția, Italia, Germania), cât și prelucrarea datelor experimentale, publicarea lor.

8. În colaborare cu diferite centre științifice din țară, materialele solide obținute în cadrul proiectului au fost investigate cu ajutorul unui set de metode chimico-fizice, precum spectroscopiile în IR și UV/Vis, pentru unele s-a efectuat analiza termogravimetrică sau/și au fost studiate proprietățile lor luminescente și adsorbitive/desorbtive. Studiul proprietăților magnetice pentru un șir de compuși a fost efectuat în colaborare cu centrele științifice din Elveția, Italia și Germania.

9. O atenție deosebită s-a acordat publicării rezultatelor obținute în formă de articole științifice în reviste de specialitate, în mare parte cu FI, în formă de teze (abstracte) ale comunicărilor orale /poster, inclusiv la diverse saloane de inventică. Unele rezultate au fost obținute în rezultatul implicării tinerilor din laborator, care în consecință au fost perfectate în formă de teze de doctor, master și/sau licență.

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

În scopul investigării corelației structură cristalină – proprietate luminescentă, cu evidențierea studiului fenomenelor de emisie indusă prin metoda de agregare a liganzilor luminofoari în cristalele compușilor coordinativi ai Cu(II), Zn(II) și/sau Cd(II) în baza liganzilor polidentati luminofoari, s-au obținut cristale pentru 22 compuși coordinativi mono-, bi- și polinucleari noi cu diverse rapoarte metal/ligand luminofor/anion/apă, utilizând principiile ingineriei cristalelor și metodele de sinteză prin evaporare lentă și solvotermală. Interacțiunea diferitor săruri de Cu(II), Zn(II) și Cd(II) cu ligandul triimidazol ciclic triimidazo [1,2-a:1',2'-c:1'',2''-e][1,3,5] -triazină (L₁), izomerul său de poziție triimidazo[1,2-a:1',2'-c:1'',5''-e][1,3,5]triazină (L₂), precum și cu derivații piridinici ai L₁: 3-(piridin-2-il) triimidazo[1,2-a:1',2'-c:1'',2''-e][1,3,5] triazăină (L₃) și 3-(piridin-4-il)triimidazo[1,2-a:1',2'-c:1'',2''-e][1,3,5] triazăină (L₄) a condus la prepararea a opt compuși coordinativi ai Cu(II), șapte ai Zn(II) și șapte ai Cd(II), care reprezintă complecși neutri sau cationi cu structură discretă sau extinsă.

Studiul cu raze X a stabilit că monocristalele compușilor coordinativi noi ai Cu(II) cu formulele $[\text{Cu}_2(\text{CH}_3\text{COO})_4(\text{L}_1)_2]$ (1), $[\text{Cu}_2(\text{CH}_3\text{COO})_4(\text{L}_3)_2]$ (2), $\{[\text{Cu}_2(\text{CH}_3\text{COO})_4(\text{L}_2)]_2[\text{Cu}_2(\text{CH}_3\text{COO})_4(\text{H}_2\text{O})(\text{L}_2)] \cdot 2(\text{H}_2\text{O})\}_n$ (3), $[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2(\text{L}_2)_2]$ (4), $[\text{Cu}(\text{NO}_3)_2(\text{L}_2)_4] \cdot 2\text{CH}_3\text{CN}$ (5), $[\text{Cu}(\text{NO}_3)_2(\text{L}_2)_4] \cdot 1.5(\text{dmf})$ (6), $[\text{Cu}(\text{NO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2(\text{L}_4)_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (7) și $[\text{Cu}(\text{NO}_3)_2(\text{L}_3)]_n$ (8) sunt construite atât din complecși neutri cu structură discretă cât și de tip polimer ce includ liganzi de triimidazol luminofoari (L₁-L₄) și anioni ce compensează sarcina cationului de metal. În acești compuși au fost depistate diferite poliedre de coordonare ale ionilor de metal, care posedă geometrie plan-pătrată formată din setul de atomi donori N₂O₂, pătrat-piramidală formată din setul de atomi N₂O₃ și octaedrică formată din setul de atomi N₄O₂ / N₂O₄. În complecșii mono- și binucleari, luminoforii L₁ – L₄ coordonează ca liganzi terminali monodentați, pe când în polimerii coordinativi ligandul L₂ acționează ca un exo-ligand bidentat cu funcție punte, iar ligandul

L₃ deja ca bidentat-chelat. Coordinarea la ionul Cu(II) asigură o creștere a coplanarității și a rigidității conformaționale a acestor liganzi luminofori în complecși, iar motivele diverse de împachetare a luminoforilor coordinați, inclusiv în dimeri, coloane și straturi, stabilizate prin interacțiuni de tip stacking, sunt caracteristice formelor pure ale luminoforilor. Investigațiile fotofizice pentru acești compuși au demonstrat că emisia indusă de H-agregate caracteristică pentru luminoforii puri se stinge semnificativ pentru aceste materiale cristaline, indicând potențiale utilizări ale moleculelor de triimidazol în calitate de senzori pentru Cu(II) și alte metale.

Interacțiunea diferitelor săruri de Zn(II) și Cd(II) cu doi liganzi triimidazol luminescenți, L₁ și L₂, în condiții de sinteză solvotermală a rezultat în cristalele compușilor coordinativi noi mono-, bi- și polinucleari ai Zn(II) și Cd(II) cu raport diferit metal/luminofor(L₁,L₂)/anion/apă: [Zn(H₂O)₆](NO₃)₂(L₁)₂ (**9**), [Zn(H₂O)₄(L₁)₂](NO₃)₂(H₂O)₂ (**10**), [Cd(H₂O)₄(L₁)₂](NO₃)₂(H₂O)₂ (**11**), [Zn(L₁)(NO₃)(H₂O)₃](NO₃) (**12**), [Cd(L₁)₂(NO₃)₂(H₂O)₂] (**13**, **14**), [Cd₂(bdc)(L₁)₂(NO₃)₂(H₂O)₄·2H₂O] (**15**), [Zn(H₂O)₄(L₂)₂](NO₃)₂ (**16**), [Cd(L₂)₂(NO₃)₂(H₂O)] (**17**), [Zn(L₂)₂(CH₃COO)₂] (**18**), [Cd(L₂)₂(CH₃COO)₂(Im)_{0.75}(H₂O)_{0.25}]·0.5(H₂O) (**19**), [Zn(Cl)₂(L₁)(H₂O)] (**20**), {[Zn(Cl)₂(L₁)] 1/6(L₁·H₂O)}_n (**21**), [Cd(L₂)₆][Cd(H₂O)₆](ClO₄)₆·7(H₂O) (**22**). În baza structuri cristaline a compușilor, aici se pot evidenția: compusul de incluziune **9**, izomerii supramoleculari **9** – **11**, doi compuși izomorfi **10** și **11**, doi – polimorfi **13** și **14** și un polimer coordinativ unidimensional **21**. Dacă în compușii cu componente discrete ambii luminofori coordonează la metal în mod monodentat, atunci în **21** - L₁ acționează ca un ligand bidentat cu funcție punte, ceea ce duce la extinderea structurii. Deoarece împachetarea în cristale, inclusiv modelele de stivuire a moleculelor de luminofor, sunt factori importanți, care stau la baza emisie induse de agregare, au fost investigate detaliat motivele de stivuire finite și infinite înregistrate în structurile cristaline **9** - **22**. Compușii **9-22** dezvăluie un răspuns emisiv la iradierea sub lampa UV-vis, dar au fost caracterizați spectroscopic complet doar compușii ce au evidențiat cele mai bune performanțe, și anume **12**, **13** și **18**. Experimentele pilot de cocristalizare a Eu(NO₃)₃·5H₂O cu luminoforul 3-(piridin-2-il) triimidazo [1,2-a:1',2'-c:1'',2''-e][1,3,5] triazină (L₃) a condus la un compus cu compoziția [Eu(NO₃)₄(H₂O)₂](L₃H) (**23**). Structura cristalină a acestui compus a relevat caracterul ionic al solidului stabilizat prin legături de hidrogen intermoleculare. Studiul datat al structurii cristaline și al proprietăților de emisie sunt în curs de desfășurare.

Cu scopul explorării cristalelor compușilor polimerice ce pot servi la livrarea biomoleculelor, la interacțiunea sărurilor de Cu(II) cu așa molecule biocompatibile ca izonicotinamida (izonia), acizii piridin-2-carboxilici (picolinic=Hpic, și adipic=H₂adi), precum și a liganzilor neutri 1,2-bis(4-piridil)-etan (bpe) și 4,4'-bipiridină (bpi) au fost obținute cristalele a patru polimeri coordinativi neutri noi {[Cu(izonia)₂(adi)(dmf)]·0,5H₂adi}_n (**24** – polimer 1D), {[Cu(izonia)₂(adi)](H₂O·H₂adi)}_n (**25** – polimer 2D), {[Cu(pic)(CH₃COO)(bpe)]·H₂O}_n (**26** – polimer 1D) și [Cu₂(pic)₂(CH₃COO)₂(bpy)]_n (**27** – polimer 2D). Ca urmare a fost stabilit că extinderea polimerilor în **24** și **25** este realizată prin intermediul anionilor bidentați-punte și a liganzilor izonia ce acționează ca „piloni” unitari sau dubli, respectiv, extinderea sturcturii în **26** are loc prin intermediul liganzilor neutri bpe, coordinați exo-bidentat, iar în **27** – prin antrenarea anionului pic, coordinat bidentat-chelat, ligandul neutru bpy participând doar la formarea unității binucleare. Impactul decisiv al grupeii amino din ligandul izonicotinamida a fost confirmată prin menținerea atât a rigidității

structurii, cât și a moleculelor de cristalizare de H₂O și apă. Micșorarea capacității menținerii moleculelor oaspete în **26** și **27** corelează cu lipofilitate mărită în comparație cu cea din **24** și **25**.

Un nou compus sintetizat este cocristalul nitrat de 2,4-diamino-6-fenil-1,3,5-triazină-1-*iu* (LH)(NO₃) (**28**), care, cristalizând în grupul spațial centrosimetric triclinic *P*1̄, conține un număr mare de componente anion-ligand cristalografic independente (*Z'*=8), iar numărul total de specii ionice în unitatea asimetrică *Z'* este 16. Cationii organici și anionii de nitrat sunt combinați în două lanțuri formate prin intermediul a 20 legături de hidrogen unice N-H···O și N-H···N. Legăturile de hidrogen sunt ordonate într-o secvență repetată de homo- și heterosintoane $R_{\frac{2}{2}}(8)R_{\frac{3}{3}}(10)R_{\frac{2}{2}}(8)R_{\frac{2}{2}}(8)R_{\frac{2}{4}}(8)R_{\frac{3}{3}}(10)$ ca motive inelare. Cationii pereche de tipul $R_{\frac{2}{2}}(8)$ formează motive inelare prin intermediul legăturilor de hidrogen N-H···N. Toate celelalte perechi includ atât cationi, cât și anioni. În structura cristalină, compromisul dintre rigiditatea lanțurilor ce se datorează multiplelor legături de hidrogen direcționate și preferințele de asamblare este atins prin rotația internă restrânsă în jurul legăturii C–C care unește ciclurile fenil cu cele de triazină în cicluri cationi 2,4-diamino-6-fenil-1,3,5-triazin-1-*iu*. Impactul decisiv al legăturilor de hidrogen NH···O(N) la stabilitatea cristalului și distribuția altor tipuri de interacțiuni intermoleculare a fost estimată prin analiza suprafeței Hirshfeld care este în concordanță cu datele cristalografice, simplificând distribuția interacțiunilor intermoleculare și interpretarea motivelor de împachetare.

În cadrul proiectului s-a lucrat intens asupra dezvoltării unei strategii unice ce permite crearea cristalelor polimerilor coordinativi, folosind ca unitate structurală clusteri trinucleari de Fe(III). Ca urmare, s-a reușit obținerea clusterilor coordinativi heteropolinucleari a căror structură a fost stabilită cu ajutorul difracției razelor X. Anume ultrasonarea precursorilor trinucleari de izobutirat de Fe(III) în acetonitril în prezența azidei de sodiu și a 4,4'-bipiridinei (bpy) a rezultat în compusul $\{[Na_2Fe_{10}O_6(OH)_4(is)_{14}(bpy)(MeO)_2(MeCN)_2] \cdot MeOH\}_n$, (**29**) (*is*=izobutirat), în care unitățile de cluster dodecanucleare sunt unite în lanțuri 1D prin antrenarea liganzilor bpy cu funcție punte. Unitatea structurală $[Na_2Fe_{10}O_6(OH)_4(is)_{14}(MeO)_2(MeCN)_2]$ din **29** este neutră din punct de vedere al sarcinii, iar asocierea lor prin bpy formează în cristal arhitecturi moleculare asemănătoare unor „lanterne chinezești”, formate din șase motive triunghiulare planare condensate $\{Fe^{III}(\mu_3-O)\}$. Cristalele compusului au fost caracterizate și investigate cu ajutorul metodelor fizico-chimice moderne pentru a elucida atât compoziția lor, cât și proprietățile spectroscopice și magnetice. Concomitent au fost elaborate metode noi de sinteză pentru o serie de compuși din clasa carboxilaților polinucleari homo- și heterometalici ce au fost obținuți în formă de monocristale. Studiul cu raze X a stabilit că acestea au nucleul metalic $\{Fe_6\}$, $\{Co_3\}$, $\{Co_2La_2\}$, $\{Co_2Er_2\}$ și formulele $[Fe_6O_2(piv)_8(Hted)_2]$ (**30**), $[Fe_6O_2(piv)_6(Hted)_2(N_3)_2]$ (**31**), (*H₄ted* = *N,N,N',N'*-tetrakis(2-hidroxietyl)etilenediamină), $[Co_3(is)(phen)_2]$ (**32**), $[Co_2Er_2(OH)_2(is)_4(bdea)_2(NO_3)_2]$ (**33**), $[Co_2La_2(OH)_2(is)_4(bdea)_2(NO_3)_2]$ (**34**), (*H₂bdea*=*N*-butildietanolamină). Proprietățile acestor clusteri au fost studiate suplimentar prin metode fizico-chimice (IR, mass-spectrometria și analiza termică, magnetochimie).

De asemenea, a fost sintetizată și studiată o nouă serie de compuși multi-componenți la baza cărora este cationul $[Co(NH_3)_6]^{3+}$ și diverși liganzi N-, N,O- și O-donatori : $[Co(NH_3)_6](Hbdc)(bdc) \cdot 3H_2O$ (**35**), $[Co(NH_3)_6]Cl_2(Hpht) \cdot 4H_2O$ (**36**), $[Co(NH_3)_6]Cl(Hpht)_2 \cdot 3H_2O$ (**37**), $[Co(NH_3)_6]Cl(sb) \cdot 4H_2O$ (**38**) și $[Co(NH_3)_6]_2(sb)_3 \cdot EtOH \cdot 3H_2O$ (**39**) (*H₂bdc*=acid difenil-4,4'-

dicarboxilic, H₂pht=acid o-ftalic, H₂sb=acid 4-sulfobenzoic). Compușii au fost caracterizați prin analiza elementară, spectroscopia în IR și datorită faptului că s-a reușit obținerea lor în fază monocristalină, cu ajutorul difracției cu raze X. Ca urmare, s-a stabilit că în acești compuși cationul [Co(NH₃)₆]³⁺ servește ca bloc de construcție pentru încorporarea diverșilor anioni/molecule ce conțin atomi de O, N sau Cl, și deci sunt antrenați ca acceptori în legăturile de hidrogen și promovează formarea compușilor multicompenenți. Compușii respectivi au fost testați in vitro împotriva *Rhizobium* (*Agrobacterium*) *vitis*, o bacterie oncogenă care provoacă formarea de tumori la plante.

În cadrul acestui proiect au fost studiate din punct de vedere al arhitecturii supramoleculare și proprietăților fotoluminiscente sarea organică ce are ca componente trietanolamina (TEA) și acidul nitrobenzoic (4NBH), cu formula (HTEA)(4NB) (**40**) (*sinteză la Institutul de Chimie Timișoara, România*), cât și au fost obținuți în diferite condiții experimentale cinci compuși coordinativi cu utilizarea sărurilor NiCl₂/Cu(CH₃COO)₂ și sării organice **40**: [Ni(4NB)(TEA)(H₂O)](4NB) (**41**), [Ni(4NB)(TEA)(H₂O)](4NB)·H₂O (**42**), [Ni(TEA)₂](4NB)₂ (**43**) și Ni(BIC)₂ (**44**), (BIC = N,N-bis(2-hidroxietyl)glicinat), [Cu₂(TEA)₂(4NB)₂]·2H₂O (**45**). Compușii noi au fost caracterizați prin spectroscopia FTIR și analiza cu raze X pe monocristal. Toți compușii noi reprezintă sisteme supramoleculare asamblate prin combinarea a două sau trei forțe organizatoare: legături donor-acceptore, legături de hidrogen și interacțiuni de tip stacking”. Studiul comparativ al fotoluminiscenței în stare solidă efectuat pentru patru compuși coordinativi ai Ni(II) cu aceste componente și a sării organice dezvăluie o corelație între structura atomică, asamblarea componentelor în cristal și proprietățile fotoluminiscente.

În colaborare cu Universitatea Tehnică Gebze, Turcia, au fost efectuate studii-pilot experimentale și teoretice ale modulării autoasamblării supramoleculare a derivaților dipirometan de bor prin legătura prin halogen și prin legătura Csp³···tetrel cu sinergia fără precedent a interacțiunilor Csp³···N și Csp³···F. A fost elucidat rolul interacțiunilor necovalente în absorbția neașteptat de înaltă și selectivă a CO₂ și în conversia catalitică a polimerilor organici ionici pe bază de porfirină, iar caracteristicile termoelectrice ale dicalcogenurilor stratificate de TlGaSe₂ au fost investigate prin calculele în baza primelor principii.

Un alt domeniu de cercetare al proiectului este legat de studiul cu raze X al compușilor obținuți în cadrul altor proiecte, realizate în diverse centre științifice din țară. O clasă de compuși țin de compușii coordinativi cu diverse hidrazone (R₁R₂C=NNR₂R₄), liganzi organici capabili să coordoneze la centre metalice generând arhitecturi moleculare variate. Baza Schiff ce conține fragmentul de hidrazonă oferă acea platformă bună pentru generarea de noi liganzi, complexii metalici ai cărora prezintă proprietăți chimice, fizice și biologice promițătoare, deci sunt utile pentru aplicațiile lor practice. Interesul față de compușii coordinativi ai acestor liganzi pe bază de Mn(II) este cauzat nu doar de rolul său biomimetic sau în calitate de cofactor pentru unele enzime, ci și pentru că sunt buni precursori pentru materialele magnetice, precum și pentru crearea materialelor polinucleare. Studiul cu raze X a stabilit crearea în cristale atât a compușilor coordinativi discreți [Mn(H₂L¹)₂(H₂O)₂](NO₃)₂ (**46**) și [Mn₃(H₂L¹)₂(NCS)₂Cl₄(H₂O)₂] (**47**), obținuți prin asamblarea templată a componentelor, cât și a unor polimeri coordinativi 2D {[Mn₃(L¹)₃(H₂O)₂]·1.5C₂H₅OH}_n (**48**) și {[MnL²]·dmf}_n (**49**), ultimii fiind obținuți în reacția directă dintre liganzii pre-sintetizați 2,6-

diacetilpiridin bis(izonicotinoilhidrazona) (H_2L^1) și 2,6-diacetilpiridin bis(nicotinoilhidrazona) (H_2L^2) și sulfatul de mangan (*Sinteza la Institutul de Chimie*).

Studiul structural în baza analizei difracției razelor X pe monocristal a arătat că bazele Schiff pot fi antrenate la formarea compușilor atât în forma sa neutră (**46** și **47**), cât și în calitate de liganzi bideprotonați (**48** și **49**), coordinând la Mn(II) prin atomii de azot azometinici și atomii centrali de azot piridil, precum și prin atomii de oxigen carbohidrazidici, în timp ce inelele piridinice izonicotinice/nicotinice terminale sunt cele ce au permis extinderea dimensionalității structurii până la polimeri coordinativi 2D (**46-49**). Analiza termică fost examinată pentru a studia influența anionului anorganic asupra stabilității compușilor sintetizați. Ca urmare, s-a stabilit că compusul **46** care conține anionul de azotat începe să se descompună la o temperatură mai joasă decât însuși ligandul H_2L^1 datorită efectului de oxidare al acestui anion, ionul de clorură, pe de altă parte, mărește stabilitatea termică a compusului coordinativ, iar absența anionilor anorganici a evidențiat că compușii încep să se descompună la o temperatură apropiată sau puțin mai mare de cea a bazei Schiff.

În rezultatul studiului cu raze X s-a stabilit că interacțiunea sărurilor de Zn(II) și Cd(II) cu baza Schiff H_2L^2 în condiții solvotermale a condus la obținerea a trei polimeri coordinativi homometalici $[CdL^2]_n$ (**50**), $\{[CdL^2] \cdot 0.5dmf \cdot H_2O\}_n$ (**51**) și $\{[ZnL^2] \cdot 0.5dmf \cdot 1.5H_2O\}_n$ (**52**), precum și a doi polimeri coordinativi heterometalici $\{[Zn_{0.75}Cd_{1.25}(L^2)_2] \cdot dmf \cdot 0.5H_2O\}_n$ (**53**) și $\{[MnZn(L^2)_2] \cdot dmf \cdot 3H_2O\}_n$ (**54**) (*Sinteza la Institutul de Chimie*). Compusul **50** reprezintă un lanț coordinativ 1D, în timp ce compușii metalici din **51-54** au structuri bidimensionale izostructurale și izomorfe. Dacă polimerul coordinativ 1D nu a cristalizat cu molecule de solvent, atunci polimerii 2D găzduiesc moleculele de apă și dmf în spațiile lor dintre straturi în formă de cușcă, care ar putea fi eliberate în urma încălzirii probelor cristaline. Astfel, trei cristale solvate au fost degazate la două temperaturi (140 și 240/250°C) și proprietățile lor fotoluminiscente și de adsorbție-desorbție au fost înregistrate pentru a confirma această ipoteză. Ca urmare, s-a stabilit că probele degazate (fără solvenți) înregistrează o creștere a volumului porilor, a suprafeței specifice de adsorbție și a fotoluminiscenței comparativ cu cristalele sintetizate. Acest rezultat prestează compușii stratificați drept materiale excelente în calitate de senzori a solvenților mici.

Studiul cu raze X a fost efectuat și pentru un șir de compuși organici sintetizați la *Institutul de Chimie*. Doi compuși noi sunt derivați ai diaminobenzoilgloximei cu substituenți în poziția para – acidul bis(p-aminobenzoic)glyoximic hidrat, $[H_4L_1] \cdot H_2O$ (**55**) și bis(di-p-aminotoluengloximă) mono-p-aminotoluenă trihidrat, $[(H_2L)_2] \text{ pat} \cdot 3H_2O$ (**56**), aceștea fiind proliganzi de perspectivă. Ultimii cristalizează în formă neutră și așa cum aceste molecule posedă atât gupări donore de proton, cât și atomi acceptori, în cristalele respective se formează un sistem complicat de legături de hidrogen. Un alt proligand de perspectivă din clasa oximelor pentru care a fost stabilită structura cristalină este unul care poate fi utilizat ca ligand polidentat cu funcție punte. Acesta, fiind obținut în rezultatul condensării la care a fost antrenată diclorgloxima, cristalizează în funcție de condițiile de sinteză cu diverse molecule de cristalizare $(TDAGH_2)MA \cdot 2DMF$ (**57**) și $(TDAGH_2)MA \cdot 3H_2O$ (**58**) $((TDAGH_2)MA = \text{Bis}-(N,N'\text{-bis}(4\text{-tolil})\text{diaminogloximă})\text{-4-metilnilin}$). E important de menționat că aceste două forme au fost testate ca substanțe cu proprietăți antifungice și antibacteriene. A fost stabilită structura cristalină și pentru un derivat al cromenolului 2-(2,4-diclorofenil)-6-nitro-3-(1H-1,2,4-triazol-1-il)-2H-chromen-2-ol $C_{17}H_{10}Cl_2N_4O_4$ (**59**) ca un nou agent antifungic.

Un șir de compuși obținuți la *Universitatea de Stat din Moldova, Facultatea de Chimie și Tehnologie Chimică* au fost studiați din punct de vedere structural, aceștia fiind atât molecule organice, proliganzi de perspectivă, cât și compușii lor cu Cu(II): CuA(HL)NO₃·nH₂O [A = imidazol (**60**), 3,5-Br₂-piridină (**61**), 4-picolină (**62**), n = 0, 3] și [Cu(DMSO)(HL)]NO₃ (H₂L=2-(2-hidroxi-benziliden)-N-(prop-2-en-1-il)-hidrazinecarbotioamidă) (**63**). Ultimii au fost testați și manifestă proprietăți biologice și farmaceutice vitale.

6. Diseminarea rezultatelor obținute în proiect în formă de publicații

Lista publicațiilor din anul 2021 în care se reflectă doar rezultatele obținute în proiect, perfectată conform cerințelor față de lista publicațiilor.

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. **BACA, S.G., KOGERLER, P.** Cluster-Based Coordination Polymers of Mn/Fe-Oxo Pivalates and Isobutyrate. În: *Coordination Polymers and Metal-Organic Frameworks: Structures and Applications—A Themed Issue in Honor of Professor Christoph Janiak on the Occasion of His 60th Birthday*. Ed. Catherine Housecroft, Basel: MDPI, 2021. pp. 5-18. ISBN 978-3-0365-1959-3. Doi: [10.3390/books978-3-0365-1959-3](https://doi.org/10.3390/books978-3-0365-1959-3) (PDF).
<https://www.mdpi.com/books/pdfview/book/4430>
2. **BACA, S.G., HERRINGER, S., LIU, SH.-X., DECURTINS, S.** Polynuclear Clusters Based on Fe/Fe-Ln Carboxylates with Selected Magnetic Properties. În: *Comprehensive Coordination Chemistry III (Third Edition)*. Ed. E.C. Constable, G. Parkin, L. Que Jr., 2021, pp. 29-65. ISBN: 978-0-08-102689-2. Doi: [10.1016/B978-0-08-102688-5.00030-1](https://doi.org/10.1016/B978-0-08-102688-5.00030-1).

3. Editor culegere de articole, materiale ale conferințelor naționale/internaționale

1. **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.

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. **CAIMAC, N., MELNIC, E., CHISCA, D., FONARI, M.S.** 2,4-Diamino-6-phenyl-1,3,5-triazin-1-ium nitrate: intriguing crystal structure with high Z'/Z'' and hydrogen bond numbers and Hirshfeld surface analysis of intermolecular interactions. *CrystEngComm*. 2021, 23(17), pp. 3099-33108. Doi: [10.1039/d1ce00313e](https://doi.org/10.1039/d1ce00313e) (IF: 3,117).
2. **FONARI, M.S.; KRAVTSOV, V.Ch.; BOLD, V.; LUCENTI, E.; CARIATI, E.; MARINOTTO, D.; FORNI, A.** Structural Landscape of Zn(II) and Cd(II) Coordination Compounds with Two Isomeric Triimidazole Luminophores: Impact of Crystal Packing Patterns on Emission Properties. *Cryst Growth Des.* 2021, 21(7), pp. 4184-4200. Doi: [10.1021/acs.cgd.1c00459](https://doi.org/10.1021/acs.cgd.1c00459) (IF: 4,089).
3. **MELNIC, E., KRAVTSOV, V.Ch., LUCENTI, E., CARIATI, E., FORNI, A., SIMINEL, N., FONARI, M.S.** Regulation of $\pi\cdots\pi$ stacking interactions between triimidazole luminophores and comprehensive emission quenching by coordination to Cu(II). *New J Chem*. 2021, 45(20), pp. 9040-9052. Doi: [10.1039/d1nj00909e](https://doi.org/10.1039/d1nj00909e) (IF: 3,288).
4. **SUMALAN, R.; HALIP, L.; MAFFEI, M.; CROITOR, L.; SIMINEL, A.V.; RADULOV, I.; SUMALAN, R.M.; CRISAN, M.E.** Bioprospecting Fluorescent Plant Growth Regulators from Arabidopsis to Vegetable Crops. *Int J Mol Sci*. 2021, 22(6), pp. 2797-1-2797-16. Doi: [10.3390/ijms22062797](https://doi.org/10.3390/ijms22062797) (IF: 4,556).
5. **COLIBABA, G.V.; RUSNAC, D.; FEDOROV, V.; PETRENKO, P.; MONAICO, E.V.** Low-temperature sintering of highly conductive ZnO:Ga:Cl ceramics by means of chemical vapor transport. *J Eur Ceram Soc*. 2021, 41(1), pp. 443-450. Doi: [10.1016/j.jeurceramsoc.2020.08.002](https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2020.08.002) (IF: 4,495).
6. **AYHAN, M.M., ÖZCAN, E., DEDEOGLU, B., CHUMAKOV, YU., ZORLU, Y., COŞUTA, B.** Carbon (sp^3) tetrel bonding mediated BODIPY supramolecular assembly: Via unprecedented synergy of $C_{sp^3}\cdots N$ and $C_{sp^3}\cdots F$ pair interactions. *CrystEngComm*. 2021, 23(2), pp. 268-272. Doi: [10.1039/d0ce01640c](https://doi.org/10.1039/d0ce01640c) (IF: 3,117)..
7. **DANILESCU, O., BOUROSH, P.N., PETUHOV, O., KULIKOVA, O.V., BULHAC, I., CHUMAKOV, YU.M., CROITOR, L.** Crystal Engineering of Schiff Base Zn(II) and Cd(II) Homoand Zn(II)M(II) (M = Mn or Cd) Heterometallic Coordination Polymers and Their Ability to Accommodate Solvent Guest Molecules. *Molecules*. 2021, 26(8), pp. 2317-1-2317-15. Doi: [10.3390/molecules26082317](https://doi.org/10.3390/molecules26082317) (IF: 3,267).
8. **GRAUR, V., USATAIA, I., BOUROSH, P., KRAVTSOV, V., GARBUZ, O., HUREAU, CH., GULEA, A.** Synthesis, characterization, and biological activity of novel 3 d metal coordination compounds with 2-acetylpyridine N^4 -allyl-S-methylisothiosemicarbazone. *Appl Organomet Chem*. 2021, 35(5), pp. e6172. Doi: [10.1002/aoc.6172](https://doi.org/10.1002/aoc.6172) (IF: 3,140).
9. **ÖZCAN, E., DEDEOGLU, B., CHUMAKOV, Y., ZORLU, Y.; ÇOŞUT, B.; AYHAN, M.M.** Modulation of supramolecular self-assembly of BODIPY tectons via halogen bonding. *CrystEngComm*. 2021, 23(36), pp. 6365-6375. Doi: [10.1039/D1CE00862E](https://doi.org/10.1039/D1CE00862E) (IF: 3,545).
10. **PODGORNII, D., VAN LEUSEN, J., KRAVTSOV, V.CH., KÖGERLER, P.; BACA, S.G.** A $\{Na_2Fe_{10}\}$ isobutyrate cluster, interlinked into 1D chains. *CrystEngComm*. 2021, 23(30), pp. 5153-5156. Doi: [10.1039/d1ce00777g](https://doi.org/10.1039/d1ce00777g) (IF: 3,545).
11. **ZVEAGHINTSEVA, M.; STINGACI, E.; POGREBNOI, S.; SMETANSCAIA, A.; VALICA, V.; UNCU, L.; KRAVTSOV, V.; MELNIC, E.; PETROU, A.; GLAMOCLIIA, J.; SOKOVIC,**

- M.; CARAZO, A.; MLADENKA, P.; POROIKOV, V.; GERONIKAKI, A.; MACAEV, F.Z. Chromenol Derivatives as Novel Antifungal Agents: Synthesis, In Silico and In Vitro Evaluation. *Molecules*. 2021, 26(14), pp. 4304-1-4304-20. Doi: [10.3390/molecules26144304](https://doi.org/10.3390/molecules26144304) (IF: 4,411).
12. **BACA, S.G.**, AMOMBO NOA, F.M., ÖHRSTRÖM, L. Octanuclear heterometallic Fe^{III}-Ce^{IV} pivalate clusters: From a close {Fe₄Ce₄(μ₄-O)₄} cage to an open {Fe₄Ce₄(μ₄-O)₂(μ₃-O)₂} core. *Inorg Chim Acta*. 2021, 515, pp. 120038-1-120038-6. Doi: [10.1016/j.ica.2020.120038](https://doi.org/10.1016/j.ica.2020.120038) (IF: 2,304).
13. **CHISCA, D.**, **CROITOR, L.**, COROPCEANU, E.B., **FONARI, M.S.** Four Cu(II) coordination polymers with biocompatible isonicotinamide and picolinate ligands in interplay with anionic and neutral linkers. *Inorg Chem Commun*. 2021, 132, pp. 108864-1-108864-10. Doi: [10.1016/j.inoche.2021.108864](https://doi.org/10.1016/j.inoche.2021.108864) (IF: 2,495).
14. **CROITOR, L.**, COCU, M., BULHAC, I., **BOUROSH, P.N.**, **KRAVTSOV, V.C.**, PETUHOV, O., DANILESCU, O. Evolution from discrete mononuclear complexes to trinuclear linear cluster and 2D coordination polymers of Mn(II) with dihydrazone Schiff bases: preparation, structure and thermal behavior. *Polyhedron*. 2021, 206, pp. 115329. Doi: [10.1016/j.poly.2021.115329](https://doi.org/10.1016/j.poly.2021.115329) (IF: 2,343).
15. **GOROBET, A.**, CRISAN, M.E., **BOUROSH, P.N.**, SIMINEL, A.V., **CROITOR, L.** Supramolecular architectures and photoluminescent properties of triethanolammonium 4-nitrobenzoate salt and its Ni(II) complexes. *Polyhedron*. 2021, 193, pp. 114893. Doi: [10.1016/j.poly.2020.114893](https://doi.org/10.1016/j.poly.2020.114893) (IF: 2,343).
16. **VITIU, A.**, COROPCEANU, E., **BOUROSH, P.** Coordination Compounds of Transition Metals with Rhodanine-3-acetic Acid. *Russ J Coord Chem*. 2021, 47(11), pp. 717-729. Doi: [10.1134/S1070328421110063](https://doi.org/10.1134/S1070328421110063) (IF: 1,179).
17. COROPCEANU, E.B., URECHE, D., RIJA, A.P., CILOCI, A.A., CLAPCO, S.F., DVORNINA, E.G., BULHAC, I.I., COCU, M., **BOUROSH, P.N.** Synthesis and Structures of Nickel(II) Complexes Based on Dianilineglyoxime. Stimulation of the Proteolytic Properties by [Ni(DAnH)₂] \cdot 0.25H₂O. *Russ J Coord Chem*. 2021, 47(1), pp. 17-25. Doi: [10.1134/S1070328421010024](https://doi.org/10.1134/S1070328421010024) (IF: 0,973).
18. CUBA, L.N., GORINCIOI, E.C., DRAGANCEA, D.P., SHOVA, S.G., **BOUROSH, P.N.** Noncovalent Interactions in the Architectures with Substituted Salicylaldehyde Semicarbazones. *Russ J Coord Chem*. 2021, 47(7), pp. 488-501. Doi: <https://doi.org/10.1134/S1070328421070034> (IF: 0,973).
19. **GOROBET, A.**, CRISAN, M.E., **BOUROSH, P.N.**, **CROITOR, L.** Structural investigation and hirshfeld surface analysis of Cu(II) triethanolamine 4-nitrobenzoate. *Rev Roum Chim*. 2021, 66(4), pp. 355-359. Doi: [10.33224/rrch.2021.66.4.06](https://doi.org/10.33224/rrch.2021.66.4.06) (IF: 0,279). <http://revroum.lew.ro/wp-content/uploads/2021/04/Art%2006.pdf>
20. GULEA, A.P., GRAUR, V.O., ULCHINA, I.A.I., **BOUROSH, P.N.**, SMAGLII, V.A., GARBUZ, O.S., 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. *Russ J Gen Chem*. 2021, 91(1), pp. 98-107. Doi: [10.1134/S1070363221010114](https://doi.org/10.1134/S1070363221010114) (IF: 0,716).

21. ÇAYDAŞI, M., MINTAŞ, M.F., **CHUMAKOV, YU.M.**, VOLZ, S., CENGİZ, A., SEYİDOV M.H.YU. A. Study of Thermoelectric Performance of TlGaSe₂ Layered Dichalcogenides from First-Principles Calculations: Vacancy Defects Modeling and Engineering. *Phys. Status Solidi B* 2021, pp. 2100409 (1-12). Doi: [10.1002/pssb.202100409](https://doi.org/10.1002/pssb.202100409) (IF: 1,71).

4.2. în alte reviste din străinătate recunoscute

1. KOSTAKOĂYLU, S.T., **CHUMAKOV, Yu.**, ZORLU, Yu., SADAK, A.E., DENIZALTI, S., GÜREK, A.G., AYHAN, M.M. Elucidating the role of non-covalent interactions in unexpectedly high and selective CO₂ uptake and catalytic conversion of porphyrin-based ionic organic polymers. *Materials Advances*. 2021, 2(11), pp. 3685-3694. Doi: [10.1039/d1ma00217a](https://doi.org/10.1039/d1ma00217a).
2. **BACA, S.** KÖGERLER, P. Cluster-Based Coordination Polymers of Mn/Fe-Oxo Pivalates and Isobutyrate. *Chemistry*. 2021, **3(1)**, 314—326. Doi: [10.3390/chemistry3010023](https://doi.org/10.3390/chemistry3010023);

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

-

4.4. în alte reviste naționale

-

5. Articole în culegeri științifice naționale/internaționale

5.1. culegeri de lucrări științifice editate peste hotare

-

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)

-

6.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

1. BOUROȘ, P. Polimeri coordinați ai Zn(II) și Cd(II) cu acidul 1,2-benzoildicarbonic și liganzi din clasa bipiridinelor. Materiale avansate în biofarmaceutică și tehnică. *Conferința științifică națională cu participare internațională, dedicată aniversării a 75 ani de la nașterea academoicianului Aurelian Gulea și de la fondarea Universității de Stat din Moldova*. 26 mai 2021. Chișinău, pp. 82 – 90. ISBN 978-9975-89216-2.

6.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

1. DANILESCU, O., BULHAC, I., **BOUROȘ, P.**, COCU, M. Arhitectura versus metoda de sinteză a compușilor coordinativi mono- și dinucleari ai vanadiului (V(II), V(IV)) cu liganzi piridincarbonilici polidentati. *Conferința științifico-practică „Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă”* Ediția VIII. 20-21 martie 2021. Universitatea de Stat din Tiraspol. Facultatea biologie și chimie Volumul II. Chimie. Chișinău, pp. 55- 60.
2. URECHE, D., BULHAC, I., **BOUROSH, P.** A new Co(III) mononuclear complex containing dianilineglyoxime and pyridine ligands: synthesis and structure. *Conferința științifico-practică „Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă”* Ediția VIII. 20-21 martie 2021. Universitatea de Stat din Tiraspol. Facultatea biologie și chimie Volumul II. Chimie. Chișinău, pp. 68-74.

7. Teze ale conferințelor științifice

7.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

1. CRISAN, M., HALIP, L., SUMALAN, R., **CROITOR, L.**, SIMINEL, A., **BOUROSH, P.**, **CHUMAKOV, Yu.**, MAFFEI, M. Prospective fluorescent plant growth regulators and their response in plants. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 46.
2. **DARII, M.**, **NIRCA, E.**, **KRAVTSOV, V. Ch.**, **BOUROSH, P.**, HAUSER, J., DECURTINS, S., LIU, S.-X., SULTANOVA, O., **BACA, S. G.** Crystalline multi-component compounds involving hexaammine cobalt(III) cations and their effects against plant pathogenic bacteria. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 56.
3. DANILESCU, O., **CROITOR, L.**, COCU, M., **BOUROSH, P. N.**, BULHAC, I., **KRAVTSOV, V. Ch.**, PETUHOV, O. Discrete and polymeric Mn(II) coordination compounds with dihydrazone schiff bases. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 47.
4. DANILESCU, O., **BOUROSH, P. N.**, PETUHOV, O., KULIKOVA, O. V., **CHUMAKOV, Yu. M.**, BULHAC, I., **CROITOR, L.** Homo- and heterometallic Zn(II) and Cd(II) coordination polymers capable of retaining guest molecules. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 48.
5. **GOROBET, A.**, CRISAN, M. E., **BOUROSH, P. N.**, **CROITOR, L.** Insights into crystal structure and hirshfeld surface analysis of Cu(II) triethanolamine 4-nitrobenzoate. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 45.
6. LOZOVAN, V. N., **KRAVTSOV, V. Ch.**, **FONARI, M. S.** 3D Cd(II) coordination polymer assembled from biphenyl-4,4'-dicarboxylic acid and N,N'-(1,4-phenylene)bis(1- (pyridin-4-

- yl)methanimine) ligands. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 40.
7. **MELNIC, E., CHUMAKOV, Yu. M., KRAVTSOV, V. Ch.** Hirshfeld surface analysis of π - π stacking interactions in the crystals of Cu(II) complexes with aromatic ligands. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 49.
 8. **NIRCA, E., KRAVTSOV, V. Ch., BACA, S. G.** Linear trinuclear cobalt(ii) isobutyrate with 1,10-phenanthroline. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 52.
 9. **PODGORNII, D., BACA, S.G., KRAVTSOV, V. Ch.** Heterometallic {Fe^{III}₄Na₂} pivalate cluster – synthesis and structure characterisation. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 50.
 10. LUNEAU, D., REBER, C., GUIONNEAU, P., GUÉGAN, F., SHEPHERD, H.J., MORELL, C., **CHUMAKOV, Y.** Etude cristallographique et théorique du déplacement bathochrome de la luminescence du complexe trinucéaire [Mn(II)-Pt(II)-Mn(II)] sous pression: mise en cause d’une interaction Pt(II)-ligand intermoléculaire. *Association Française de Cristallographie*, 29 iunie – 2 iulie 2021, S10 - Cristallographie moléculaire, 00040, p. 174.
 11. CRISAN, M.E., **CROITOR, L., BOUROSH, P.N., VLASE, G., VLASE, T.** Structural and thermal characterization of polymorphic system metilethanolammonium 2-chloro-4-nitrobenzoate. *XLII National Conference on Calorimetry, Thermal Analysis and Applied Thermodynamics*, 27 - 28 ianuarie 2021, Udine, Italy, P36, p.133.
 12. PETRIC, M.F., CRISAN, M.E., **CROITOR, L., BOUROSH, P.N., VLASE, G., VLASE T.** Substituent effect on crystal structure and thermal stability of iminophosphoranes. *XLII National Conference on Calorimetry, Thermal Analysis and Applied Thermodynamics*, 27 - 28 ianuarie 2021, Udine, Italy, P37, p.135.
 13. COCU, M., CUBA, L., **BOUROSH, P., DANILESCU, O., KRAVTSOV, V., BULHAC, I.** Synthesis and structural study of new molibdenum(VI) coordination compounds based on 2,6-diformyl-4-methylphenol and izonicotinic hydrazide. *XXVIII Международная Чугаевская конференция по Координационной химии*. 03-08 octombrie 2021. Rusia. p. 391.
 14. **FONARI, M.S.** Some examples of Co(II), Zn(II), Cd(II) and Cu(I) coordination polymers with inclusion and luminescent properties, *The 3rd STRUCHKOV MEETING. International Workshop on Chemical Crystallography and Structural Biology dedicated to the 95th Birth Anniversary of Yuri T. Struchkov*. Book of Abstracts. November 15-19, 2021. RUDN University Moscow, Moscow, Russia. Section Keynote Lectures, p. 51-52. (comunicare orală).

7.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

1. COLIBABA, G., **COSTRIUCOVA, N.**, RUSNAC, D., BUSUIOC, S., MONAICO, E. Wettability of highly conductive ZnO:Ga:Cl CVT ceramics with various Ga content. *5th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering ICNBME-2021, November 3-5, 2021, Chisinau, Republic of Moldova*. Program and Abstract Book. ISBN 978-9975-72-592-7.S7-1.5. p. 114. (comunicare orală)
2. COLIBABA, G., RUSNAC, D., FEDOROV, V., **COSTRIUCOVA, N.**, MONAICO, E., POTLOG, T. Highly conductive ZnO thin films deposited using CVT ceramics as magnetron targets. *5th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering ICNBME-2021, November 3-5, 2021, Chisinau, Republic of Moldova*. Program and Abstract Book. ISBN 978-9975-72-592-7. S1-1.8. p. 63.(comunicare orală).

7.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

-

7.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

1. RUSNAC, D., **COSTRIUCOVA, N.**, COLIBABA, G. Efectul Cl asupra conductibilității straturilor subțiri de ZnO:Ga. In: *Conferința Studenților, Masteranzilor, Doctoranzilor UTM 2021, Chișinău UTM 23-25 martie 2021*, p. 73-76.

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

8.1.cărți (cu caracter informativ)

-

8.2. enciclopedii, dicționare

S. Baca. Cluster-based Coordination Polymers. Published in *Encyclopedia*.

<https://encyclopedia.pub/10330>

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

1. GOLOGAN, V.; SIDELNICOVA, S.; IVAȘCU, S.; **VOLODINA, G.** *Procedeu de depunere a acoperirilor din electrolit pe bază de crom trivalent*. Brevet de Invenție nr. [MD 4720 C1 2021.05.31](#).
2. **BACA, S.**; SULTANOVA, O.; **DARII, M.**; **BOUROȘ, P.** *Compusul coordinativ hexaamincobalt(III) triclorură bis(1,10-fenantrolină) trihidrat cu proprietăți de inhibitor al dezvoltării cancerului la vișă de vie*. Brevet de Invenție nr. [MD 4725 C1 2021.06.30](#).
3. **BACA, S.**; **DARII, M.**; **KRAVȚOV, V.**; CILOCI, A.; TIURINA, J.; LABLIUC, S.; DVORNINA, E.; BIVOL, C.; CLAPCO, S. *Compus coordinativ izobutirato-cloro-metoxo-(2,4,6-tris(2-piridil)-s-triazină)-mangan(II) metanol solvat care manifestă proprietăți de*

- stimulator al activității proteolitice la tulpina Fusarium gibbosum CNMN FD 12. Brevet de Invenție nr. MD 4724 C1 2021.06.30.*
4. URECHE, D.; BULHAC, I.; VEVERIȚĂ, A.; **BOUROȘ, P.**; LUPAȘCU, L. *Compusul 2,5,11,14-tetraazatriciclo-[13,3,1,16,10]-icosa-1(19),6,8,10(20),15,17-hexaen-3,4,12,13-tetraontetraoximă bis(N,N-dimetilformamidă) cu activitate antibacteriană și antifungică.* Brevet de Invenție nr. MD 4745 C1 2021.09.30.
 5. URECHE, D.; BULHAC, I.; **BOUROȘ, P.**; ROȘCA, D.; LUPAȘCU, L. *Bis-(N,N'-bis(4-tolil)diaminogloximă)-4-metilanilin-trihidrat pentru utilizare în calitate de remediu antibacterian în agricultură.* Brevet MD 4762 B1 din 2021.07.31.
 6. **BACA, S., DARIL, M., KRAVTSOV, V.** Giant Heterometallic Compounds of Manganese Oxy-Hydroxy-Isobutyrate with Lanthanides [Mn₂₆Ln₆O₁₆(OH)₁₂(O₂CCH(CH₃)₂)₄₂] (Ln = Tb, Dy, Ho) and Process for Their Preparation. MD.106, p.235. *Proceedings of The 13th Edition of Euroinvent Europe an Exhibition of Creativity and Innovation*, 20-22 mai 2021, Iași, România. ISSN Print: 2601-4564. Online: 2601-4572. MD.106. p. 235.
 7. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROȘ, 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. MD.86, p.220. *Proceedings of The 13th Edition of Euroinvent Europe an Exhibition of Creativity and Innovation*, 20-22 mai 2021, Iași, România. ISSN Print: 2601-4564. Online: 2601-4572. MD.86. p. 220.
 8. **MELNIC, E., KRAVTOV, V., BACA, S.** Process for Producing the Coordination Compound of Copper(II): Bis(μ₂-1-(7-chloro-6-methyl-2,3-bis(pyridine-2-yl)-5H-cyclopenta[b]pyrazine-5-yl)ethanone)-dichloro-di-copper(II) Methanol Solvate. MD.109, p.237. *Proceedings of The 13th Edition of Euroinvent Europe an Exhibition of Creativity and Innovation*, 20-22 May, 2021, Iași, România. ISSN Print: 2601-4564. Online: 2601-4572. MD.109. p. 237.
 9. **VITIU, A., CHIȘCA, D., GORINCIOI, E., COROPCEANU, E., BOUROȘ, P.** Zinc coordination compound with antifungal and antibacterial activity. MD.126, p.254. *Proceedings of The 13th Edition of Euroinvent Europe an Exhibition of Creativity and Innovation*, 20-22 May, 2021, Iași, România. ISSN Print: 2601-4564. Online: 2601-4572. MD.126. p. 254.
 10. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROȘ, 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: *The 25th international exhibition of inventions "INVENTICA 2021"*. 23-25 june 2021, Iași, România. 284. P. 300.
 11. URECHE, D., BULHAC, I., **BOUROȘ, P.**, ROȘCA, D., LUPAȘCU, L. The bis-(n,n'-bis(4-tolyl)diaminogloxim)-4-methylanyl-trihydrate for use as antibacterial remedy in agriculture. *Salonul Internațional de Invenții Inovare Traian Vuia, Timișoara*. 12-14 octombrie 2021. Catalog Oficial. Societatea inventatorilor din Banat. Clasa K. P. 164.

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 /senatul instituției)

-

10.3. alte lucrări științifico-metodice și didactice

-

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

Rezultatele obținute în cadrul proiectului largesc și îmbunătățesc cunoștințele existente despre procedeele de obținere, structură atomică și cristalină, proprietățile magnetochimice, luminescente, spectroscopice ale sistemelor mono- și polimetalice. Rezultatele structurale științifice obținute pentru un număr mai mare de compuși din aceeași clasă evidențiază valoarea teoretică, în comparație cu lucrările separate existente în țară și peste hotare, permit de a generaliza noi legități privind realizarea proceselor de sinteză, particularitățile structurale de asamblare a acestor compuși netriviali, cât și proprietățile valoroase ale sistemelor obținute.

8. Infrastructura de cercetare utilizată în cadrul proiectului

Birouri cu computere, printere, scanere; difractometru modern automatizat Xcalibur E pentru studiul structural al monocristalelor; Baza de Date Structurale Cambridge; Difractometru DRON pentru efectuarea unui control al fazelor substanțelor în formă de pulbere; Baza de Date ASTS (pentru pulberi), etuvă pentru sinteza solvotermală; băi cu ultrasunet; microscopie optice, inclusiv și binocular; balanțe analitice electronice; complexe de program pentru descifrarea, precizarea și vizualizarea structurilor cristaline.

9. Colaborare la nivel național în cadrul implementării proiectului

1. Institutul de Chimie, R. Moldova, Laboratoarele: Chimie Coordinativă, Chimie Bioanorganică și Biocompozite, Chimie Fizică și Cuantică, Chimie Ecologică, Sinteză Organică ș.a.;
2. Universitatea de Stat din Moldova, Facultatea de Chimie și Tehnologie Chimică, Facultatea de Fizică și Inginerie;
3. Universitatea din Tiraspol (cu sediul la Chișinău), Facultatea de Biologie și Chimie;
4. Institutul de Microbiologie și Biotehnologie;
5. Institutul Științifico-Practic de Horticultură și Tehnologie Alimentară.
6. Institutul de Fizică Aplicată, Laboratorul Fizica Compușilor Semiconductori "Sergiu Rădăușan".

10. Colaborare la nivel internațional în cadrul implementării proiectului

1. Institutul de Chimie „Coriolan Dragulescu”, Timișoara, România;
2. Universitatea de Vest din Timișoara, Centrul de Cercetare Analize termice în probleme de mediu, Timișoara, România;
3. Institutul de Chimie Macromoleculară Petru Poni, Iași, România;
4. Universitatea Națională de Medicină din Odesa, Odesa, Ucraina;
5. ISTM-CNR, Institutul de Științe Moleculare și Tehnologii din CNR și INSTM UdR, Milan, Italia;
6. Departamentul de Chimie, Universitatea pentru Studii din Milan, Milan, Italia;
7. Universitatea Tehnică din Gebze, Centru de Cercetare Nanotehnologică (GTU/NRC) din Gebze, Turcia;
8. Institutul de Chimie Anorganică, RWTH Universitatea din Aachen, Aachen, Germania.
9. Universitatea Highlands New Mexico, Las Vegas, NM, USA.
10. Universitatea de Științe Agricole și Medicină Veterinară a Banatului, Timișoara, România.

11. Dificultățile în realizarea proiectului

- Financiare, organizatorice, legate de resursele umane etc.
- Lipsa accesului la noi publicații în reviste științifice internaționale de top **la** tema proiectului;
- Repararea și scimbul tubului cu raze X la difractometrul Xcalibur a fost efectuat cu întârziere (din cauza COVID19);
- Metoda de procurare a consumabilelor (licitația generală susținută de Institutul de Fizică Aplicată în 2021) a durat mult și substanțele chimice planificate au fost achiziționate cu o întârziere inacceptabilă la sfârșitul anului 2021, în timp ce sinteza și creșterea cristalelor planificate durează în timp. Pentru implementarea eficientă a proiectului reactivele planificate trebuie primite la început de an. Achizițiile în parte în cadrul proiectului sunt mult mai eficiente.

12. Diseminarea rezultatelor obținute **în proiect** în formă de prezentări la foruri științifice (comunicări, postere – pentru cazurile când nu au fost publicate în materialele conferințelor, reflectate în p. 6)

Lista forurilor la care au fost prezentate rezultatele obținute în cadrul proiectului de stat sunt prezentate separat pentru:

➤ Manifestări științifice internaționale (în străinătate)

-

➤ Manifestări științifice internaționale (în Republica Moldova)

-

➤ Manifestări științifice naționale

1. **PODGORÎI, D.** Conferința științifică națională a doctoranzilor dedicată aniversării a 75-a a USM „Metodologii contemporane de cercetare și evaluare”, 22-23 aprilie 2021. Chișinău, Sinteza și caracteristica structurală a doi clusteri hexanucleari {Fe₆} în baza liganzilor pivalat și N,N,N',N' – tetrakis(hidroxietyl)etilendiamină. (comunicare orală).

➤ Manifestări științifice cu participare internațională

-

13. Aprecierea și recunoașterea rezultatelor obținute **în proiect** (premiu, medalii, titluri, alte aprecieri).

- **BACA, S., DARII, M., KRAVTSOV, V.** *Medalia de Aur*; EUROINVENT 2021. Iași. România.
- DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROȘ, P.**, CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., MATROI, A. *Medalia de Aur*; EUROINVENT 2021. Iași. România.
- **VITIU, A., CHIȘCA, D.**, GORINCIOI, E., COROPCEANU, E., **BOUROȘ, P.** *Medalia de Aur*; EUROINVENT 2021. Iași. România.
- **MELNIC, E., KRAVTOV, V., BACA, S.** *Diplomă de excelență*. EUROINVENT 2021. Iași. România.
- DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROȘ, P.**, CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., MATROI, A. *Medalie de argint*. The 25th international exhibition of inventions “INVENTICA 2021”. 23-25 iunie 2021, Iași, România.
- URECHE, D., BULHAC, I., **BOUROȘ, P.**, ROȘCA, D., LUPAȘCU, L. *Medalia de Aur*. Salonul Internațional de Invenții și Inovații "Traian Vuia". 2021. Timișoara. România.
- **BACA, S., CRIOTOR, L.** au fost menționate cu **certIFICATE DE REVIEWING**.

14. Promovarea rezultatelor cercetărilor obținute **în proiect** în mass-media:

➤ Emisiuni radio/TV de popularizare a științei/ seminare on-line

1. **Kravțov Victor, Bouroș Pavlina.** Știință și Inovare. Moldova 1, 11 iulie 2021 (25, 30 septembrie (repetare)).
2. **Kravțov Victor**, seminar științific on-line consacrat aniversării a 100 ani de la nașterea academicianului T. Malinowskii cu participarea oaspeților din diverse centre științifice/neștiințifice

➤ Articole de popularizare a științei (*altele*)

-

15. Teze de doctorat / postdoctorat susținute și confirmate în anul 2021 de membrii echipei proiectului

1. **VITIU Aliona**, „Compuși coordinativi ai unor metale tranziționale cu liganzi polidentati ce conțin azot, oxigen și sulf. Sinteză, arhitectură structurală, proprietăți”. Teză de doctorat. **Bouroș Pavlina**, doctor în științe chimice, conferențiar cercetător – conducător de doctorat în cotutelă.
2. LOZOVAN Vasile, „Sinteza și caracterizarea polimerilor coordinativi ai Zn(II) și Cd(II) în baza liganzilor punte azinici și azometinici”. Teză de doctorat. **Fonari Marina**, doctor în științe chimice, conferențiar cercetător – conducător de doctorat în cotutelă.

16. Materializarea rezultatelor obținute în proiect

Forme de materializare a rezultatelor cercetării în cadrul proiectului pot fi produse, utilaje și servicii noi, documente ale autorităților publice aprobate etc.

Teze de doctor în derulare

1. **Darii Mariana** “Materiale metal-organice în baza clusterilor de carboxilat și polimerilor coordinativi ai metalelor d și d-f”, conducători dr. **V. Kravțov**, dr. **S. Baca**
2. **Podgornâi Daniel** Designul, structura și proprietățile magnetice ale materialelor metalorganice de tip clusteri homo- și heteronucleari de Fe/Fe-Ln”, conducători dr. **V. Kravțov**, dr. **S. Baca**
3. **Ureche Dumitru** “Sinteza, studiul proprietăților și a arhitecturii moleculare ale compușilor coordinative ai metalelor de tip s și d cu liganzi polifuncționali”, conducători dr. hab. I. Bulhac, dr. **P. Bouroș**
4. **Stati Dumitru** “Materiale metal-organice multifuncționale în bază de clusteri de carboxilat și polimeri coordinativi homometalici Co(II,III) și heterometalici Co(II,III)/4f”, conducători dr. **V. Kravțov**, dr. **S. Baca**
5. **Melnic Elena** “Rolul legăturilor coordinative și a interacțiunilor π - π în edificarea arhitecturii supramoleculare în cristalele compușilor complecși de cupru. Studiul cu raze X” (teza de doctor prezentată la seminarul științific din laborator), conducător dr. **V. Kravțov**.

Teze de master și teze de liceță finisate și în derulare

1. **Capbătut Olga** “Sinteza și studiul compușilor coordinativi zero și multidimensionali în baza carboxilatului de Cu(II)” (master, UST), conducători dr. **S. Baca**, dr. **P. Bouroș**
2. **Nirca Ecaterina** “Sinteza și studiul compușilor coordinative ai Co(II,III) cu liganzi care conțin atomii donori N, O, S” (master în derulare, UST), conducători dr. **S. Baca**, dr. **P. Bouroș**
3. **Plusnina Maria** „Sinteza, structura și proprietățile compușilor coordinativi ai Co(II) și Ni(II) cu ligandul flexibil 4,4'-diaminodifenilmetan” (licență, UST), conducător dr. **D. Chișca**

4. **Caimac Nicoleta** „Sinteza și caracteristica compușilor coordinativi cu liganzi biologic activi” (licență în derulare, UST), conducător dr. **D. Chișca**

17. Informație suplimentară referitor la activitățile membrilor echipei în anul 2021

- Membru/președinte al comitetului organizatoric/științific, al comisiilor, consiliilor științifice de susținere a tezelor

1. **Kravțov Victor**, membru al Consiliului științific al IFA.
2. **Kravțov Victor**, membru al seminarului științific de profil „Fizica Aplicată”
3. **Fonari Marina**, membru al Comisiei de doctorat privind susținerea publică a tezei de doctorat cu titlul: „Sinteza și caracterizarea polimerilor coordinativi ai Zn(II) și Cd(II) în baza liganzilor punte azinici și azometinici”, elaborată de către studentul–doctorand LOZOVAN Vasile, program de doctorat 141.01. Chimie anorganică, domeniul științific: 1. Științe ale naturii. Data: 18 iunie 2021. Școala doctorală Științe Biologice, Geomice, Chimice și Tehnologice. Susținerea publică (în regim online).
4. **Bouroș Pavlina**, membru al Comisiei de îndrumare extinsă privind teza de doctorat cu titlul: „Sinteza și caracterizarea polimerilor coordinativi ai Zn(II) și Cd(II) în baza liganzilor punte azinici și azometinici”, elaborată de către studentul–doctorand LOZOVAN Vasile, program de doctorat 141.01. Chimie anorganică, domeniul științific: 1. Științe ale naturii. (22 decembrie 2020)
5. **Bouroș Pavlina**, membru al Comisiei de îndrumare extinsă privind teza de doctorat cu titlul: „Dinamica cuantică în sistemele moleculare dipolare”, elaborată de către doctoranda MÎRZAC Alexandra, 141.01. Fizică teoretică, domeniul științific: 1. Științe ale naturii. (noiembrie 2020).
6. **Bouroș Pavlina**, membru al comitetului concursului național „Teza de excelență a anului”: <https://www.anacec.md/files/Regulament-teze-excelenta-27.12.2019.pdf>, martie, ANACEC.
7. **Bouroș Pavlina**, recenzent / avizarea dărilor de seamă la AȘM, concurs pentru tineri cercetători AȘM.
8. **Kravțov Victor**, membru al comisiei de audit, creată de Ministerul Economiei R. Moldova, ca furnizor de serviciu pentru efectuarea experizei echipamentelor de laborator, 11.11. 2021.

- Redactor / membru al colegiilor de redacție al revistelor naționale / internaționale

- dr. **Kravțov Victor**, revista Moldavian Journal of the Physical Sciences / membru al colegiului de redacție.
- dr. **M. Fonari**, dr. **V. Kravșov**, dr. **S. Baca**, dr. **L. Croitor** - recenzenți la reviste internaționale de specialitate cotate.

18. Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect.

To design new crystalline hybrid organic/inorganic materials with advanced physical and biological properties and in accordance with the program of activities for 2021 crystal structures of 63 new crystalline compounds have been studied by single crystal X-ray diffraction and other physical methods. New synthetic approaches have been developed for creation of crystalline materials in the class of homo- and heterometallic polynuclear carboxylate clusters comprising the metal cores $\{Fe_6\}$, $\{Co_3\}$, $\{Co_2La_2\}$, $\{Co_2Er_2\}$ as well as cluster-based coordination polymer in which clusters with $\{Na_2Fe_{10}\}$ core are united in crystal structure in polymeric chains by 4,4'-bipyridine linker. Substantial research has been focused on new energy saving concepts for lighting and displays based on the radiation induced by the aggregation of organic phosphors. To study the correlation between the crystal structure and luminescent properties and the possibility of tuning the mode of stacking interactions responsible for aggregation by coordination of triimidazole phosphors to the metal, special attention was paying to the study of emission phenomena caused by the aggregation of phosphorus ligands in crystals of coordination compounds of Cu(II), Zn(II) and Cd(II) and in ionic compound with Eu(III). Crystals of 23 new mono-, bi- and polynuclear coordination compounds with different metal / phosphor / anion / water-ligand ratios were obtained. Crystals of all compounds exhibited an emission response when irradiated with a UV-visible lamp and the best performance crystals have been fully spectroscopically characterized. To explore the possibility of polymeric crystals to deliver biomolecules the crystals of Cu(II) coordination polymers with biocompatible molecules have been obtained. The crystal of triethanolammonium/4-nitrobenzoate organic salt and products of their interaction with $NiCl_2/Cu(CH_3COO)_2$ salts were obtained and characterized. Photoluminescence investigation reveals a correlation between the supramolecular assembly of components and photoluminescent properties. A new series of multi-component crystals containing the cation $[Co(NH_3)_6]^{3+}$ and N-, N,O- and O-donor ligands including sulfonate derivatives was synthesized and tested in vitro against agrobacterium.

In the framework of scientific collaboration with Institute of Chemistry and Moldova State University, a number of coordination polymers, organic and mononuclear coordination compounds have been studied by single crystal X-ray method: the evolution from discrete mononuclear complexes to trinuclear linear cluster and 2D coordination polymers of Mn(II) with dihydrazone Schiff bases has been explored; the structural similarity of homometallic Zn and Cd 2D coordination polymers and their heterometallic Zn/Cd and Mn/Zn analogs was proved. Some of studied compounds of Cu(II) with thiosemicarbazones possess vital biological properties, including substances with anticancer activity.

In 2021 within the framework of the project, 25 scientific articles were published in leading international scientific journals and monographs, including the most prestigious ones with high impact factors, team members took part in 13 international and national scientific conferences (on-line) and published 26 abstracts and proceedings, 5 patents were obtained and awarded with Gold and Silver medals and Diploma of excellence. Two doctor, one master theses and one licentiate diploma have been defended and three doctor theses, one master and one licentiate studies are in realization.

Pentru a dezvolta designul a noi materiale organice/anorganice hibride cristaline cu proprietăți fizice și biologice avansate și în conformitate cu programul de activitate pentru 2021, au fost studiate structurile a 63 de compuși noi în fază monocristalină prin difracție de raze X și alte metode fizice. Au fost dezvoltate noi abordări sintetice pentru crearea materialelor cristaline din clasa clusterilor polinucleari de carboxilat homo- și heterometalici, care includ nucleul metalic {Fe₆}, {Co₃}, {Co₂La₂}, {Co₂Er₂}, precum și a polimerului coordinativ în care clusterii cu nucleul {Na₂Fe₁₀} sunt uniți prin linkeri de 4,4'-bipiridină.

Cercetări substanțiale s-au concentrat asupra noilor concepte de economisire a energiei pentru iluminat și a utilajelor bazate pe conceptul de radiație indusă de agregarea luminoforilor organici. Pentru a studia corelația dintre structura cristalului și proprietățile luminescente și posibilitatea de reglare a modului de stivuire a interacțiunilor responsabile de agregare prin coordinarea luminoforilor de triimidazol la metal, o atenție deosebită a fost acordată studiului fenomenelor de emisie cauzate de agregarea liganzilor de luminofor în cristalele compușilor coordinativi ai Cu(II), Zn(II) și Cd(II) și în compusul ionic cu Eu(III). Au fost obținute cristale pentru 23 compuși coordinativi mono-, bi- și polinucleari noi cu diferite rapoarte metal/luminofor/anion/apă-ligand. Cristalele tuturor compușilor prezintă un răspuns de emisie atunci când sunt iradiate cu o lampă UV-vizibilă, iar cristale de performanță au fost caracterizate spectroscopic complet.

Pentru a explora posibilitatea livrării de către cristalele polimerice a biomoleculelor, au fost obținute cristalele polimerilor coordinativi de Cu(II) cu molecule biocompatibile. Au fost obținute și caracterizate în fază monocristalină sarea organică de trietanolamoniu/4-nitrobenzoat și produsele interacțiunii acestei cu sărurile NiCl₂/Cu(CH₃COO)₂. Investigația fotoluminescenței pentru acestea relevă o corelație între ansamblul supramolecular al componentelor și proprietățile lor fotoluminescente. A fost sintetizată o nouă serie de cristale multicomponente care conțin cationul [Co(NH₃)₆]³⁺ și liganzi N-, N,O- și O-donatori, inclusiv derivați de sulfonat, care au fost testați in vitro împotriva agrobacteriei.

În cadrul colaborării științifice cu Institutul de Chimie și Universitatea de Stat din Moldova, o serie de polimeri coordinativi, compuși organici și coordinativi mononucleari au fost studiați prin metoda cu raze X pe monocristal: evoluția de la complexe mononucleare discrete la cluster trinuclear liniar și rețele coordinative 2D au fost explorate la compușii de Mn(II) cu baze Schiff în bază de dihidrazone; a fost demonstrată asemănarea structurală a polimerilor coordinativi 2D homometalici de Zn și Cd cu a analogilor heterometalici Zn/Cd și Mn/Zn. Unii dintre compușii studiați de Cu(II) cu tiosemicarbazonele posedă proprietăți biologice vitale, inclusiv cu proprietăți anticancer.

În 2021, în cadrul proiectului, au fost publicate 25 de articole științifice în reviste și monografii științifice internaționale de top, inclusiv în reviste prestigioase cu factori de impact mare, membrii echipei au participat la 13 conferințe științifice internaționale și naționale (on-line) și au publicat 26 de rezumate, au obținut 5 brevete, care au fost premiate cu medalii de aur, argint și diplomă de excelență la saloane de invenție. Au fost susținute două teze de doctor, una de master și una de licență și sunt în curs de realizare 3 teze de doctor, o teză de master și una de licență.

19. Recomandări, propuneri

1. Este necesar să se ofere o oportunitate de a achiziționa rapid, în cadrul proiectului, echipamente electronice mici pentru calculatoare - camere web, căști, microfoane, care sunt esențiale pentru munca online în contextul pandemiei de COVID 19;
2. Achizițiile în parte în cadrul proiectului vor fi mai eficiente;
3. Este necesară o planificare a posibilității unei mici finanțări suplimentare pentru creșterea calitativă a personalului (un adaos pentru o diplomă științifică după susținerea unei teze de doctorat, trecerea la o categorie superioară) fără a atinge restului costurilor cuprinse în proiect. Există o contradicție între cerința de a avea tineri în echipa științifică și oportunitățile reale de a stimula creșterea calitativă în cadrul proiectului, fără a încălca interesele celorlalți participanți la proiect;
4. E necesar internet-accesul la publicații în reviste științifice internaționale de top

Conducătorul de proiect _____ / (Kravțov Victor)

Data: _____

LS

Lista lucrărilor științifice, științifico-metodice și didactice

publicate în anul de referință 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, ANCD 20.80009.5007.15

1. Monografii (recomandate spre editare de consiliul științific/senatul organizației din domeniile cercetării și inovării)

1.1. monografii internaționale

-

1.2. monografii naționale

-

2. Capitle în monografii naționale/internaționale

1. **BACA, S.G., KOGERLER, P.** Cluster-Based Coordination Polymers of Mn/Fe-Oxo Pivalates and Isobutyrate. În: *Coordination Polymers and Metal-Organic Frameworks: Structures and Applications—A Themed Issue in Honor of Professor Christoph Janiak on the Occasion of His 60th Birthday*. Ed. Catherine Housecroft, Basel: MDPI, 2021. pp. 5-18. ISBN 978-3-0365-1959-3. Doi: 10.3390/books978-3-0365-1959-3 (PDF).
<https://www.mdpi.com/books/pdfview/book/4430>
2. **BACA, S.G., HERRINGER, S., LIU, SH.-X., DECURTINS, S.** Polynuclear Clusters Based on Fe/Fe-Ln Carboxylates with Selected Magnetic Properties. În: *Comprehensive Coordination Chemistry III (Third Edition)*. Ed. E.C. Constable, G. Parkin, L. Que Jr., 2021, pp. 29-65. ISBN: 978-0-08-102689-2. Doi: [10.1016/B978-0-08-102688-5.00030-1](https://doi.org/10.1016/B978-0-08-102688-5.00030-1).

3. Editor culegere de articole, materiale ale conferințelor naționale/internaționale

1. **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.

4. Articole în reviste științifice

4.1. în reviste din bazele de date Web of Science și SCOPUS (cu indicarea factorului de impact IF)

2. **CAIMAC, N., MELNIC, E., CHISCA, D., FONARI, M.S.** 2,4-Diamino-6-phenyl-1,3,5-triazin-1-ium nitrate: intriguing crystal structure with high Z'/Z" and hydrogen bond numbers and Hirshfeld surface analysis of intermolecular interactions. *CrystEngComm*. 2021, 23(17), pp. 3099-33108. Doi: [10.1039/d1ce00313e](https://doi.org/10.1039/d1ce00313e) (IF: 3,117).

3. **FONARI, M.S.; KRAVTSOV, V.Ch.;** BOLD, V.; LUCENTI, E.; CARIATI, E.; MARINOTTO, D.; FORNI, A. Structural Landscape of Zn(II) and Cd(II) Coordination Compounds with Two Isomeric Triimidazole Luminophores: Impact of Crystal Packing Patterns on Emission Properties. *Cryst Growth Des.* 2021, 21(7), pp. 4184-4200. Doi: Doi: [10.1021/acs.cgd.1c00459](https://doi.org/10.1021/acs.cgd.1c00459) (IF: 4,089).
4. **MELNIC, E., KRAVTSOV, V.Ch.,** LUCENTI, E., CARIATI, E., FORNI, A., SIMINEL, N., **FONARI, M.S.** Regulation of $\pi\cdots\pi$ stacking interactions between triimidazole luminophores and comprehensive emission quenching by coordination to Cu(II). *New J Chem.* 2021, 45(20), pp. 9040-9052. Doi: [10.1039/d1nj00909e](https://doi.org/10.1039/d1nj00909e) (IF: 3,288).
5. SUMALAN, R.; HALIP, L.; MAFFEI, M.; **CROITOR, L.;** SIMINEL, A.V.; RADULOV, I.; SUMALAN, R.M.; CRISAN, M.E. Bioprospecting Fluorescent Plant Growth Regulators from Arabidopsis to Vegetable Crops. *Int J Mol Sci.* 2021, 22(6), pp. 2797-1-2797-16. Doi: Doi: [10.3390/ijms22062797](https://doi.org/10.3390/ijms22062797) (IF: 4,556).
6. COLIBABA, G.V.; RUSNAC, D.; FEDOROV, V.; **PETRENKO, P.;** MONAICO, E.V. Low-temperature sintering of highly conductive ZnO:Ga:Cl ceramics by means of chemical vapor transport. *J Eur Ceram Soc.* 2021, 41(1), pp. 443-450. Doi: [10.1016/j.jeurceramsoc.2020.08.002](https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2020.08.002) (IF: 4,495).
7. AYHAN, M.M., ÖZCAN, E., DEDEOGLU, B., **CHUMAKOV, YU.,** ZORLU, Y., COŞUTA, B. Carbon (sp^3) tetrel bonding mediated BODIPY supramolecular assembly: Via unprecedented synergy of $C_{sp^3}\cdots N$ and $C_{sp^3}\cdots F$ pair interactions. *CrystEngComm.* 2021, 23(2), pp. 268-272. Doi: [10.1039/d0ce01640c](https://doi.org/10.1039/d0ce01640c) (IF: 3,117)..
8. DANILESCU, O., **BOUROSH, P.N.,** PETUHOV, O., KULIKOVA, O.V., BULHAC, I., CHUMAKOV, YU.M., **CROITOR, L.** Crystal Engineering of Schiff Base Zn(II) and Cd(II) Homoand Zn(II)M(II) (M = Mn or Cd) Heterometallic Coordination Polymers and Their Ability to Accommodate Solvent Guest Molecules. *Molecules.* 2021, 26(8), pp. 2317-1-2317-15. Doi: [10.3390/molecules26082317](https://doi.org/10.3390/molecules26082317) (IF: 3,267).
9. GRAUR, V., USATAIA, I., **BOUROSH, P., KRAVTSOV, V.,** GARBUZ, O., HUREAU, CH., GULEA, A. Synthesis, characterization, and biological activity of novel 3 d metal coordination compounds with 2-acetylpyridine N^4 -allyl-S-methylisothiosemicarbazone. *Appl Organomet Chem.* 2021, 35(5), pp. e6172. Doi: [10.1002/aoc.6172](https://doi.org/10.1002/aoc.6172) (IF: 3,140).
10. ÖZCAN, E., DEDEOGLU, B., **CHUMAKOV, Y.,** ZORLU, Y.; ÇOŞUT, B.; AYHAN, M.M. Modulation of supramolecular self-assembly of BODIPY tectons via halogen bonding. *CrystEngComm.* 2021, 23(36), pp. 6365-6375. Doi: [10.1039/D1CE00862E](https://doi.org/10.1039/D1CE00862E) (IF: 3,545).
11. **PODGORNII, D.,** VAN LEUSEN, J., KRAVTSOV, V.CH., KÖGERLER, P.; **BACA, S.G.** A $\{Na_2Fe_{10}\}$ isobutyrate cluster, interlinked into 1D chains. *CrystEngComm.* 2021, 23(30), pp. 5153-5156. Doi: Doi: [10.1039/d1ce00777g](https://doi.org/10.1039/d1ce00777g) (IF: 3,545).
12. ZVEAGHINTSEVA, M.; STINGACI, E.; POGREBNOI, S.; SMETANSCAIA, A.; VALICA, V.; UNCU, L.; **KRAVTSOV, V.;** **MELNIC, E.;** PETROU, A.; GLAMOCLIIA, J.; SOKOVIC, M.; CARAZO, A.; MLADENKA, P.; POROIKOV, V.; GERONIKAKI, A.;

- MACAEV, F.Z. Chromenol Derivatives as Novel Antifungal Agents: Synthesis, In Silico and In Vitro Evaluation. *Molecules*. 2021, 26(14), pp. 4304-1-4304-20. Doi: [10.3390/molecules26144304](https://doi.org/10.3390/molecules26144304) (IF: 4,411).
13. **BACA, S.G.**, AMOMBO NOA, F.M., ÖHRSTRÖM, L. Octanuclear heterometallic Fe^{III}-Ce^{IV} pivalate clusters: From a close {Fe₄Ce₄(μ₄-O)₄} cage to an open {Fe₄Ce₄(μ₄-O)₂(μ₃-O)₂} core. *Inorg Chim Acta*. 2021, 515, pp. 120038-1-120038-6. Doi: [10.1016/j.ica.2020.120038](https://doi.org/10.1016/j.ica.2020.120038) (IF: 2,304).
14. **CHISCA, D.**, **CROITOR, L.**, COROPCEANU, E.B., **FONARI, M.S.** Four Cu(II) coordination polymers with biocompatible isonicotinamide and picolinate ligands in interplay with anionic and neutral linkers. *Inorg Chem Commun*. 2021, 132, pp. 108864-1-108864-10. Doi: [10.1016/j.inoche.2021.108864](https://doi.org/10.1016/j.inoche.2021.108864) (IF: 2,495).
15. **CROITOR, L.**, COCU, M., BULHAC, I., **BOUROSH, P.N.**, **KRAVTSOV, V.C.**, PETUHOV, O., DANILESCU, O. Evolution from discrete mononuclear complexes to trinuclear linear cluster and 2D coordination polymers of Mn(II) with dihydrazone Schiff bases: preparation, structure and thermal behavior. *Polyhedron*. 2021, 206, pp. 115329. Doi: [10.1016/j.poly.2021.115329](https://doi.org/10.1016/j.poly.2021.115329) (IF: 2,343).
16. **GOROBET, A.**, CRISAN, M.E., **BOUROSH, P.N.**, SIMINEL, A.V., **CROITOR, L.** Supramolecular architectures and photoluminescent properties of triethanolammonium 4-nitrobenzoate salt and its Ni(II) complexes. *Polyhedron*. 2021, 193, pp. 114893. Doi: [10.1016/j.poly.2020.114893](https://doi.org/10.1016/j.poly.2020.114893) (IF: 2,343).
17. **VITIU, A.**, COROPCEANU, E., **BOUROSH, P.** Coordination Compounds of Transition Metals with Rhodanine-3-acetic Acid. *Russ J Coord Chem*. 2021, 47(11), pp. 717-729. Doi: [10.1134/S1070328421110063](https://doi.org/10.1134/S1070328421110063) (IF: 1,179).
18. COROPCEANU, E.B., URECHE, D., RIJA, A.P., CILOCI, A.A., CLAPCO, S.F., DVORNINA, E.G., BULHAC, I.I., COCU, M., **BOUROSH, P.N.** Synthesis and Structures of Nickel(II) Complexes Based on Dianilineglyoxime. Stimulation of the Proteolytic Properties by [Ni(DAnH)₂]•0.25H₂O. *Russ J Coord Chem*. 2021, 47(1), pp. 17-25. Doi: [10.1134/S1070328421010024](https://doi.org/10.1134/S1070328421010024) (IF: 0,973).
19. CUBA, L.N., GORINCIOI, E.C., DRAGANCEA, D.P., SHOVA, S.G., **BOUROSH, P.N.** Noncovalent Interactions in the Architectures with Substituted Salicylaldehyde Semicarbazones. *Russ J Coord Chem*. 2021, 47(7), pp. 488-501. Doi: <https://doi.org/10.1134/S1070328421070034> (IF: 0,973).
20. **GOROBET, A.**, CRISAN, M.E., **BOUROSH, P.N.**, **CROITOR, L.** Structural investigation and hirshfeld surface analysis of Cu(II) triethanolamine 4-nitrobenzoate. *Rev Roum Chim*. 2021, 66(4), pp. 355-359. Doi: [10.33224/rrch.2021.66.4.06](https://doi.org/10.33224/rrch.2021.66.4.06) (IF: 0,279). <http://revroum.lew.ro/wp-content/uploads/2021/04/Art%2006.pdf>
21. GULEA, A.P., GRAUR, V.O., ULCHINA, I.A.I., **BOUROSH, P.N.**, SMAGLII, V.A., GARBUZ, O.S., 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. *Russ J Gen Chem.* 2021, 91(1), pp. 98-107. Doi: [10.1134/S1070363221010114](https://doi.org/10.1134/S1070363221010114) (IF: 0,716).

22. ÇAYDAŞI, M., MINTAŞ, M.F., **CHUMAKOV, Yu.M.**, VOLZ, S., CENGİZ, A., SEYİDOV M.H.YU. A. Study of Thermoelectric Performance of TlGaSe₂ Layered Dichalcogenides from First-Principles Calculations: Vacancy Defects Modeling and Engineering. *Phys. Status Solidi B* 2021, pp. 2100409 (1-12). Doi: [10.1002/pssb.202100409](https://doi.org/10.1002/pssb.202100409) (IF: 1,71).

4.2. în alte reviste din străinătate recunoscute

1. KOSTAKOĂYLU, S.T., **CHUMAKOV, Yu.**, ZORLU, Yu., SADAK, A.E., DENIZALTI, S., GÜREK, A.G., AYHAN, M.M. Elucidating the role of non-covalent interactions in unexpectedly high and selective CO₂ uptake and catalytic conversion of porphyrin-based ionic organic polymers. *Materials Advances.* 2021, 2(11), pp. 3685-3694. Doi: [10.1039/d1ma00217a](https://doi.org/10.1039/d1ma00217a).
2. **BACA, S.** KÖGERLER, P. Cluster-Based Coordination Polymers of Mn/Fe-Oxo Pivalates and Isobutyrate. *Chemistry.* 2021, **3(1)**, 314—326. Doi: [10.3390/chemistry3010023](https://doi.org/10.3390/chemistry3010023);

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

-

4.4. în alte reviste naționale

-

5. Articole în culegeri științifice naționale/internaționale

5.1. culegeri de lucrări științifice editate peste hotare

-

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)

-

6.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

1. **BOUROȘ, P.** Polimeri coordinativi ai Zn(II) și Cd(II) cu acidul 1,2-benzoildicarbonic și liganzi din clasa bipiridinelor. Materiale avansate în biofarmaceutică și tehnică. *Conferința științifică națională cu participare internațională, dedicată aniversării a 75 ani de la nașterea*

academoicianului Aurelian Gulea și de la fondarea Universității de Stat din Moldova. 26 mai 2021. Chișinău, pp. 82 – 90. ISBN 978-9975-89216-2.

6.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

1. DANILESCU, O., BULHAC, I., **BOUROȘ, P.**, COCU, M. Arhitectura versus metoda de sinteză a compușilor coordinativi mono- și dinucleari ai vanadiului (V(II), V(IV)) cu liganzi piridincarbonilici polidentati. *Conferința științifico-practică „Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă”* Ediția VIII. 20-21 martie 2021. Universitatea de Stat din Tiraspol. Facultatea biologie și chimie Volumul II. Chimie. Chișinău, pp. 55- 60.
2. URECHE, D., BULHAC, I., **BOUROȘ, P.** A new Co(III) mononuclear complex containing dianilineglyoxime and pyridine ligands: synthesis and structure. *Conferința științifico-practică „Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă”* Ediția VIII. 20-21 martie 2021. Universitatea de Stat din Tiraspol. Facultatea biologie și chimie Volumul II. Chimie. Chișinău, pp. 68-74.

7. Teze ale conferințelor științifice

7.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

1. CRISAN, M., HALIP, L., SUMALAN, R., **CROITOR, L.**, SIMINEL, A., **BOUROȘ, P.**, **CHUMAKOV, Yu.**, MAFFEI, M. Prospective fluorescent plant growth regulators and their response in plants. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 46.
2. **DARII, M.**, **NIRCA, E.**, **KRAVTSOV, V. Ch.**, **BOUROȘ, P.**, HAUSER, J., DECURTINS, S., LIU, S.-X., SULTANOVA, O., **BACA, S. G.** Crystalline multi-component compounds involving hexaammine cobalt(III) cations and their effects against plant pathogenic bacteria. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 56.
3. DANILESCU, O., **CROITOR, L.**, COCU, M., **BOUROȘ, P. N.**, BULHAC, I., **KRAVTSOV, V. Ch.**, PETUHOV, O. Discrete and polymeric Mn(II) coordination compounds with dihydrazone schiff bases. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 47.
4. DANILESCU, O., **BOUROȘ, P. N.**, PETUHOV, O., KULIKOVA, O. V., **CHUMAKOV, Yu. M.**, BULHAC, I., **CROITOR, L.** Homo- and heterometallic Zn(II) and Cd(II) coordination polymers capable of retaining guest molecules. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 48.
5. **GOROBET, A.**, CRISAN, M. E., **BOUROȘ, P. N.**, **CROITOR, L.** Insights into crystal structure and hirshfeld surface analysis of Cu(II) triethanolamine 4-nitrobenzoate. *The 13th*

Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 45.

6. LOZOVAN, V. N., **KRAVTSOV, V. Ch.**, **FONARI, M. S.** 3D Cd(II) coordination polymer assembled from biphenyl-4,4'-dicarboxylic acid and N,N'-(1,4-phenylene)bis(1- (pyridin-4-yl)methanimine) ligands. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 40.
7. **MELNIC, E.**, **CHUMAKOV, Yu. M.**, **KRAVTSOV, V. Ch.** Hirshfeld surface analysis of π - π stacking interactions in the crystals of Cu(II) complexes with aromatic ligands. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 49.
8. **NIRCA, E.**, **KRAVTSOV, V. Ch.**, **BACA, S. G.** Linear trinuclear cobalt(ii) isobutyrate with 1,10-phenanthroline. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 52.
9. **PODGORNII, D.**, **BACA, S.G.**, **KRAVTSOV, V. Ch.** Heterometallic $\{Fe^{III}_4Na_2\}$ pivalate cluster – synthesis and structure characterisation. *The 13th Edition “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”*, 7-8 octombrie 2021, Timișoara, România, p. 50.
10. LUNEAU, D., REBER, C., GUIONNEAU, P., GUÉGAN, F., SHEPHERD, H.J., MORELL, C., **CHUMAKOV, Y.** Etude cristallographique et théorique du déplacement bathochrome de la luminescence du complexe trinucéaire [Mn(II)-Pt(II)-Mn(II)] sous pression: mise en cause d'une interaction Pt(II)-ligand intermoléculaire. *Association Française de Cristallographie*, 29 iunie – 2 iulie 2021, S10 - Cristallographie moléculaire, 00040, p. 174.
11. CRISAN, M.E., **CROITOR, L.**, **BOUROSH, P.N.**, VLASE, G., VLASE, T. Structural and thermal characterization of polymorphic system metilethanolammonium 2-chloro-4-nitrobenzoate. *XLII National Conference on Calorimetry, Thermal Analysis and Applied Thermodynamics*, 27 - 28 ianuarie 2021, Udine, Italy, P36, p.133.
12. PETRIC, M.F., CRISAN, M.E., **CROITOR, L.**, **BOUROSH, P.N.**, VLASE, G., VLASE T. Substituent effect on crystal structure and thermal stability of iminophosphoranes. *XLII National Conference on Calorimetry, Thermal Analysis and Applied Thermodynamics*, 27 - 28 ianuarie 2021, Udine, Italy, P37, p.135.
13. COCU, M., CUBA, L., **BOUROSH, P.**, DANILESCU, O., **KRAVTSOV, V.**, BULHAC, I. Synthesis and structural study of new molibdenum(VI) coordination compounds based on 2,6-diformyl-4-methylphenol and izonicotinic hydrazide. *XXVIII Международная Чугаевская конференция по Координационной химии*. 03-08 octombrie 2021. Rusia. p. 391.

14. **FONARI, M.S.** Some examples of Co(II), Zn(II), Cd(II) and Cu(I) coordination polymers with inclusion and luminescent properties, *The 3rd STRUCHKOV MEETING. International Workshop on Chemical Crystallography and Structural Biology dedicated to the 95th Birth Anniversary of Yuri T. Struchkov*. Book of Abstracts. November 15-19, 2021. RUDN University Moscow, Moscow, Russia. Section Keynote Lectures, p. 51-52. (comunicare orală).

7.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

1. COLIBABA, G., **COSTRIUCOVA, N.**, RUSNAC, D., BUSUIOC, S., MONAICO, E. Wettability of highly conductive ZnO:Ga:Cl CVT ceramics with various Ga content. *5th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering ICNBME-2021, November 3-5, 2021, Chisinau, Republic of Moldova*. Program and Abstract Book. ISBN 978-9975-72-592-7. S7-1.5. p. 114. (comunicare orală)
2. COLIBABA, G., RUSNAC, D., FEDOROV, V., **COSTRIUCOVA, N.**, MONAICO, E., POTLOG, T. Highly conductive ZnO thin films deposited using CVT ceramics as magnetron targets. *5th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering ICNBME-2021, November 3-5, 2021, Chisinau, Republic of Moldova*. Program and Abstract Book. ISBN 978-9975-72-592-7. S1-1.8. p. 63. (comunicare orală).

7.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

-

7.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

-

1. RUSNAC, D., **COSTRIUCOVA, N.**, COLIBABA, G. Efectul Cl asupra conductibilității straturilor subțiri de ZnO:Ga. In: *Conferința Studenților, Masteranzilor, Doctoranzilor UTM 2021*, Chișinău UTM 23-25 martie 2021, p. 73-76.

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

8.1. cărți (cu caracter informativ)

-

8.2. enciclopedii, dicționare

1. S. Baca. Cluster-based Coordination Polymers. Published in *Encyclopedia*.
<https://encyclopedia.pub/10330>

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

1. **BACA, S.; SULTANOVA, O.; DARII, M.; BOUROȘ, P.** *Compusul coordinativ hexaamincobalt(III) tricolorură bis(1,10-fenantrolină) trihidrat cu proprietăți de inhibitor al dezvoltării cancerului la vișă de vie.* Brevet de Invenție nr. [MD 4725 C1 2021.06.30](#).
2. **BACA, S.; DARII, M.; KRAVTOV, V.; CILOCI, A.; TIURINA, J.; LABLIUC, S.; DVORNINA, E.; BIVOL, C.; CLAPCO, S.** *Compus coordinativ izobutirato-cloro-metoxo-(2,4,6-tris(2-piridil)-s-triazină)-mangan(II) metanol solvat care manifestă proprietăți de stimulator al activității proteolitice la tulpina Fusarium gibbosum CNMN FD 12.* Brevet de Invenție nr. [MD 4724 C1 2021.06.30](#).
3. **URECHE, D.; BULHAC, I.; VEVERIȚĂ, A.; BOUROȘ, P.; LUPAȘCU, L.** *Compusul 2,5,11,14-tetraazatriciclo-[13,3,1,16,10]-icosa-1(19),6,8,10(20),15,17-hexaen-3,4,12,13-tetraontetraoximă bis(N,N-dimetilformamidă) cu activitate antibacteriană și antifungică.* Brevet de Invenție nr. [MD 4745 C1 2021.09.30](#).
4. **URECHE, D.; BULHAC, I.; BOUROȘ, P.; ROȘCA, D.; LUPAȘCU, L.** *Bis-(N,N'-bis(4-tolil)diaminogloximă)-4-metilanilin-trihidrat pentru utilizare în calitate de remediu antibacterian în agricultură.* Brevet MD 4762 B1 din 2021.07.31.
5. **GOLOGAN, V.; SIDELNICOVA, S.; IVAȘCU, S.; VOLODINA, G.** *Procedeu de depunere a acoperirilor din electrolit pe bază de crom trivalent.* Brevet de Invenție nr. [MD 4720 C1 2021.05.31](#)

1. **BACA, S., DARII, M., KRAVTSOV, V.** Giant Heterometallic Compounds of Manganese Oxy-Hydroxy-Isobutyrate with Lanthanides $[Mn_{26}Ln_6O_{16}(OH)_{12}(O_2CCH(CH_3)_2)_{42}]$ (Ln = Tb, Dy, Ho) and Process for Their Preparation. MD.106, p.235. *Proceedings of The 13th Edition of Euroinvent Europe an Exhibition of Creativity and Innovation*, 20-22 mai 2021, Iași, România. ISSN Print: 2601-4564. Online: 2601-4572. MD.106. p. 235.
2. **DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., BOUROȘ, 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. MD.86, p.220. *Proceedings of The 13th Edition of Euroinvent Europe an Exhibition of Creativity and Innovation*, 20-22 mai 2021, Iași, România. ISSN Print: 2601-4564. Online: 2601-4572. MD.86. p. 220.
3. **MELNIC, E., KRAVTOV, V., BACA, S.** Process for Producing the Coordination Compound of Copper(II): Bis(μ_2 -1-(7-chloro-6-methyl-2,3-bis(pyridine-2-yl)-5H-cyclopenta[b]pyrazine-5-yl)ethanone)-dichloro-di-copper(II) Methanol Solvate. MD.109, p.237. *Proceedings of The 13th Edition of Euroinvent Europe an Exhibition of Creativity and Innovation*, 20-22 May, 2021, Iași, România. ISSN Print: 2601-4564. Online: 2601-4572. MD.109. p. 237.
4. **VITIU, A., CHIȘCA, D., GORINCIOI, E., COROPCEANU, E., BOUROȘ, P.** Zinc coordination compound with antifungal and antibacterial activity. MD.126, p.254. *Proceedings*

of The 13th Edition of Euroinvent Europe an Exhibition of Creativity and Innovation, 20-22 May, 2021, Iași, România. ISSN Print: 2601-4564. Online: 2601-4572. MD.126. p. 254.

5. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROȘ, 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: *The 25th international exhibition of inventics "INVENTICA 2021"*. 23-25 june 2021, Iași, România. 284. P. 300.
6. URECHE, D., BULHAC, I., **BOUROȘ, P.**, ROȘCA, D., LUPAȘCU, L. The bis-(n,n'-bis(4-tolyl)diaminogloxim)-4-methylanyl-trihydrate for use as antibacterial remedy in agriculture. *Salonul Internațional de Invenții Inovare Traian Vuia, Timișoara*. 12-14 octombrie 2021. Catalog Oficial. Societatea inventatorilor din Banat. Clasa K. P. 164.

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 /senatul instituției)

-

10.3. alte lucrări științifico-metodice și didactice

-

Executarea devizului de cheltuieli, conform anexei nr. 2.3 din contractul de finanțare

Cifrul proiectului: 20.80009.5007.15

| Cheltuieli, mii lei | | | | |
|--|-----------------|----------------|-------------------------|-----------------|
| Denumirea | Cod | | Anul de gestiune | |
| | Eco (k6) | Aprobat | Modificat +/- | Precizat |
| Remunerarea muncii angajaților conform statelor | 211180 | 1324.6 | | 1324.6 |
| Contribuții de asigurări sociale de stat obligatorii | 212100 | 384.2 | | 384.2 |
| Prime de asigurare obligatorie de asistenta medicală achitate de angajator și angajați pe teritoriul țării | 212210 | 3.5 | | 3.5 |
| Indemnizații pentru incapacitatea temporară de muncă achitate din mijloacele financiare ale angajatorului | 273500 | 4.0 | | 4.0 |
| Procurarea pieselor de schimb | 332110 | 1.5 | | 1.5 |
| Procurarea materialelor pentru scopuri didactice, științifice și alte scopuri | 335110 | 31.9 | | 31.9 |
| Total | | 1749.7 | | 1749.7 |

Directorul Institutului de Fizică Aplicată _____ / Macovei Mihai

Economist șef _____ / Mitroșenco Larisa

Conducătorul de proiect _____ / Kravțov Victor

Data: _____

LȘ

Componența echipei proiectului

Cifrul proiectului 20.80009.5007.15

| Echipea proiectului conform contractului de finanțare (la semnarea contractului) | | | | | | |
|---|--|--------------------------|------------------------------|--|---------------------------|----------------------------|
| 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 | 04.01.2021 | |
| 2 | Baca Svetlana | 1961 | dr. șt. chim. | 1.00 | 04.01.2021 | |
| 3 | Bouroș Pavlina | 1959 | dr. șt. chim. | 1.00 | 04.01.2021 | |
| 4 | Ciumacov Iurii | 1952 | dr. șt. fiz.-mat. | 1.00 | 04.01.2021 | |
| 5 | Fonari Marina | 1959 | dr. șt. chim. | 1.00 | 04.01.2021 | |
| 6 | Croitor Lilia | 1984 | dr. șt. chim. | 1.00 | 04.01.2021 | |
| 7 | Botezat Olga | 1985 | dr. șt. chim. | 1.00 | 04.01.2021 | |
| 8 | Chișca Diana | 1982 | dr. șt. chim. | 0.50 | 04.01.2021 | |
| 9 | Costriucova Natalia | 1946 | | 1.00 | 04.01.2021 | |
| 1 | Gorobeț Anastasia | 1994 | | 1.00 | 04.01.2021 | |
| 1 | Melnic Elena | 1979 | | 1.00 | 04.01.2021 | |
| 1 | Podgornii Daniel | 1995 | | 1.00 | 04.01.2021 | |
| 1 | Vitiu Aliona | 1985 | dr. șt. chim. | 1.00 | 04.01.2021 | |
| 1 | Darii Mariana | 1990 | | 0.50 | 04.01.2021 | |
| 1 | Capbătut Olga | 1997 | | 1.00 | 04.01.2021 | |
| 1 | Beleav (Nirca) Ecaterina | 1997 | | 1.00 | 04.01.2021 | |
| | | | | 15.00 | | |

| | |
|---|-----------------|
| Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor conform contractului de finanțare | 6 pers 37.5% |
|---|-----------------|

| Modificări în componența echipei pe parcursul anului 2021 | | | | | |
|--|----------------------|----------------------|--------------------------|--|-----------------------|
| Nr | Nume, prenume | Anul nașterii | Titlul științific | Norma de muncă conform contractului | Data angajării |
| 1. | Gorobeț Anastasia | 1994 | | -1.0 | |
| 2. | Menic Elena | 1979 | | 0.5 | 04.01.2021 |
| 3. | Podgornii Daniel | 1995 | | 0.5 | 04.01.2021 |
| 4. | Podgornii Daniel | 1995 | | -1.5 | |

| | | | | | |
|----|-------------------|------|-----|------|------------|
| 5. | Podgornii Daniel | 1995 | | -0.5 | |
| 6. | Gorobeț Anastasia | 1994 | | 0.5 | 01.09.2021 |
| 7. | Capbătut Olga | 1997 | | -1.0 | |
| 8. | Baca Svetlana | 1961 | dr. | 0.5 | 03.09.2021 |
| 9. | Fonari Marina | 1959 | dr. | 0.5 | 03.09.2021 |

| | |
|--|--------------|
| Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor la data raportării | 4 pers. 25 % |
|--|--------------|

Directorul Institutului de Fizică Aplicată _____ / Macovei Mihai

Economist șef _____ / Mitroșenco Larisa

Conducătorul de proiect _____ / Kravțov Victor

Data: _____

LS