

RECEȚIONAT

Agenția Națională pentru Cercetare
și Dezvoltare _____

_____ 2022

AVIZAT

Secția AȘM _____

_____ 2022

RAPORT ȘTIINȚIFIC ANUAL 2022


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

Directorul organizației

MACOVEI Mihai



Consiliul științific/Senatul

COJOCARU Ion



Conducătorul proiectului

KRAVTOV Victor



Chișinău 2022

1. Scopul etapei anuale conform proiectului depus la concurs

Elaborarea designului și obținerea compușilor coordinativi ai metalelor 3d și studiul lor structural, inclusiv al compușilor heterometalici. Studiul proprietăților magnetice, adsorbitive, luminescente și al activității biologice.

2. Obiectivele etapei anuale

1. Analiza rezultatelor din Baza de Date Structurale Cambridge (BDSC) având ca scop evidențierea informației referitor la materiale cunoscute pentru a evita orice repetare în lucrările planificate.
2. Stabilirea condițiilor de obținere a materialelor noi, variind atât sărurile și solvenții, cât și condițiile reacțiilor. Analiza prealabilă a modurilor de coordinare posibile ale liganzilor cu mai mulți atomi donori, forma poliedrelor de coordinare ale metalelor, generatori de compuși coordinativi având ca scop obținerea clusterilor cu nuclearitate superioară ori a polimerilor coordinativi.
3. Determinarea structurii cristaline a compușilor noi obținuți, a purității fazelor având ca scop studiul proprietăților posibile ale acestora.
4. Elaborarea tezelor de doctor, master și licență (la caz). Publicarea rezultatelor sub formă de articole, brevete, rezumate la foruri științifice ori la saloane de inventică.

3. Acțiunile planificate pentru realizarea scopului și obiectivelor etapei anuale

1. Vor fi analizate rezultatele din BDSC referitor la compușii metalelor de tranziție cu acizi carboxilici, dibenzoici, cu tiosemicarbazone și dihidrazone ale diacetilpiridinei. Un studiu special va ține de sistemele multicomponente organice, ce conțin amine alifaticе și derivați ai acidului nitrobenzoic.
2. Vor fi stabilite condițiile de obținere a materialelor noi, variind sărurile și solvenții, cât și condițiile reacțiilor pentru crearea compușilor noi ce conțin ionii de metal Mn(II)/Fe(II,III) și 2,4,6-tris(2-piridil)-s-triazină (tpt), a clusterilor heterometalici cu nucleul $\{Fe_{18}M_6\}$ (M = Dy, Gd, Y), a compusului Eu(III) cu liganzul luminofor tris-[4-(piridin-2-il)]triimidazo[1,2-a:1',2'-c:1'',2''-e][1,3,5]triazina.
3. Vor fi stabilite condițiile de obținere a unui șir de compuși ce conțin cationul complex $[Co(NH_3)_6]^+$, având ca scop investigarea acestora ca inhibitori ai cancerului la viața de vie.
4. În baza rezultatelor studiului cu raze X vor fi determinate și finalizate structurile cristaline ale unor compuși obținuți în cadrul proiectului din diverse clase: a compușilor Mn(II)/Fe(II,III) cu tpt, a clusterilor heterometalici cu nucleul $\{Fe_{18}M_6\}$ (M = Dy, Gd, Y), a compusului Eu(III) cu liganzul luminofor tris-[4-(piridin-2-il)]triimidazo[1,2-a:1',2'-c:1'',2''-e][1,3,5]triazina, a compușilor ce conțin cationul complex $[Co(NH_3)_6]^+$. Pentru un șir de compuși vor fi analizate spectrele de luminiscentă, iar unii vor fi investigați din punct de vedere a activității biologice.
5. Vor fi determinate și finisate investigațiile structurale pentru un șir de compuși obținuți în diverse centre din țară și de peste hotare.
6. Rezultatele definitive vor fi publicate în articole științifice din reviste de specialitate cu IF inclusiv, o parte din acestea vor fi prezentate ca comunicări orale ori poster și publicate ca abstracte la conferințe, iar cele ce au fost prezentate în brevete vor alcătui prezentările la

saloane de inventică. Se va lucra în cadrul cercetărilor planificate pentru teze de licență, master și de doctor, unele vor fi planificate pentru finisare.

4. Acțiunile realizate pentru atingerea scopului și obiectivelor etapei anuale

1. Au fost analizate datele din BDSC referitor la compușii metalelor de tranziție cu un șir de liganzi organici polidentati, precum acizi dibenzoici, derivați ai triazinei, tiosemicarbazone, dihidrazone ale diacetilpiridinei ș.a.. Din literatura de specialitate au fost analizate un șir de structuri ale compușilor din clasele respective, au fost identificate particularitățile de coordinare ale liganzilor în funcție de natura metalelor și a solvenților utilizați, forma poliedrelor de coordinare ale metalelor și blocurile moleculare pentru obținerea clusterilor cu nuclearitate superioară ori a polimerilor coordinative. Un studiu special ține de sistemele multicomponente organice, ce conțin amine alifatică și derivați ai acidului nitrobenzoic.

2. Au fost stabilite condițiile de obținere a materialelor noi, selectate componentele reactante și au fost obținute cristalele compușilor Mn(II)/Fe(II,III) cu 2,4,6-tris(2-piridil)-s-triazină (tpt), a clusterilor heterometalici cu nucleul $\{Fe_{18}M_6\}$ ($M = Dy, Gd, Y$), a compusului Eu(III) cu ligandul lunofofor tris-[4-(piridin-2-il)]triimidazo[1,2-a:1',2'-c:1'',2''-e][1,3,5]triazina. Au fost obținute cristalele unor noi compuși cu cationul complex $[Co(NH_3)_6]^+$.

3. La sinteza cristalelor au fost aplicate tehnici moderne de obținere, precum sinteza hidro(solvo)termală, ultrasonificarea, metode de difuzie și recristalizare a componentilor.

4. În baza rezultatelor studiului cu raze X au fost determinate structurile cristaline ale compușilor obținuți în cadrul proiectului din diverse clase: a compușilor Mn(II)/Fe(II,III) cu tpt, a clusterilor heterometalici cu nucleul $\{Fe_{18}M_6\}$ ($M = Dy, Gd, Y$), a compusului Eu(III) cu ligandul lunofofor tris-[4-(piridin-2-il)]triimidazo[1,2-a:1',2'-c:1'',2''-e][1,3,5]triazina, a compușilor ce conțin cationul complex $[Co(NH_3)_6]^+$.

5. Posibilitățile unice pentru R. Moldova ale laboratorului Metode Fizice de Studiere a Solidului "Tadeusz Malinowski" în ceea ce privește aparatul (difractometrele „Xcalibur E” și DRON) și complexele de program Baza de Date Structurale Cambridge (BDSC), SHELX, OLEX-2, MERCURY, PLATON, Crystal Explorer ș.a pentru determinarea structurii atomocristaline, au fost utilizate pentru realizarea investigării materialelor hibride organice/anorganice cu proprietăți avansate fizice și biologice active, obținute în rezultatul colaborărilor atât pe scară națională (Institutul de Fizică Aplicată, Institutul de Chimie, Universitatea de Stat din Moldova, Universitatea de Stat din Tiraspol, Institutul de Microbiologie și Biotehnologie și Institutul Științifico-Practic de Horticultură și Tehnologie Alimentară), cât și internațională (Institutul de Chimie „Coriolan Drăgulescu”, Timișoara, România, Universitatea din Gebze, Turcia, centre științifice de la Odesa, Ucraina). Suplimentar pentru efectuarea măsurătorilor inaccesibile în R. Moldova au fost utilizate posibilitățile tehnice din centre științifice din România, Elveția, Italia, Germania, de la Institutul de Chimie Macromoleculară “Petru Poni”, Iași, România.

6. Au fost pregătite și publicate în acest an 19 articole, 18 în reviste cu IF, 35 teze ale comunicărilor la conferințe și saloane de inventică, au fost primite 2 hotărâri pozitive și 2 Brevete de invenție. Au fost finisate o teză de doctor în științe fizice (E. Melnic), o teză de master (E. Nirca/Beleaev), o teză de licență (N. Caimac/Craciun). S-a lucrat la un șir de teze de licență, master și doctor în derulare.

5. Rezultatele obținute

Au fost elaborate ori ajustate metode noi de sinteză și s-au creat serii noi de compuși ce conțin ionii de metal Mn(II)/Fe(II,III) și 2,4,6-tris(2-piridil)-s-triazină (tpt), obținând compuși mononucleari $[\text{Fe}(\text{tpt})(\text{tptH})][\text{FeCl}_4] \cdot 2(\text{thf}) \cdot 0.23(\text{H}_2\text{O})$ (**1**), $[\text{Fe}(\text{piv})(\text{tpt})\text{Cl}_2]$ (**2**), $[\text{Fe}(\text{tpt})\text{Cl}_2] \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$ (**3**), dinuclear $[\text{Fe}_2\text{O}(\text{tpt})_2\text{Cl}_4]$ (**4**), heptanucleari $[\text{Fe}_7\text{O}_4(\text{piv})_{12}(\text{tpt}-\text{O})] \cdot \text{A}$ [$\text{A} = \text{MeCN}$ (**5**) sau 4(dioxan) (**6**)], $[\text{Fe}_7\text{O}_4(\text{piv})_{11}(\text{tpt}-\text{O})(i\text{-PrO})(i\text{-PrOH})] \cdot 0.75(i\text{-PrOH})$ (**7**) și compuși mononucleari $[\text{Mn}(\text{tpt})(\text{NO}_3)(\text{H}_2\text{O})_2](\text{NO}_3)$ (**8**) și $[\text{Mn}(\text{tpt})(\text{ib})(\text{Cl})(\text{MeOH})] \cdot \text{MeOH}$ (**9**). Compușii au fost studiați prin metode fizico-chimice (IR și analiza termică, măsurători magnetice), iar structurile cristalelor au fost stabilite cu ajutorul difracției razelor X pe monocristal, evidențiind implicarea și modul de coordinare a tuturor liganzilor, forma poliedrelor de coordinare rezultantă ale atomilor de metal și modul de împachetare în cristal a componentelor. Studiul cu raze X a identificat tpt ca un ligand tridentat cu setul de atomi donori NNN, care în rezultatul coordinării la metal formează două cicluri din cinci atomi în **1–4**, **8** și **9**, în timp ce în **5–7** cinci atomii de azot ai ligandului tpt formează legături coordinative însoțite de oxidare neobișnuită indusă de metal a unuia dintre atomii de carbon din miezul central de triazină (Fig. 1). Proprietățile magnetice ale Fe(III)–tpt (**2**, **4**, **7**), Fe(II)–tpt (**3**) și compușii Mn(II)–tpt (**9**) prezintă cuplare antiferomagnetică dominantă.

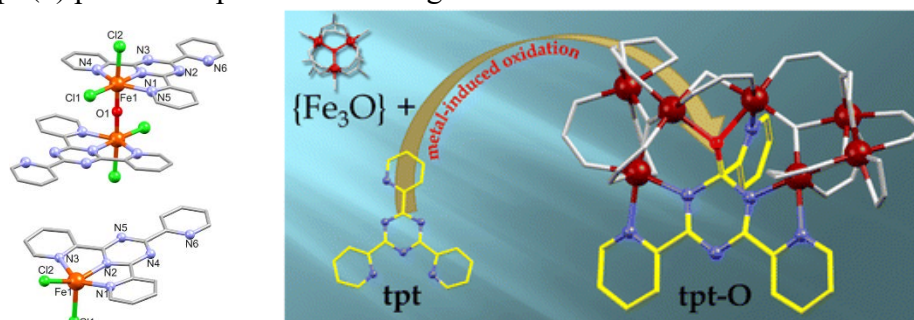


Fig. 1. Complexele mono- și binucleare cu ligandul tpt și modul de asamblare a clusterului heptanuclear în baza atomilor de fier însoțită de oxidarea unuia dintre atomii de carbon indusă de metal.

A fost obținuți în continuare compuși multi-compenți coordinativi în baza cationilor hexaminei Co(III) cu formulele $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6](\text{pys})_2 \cdot 2\text{CH}_3\text{CN}$ (**10**), $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6](\text{pys})_3 \cdot \text{Hpys}$ (**11**), $\{\text{K}[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}(\text{sb})_2\}_n$ (**12**), $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}(2,3\text{-pdc}) \cdot \text{H}_2\text{O}$ (**13**), $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]_{11}[\text{Co}(2,5\text{-pdc})_3]_8\text{Cl} \cdot 84\text{H}_2\text{O}$ (**14**), $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6][\text{Co}(3,5\text{-pdc})_2(\text{H}_2\text{O})_4]\text{Cl} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (**15**), $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6](\text{mef})_2\text{Cl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (**16**) și $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6](\text{oxa})_2\text{Cl} \cdot \text{H}_2\text{O}$ (**17**) (unde Hpys = acid piridinsulfonic, H₂sb = acid 4-sulfobenzoic Hmef = acidul (2-(2,3-dimetilfenil)aminobenzoic, Hoxa = acidul 4-amino-1,2,5-oxadiazol-3-carboxilic, H₂pdc = 2,3-/2,5-/3,5- acid piridindicarboxilic). Compușii au fost studiați prin metode fizico-chimice (IR și analiza termică, măsurători biologice). Ca rezultat al studiului structural a fost stabilit că toți compușii sunt de natură ionică în care $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^+$ rămâne neschimbat, iar extinderea rețelelor cristaline supramoleculare este susținută de interacțiunile dintre componentele cationice și anionice, antrenând inclusiv cationii complecși ai Co(II). Concomitent au fost determinate modul de coordinare a liganzilor, forma poliedrelor de coordinare ale atomilor de metal și parametrii legăturilor fine ce au stabilizat împachetarea în cristal a componentelor atât ionice, cât și neutre (molecule de cristalizare). Pentru compușii **13–15** și $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3 \cdot 2(\text{phen}) \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, phen = 1,10-fenanthrolină (**18**) au fost calculate suprafețele Hirshfeld (Fig. 2). Analiza suprafețelor Hirshfeld a evidențiat tăria legăturilor de hidrogen și a permis cuantificarea intercontactelor dintre

componente. Analiza de descompunere energetică a interacțiunilor intermoleculare, efectuată folosind metoda SAPT pentru a studiat interacțiunile non-covalente dintre cationii $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ cu mono-, dianionii și moleculele neutre, constatând energia minimă a legăturilor pentru compusul **18**. Testarea in vitro a compușilor **13-15** împotriva *Rhizobium* (*Agrobacterium*) *vitis*, o bacterie oncogenă care provoacă formarea tumorii la plante, a stabilit că totuși compusul **18**, care conține 1,10-fenantrolină, a prezentat cel mai mare potențial inhibitor al cancerului bacterian la plante.

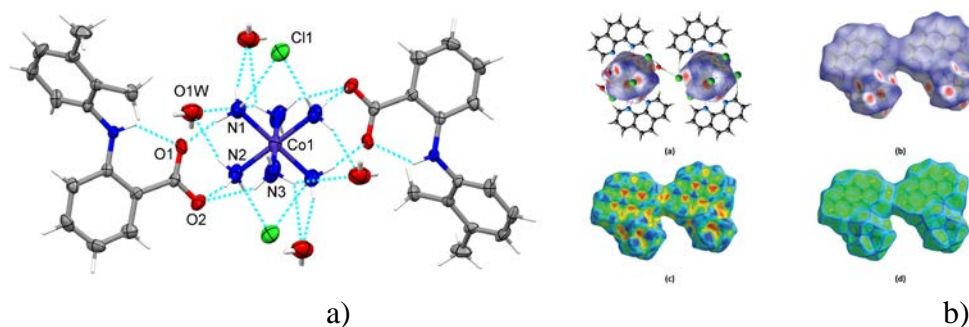


Fig. 2. Structura compusului cu acidul mefenamic (a). Rezultatele analizei suprafețelor Hirshfeld pentru **10**, potențial inhibitor al cancerului bacterian la plante(b).

Intrațiunea clusterilor homometalici de fier cu sărurile metalelor rare a dus la crearea unui șir de clusteri heterometalici cu nucleul $\{\text{Fe}_{18}\text{M}_6\}$ ($\text{M} = \text{Dy}$ (**19**), Gd (**20**), Y (**21**)), aceștea prezentând arhitecturi structurale inelare care cristalizează în două forme polimorfe (grupul spațial $P-1$ cu simetria C_i și grupul spațial $R-3$ cu simetria C_{3i} , Fig. 3). A fost stabilită influența solvenților asupra creării polimorfului. Pentru acești compuși au fost investigate proprietățile spectroscopice și magnetice în corelație cu structura lor. Studiile magnetice relevă medii antiferomagnetice cu interacțiuni de schimb în unitatea trimerică Fe_3 (cu parametrii de cuplare de schimb ai lui $J_{\text{Fe}_3} = -13,1 \text{ cm}^{-1}$ pentru **21** cristalizat în $P-1$, $J_{\text{Fe}_3} = -11,6 \text{ cm}^{-1}$ pentru **21** - în $R-3$) și interacțiuni de schimb antiferomagnetice intermoleculare slabe ($\lambda_{\text{mf}} = -0,366 \text{ mol cm}^{-3}$ și $-0,368 \text{ mol cm}^{-3}$ ($zJ_{\text{mf}} = -0,19 \text{ cm}^{-1}$), respectiv). Ca rezultat, se evidențiază stări fundamentale de spin cu $S = 5/2$ pentru fiecare unitate $\{\text{Fe}_3\}$. Înlocuirea ionului central diamagnetic $\text{Y}(\text{III})$ din **21** cu centrele paramagnetice $\text{Ln}(\text{III})$ (în **20** prin $\text{Gd}(\text{III})$ și în **19** prin $\text{Dy}(\text{III})$) rezultă în interacțiuni cu schimb feromagnetic între ionii $\text{Fe}(\text{III})$ și $\text{Ln}(\text{III})$, pe lângă interacțiunile antiferomagnetice predominante $\text{Fe} \cdots \text{Fe}$ din **21**.



Fig. 3. Structuri inelare, cristalizate în două forme polimorfe în funcție de amestecul de solvenți.

Interacțiunea $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 \cdot 3,5\text{H}_2\text{O}$ cu luminoforul tris-[4-(piridin-2-il)triimidazo[1,2-a:1',2'-c:1'',2''-e][1,3,5]triazina (L) a dus la crearea unui compus coordinativ neutru mononuclear, $[\text{Eu}(\text{NO}_3)_3(\text{H}_2\text{O})_2(\text{L})]$ (**22**). $\text{Eu}(\text{III})$ este nona-coordinat cu înconjurarea NO_8 .

Studiul cu raze X a stabilit că sinteza simplă ce are la bază amestecul de piridină-n-oximă/acid dicarboxilic cu sărurile de metal și-au dovedit eficacitatea și au dus la crearea a zece noi compuși ai $\text{Cu}(\text{II})$ cu formulele $\{[\text{Cu}(\text{SiF}_6)(4\text{-pyaoH})_4] \cdot \text{dmf} \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}\}_n$ (**23**), $\{[\text{Cu}(\text{mal})(4\text{-pyaoH})_2] \cdot \text{dmf}\}_n$ (**24**), $\{[\text{Cu}(\text{mal})_2](4\text{-pyaoH}_2)_2\}_n$ (**25**), $[\text{Cu}(\text{adi})(3\text{-pyaoH})_2(\text{H}_2\text{O})]_n$ (**26**), $[\text{Cu}(\text{adi})(3\text{-pyaoH})_2]_n$ (**27**), $\{[\text{Cu}(\text{adi})(3\text{-$

$\text{pyaoH}_2\text{]} \cdot 0.6\text{MeOH} \cdot 0.3\text{H}_2\text{O}\}_n$ (28), $\{[\text{Cu}(\text{seb})(3\text{-pyaoH})_2] \cdot \text{H}_2\text{seb} \cdot \text{H}_2\text{O}\}_n$ (29), $[\text{Cu}(\text{ClO}_4)(2\text{-pyao})(2\text{-pyaoH})]_n$ (30), $\{[\text{Cu}(\text{oxa})(2\text{-pyaoH})] \cdot \text{H}_2\text{O}\}_n$ (31) și $\{[\text{Cu}_3(\mu_3\text{-OH})(2\text{-pyao})_3(\text{fum})] \cdot 6.5\text{H}_2\text{O}\}_n$ (32) (piridin-*n*-oxime: *n*-pyaoH, *n*=2-4; acizi dicarboxilici: oxalic=H₂oxa, malonic=H₂mal, fumaric=H₂fum, succinic=H₂suc, adipic=H₂adi și sebacic=H₂seb), structura cărora prezintă polimeri coordinativi 1D și 2D. Dezvoltarea structurilor până la rețelele coordinative 1D în 23-26 și 30, 31 este determinată în mare parte de funcția punte a liganzilor dicarboxilici și doar în două cazuri ca ligand-punte au fost antrenate hexafluorosilicatul ori perchloratul. Extinderea structurilor până la rețele de coordonare 2D în 27-29 a devenit posibilă cu implicarea piridin-3-oximei coordonată bismonodentat prin seturile de atomi N-piridină și O-hidroxil. Linkerii dicarboxilici diferiți au evidențiat posibilitatea de a regla distanțele Cu...Cu din structurile cristaline într-un interval semnificativ, crucial pentru predicția proprietăților magnetice, de adsorbție și a altor proprietăți. **Obiectele de studiu 23- 32 au fost sintetizate la UST.**

Studiul structural a stabilit că în seria structurilor cristaline a șapte polimeri coordinativi 2D izostructurali și izomorfi formați în baza aceluiași ligand, 2,6-diacetilpiridina bis(nicotinoilhidrazonă), având atomul central diferit (33 = Fe; 34 = Co; 35 = Mn; 36 = Zn; 37 = Cd; 38 = MnZn și 39 = Zn_{0.75}Cd_{1.25}), compușii cu Fe(II) și Co(II) prezintă cea mai mare asemănare structurală. Doi compuși care conțin Cd(II), 37 și 39, prezintă indice mare de izostructuralitate și similaritate medie cu 33 și 34, cauzată de diferența razelor atomice. A fost stabilit că polimerii coordinativi 35 și 36, foarte apropiați structural, sunt enantiomerii polimerilor coordinativi 33 (Fig.4a), 34 și 37-39. Investigarea acestora din punct de vedere al proprietăților a evidențiat intensități fotoluminescente (FL) mai mari pentru compușii Zn(II) și Cd(II), cea mai mare FL fiind înregistrată pentru compusul heteronuclear cu Zn(II) și Cd(II). Studiul proprietăților termoelectrice a stabilit că combinarea ionilor Mn(II) și Zn(II) într-un singur compus duce la termoputere negativă, iar compusul cu Zn(II) posedă cele mai înalte caracteristici termoelectrice. Cele mai bune proprietăți NLO au fost găsite pentru compusul 33 cu Fe(II), partea imaginară totală a cărei este de 2-7 ori mai mare decât cea a compușilor 34-39. În seria acestor polimeri coordinativi izostructurali a fost stabilit că proprietățile lor depind în mare parte de natura metalelor.

Patru compuși coordinativi, unul fiind în două forme polimorfe, au fost sintetizați la interacțiunea clorurii de cobalt(II) cu dianilinegloxima (DAnH₂), variind liganzii de piridil (L): [Co(DAnH)₂(L¹)₂]Cl·2dmf (40), [Co(DAnH)₂(L²)₂]Cl·H₂O (41), [Co(DAnH)₂(L³)₂]Cl (42 și 43) și [Co(DAnH)₂(L⁴)₂]Cl (44) (L¹ și L² - 3- și 4-metilpiridină, respectiv; L³ - etilnicotinat; L⁴ - *N,N*-dietilnicotinamidă). Studiu cu raze X a stabilit că acești compuși sunt de natură ionică, formați din cationii complecși centrosimetrice mononucleari [Co(DAnH)₂(L)₂]⁺ și anionii Cl⁻. În cationii complecși cei doi liganzi de oximă monodeprotonați coordonează la atomul de metal bidentat-chelat, a ceștea fiind uniți între ei prin două legături de hidrogen O-H...O intramoleculare, iar cei doi liganzi L suplimentari – ca liganzi neutri monodentați. În poliedrele de coordonare octaedrice ale atomilor de metal înconjurarea este formată de setul de atomi donori N₆. Componentele în aceste cristale se unesc prin legături de hidrogen intermoleculare.

Cu ajutorul razelor X a fost confirmată structura compusului 2,6-piridindimetildicarboxilat (L) (45). Studiul structural a confirmat că la interacțiunea lui cu diverse săruri de Ca(II), Sr(II), Ba(II) și tiocianat de cobalt(II) s-au obținut trei compuși heterometalici cu formulele [CaL₃][Co(NCS)₄] (46), [SrL₃][Co(NCS)₄] (47) și [BaCoL₃(μ-NCS)₂(NCS-κN)₂] (48). Ca rezultat a fost stabilit că compușii cu Ca(II) și Sr(II) izostructurali

sunt de tip ionic și conțin cationii complecși $[\text{CaL}_3]^{2+}$ и $[\text{SrL}_3]^{2+}$, sarcinile cărora sunt compensate de cea a anionilor complecși $[\text{Co}(\text{SCN})_4]^{2-}$, iar compusul cu Ba(II) este un compus complex molecular, în care fragmentele $[\text{BaL}_3]^{2+}$ și $[\text{Co}(\text{NCS})_4]^{2-}$ sunt unite prin anionii complecși a căror liganzi (NCS)⁻. Sunt antrenați în calitate de liganzi cu funcție punte. În acești compuși poliedrele de coordinare ale Ca(II) și Sr(II) sunt formate de setul de atomi ONO a trei liganzi organici L, iar numărul de coordinare al Ba(II) este 11, deci la coordinare sunt implicați nu numai cele trei seturi ONO ale celor trei liganzi L, dar și doi atomi de N ce aparțin la doi liganzi (NCS)⁻.

Structura cristalină a ligandului cromofor azinic dicarboxilic, a acidului 4,4'-(hidrazină-1,2-diilidenbis(metanililiden))dibenzoic, $\text{H}_2(4\text{-dbahz})$, este raportată pentru prima dată. Eficiența sa în calitate de ligand punte este demonstrată prin sinteza polimerilor coordinativi ai Cd(II) și Zn(II), care includ atât lanțuri coordinative 1D $\{[\text{Cd}(4\text{-dbahz})(\text{dmsO})_2(\text{H}_2\text{O})] \cdot (\text{dmsO})_2\}_n$ (**49**, **50**) cristalizate în două forme polimorfe (monoclinice și ortorombice), cât și rețele coordinative 2D $\{[\text{Zn}(4\text{-dbahz})(\text{dmsO})] \cdot 0.5(\text{dmsO} \cdot \text{dmf})\}_n$ (**51**) (Fig. 4 b,c) și 3D (MOF) $\{[\text{Cd}_2(4\text{-dbahz})_2(\text{dmsO})_2] \cdot \text{dmsO}\}_n$ (**52**). A fost stabilit că posibilitatea de interpenetrare a rețelelor coordinative 2D și 3D este determinată de lungimea semnificativă a ligandului și flexibilitatea restrânsă oferită de prezența fragmentului azinic în moleculă. Acești compuși prezintă emisie generată în special de ligandul cromofor, dar fiind dependentă și de structura cristalină concretă, evidențiind totuși potențialul mare al acestui ligand în construcția polimerilor coordinativi cu proprietăți vizate. Aceste obiecte de studiu (**33-52**) au fost obținute la **Institutul de Chimie**.

Cu ajutorul razelor X au fost stabilite structurile moleculare și cristaline pentru trei hidrazone noi 3-, 4 - și 2-formilpiridină N4-alitiosemicarbazonă (**53-55**, HL - ultima) și doi compuși cu HL cu formulele $[\text{Cu}_2(\text{L})_2(\text{CH}_3\text{COO})_2] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (**56**), $[\text{Ni}(\text{HL})_2]\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (**57**), sintetizați și investigați la **USM, Departamentul de Chimie**. Important e că compusul cu nichel a prezentat o selectivitate ridicată ($\text{SI} > 1000$) față de linia celulară HL-60 și este cel mai puțin toxic. Compusul coordinativ cu zinc a evidențiat cea mai mare selectivitate față de linia celulară RD ($\text{SI}=640$), iar compusul cu cupru prezintă activitate ridicată față de o gamă largă de celule canceroase, dar este mai toxic, ultimul posedând activitate antibacteriană și antifungică semnificativă care este utilă pentru tratamentul cancerului. Calculul în baza teoriei B3LYP, diferiți descriptori de reactivitate ai compușilor studiați corelează puternic cu activitatea lor biologică. Au fost investigați din punct de vedere structural și doi compuși ai Cu(II) cu activitate antibacteriană și antifungică $[\text{Cu}(1,10\text{-Phen})(\text{L})] \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$ (**58**) și $[\text{Cu}(2,2'\text{-BPy})(\text{L})] \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$ (**59**), în care H_2L este 2-(2-hidroxibenziliden)-N-(prop-2-en-1-il)hidrazincarbotoioamid.

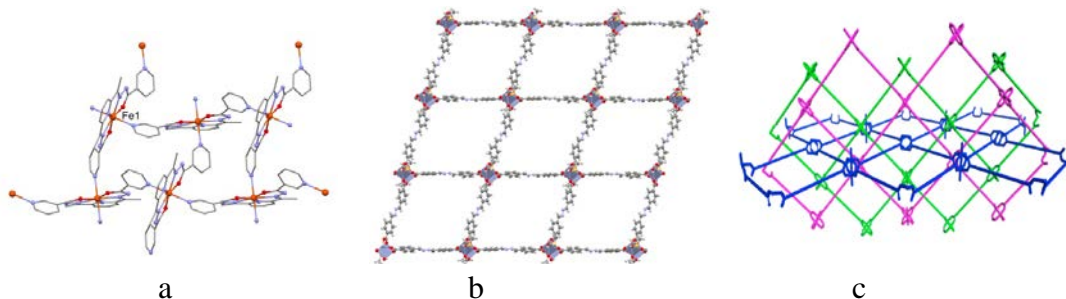


Fig.4. Structura polimerilor coordinativi 2D din **33** (a) și $[\text{Zn}(4\text{-dbahz})(\text{dmsO})]_n$ din **50** (b,c).

Studiul cu raze X al monocristalelor compușilor complecși $[\text{Ni}(\text{pyrdtc})(\text{PPh}_3)(\text{NCS})]$ (**60**), $[\text{Ni}(\text{pyrdtc})(4\text{-MP})(\text{NCS})]$ (**61**), $[\text{Ni}(\text{pyrdtc})(\text{PPh}_3)(\text{CN})] \cdot \text{H}_2\text{O}$ (**62**), $[\text{Ni}(\text{pyrdtc})(\text{PPh}_3)_2]\text{ClO}_4$ (**63**) și $[\text{Ni}(\text{pyrdtc})(\overline{\text{PP}})]\text{BPh}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (**64**) (pyrdtc: pirolidincarboditioat/ $\overline{\text{SS}}$, PPh_3 : trifenilfosfin, 4-MP:

tri(4-metilfenil)fosfin, dppe/PP: 1,2-bis(difenilfosfino)etan) a stabilit o geometrie plan-pătrată în jurul nichelului, care este în concordanță cu diamagnetismul lor. **Studiul a fost efectuat împreună cu Universitatea din Gebze, Turcia.** Sumele legăturilor de valență calculate cu Rij corectat au indicat natura bivalentă a nichelului cu interacțiuni covalente predominante. O analiză a formei a liganzilor cromofori prevede încojurarea plan-pătratică în jurul atomului de nichel și deviația la variantele bipiramidale tetraedrice sau trigonale sunt absolut negate. Analiza CSM a arătat o comparabilitate a acestor cromofori de nichel cu formă plan-pătrată cu cea a cis-platinei, agent clinic anti-cancer.

Interacțiunea soluțiilor metanolice de 2-, 3-, 4-carboxietilpiridine cu un exces de 45 % acid hidrofliurosilic a dus la crearea hexafluorosilicaților de amoniu corespunzători **65-67**, izolați în randamente practic cantitative. Structurile cristaline ale sărurilor sunt susținute de interacțiunea prin legăturile de hidrogen interatomice puternice $\text{NH}\cdots\text{F}$, $\text{OH}\cdots\text{F}$ și fine $\text{C-H}\cdots\text{F}$. Toți cei trei hexafluorosilicați prezintă activitate anti-carie notabilă cu îmbunătățirea semnificativă simultană a parametrilor biochimici ai pulpei dentare și absența efectelor hepatotoxice. Sarea hexafluorosilicatului de 3-carboxietilpiridiniu **66** prezintă cea mai mare eficacitate preventivă a cariilor, care depășește indicatorii analogi pentru medicamentele de referință, NaF și $(\text{NH}_4)_2[\text{SiF}_6]$ de 1,75 și, respectiv, de 1,62 ori. Rezultatele obținute evidențiază acest compus ca un obiect promițător pentru cercetări farmacologice ulterioare ca un potențial agent profilactic al cariilor. Obiectele de studiu au fost obținute și investigate împreună cu **Universitatea Națională de Medicină, Odesa, Ucraina.**

Un studiu complex este legat de sistemele multicomponente și ține de investigarea relației structură cristalină-proprietăți termice pentru doi polimorfi (α și β) ai 2-cloro-4-nitrobenzoatului de etiletanolamoniu (HMMEA)(2Cl4NB) (**68**, **69**). Analiza structurală a polimorfilor relevă atât asemănări, cât și diferențe, ceea ce evidențiază caracterul versatil al sistemului multicomponent studiat. Un aspect special de interes se referă la un număr diferit de molecule din unitatea asimetrică a structurilor cristaline, apărând ca $Z' = 1$ în α și $Z' = 2$ în β . Studiul cu raze X a stabilit formarea încă a două noi forme multicomponente diferite din sistemul acid 4-nitrobenzoic-dietanolamină, și anume sare organică 1:1 (**70**) și sare organică cu molecule cocristalizate 1:1:1 (**71**), acestea fiind sintetizate în aceleași condiții, dar din diferiți solvenți. Structurile cristaline au evidențiat prezența sintonilor acid alcanolamină heterodimeric în sarea **70**, în timp ce în cazul sării cocristal **71** este observat sintonul centrosimetric alcanolamină-alcanolamină. Molecula suplimentară cocristalizată de 4NBH în **71** modifică stoichiometria, modul de legare a cationilor și anionilor, precum și modul de împachetare a componentelor în cristal.

Un alt studiu ține de continuarea cercetărilor privind șirul iminofosforanilor N-fosforilați, pornind de la difenilfosforil azidă și diferite fosfine terțiare substituie, cu scopul de a investiga influența substituentului asupra structurii cristaline și a stabilității termice. Astfel, cei doi iminofosforani N-fosforilați studiați (**72**, **73**) diferă prin natura și numărul de substituenți (metil, metoxi) la inelul fosforan fenil, care influențează interacțiunile intra- și intermoleculare, împachetarea lor în cristale, stabilitatea chimică și termică, precum și cinetica descompunerii. Aceste obiecte de studiu (**68-73**) au fos obținute la **Institutul de Chimie "Coriolan Drăgulescu", Timișoara, România.**

6. Diseminarea rezultatelor obținute în proiect în formă de publicații

Articole în reviste științifice

1. în reviste din bazele de date Web of Science și SCOPUS

1. CRISAN, M.; PETRIC, M.; VLASE, G.; VLASE, T.; SIMINEL, A.V.; **BOUROSH, P.N.; CROITOR, L.** Organic salt versus salt cocrystal: thermal behavior, structural and photoluminescence investigations. *J Therm Anal Calorim.* 2022, **147(2)**, 1203—1213. ISSN 1388-6150. Doi: [10.1007/s10973-020-10438-y](https://doi.org/10.1007/s10973-020-10438-y) (IF: 4,755).
2. ÇAYDAŞI, M.; MINTAŞ, M.F.; **CHUMAKOV, Y.M.**; VOLZ, S.; CENGİZ, A.; SEYIDOV, M.H.Y. A Study of Thermoelectric Performance of TlGaSe₂ Layered Dichalcogenides from First-Principles Calculations: Vacancy Defects Modeling and Engineering. *Phys Status Solidi B.* 2022, **259(1)**, 2100409-1—2100409-12. ISSN 0370-1972. Doi: [10.1002/pssb.202100409](https://doi.org/10.1002/pssb.202100409) (IF: 1,782).
3. **BOUROSH, P.N.**; COROPCEANU, ED.B.; RIJA, A.P.; URECHE, D.; CILOCI, A.A.; CLAPCO, S.F.; DVORNINA, E.G.; LABLIUC, S.V.; BULHAC, I.I. Synthesis and Structures of Disulfanilamide Glyoxime and Ni(II) and Cu(II) Complexes with This Ligand Stimulating the Proteolytic Properties of [Cu(DsamH₂)₃]SO₄·5H₂O. *Russ J Coord Chem.* 2022, **48(1)**, 41—51. ISSN 1070-3284. Doi: [10.1134/S1070328422010018](https://doi.org/10.1134/S1070328422010018) (IF: 1,814).
4. DANILESCU, O.; BULHAC, I.; **BOUROSH, P.N.; CROITOR, L.** Anion-assisted Fe(III)-coordination supramolecular systems based on 2,6-diacetylpyridine dihydrazone. *Polyhedron.* 2022, **215**, 115679-1—115679-12. ISSN 0277-5387. Doi: [10.1016/j.poly.2022.115679](https://doi.org/10.1016/j.poly.2022.115679) (IF: 2,975).
5. DUYGULU, E.; ALEV, O.; **CHUMAKOV, Y.**; ÖZTÜRK, Z.Z.; AYHAN, M.M.; YUKSEL, F. Morphology induced enhanced photoconductivity of a phthalocyanine-based benzimidazole linked two-dimensional conjugated covalent organic polymer. *New J Chem.* 2022, **46(13)**, 6314—6318. ISSN 1144-0546. Doi: [10.1039/D2NJ00339B](https://doi.org/10.1039/D2NJ00339B) (IF: 3,925).
6. **CROITOR, L.**; PETRIC, M.; CRISAN, L.; **BOUROSH, P.N.**; VLASE, G.; VLASE, T.; CRISAN, M. Effect of substituents on the crystal structure and thermal stability of N-phosphorylated iminophosphoranes. *J Therm Anal Calorim.* 2022, **147(9)**, 5423—5435. ISSN 1388-6150. Doi: [10.1007/s10973-022-11201-1](https://doi.org/10.1007/s10973-022-11201-1) (IF: 4,755).
7. **CROITOR, L.**; VLASE, G.; VLASE, T.; **BOUROSH, P.N.**; CHUMAKOV, Y.M.; CRISAN, M. Relationship between crystal structure and thermal properties of polymorphic system methylethanolammonium 2-chloro-4-nitrobenzoate. *J Therm Anal Calorim.* 2022, **147(9)**, 5437—5449. ISSN 1388-6150. Doi: [10.1007/s10973-022-11263-1](https://doi.org/10.1007/s10973-022-11263-1) (IF: 4,755).
8. GRAUR, V.; **CHUMAKOV, Yu.**; GARBUZ, O.; HUREAU, CH.; TSAPKOV, V.; GULEA, A. Synthesis, Structure, and Biologic Activity of Some Copper, Nickel, Cobalt, and Zinc Complexes with 2-Formylpyridine N4-Allylthiosemicarbazone. *Bioinorg Chem Appl.* 2022, **2022**, 2705332-1—2705332-18. ISSN 1565-3633. Doi: [10.1155/2022/2705332](https://doi.org/10.1155/2022/2705332) (IF: 7,778).
9. LOZOVAN, V.; **KRAVTSOV, V.CH.**; **COSTRIUCOVA, N.V.**; SIMINEL, A.; KULIKOVA, O.V.; **FONARI, M.S.** Tunability in dimension, metal and ligand coordination modes and emission properties in Cd(II) and Zn(II) coordination networks based on 4,4'-(hydrazine-1,2-diyilidenebis(methanylylidene)) dibenzoic acid linker. *J Solid*

- State Chem.* 2022, **310**, 123021-1—123021-9. ISSN 0022-4596. Doi: [10.1016/j.jssc.2022.123021](https://doi.org/10.1016/j.jssc.2022.123021) (IF: 3,656).
10. URECHE, D.; BULHAC, I.; SHOVA, S.; **BOUROSH, P.** Pseudomacrocyclic Bis(dianilineglyoximato)cobalt(III) Complex Cations: Synthesis and Structures. *Russ J Coord Chem.* 2022, **48(6)**, 333—343. ISSN 1070-3284. Doi: [10.1134/S1070328422060070](https://doi.org/10.1134/S1070328422060070) (IF: 1,814).
 11. **DARII, M.; BELEAEV, E.S.; KRAVTSOV, V.CH.; BOUROSH, P., CHUMAKOV, Y.; HAUSER, J.; DECURTINS, S.; LIU, SH.-X.; SULTANOVA, O.; BACA, S.G.** Crystalline multicomponent compounds involving hexaammine cobalt(III) cations. *New J Chem.* 2022, **46(23)**, 11404—11421. ISSN 1144-0546. Doi: [10.1039/d2nj01655a](https://doi.org/10.1039/d2nj01655a) (IF: 3,925).
 12. **CHUMAKOV, Yu.; DANILESCU, O.; BOUROSH, P.; KULIKOVA, O.V.; BULHAC, I.; CROITOR, L.** Metal ions impact on the isostructurality and properties of 2D coordination polymers. *CrystEngComm.* 2022, **24**, 4430—4439. ISSN 1466-8033. Doi: [10.1039/d2ce00444e](https://doi.org/10.1039/d2ce00444e) (IF: 3,756).
 13. **CHUMAKOV, YU.M.; GRAUR, V.O.; ULCHINA, YA.I.; SMAGLII, V.A.; GULEA, A.P.; GARBUZ, O.S.; TSAPKOV, V.I.** Crystal structures of [*N'*-(2-oxidobenzylidene)-*N*-(prop-2-en-1-yl)-carbamohydrazonothioato(2-)](1,10-phenanthroline) copper and [*N'*-(2-oxidobenzylidene)-*N*-(prop-2-en-1-yl)-carbamohydrazonothioato(2-)](2,2'-bipyridine) copper hemihydrates. *J Struct Chem.* 2022, **63(6)**, 905—913. ISSN 0022-4766. Doi: [10.1134/S0022476622060075](https://doi.org/10.1134/S0022476622060075) (IF: 1,071).
 14. GELMBOLDT, V.O.; LYTVYNCHUK, I.V.; SHYSHKIN, I.O.; KHRUMAGINA, L.N.; **FONARI, M.S.; KRAVTSOV, V.CH.** Bis(2-, 3-, 4-carboxyethylpyridinium) hexafluorosilicates as potential caries prophylactic agents. *Arch Pharm.* 2022, **355(7)**, e2200074-1—e2200074-16. ISSN 0365-6233. Doi: [10.1002/ardp.202200074](https://doi.org/10.1002/ardp.202200074) (IF: 4,613).
 15. **PODGORNII, D.; AMOMBO NOA, F.M.; VAN LEUSEN, J.; MCKENZIE, CH.J.; ÖHRSTRÖM, L.; KÖGERLER, P.; BACA, S.G.** Heterometallic {Fe₁₈M₆} (M = Y, Gd, Dy) Pivalate Wheels Display Solvent-Induced Polymorphism. *Cryst Growth Des.* 2022, **22(9)**, 5526—5534. ISSN 1528-7483. Doi: [10.1021/acs.cgd.2c00620](https://doi.org/10.1021/acs.cgd.2c00620) (IF: 4,01).
 16. **CROITOR, L.; COROPCEANU, E.B.; FONARI, M.S.** Anion–pyridine-*n*-oxime interplay to control metal–metal separations in a series of Cu(II) coordination polymers. *CrystEngComm.* 2022, **24(35)**, 6146—6154. ISSN 1466-8033. Doi: [10.1039/D2CE01000C](https://doi.org/10.1039/D2CE01000C) (IF: 3,756).
 17. **DARII, M.; MIKOSCH, A.; VAN LEUSEN, J.; KRAVTSOV, V.CH.; DVORNINA, E.G.; CLAPCO, S.T.; CILOCI, A.; KÖGERLER, P.; BACA, S.G.** Fe^{II/III} and Mn^{II} complexes based on 2,4,6-tris(2-pyridyl)-triazine: synthesis, structures, magnetic and biological properties. *RSC Adv.* 2022, **12(45)**, 29034—29047. ISSN 2046-2069. Doi: [10.1039/d2ra04868j](https://doi.org/10.1039/d2ra04868j) (IF: 4,036).
 18. URECHE, D.; BULHAC, I.; CIOCARLAN, A.; ROSHCA, D.; LUPASCU, L.; **BOUROSH, P.** Novel vic-dioximes: synthesis, structure characterization, and antimicrobial activity evaluation. *Turk J Chem.* 2021, **45(6)**, 1873—1881. Doi: [10.3906/kim-2104-24](https://doi.org/10.3906/kim-2104-24); <https://journals.tubitak.gov.tr/chem/vol45/iss6/18/> (IF: 1,236).

2. în alte reviste din străinătate recunoscute

1. RAMALINGAM, K.; SARAVANAN, M.; BOCELLI, G.; RIGHI, L.; **CHUMAKOV, Y.**; CANTONI, A. Pyrrolidinecarbodithioate as a planarity check in the search for cis-platin analogues of nickel: Spectral, single crystal X-ray structural, BVS, and CSM analysis of some planar nickel(II) mixed ligand complexes. *Eur J Chem.* 2022, **13(1)**, 117—125. ISSN 2153-2249. Doi: [10.5155/eurjchem.13.1.117-125.2214](https://doi.org/10.5155/eurjchem.13.1.117-125.2214).

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

1. URECHE, D.; BULHAC, I.; SHOVA, S.; BOUROSH, P. Novel Zn(II) binuclear and Ni(II) 1D polymeric coordinating compounds based on dianilineglyoxime and dicarboxylic acids: synthesis and structure. *Chemistry Journal of Moldova.* 2022 (acceptat), ISSN 1857-1727. Doi: <http://dx.doi.org/10.19261/cjm.2022.954>
2. ZVEAGHINTSEVA, M.; STINGACI, E.; POGREBNOI, S.; LUPASCU, L.; BARBA, A.; DUCA, GH.; VALICA, V.; UNCU, L.; KRAVTSOV, V.; TERTEAC, D.; BRINZAN, A.; MACAEV, F. Resin acids as raw material for fabrication of antimicrobial micro- and nanoparticles of dehydroabietic acid loaded with cyclodextrin and chromenol hybrid. *Chemistry Journal of Moldova.* 2022 (acceptat). ISSN 1857-1727. Doi: <http://dx.doi.org/10.19261/cjm.2022.942>

4. Teze ale conferințelor științifice

1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

1. TAPU, D.; **MELNIC, E.**; **FONARI, M.**; **CHISCA, D.** Evaluation of Intermolecular Interactions in Organic Cocrystal of 2-Nitroterephthalic Acid and 1,2-Bis(4-pyridyl)ethane Using Hirshfeld Surface Analysis. În: *Virtual Abstract Book - Poster Session Papers.* International Colloquium 'Physics of Materials - PM7', November 10-11, 2022, Bucharest, Romania.
2. **CRACIUN, N.**; **CHISCA, D.**; **MELNIC, E.**; **FONARI, M.** Hirshfeld Surface Analysis of Supramolecular Synthons in Cocrystal of 2,4-Diamino-6-Phenyl-1,3,5-Triazine with Adipic Acid. În: *Virtual Abstract Book - Poster Session Papers.* International Colloquium 'Physics of Materials - PM7', November 10-11, 2022, Bucharest, Romania.
3. LOZOVAN, V.; **CHUMAKOV, YU.M.**; **KRAVTSOV, V.CH.**; **COSTRIUCOVA, N.V.**; **FONARI, M.S.** Synthesis, crystal structures and modeling of CO₂ binding sites in Zn(II) and Cd(II) MOFs based on 4,4'-biphenyldicarboxylate and azine ligands. In: *Book of Abstracts. New Trends and Strategies in the Chemistry of Advanced Materials with Relevance in Biological Systems, Technique and Environmental Protection*, 14th Edition, October 20-21, 2022, Timisoara, Romania. p. 56—57. <https://www.newtrends-timisoara.ro/docs/Book-of-abstracts-new-trends-2022.pdf>
4. **CRACIUN, N.**; **MELNIC, E.**; **CHISCA, D.** Synthesis, crystal structure and Hirshfeld surface analysis of ionic adduct of 2,4-diamino-6-phenyl-1,3,5-triazine with malonic acid. In: *Book of Abstracts. New Trends and Strategies in the Chemistry of Advanced Materials with Relevance in Biological Systems, Technique and Environmental Protection*, 14th Edition, October 20-21, 2022, Timisoara, Romania. p. 57—58. <https://www.newtrends-timisoara.ro/docs/Book-of-abstracts-new-trends-2022.pdf>
5. **CHUMAKOV, YU.**; **DARII, M.**; **KRAVTSOV, V.CH.**; HAUSER, J.; KRÄMER, K.; LEUSEN, J. VAN; DECURTINS, S.; KÖGERLER, P.; LIU, SHI-XIA; **BACA, S.G.** DFT

- calculations of magnetic interactions in $\{Mn_2Ln_2, Ln = Gd, Tb, Dy\}$ coordination clusters. In: *Book of-Abstracts*. New Trends and Strategies in the Chemistry of Advanced Materials with Relevance in Biological Systems, Technique and Environmental Protection, 14th Edition, October 20-21, 2022, Timisoara, Romania. p. 59—60. <https://www.newtrends-timisoara.ro/docs/Book-of-abstracts-new-trends-2022.pdf>
6. **BELEAEV, E.; KRAVTSOV, V.CH.; BACA, S.G.** Synthesis and characterization of a multi-ionic polymeric compound involving hexaamminecobalt(III), potassium, 4-sulfobenzoic, and chloride ions. In: *Book of-Abstracts*. New Trends and Strategies in the Chemistry of Advanced Materials with Relevance in Biological Systems, Technique and Environmental Protection, 14th Edition, October 20-21, 2022, Timisoara, Romania. p. 63—64. <https://www.newtrends-timisoara.ro/docs/Book-of-abstracts-new-trends-2022.pdf>
 7. **STATI, D.; LEUSEN, J. VAN; KRAVTSOV, V.CH., KÖGERLER, P.; BACA, S.G.** A small structural rearrangement in $\{Co^{III}_2Dy^{III}_4\}$ SMMs affects magnetization quantum tunneling. In: *Book of-Abstracts*. New Trends and Strategies in the Chemistry of Advanced Materials with Relevance in Biological Systems, Technique and Environmental Protection, 14th Edition, October 20-21, 2022, Timisoara, Romania. p. 68—69. <https://www.newtrends-timisoara.ro/docs/Book-of-abstracts-new-trends-2022.pdf>
 8. **PODGORNII, D.; LEUSEN, J. VAN; KRAVTSOV, V.CH., KÖGERLER, P.; BACA, S.G.** Heterometallic hexanuclear $\{Fe_4Ln_2, Ln = Dy, Gd\}$ pivalate clusters. In: *Book of-Abstracts*. New Trends and Strategies in the Chemistry of Advanced Materials with Relevance in Biological Systems, Technique and Environmental Protection, 14th Edition, October 20-21, 2022, Timisoara Romania. p. 70—71. <https://www.newtrends-timisoara.ro/docs/Book-of-abstracts-new-trends-2022.pdf>
 9. **GELMBOLDT, V.O.; LYTUVYNCHUK, I.V.; SHYSHKIN, I.O.; KHROMAGINA, L.M.; FONARI, M.S.; KRAVTSOV, V.C.** Synthesis, crystal structures, solubility and biological activity of 2-, 3-, 4-carboxyethyl pyridinium hexafluorosilicates. În: *Proceedings "Euroasian Scientific Discussions" (SCI-CONF.COM.UA)*. II Internatioanl Scientific and Practical Conference, March 13-15, 2022, Barcelona, Spain, p. 45—50. ISBN: 978-84-15927-32-7

2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

1. **BELEAEV, E.** Investigația structurală și analiza suprafeței Hirshfeld a compusului multi-component al $[Co(NH_3)_6]^{3+}$ cu ligandul 3-piridinsulfonic. În: *Proceedings. Book of Abstracts. Volume II Chemistry*. Conferința științifico-practică internațională "Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă". Ediția a IX-a. 19-20 martie 2022, Chișinău, Republica Moldova, p. 57—61. ISBN: 978-9975-76-389-9.
2. **CAIMAC, N.; CHIȘCA, D.** 4,4'-Diaminodifenilmetan și 4,4'-diaminodifeniletan în compușii coordinativi. sinteză, structură și proprietăți. În: *Proceedings. Book of Abstracts. Volume II Chemistry*. Conferința științifico-practică internațională "Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă". Ediția a IX-a. 19-20 martie 2022, Chișinău, Republica Moldova, p. 62—70. ISBN: 978-9975-76-389-9.
3. **CAZACIOC, N.; CHIȘCA, D.** Compuși coordinativi cu acidul 3(M)-aminobenzoic: analiza literaturii privind sinteza, structura și aplicare. În: *Proceedings. Book of Abstracts. Volume II Chemistry*. Conferința științifico-practică internațională "Instruire prin cercetare pentru o

- siciedade prosperă”. Ediția a IX-a. 19-20 martie 2022, Chișinău, Republica Moldova, p. 71—79. ISBN: 978-9975-76-389-9.
4. COȘCODAN, E.; **CHIȘCA, D.** Compuși coordinativi cu liganzi piridindicarboxilici. analiza literaturii. Structură și proprietăți. În: *Proceedings. Book of Abstracts. Volume II Chemistry*. Conferința științifico-practică internațională ”Instruire prin cercetare pentru o siciedade prosperă”. Ediția a IX-a. 19-20 martie 2022, Chișinău, Republica Moldova, p. 103—114. ISBN: 978-9975-76-389-9.
 5. DANILESCU, O.; **CROITOR, L.**; BULHAC, I.; **BOUROȘ, P.**; COCU, M. Arhitectura compușilor coordinativi ionici ai Fe(III) cu hidrazone în baza 2,6-diacetilpiridinei. În: *Proceedings. Book of Abstracts. Volume II Chemistry*. Conferința științifico-practică internațională ”Instruire prin cercetare pentru o siciedade prosperă”. Ediția a IX-a. 19-20 martie 2022, Chișinău, Republica Moldova, p. 115—122. ISBN: 978-9975-76-389-9.
 6. LOZOVAN, V.; **KRAVȚOV, V.**; **FONARI, M.** Polimer coordinativ 2D al Zn(II) în baza acidului dicarboxilic 4,4'-(hidrazin-1,2-diilidenbis(metanililiden)) dibenzoic. În: *Proceedings. Book of Abstracts. Volume II Chemistry*. Conferința științifico-practică internațională ”Instruire prin cercetare pentru o siciedade prosperă”. Ediția a IX-a. 19-20 martie 2022, Chișinău, Republica Moldova, p. 138—139. ISBN: 978-9975-76-389-9.
 7. URECHE, D.; BULHAC, I.; **BOUROȘ, P.** Sinteza și structura complexului bimetalic [Sr(L)₃][Co^{II}(NCS)₄]. În: *Proceedings. Book of Abstracts. Volume II Chemistry*. Conferința științifico-practică internațională ”Instruire prin cercetare pentru o siciedade prosperă”. Ediția a IX-a. 19-20 martie 2022, Chișinău, Republica Moldova, p. 153—155. ISBN: 978-9975-76-389-9.
 8. **CHUMAKOV, Y.**; **DARII, M.**; **NIRCA, E.**; **KRAVTSOV, V.**; **BOUROSH, P.**; **BACA, S.** Ab initio study of hexaammine cobalt(III) cations interaction with mono- dianions and neutral molecules in multi-component compounds. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry-2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 59—60. ISBN: 978-9975-159-07-4. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
 9. **FONARI, M.**; **KRAVTSOV, V.** Multiple component ionic complexes of hexaamminecobalt chloride with two pharmacophoric acids. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry-2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 60—61. ISBN: 978-9975-159-07-5. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
 10. **STATI, D.**; **KRAVTSOV, V.**; LABLIUC, S.; DVORNINA, E.; CLAPCO, S.; CILOCI (DESEATNIC), A.; **BACA, S.** Application of bis(triethanolamine)-cobalt(II) dinitrate in the production of enzymes by microorganisms. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry -2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 63. ISBN: 978-9975-159-07-6. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
 11. **CAIMAC, N.**; **MELNIC, E.**; **CHIȘCA, D.** A 2D cadmium coordination host framework with inclusion of 4,4'-diaminodiphenylmethane and 4,4'-bipyridine guest molecules. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and

environmental chemistry -2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 65 . ISBN: 978-9975-159-07-7. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>

12. **FONARI, M.; LOZOVAN, V.; KRAVTSOV, V.** 2D and 3D Nd(III) coordination polymers assembled via bridging 1,4-benzenedicarboxylate and oxalate linkers. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry - 2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 66 . ISBN: 978-9975-159-07-8. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
13. **BELEAEV, E.; KRAVTSOV, V.; BACA, S.** Crystal structure and hirshfeld surface analysis of a multi-component compound comprising hexaammine Co(III) cations and 3-pyridinesulfonate anions. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry-2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 71—72. ISBN: 978-9975-159-07-9. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
14. **COȘCODAN, E.; MELNIC, E.; PETUHOV, O.; CHIȘCA, D.** Synthesis, structural characterization and thermal analysis of Co(II) monomer based on 2,3-pyridinedicarboxylic acid. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry -2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 72—73. ISBN: 978-9975-159-07-10. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
15. **PODGORNÎI, D.; BACA, S.; KRAVTSOV, V.** A hexanuclear {Fe₆} pivalate cluster based on aminoalcohol ligands. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry -2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 74 . ISBN: 978-9975-159-07-12. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
16. **ZVEAGHINTSEVA, M.; STYNGACH, E.; POGREBNOI, S.; LUPAȘCU, L., VALICA, V.; UNCU, L.; KRAVTSOV, V.; TERTEAC, D.; BRÎNZAN, A.; MAKAEV, F.** Resin acids as raw material for fabrication of antifungal micro- and nanoparticles of dehydroabietic acid loaded with cyclodextrin and chromenol hybrid. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry-2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 165 . ISBN: 978-9975-159-07-14. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>

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

1. URECHE, Dumitru, MD; BULHAC, Ion, MD; **BOUROȘ, Pavlina**, MD; ROȘCA, Daniel, MD; LUPAȘCU, Lucian, MD. Bis-(N,N'-bis(4-tolil)diaminogliximă)-4-metilnilin-trihidrat pentru utilizare în calitate de remediu antibacterian în agricultură. *Brevet de invenție MD* 4762 CI din 28.02.2022. <http://www.db.agepi.md/Inventions/details/a%202019%200090>.
2. LOZOVAN V.; **FONARI, M.; KRAVȚOV, V.**; SIMINEL, N.; COROPCEANU, E.; KULIKOVA, O.; **COSTRIUCOVA, N.** *Polimer coordinativ unidimensional al cadmiului*

(II) în baza liganzilor 1,2-bis(piridin-4-ilmetilen)hidrazină și acid 2-aminobenzoic, care manifestă activitate fotoluminescentă și capacitate de schimb al moleculelor de solvent. <http://www.db.agepi.md/Inventions/registru/a%202020%200076>.

Hotărâri de acordare a brevetelor:

1. BULHAC, Ion, MD; URECHE, Dumitru, MD; CILOCI, Alexandra, MD; BOUROȘ, Pavlina, MD; TIURINA, Janeta, MD; LABLIUC, Steliana, MD. Tetra(izotiocianat)cobaltat(II) de tris(dimetil piridin-2,6-dicarboxilat)stronțiu cu proprietăți de biostimulator al activității lipolitice pentru tulpina de fungi *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03. Hotărâre nr. 10137 din 27.09.2022 de acordare a brevetului de invenție.
2. CILOCI, A.; BACA, S.; CLAPCO, S.; TIURINA, J.; LABLIUC, S.; DVORNINA, E.; BIVOL, C.; DARII, M.; KRAVTOV, V. Aplicarea compusului coordinativ diaqua-nitrato-(2,4,6-tris(2-piridil)-s-triazină)-mangan (II) nitrat ca stimulator al sintezei proteazelor la tulpina de fungi miceliali *Fusarium gibbosum* CNMN FD 12. Hotărâre nr. 10003 din 25.02.2022 de acordare a brevetului de invenție.
3. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., BOUROȘ, P., CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., MATROI, A. Nitrat de 2,6-diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-bis(aqua)fier(III)-hidrat(1/2,5) cu proprietăți de stimulator al sintezei lipazelor exocelulare pentru tulpina de fungi *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03 și mediu nutritiv pentru cultivare. Nr. 10118 din 2022.08.26 (CBI a 2021 0014).

Cerere de brevet de invenție:

1. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., BOUROȘ, P., CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., MATROI, A. Perclorat de 2,6-diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-bis(aqua)fier(III)-hidrat(1/2,5) cu proprietăți de stimulator al sintezei lipazelor exocelulare pentru tulpina de fungi *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03. Cerere de brevet de invenție. Institutul de Chimie. Institutul de Fizică Aplicată. Institutul de Microbiologie și Biotehnologie. Nr. depozit a 2022 0005. Data depozit 2022. 02.04.
2. DANILESCU, O., BULHAC, I., CROITOR, L., BOUROȘ, P., KULICOVA, O. Nitrat de 2,6-diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-(aqua)(nitrato)cadmiu(II)-monohidrat cu proprietăți fotoluminescente. Cerere de brevet de invenție. Institutul de Chimie. Institutul de Fizică Aplicată. Nr. depozit a 2022 0015. Data depozit 2022. 03.24.

Materiale la saloane de inventică:

1. LOZOVAN, V.; FONARI, M.; KRAVTOV, V.; SIMINEL, N.; COROPCEANU, E.; KULIKOVA, O.; COSTRIUCOVA, N. Cadmium(II) one-dimensional coordination polymer based on 1,2-bis (pyridin-4-ylmethylene)hydrazine and 2-aminobenzoic acid ligands, which shows a photoluminescent activity and an ability to solvent exchange. În: *Proceedings*. The 14th Edition of EUROINVENT European Exhibition of Creativity and Innovation, May 28, 2022, Iași, România, p.192. ISBN: 2601-4564. https://www.euroinvent.org/cat/EUROINVENT_2022.pdf
2. BULHAC, I.; URECHE, D.; BOUROȘ, P.; COCU, M.; CILOCI, A.; CONDRUC, V.; DVORNINA, E. Tris(2,6-dimethyl pyridinecarboxylate-1kONO)-di-μ-(isothiocyano-1,2kN)-(diisothiocyano-2kN)barium(II)cobalt(II) with biostimulatory properties of the

synthesis of bioactive principles on fungi. În: *Proceedings*. The 14th Edition of EUROINVENT European Exhibition of Creativity and Innovation, May 28, 2022, Iași, România, p. 194 . ISBN: 2601-4564.

https://www.euroinvent.org/cat/EUROINVENT_2022.pdf

3. **BACA, S.; SULTANOVA, O.; DARII, M.; BOUROSH, P.** Employing of hexaamminecobalt(III) trichloride bis(1,10-phenanthroline) with antibacterial properties against tumor growth in grapevine. În: *Proceedings*. The 14th Edition of EUROINVENT European Exhibition of Creativity and Innovation, May 28, 2022, Iași, România, p. 212 . ISBN: 2601-4564. https://www.euroinvent.org/cat/EUROINVENT_2022.pdf
4. **CILOCI, A.; BACA, S.; CLAPCO, S.; TIURINA, J.; LABLIUC, S.; DVORNINA, E.; BIVOL, C.; DARII, M.; KRAVȚOV, V.** Application of coordination compound diaqua-nitrato-(2,4,6-tris(2-pyridyl)-s-triazine)-manganese(II) nitrate as stimulator of protease synthesis in fungal strain *Fusarium gibbosum* CNMN FD 12. În: *Proceedings*. The 14th Edition of EUROINVENT European Exhibition of Creativity and Innovation, May 28, 2022, Iași, România, p. 220 . ISBN: 2601-4564. https://www.euroinvent.org/cat/EUROINVENT_2022.pdf
5. **CILOCI, A.; BACA, S.; CLAPCO, S.; TIURINA, J.; LABLIUC, S.; DVORNINA, E.; BIVOL, C.; DARII, M.; KRAVȚOV, V.** Application of coordination compound diaqua-nitrato-(2,4,6-tris(2-pyridyl)-s-triazine)-manganese (II) nitrate as stimulator of protease synthesis in fungal strain *Fusarium gibbosum* CNMN FD 12. În: *INVENTICA 2022*. The 26th International Exhibition of Inventions, June 22-24, 2022, Iași, România , p. 279 . ISBN: 1844-7880.
6. **CILOCI, A.; BACA, S.; CLAPCO, S.; TIURINA, J.; LABLIUC, S.; DVORNINA, E.; BIVOL, C.; DARII, M.; KRAVTOV, V.** Aplicarea compusului coordinativ diaqua-nitrato-(2,4,6-tris(2-piridil)-s-triazină)-mangan (II) nitrat ca stimulator al sintezei proteazelor la tulpina de fungi miceliali *Fusarium gibbosum* CNMN FD 12. În: *CATALOG OFICIAL, Colecția "ȘTIINȚE TEHNICE"*. Salonul internațional de invenții, inovații "Traian Vuia", ediția a VIII-a, 08-10 octombrie 2022, Timișoara, România, p. 129 . ISBN: 978-606-35-0496-9.
7. **DANILESCU, O.; BULHAC, I.; COCU, M.; BOUROȘ, P.; CILOCI, A.; CLAPCO, S.; LABLIUC, S.; MATROI, A.** Nitrat de 2,6-diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-bis(aqua)fier(III)-hidrat(1/2,5) cu proprietăți de stimulator al sintezei lipazelor exocelulare pentru tulpina de fungi *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03 și mediu nutritiv pentru cultivare. În: *CATALOG OFICIAL, Colecția "ȘTIINȚE TEHNICE"*. Salonul internațional de invenții, inovații "Traian Vuia", ediția a VIII-a, 08-10 octombrie 2022, Timișoara, România, p. 146 . ISBN: 978-606-35-0496-9.
8. **LOZOVAN, V.; FONARI, M.; KRAVTOV, V.; SIMINEL, N.; COROPCEANU, E.; KULIKOVA, O.; COSTRIUCOVA, N.** Polimer coordinativ unidimensional al cadmiului(II) în baza liganzilor 1,2-bis(piridin-4-ilmetilen)hidrazină și acid 2-aminobenzoic, care manifestă activitate fotoluminescentă și capacitate de schimb a moleculelor de solvent. În: *CATALOG OFICIAL, Colecția "ȘTIINȚE TEHNICE"*. Salonul internațional de invenții, inovații "Traian Vuia", ediția a VIII-a, 08-10 octombrie 2022, Timișoara, România, p. 147 . ISBN: 978-606-35-0496-9.
9. **BULHAC, I.; URECHE, D.; BOUROSH, P.; COCU, M., CILOCI, A., CONDRUC, V.; DVORNINA, E.** Tris(2,6-dimethyl pyridinecarboxylate-1kONO)-di-μ-(isothiocyanato-

1,2kN)-(diisothiocyanato-2kN)barium(II)cobalt(II) with biostimulatory properties of the synthesis of bioactive principles on fungi. În: *CATALOG OFICIAL, Colecția "ȘTIINȚE TEHNICE"*. Salonul internațional de invenții, inovații "Traian Vuia", ediția a VIII-a, 08-10 octombrie 2022, Timișoara, România, p. 147—148. ISBN: 978-606-35-0496-9.

10. **BACA, S.; SULTANOVA, O.; DARII, M.; BOUROȘ, P.** Aplicarea compusului hexaaminăcobalt(III) triclorură bis(1,10-fenantrolină) trihidrat în calitate de inhibitor al dezvoltării cancerului la vița de vie. În: *CATALOG OFICIAL, Colecția "ȘTIINȚE TEHNICE"*. Salonul internațional de invenții, inovații "Traian Vuia", ediția a VIII-a, 08-10 octombrie 2022, Timișoara, România, p. 154 . ISBN: 978-606-35-0496-9.

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

Rezultatele obținute în cadrul proiectului țin de cunoaștere în special, adică de lărgirea și îmbunătățirea/precizarea cunoștințelor referitor la metodele de obținere a compușilor noi, în special în față monocristalină, de rezultate ale determinării structurii atomice și cristaline cu ajutorul razelor X, de unele proprietăți ale materialelor noi monomerică cu diferită nuclearitate, cât și polimerice, cum ar fi magnetochimice, luminescente, spectroscopice ale sistemelor. O atenție deosebită a fost acordată studiului activității biologice, având ca scop crearea compușilor cu aplicabilitate în diferite domenii farmaceutice ori agricole. Rezultatele structurale obținute pentru un număr mai mare de compuși noi evidențiază valoarea teoretică, în comparație cu lucrările separate existente în țară și peste hotare referitor la clasa de compuși concretă, 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 personale, printere, scanere; difractometru modern automatizat Xcalibur E pentru studiul structural al monocristalelor; Baza de Date Structurale Cambridge; cu informație referitor la structura compușilor organici și metalorganici; 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

- Institutul de Chimie, R. Moldova, Laboratoarele: Chimie Coordinativă, Chimie Bioanorganică și Biocompozite, Chimie Fizică și Cuantică, Chimie Ecologică, Sinteză Organică ș.a.;
- Universitatea de Stat din Moldova, Facultatea de Chimie și Tehnologie Chimică, Facultatea de Fizică și Inginerie;
- Universitatea de Stat din Tiraspol (Universitatea Pedagogică de Stat "Ion Creangă"), Facultatea de Biologie și Chimie;
- Institutul de Microbiologie și Biotehnologie;
- Institutul Științifico-Practic de Horticultură și Tehnologie Alimentară;

- Institutul de Fizică Aplicată, Laboratorul Fizica Compușilor Semiconductori ”Sergiu Rădăuțan”.

10. Colaborare la nivel internațional în cadrul implementării proiectului

- Institutul de Chimie „Coriolan Drăgulescu”, Timișoara, România;
- Universitatea de Vest din Timișoara, Centrul de Cercetare Analize termice în probleme de mediu, Timișoara, România;
- Institutul de Chimie Macromoleculară “Petru Poni“, Iași, România;
- Universitatea Națională de Medicină din Odesa, Odesa, Ucraina;
- ISTM-CNR, Institutul de Științe Moleculare și Tehnologii din CNR și INSTM UdR, Milan, Italia;
- Departamentul de Chimie, Universitatea pentru Studii din Milan, Milan, Italia;
- Universitatea Tehnică din Gebze, Centru de Cercetare Nanotehnologică (GTU/NRC) din Gebze, Turcia;
- Institutul de Chimie Anorganică, RWTH Universitatea din Aachen, Aachen, Germania.
- Universitatea Highlands New Mexico, Las Vegas, NM, USA.
- 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;
- Metoda de procurare a consumabilelor (licitația generală susținută de Institutul de Fizică Aplicată în 2022) a durat mult și substanțele chimice planificate au fost achiziționate cu o întârziere inacceptabilă, 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 se va prezenta separat (conform modelului) pentru:

- Manifestări științifice internaționale (în străinătate)
- Manifestări științifice internaționale (în Republica Moldova)
- Manifestări științifice naționale
- Manifestări științifice cu participare internațională

1. **NIRCA (BELEAEV) Ecaterina.** Masterand. Conferința științifică studentescă națională cu participare internațională. Ediția LXXI-a. 20 aprilie 2022. Ministerul Educației și Cercetării, Universitatea de Stat din Tiraspol. Sinteza și studiul compușilor coordinați

multicompenți care conțin hexaaminăcobalt(III) și liganzi cu proprietăți antivirale și antibacteriene (oral).

2. **CAIMAC Nicoleta.** Licențiat. Conferința științifică studentescă națională cu participare internațională. Ediția LXXI-a. 20 aprilie 2022. Ministerul Educației și Cercetării, Universitatea de Stat din Tiraspol. Compuși coordonativi ai Co(II) și Cd(II) 4,4'-diaminodifeniletan. Sintează, structură și proprietăți (oral).
13. Aprecierea și recunoașterea rezultatelor obținute **în proiect** (premiu, medalii, titluri, alte aprecieri).
 - BULHAC, I., MD; URECHE, D., MD; **BOUROȘ, P.**, MD; COCU, M., MD; CILOCI, A., MD; CONDRUC, V., MD; DVORNINA, E., MD. **Medalie de bronz.** Ediția a 14-a a EUROINVENT – 2022. 28 mai 2022, Iași, România;
 - **LOZOVAN, V.; FONARI, M.; KRAVTOV, V.;** SIMINEL, N.; COROPCEANU, E.; KULIKOVA, O.; **COSTRIUCOVA, N.** **Medalie de argint.** Ediția a 14-a a EUROINVENT -2022, 28 mai, 2022, Iași, România;
 - **BACA, S.;** SULTANOVA, O.; **DARII, M.;** **BOUROSH, P.** **Medalie de aur.** Ediția a 14-a a EUROINVENT -2022, 28 mai, 2022, Iași, România;
 - CILOCI, A.; **BACA, S.;** CLAPCO, S.; TIURINA, J.; LABLIUC, S.; DVORNINA, E.; BIVOL, C.; **DARII, M.;** **KRAVTOV, V.** **Medalie de aur.** Universitatea Politehnica din București. Ediția a 14-a a EUROINVENT -2022, 28 mai, 2022, Iași, România;
 - **BACA, S.;** SULTANOVA, O.; **DARII, M.;** **BOUROSH, P.** **Premiu de excelență în inovare.** Ediția a 14-a a EUROINVENT -2022, 28 mai, 2022, Iași, România;
 - BULHAC, I., MD; URECHE, D., MD; **BOUROȘ, P.**, MD; COCU, M., MD; CILOCI, A., MD; CONDRUC, V., MD; DVORNINA, E., MD. **Medalie de argint.** Salonul Internațional Invenții Inovații TRAIAN VUIA, 10 octombrie 2022, Timișoara, România;
 - BULHAC, I., MD; URECHE, D., MD; **BOUROȘ, P.**, MD; COCU, M., MD; CILOCI, A., MD; CONDRUC, V., MD; DVORNINA, E., MD. **Diplomă de excelență.** Salonul Internațional Invenții Inovații TRAIAN VUIA, 10 octombrie 2022, Timișoara, România;
 - **BACA, S.;** SULTANOVA, O.; **DARII, M.;** **BOUROSH, P.** **Medalie de aur.** Salonul Internațional Invenții Inovații TRAIAN VUIA, 10 octombrie 2022, Timișoara, România;
 - **LOZOVAN, V.;** **FONARI, M.;** **KRAVTOV, V.;** SIMINEL, N.; COROPCEANU, E.; KULIKOVA, O.; **COSTRIUCOVA, N.** **Medalie de aur.** Salonul Internațional Invenții Inovații TRAIAN VUIA, 10 octombrie 2022, Timișoara, România;
 - DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., **BOUROȘ, P.**, CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., MATROI, A. **Medalie de aur.** Salonul Internațional Invenții Inovații TRAIAN VUIA, 10 octombrie 2022, Timișoara, România;
 - **MELNIC ELENA,** Diplomă de Onoare, Cu prilejul Zilei Internaționale a Femeilor și Fetelor din domeniul Științei. Ministerul Educației și Cercetării al R. Moldova;
 - **CHIȘCA DIANA.** Diplomă de Onoare, Cu prilejul Zilei Internaționale a Femeilor și Fetelor din domeniul Științei. Ministerul Educației și Cercetării al R. Moldova;
 - **FONARI MARINA.** Diplomă de Merit, Pentru coordonarea științifică a tezei de doctor de excelență de gradul I (Lozovan Vasile), AN ACEC, Chișinău 2022;
 - **BOUROȘ PAVLINA,** Diplomă de Merit, Pentru coordonarea științifică a tezei de doctor de excelență de gradul II (Vitiu Aliona), AN ACEC, Chișinău 2022;

- **VITIU ALIONA**, Diplomă de laureat al Concursului Național teza de doctor de excelență 2021 și premiul Constantin Turtă. Teza de doctor de excelență de gradul II. AN ACEC, Chișinău 2022.
- **KRAVȚOV VICTOR**. Medalie academică “Nicolae Milescu Spătaru” AȘM, 18.01.2022.

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

➤ Emisiuni radio/TV de popularizare a științei

Model: Nume, prenume / Emisiunea / Subiectul abordat

➤ Articole de popularizare a științei

➤ Participări la diverse manifestări

1. Noaptea cercetătorului, organizată de UTM, 1 octombrie 2022
2. Ziua Internațională a Științei cu expoziție, organizată de Ministerul de Educație și Cercetare a RM. 10 noiembrie 2022, Sala Republicii. Chișinău.

15. Teze de doctorat / postdoctorat susținute și confirmate în anul 2022 de membrii echipei proiectului

1. **MELNIC Elena**. “ROLUL LEGĂTURILOR COORDINATIVE ȘI A INTERACȚIUNILOR π - π ÎN EDIFICAREA ARHITECTURII SUPRAMOLECULARE ÎN CRISTALELE COMPUȘILOR COMPLECȘI DE CUPRU. STUDIUL CU RAZE X”. Teză de doctor în științe fizice. Coducător – dr. **KRAVȚOV Victor**.

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.

Au fost trimise în Baza de Date Structurale Cambridge în Cif-uri ale structurilor trimise spre publicare: dr. **M. Fonari** (9), dr. **P. Bouroș** (16), dr. **V. Kravțov** (2), dr. **S. Baca** (13), dr. **Iu. Ciumacov** (11) dr. **L. Croitor** (10).

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 coordinativi 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**

Teze de master și teze de licență finalizate și în derulare

1. **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**
 2. **Caimac Nicoleta** „Sinteza și caracteristica compușilor coordinativi cu liganzi biologic activi” (licență în derulare, UST), conducător dr. **D. Chișca**
 3. **Veveriță Anastasia** „Studiul cu raze X al cloro-bis(dimetilglioximato) cobalt(III) cu derivați ai piridinei” (master, UPS Ion Creangă), conducători dr. **E. Coropceanu**, **P. Bouroș**
 4. **Țapu Dumitrița** „Difracția cu raze X și analiza interacțiunilor intermoleculare din cocristalele organice ale acidului 2-nitroterifalic și diferiți liganzi piridinici” (licență, UPS Ion Creangă), conducător dr. **D. Chișca**
17. Informație suplimentară referitor la activitățile membrilor echipei în anul 2022
- Membru/președinte al comitetului organizatoric/științific, al comisiilor, consiliilor științifice de susținere a tezelor (Opțional)
 1. **Kravțov Victor**, membru al Consiliului științific al IFA.
 2. **Kravțov Victor**, membru al seminarului științific de profil „Fizica Aplicată”
 3. **Bouroș Pavlina**, recenzent la dările de seamă la AȘM.
 4. **Bouroș Pavlina**, recenzii la rezumate ale tezelor de doctor (Baja Svetlana, Popovici Violina, Cebotari Diana.)
 - Redactor / membru al colegiilor de redacție al revistelor naționale / internaționale
 1. dr. **Kravțov Victor**, revista Moldavian Journal of the Physical Sciences / membru al colegiului de redacție.
 2. **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.
 3. **Croitor Lilia**, revista Crystals https://www.mdpi.com/journal/crystals/special_issues/multicomponent_molecular_crystals.
 4. dr. **M. Fonari** (14), dr. **V. Kravțov** (3), dr. **S. Baca** (23), dr. **Iu. Ciumacov** (2) dr. **L. Croitor** (12)- recenzii la articole în reviste internaționale de specialitate cu IF.

18. Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect.

În conformitate cu programul de activitate pentru 2022, utilizând abordarea ingineriei cristalului, au fost proiectate și studiate prin metoda cristalografică cu raze X noi materiale hibride organice/anorganice cristaline care includ atât compuși coordinativi monomerici și polimerici, inclusiv nanoclusteri, cât și sisteme supramoleculare organice sau organice/anorganice multicomponente cu proprietăți fizice și biologice avansate. Ca urmare prin difracția razelor X pe monocristale și alte metode fizice sau prin testări biologice au fost studiate structurile cristaline a 72 de compuși noi. Materialele cristaline din clasa complexilor mononucleari Fe/Mn și clusterilor polinucleari homo- și heterometalici cu nucleul metalic $\{Fe_2\}$, $\{Fe_7\}$ și $\{Fe_{18}M_6\}$ ($M = Dy, Gd, Y$) au fost obținute și studiate din punct de vedere al relației structură-proprietăți magnetice și al polimorfismului indus de solvent. Cercetări substanțiale sunt legate de studiul polimerilor coordinativi ai Fe(II), Co(II), Mn(II), Cu(II), Zn(II) și Cd(II) pentru a evidenția factorii care au influențat reglabilitatea în dimensiune, distanțele interatomice metal-metal de-a lungul lanțurilor polimerice, impactul ionilor metalici asupra izostructuralității, posibilitatea detectării moleculelor cu incluziune. Studiul fotoluminescenței a arătat că unele compuși au prezentat intensități semnificative. Pentru a estima proprietățile optice și termoelectrice neliniare în serii concrete de polimeri coordinativi a fost utilizată teoria funcțională a densității. S-a demonstrat că, indiferent de diferitele grade de izostructuralitate ale polimerilor de coordonare studiați, proprietățile acestora depind semnificativ de natura ionilor metalici. A fost obținut și caracterizat un nou compus coordinativ cu formula $[Eu(NO_3)_3(H_2O)_2(L)]$ având ca ligand fosfor organic, tris-[4-(piridin-2-il)]triimidazo[1,2-a:1',2'-c :1'',2''-e][1,3,5]triazina (L). O nouă serie de solide farmaceutice cu componente multiple care conțin cationul $[Co(NH_3)_6]^{3+}$ și acizi farmacofori a fost sintetizată și studiată prin metoda cu raze X și analiza suprafețelor Hirshfeld. Studiul cu raze X a relevat o diferență structurală esențială în compușii heterometalici ai Ca(II), Sr(II) și Ba(II) cu 2,6-pirindimetildicarboxilatul (L) cu formulele $[CaL_3][Co(NCS)_4]$, $[SrL_3][Co(NCS)_4]$ și $[BaCoL_3(\mu-NCS)_2(NCS-\kappa N)_2]$. Investigații științifice semnificative au fost realizate în strânsă colaborare cu cercetătorii din Institutul de Chimie, Universitatea de Stat din Moldova, Universitatea de Stat din Tiraspol (UPS Ion Creangă), Institutul de Microbiologie și Biotehnologie, Institutul Științifico-Practic de Horticultură și Tehnologii Alimentare, Institutul de Chimie „Coriolan Drăgulescu”, Timișoara, România, Universitatea din Gebze, Turcia, Universitatea Națională de Medicină Odesa și Institutul de Stomatologie și Chirurgie Maxilo-Facială al Academiei Naționale de Științe Medicale din Ucraina, Odesa, Ucraina, Universitatea din Berna, Elveția, Institutul de Chimie Anorganică a Universității din Aachen, Germania, Institutul de Chimie Macromoleculară „Petru Poni”, Iași, România. În 2022, în cadrul proiectului, au fost publicate 19 articole științifice în reviste științifice internaționale de top, inclusiv cele mai prestigioase cu factori de impact ridicat; membrii echipei au participat la 8 conferințe științifice și saloane de invenție internaționale și naționale și au publicat 35 de rezumate și proceeding-uri, au fost obținute 2 brevete și au fost menționați cu medalii de aur, argint, bronz și diplome de excelență. În 2022 a fost susținute trei teze de doctor, de master și de licență și sunt în curs de realizare patru teze de doctor, o teză de master și una de licență.

New crystalline hybrid organic/inorganic materials involving nanoclusters, coordination polymers, coordination compounds, multicomponent organic or organic/inorganic supramolecular systems with advanced physical and biological properties have been designed utilizing crystal engineering approach and studied by X-ray crystallographic method in accordance with the program of activities for 2022. Crystal structures of 72 new crystalline compounds have been studied by single crystal X-ray diffraction and other physical methods or biological testing. Crystalline materials in the class of mononuclear Fe/Mn complexes and homo- and heterometallic polynuclear clusters comprising the metal cores $\{Fe_2\}$, $\{Fe_7\}$, and $\{Fe_{18}M_6\}$ ($M = Dy, Gd, Y$) have been obtained and studied from the view point of structure-magnetic properties relationship and solvent-induced polymorphism. Substantial research has been focused on coordination polymers of Fe(II), Co(II), Mn(II), Cu(II), Zn(II) and Cd(II) to study factors influenced the tunability in dimension, metal-metal separation along polymeric chains, metal ions impact on the isostructurality, possibility to sensing guest molecules. The photoluminescence study revealed that some of them exhibited significant photoluminescence intensities. Density functional theory has been used to estimate the nonlinear optical and thermoelectric properties of the given series of coordination polymers. It has been shown that, regardless of the different degrees of isostructurality of the studied coordination polymers, their properties significantly depend on the nature of the metal ions. New coordination compound, $[Eu(NO_3)_3(H_2O)_2(L)]$ with organic phosphor, tris-[4-(pyridin-2-yl)]triimidazo[1,2-a:1',2'-c:1'',2''-e][1,3,5]triazine (L) has been obtained and characterized. A new series of multiple component pharmaceutical solids containing the cation $[Co(NH_3)_6]^{3+}$ and pharmacophoric acids has been synthesised and studied by X-ray method and Hirshfeld surface analysis. The X-ray study revealed an essential structural difference between the heterometallic compounds $[CaL_3][Co(NCS)_4]$, $[SrL_3][Co(NCS)_4]$ and $[BaCoL_3(\mu-NCS)_2(NCS-\kappa N)_2]$, where $L=2,6$ -pyridindimethyldicarboxylate.

A meaningful scientific research has been done in close scientific collaboration with Institute of Chemistry, Moldova State University, Tiraspol State University (PSU I. Creanga), Institute of Microbiology and Biotechnology, Practical Scientific Institute of Horticulture and Food Technology, Institute of Chemistry „Coriolan Dragulescu”, Timisoara, Romania, University of Gebze, Turkey, Odessa National Medical University and Institute of Stomatology and Maxillo-Facial Surgery National Academy of Medical Science of Ukraine, Odessa, Ukraine, University of Bern, Switzerland, Institute of Inorganic Chemistry Aachen University, Germany, “Petru Poni” Institute of Macromolecular Chemistry, Iasi, Romania.

In 2022 within the framework of the project, 19 scientific articles were published in leading international scientific journals, including the most prestigious ones with high impact factors; team members took part in 8 international and national scientific conferences, exhibitions, and published 35 abstracts and proceedings, 2 patents were obtained and awarded with Gold, Silver, and Bronze medals and Diploma of excellence. One doctor, one master and one bachelor theses have been defended and four doctor, one master and one bachelor theses are in realization.

19. Recomandări, propuneri

- Achizițiile în parte în cadrul proiectului vor fi mai eficiente;
- 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 restul 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;
- Este necesar internet-accesul la publicații în reviste științifice internaționale de top.

Conducătorul de proiect  / KRAVTOV Victor

Data: 17.11.2022



**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 biologic 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. **Capitole în monografii naționale/internaționale**

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.

2. **Croitor Lilia**, revista *Crystals*

https://www.mdpi.com/journal/crystals/special_issues/multicomponent_molecular_crystals.

4. **Articole în reviste științifice**

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

1. CRISAN, M.; PETRIC, M.; VLASE, G.; VLASE, T.; SIMINEL, A.V.; **BOUROSH, P.N.**; **CROITOR, L.** Organic salt versus salt cocrystal: thermal behavior, structural and photoluminescence investigations. *J Therm Anal Calorim.* 2022, **147(2)**, 1203—1213. ISSN 1388-6150. Doi: [10.1007/s10973-020-10438-y](https://doi.org/10.1007/s10973-020-10438-y) (IF: 4,755).
2. ÇAYDAŞI, M.; MINTAŞ, M.F.; **CHUMAKOV, Y.M.**; VOLZ, S.; CENGİZ, A.; SEYIDOV, M.H.Y. A Study of Thermoelectric Performance of TlGaSe₂ Layered Dichalcogenides from First-Principles Calculations: Vacancy Defects Modeling and Engineering. *Phys Status Solidi B.* 2022, **259(1)**, 2100409-1—2100409-12. ISSN 0370-1972. Doi: [10.1002/pssb.202100409](https://doi.org/10.1002/pssb.202100409) (IF: 1,782).
3. **BOUROSH, P.N.**; COROPCEANU, ED.B.; RIJA, A.P.; URECHE, D.; CILOCI, A.A.; CLAPCO, S.F.; DVORNINA, E.G.; LABLIUC, S.V.; BULHAC, I.I. Synthesis and Structures of Disulfanilamide Glyoxime and Ni(II) and Cu(II) Complexes with This Ligand Stimulating the Proteolytic Properties of [Cu(DsamH₂)₃]SO₄·5H₂O. *Russ J Coord Chem.* 2022, **48(1)**, 41—51. ISSN 1070-3284. Doi: [10.1134/S1070328422010018](https://doi.org/10.1134/S1070328422010018) (IF: 1,814).
4. DANILESCU, O.; BULHAC, I.; **BOUROSH, P.N.**; **CROITOR, L.** Anion-assisted Fe(III)-coordination supramolecular systems based on 2,6-diacetylpyridine dihydrazone. *Polyhedron.* 2022, **215**, 115679-1—115679-12. ISSN 0277-5387. Doi: [10.1016/j.poly.2022.115679](https://doi.org/10.1016/j.poly.2022.115679) (IF: 2,975).

5. DUYGULU, E.; ALEV, O.; **CHUMAKOV, Y.**; ÖZTÜRK, Z.Z.; AYHAN, M.M.; YUKSEL, F. Morphology induced enhanced photoconductivity of a phthalocyanine-based benzimidazole linked two-dimensional conjugated covalent organic polymer. *New J Chem.* 2022, **46(13)**, 6314—6318. ISSN 1144-0546. Doi: [10.1039/D2NJ00339B](https://doi.org/10.1039/D2NJ00339B) (IF: 3,925).
6. **CROITOR, L.**; PETRIC, M.; CRISAN, L.; **BOUROSH, P.N.**; VLASE, G.; VLASE, T.; CRISAN, M. Effect of substituents on the crystal structure and thermal stability of N-phosphorylated iminophosphoranes. *J Therm Anal Calorim.* 2022, **147(9)**, 5423—5435. ISSN 1388-6150. Doi: [10.1007/s10973-022-11201-1](https://doi.org/10.1007/s10973-022-11201-1) (IF: 4,755).
7. **CROITOR, L.**; VLASE, G.; VLASE, T.; **BOUROSH, P.N.**; CHUMAKOV, Y.M.; CRISAN, M. Relationship between crystal structure and thermal properties of polymorphic system methylethanolammonium 2-chloro-4-nitrobenzoate. *J Therm Anal Calorim.* 2022, **147(9)**, 5437—5449. ISSN 1388-6150. Doi: [10.1007/s10973-022-11263-1](https://doi.org/10.1007/s10973-022-11263-1) (IF: 4,755).
8. GRAUR, V.; **CHUMAKOV, Yu.**; GARBUZ, O.; HUREAU, CH.; TSAPKOV, V.; GULEA, A. Synthesis, Structure, and Biologic Activity of Some Copper, Nickel, Cobalt, and Zinc Complexes with 2-Formylpyridine N4-Allylthiosemicarbazone. *Bioinorg Chem Appl.* 2022, **2022**, 2705332-1—2705332-18. ISSN 1565-3633. Doi: [10.1155/2022/2705332](https://doi.org/10.1155/2022/2705332) (IF: 7,778).
9. LOZOVAN, V.; **KRAVTSOV, V.CH.**; COSTRIUCOVA, N.V.; SIMINEL, A.; KULIKOVA, O.V.; **FONARI, M.S.** Tunability in dimension, metal and ligand coordination modes and emission properties in Cd(II) and Zn(II) coordination networks based on 4,4'-(hydrazine-1,2-diylidenebis(methanylylidene)) dibenzoic acid linker. *J Solid State Chem.* 2022, **310**, 123021-1—123021-9. ISSN 0022-4596. Doi: [10.1016/j.jssc.2022.123021](https://doi.org/10.1016/j.jssc.2022.123021) (IF: 3,656).
10. URECHE, D.; BULHAC, I.; SHOVA, S.; **BOUROSH, P.** Pseudomacrocyclic Bis(dianineglyoximato)cobalt(III) Complex Cations: Synthesis and Structures. *Russ J Coord Chem.* 2022, **48(6)**, 333—343. ISSN 1070-3284. Doi: [10.1134/S1070328422060070](https://doi.org/10.1134/S1070328422060070) (IF: 1,814).
11. **DARII, M.**; BELEAEV, E.S.; **KRAVTSOV, V.CH.**; **BOUROSH, P.**, **CHUMAKOV, Y.**; HAUSER, J.; DECURTINS, S.; LIU, SH.-X.; SULTANOVA, O.; **BACA, S.G.** Crystalline multicomponent compounds involving hexaammine cobalt(III) cations. *New J Chem.* 2022, **46(23)**, 11404—11421. ISSN 1144-0546. Doi: [10.1039/d2nj01655a](https://doi.org/10.1039/d2nj01655a) (IF: 3,925).
12. **CHUMAKOV, Yu.**; DANILESCU, O.; **BOUROSH, P.**; KULIKOVA, O.V.; BULHAC, I.; **CROITOR, L.** Metal ions impact on the isostructurality and properties of 2D coordination polymers. *CrystEngComm.* 2022, **24**, 4430—4439. ISSN 1466-8033. Doi: [10.1039/d2ce00444e](https://doi.org/10.1039/d2ce00444e) (IF: 3,756).
13. **CHUMAKOV, YU.M.**; GRAUR, V.O.; ULCHINA, YA.I.; SMAGLII, V.A.; GULEA, A.P.; GARBUZ, O.S.; TSAPKOV, V.I. Crystal structures of [*N'*-(2-oxidobenzylidene)-*N*-(prop-2-en-1-yl)-carbamohydrazonothioato(2-)](1,10-phenanthroline) copper and [*N'*-(2-oxidobenzylidene)-*N*-(prop-2-en-1-yl)-carbamohydrazonothioato(2-)](2,2'-bipyridine) copper hemihydrates. *J Struct Chem.* 2022, **63(6)**, 905—913. ISSN 0022-4766. Doi: [10.1134/S0022476622060075](https://doi.org/10.1134/S0022476622060075) (IF: 1,071).
14. GELMBOLDT, V.O.; LYTUVYNCHUK, I.V.; SHYSHKIN, I.O.; KHRUMAGINA, L.N.; **FONARI, M.S.**; **KRAVTSOV, V.CH.** Bis(2-, 3-, 4-carboxyethylpyridinium)

- hexafluorosilicates as potential caries prophylactic agents. *Arch Pharm.* 2022, **355(7)**, e2200074-1—e2200074-16. ISSN 0365-6233. Doi: [10.1002/ardp.202200074](https://doi.org/10.1002/ardp.202200074) (IF: 4,613).
15. **PODGORNII, D.**; AMOMBO NOA, F.M.; VAN LEUSEN, J.; MCKENZIE, CH.J.; ÖHRSTRÖM, L.; KÖGERLER, P.; **BACA, S.G.** Heterometallic {Fe₁₈M₆} (M = Y, Gd, Dy) Pivalate Wheels Display Solvent-Induced Polymorphism. *Cryst Growth Des.* 2022, **22(9)**, 5526—5534. ISSN 1528-7483. Doi: [10.1021/acs.cgd.2c00620](https://doi.org/10.1021/acs.cgd.2c00620) (IF: 4,01).
 16. **CROITOR, L.**; COROPCEANU, E.B.; **FONARI, M.S.** Anion–pyridine-n-oxime interplay to control metal–metal separations in a series of Cu(II) coordination polymers. *CrystEngComm.* 2022, **24(35)**, 6146—6154. ISSN 1466-8033. Doi: [10.1039/D2CE01000C](https://doi.org/10.1039/D2CE01000C) (IF: 3,756).
 17. **DARII, M.**; MIKOSCH, A.; VAN LEUSEN, J.; **KRAVTSOV, V.CH.**; DVORNINA, E.G.; CLAPCO, S.T.; CILOCI, A.; KÖGERLER, P.; **BACA, S.G.** Fe^{II/III} and Mn^{II} complexes based on 2,4,6-tris(2-pyridyl)-triazine: synthesis, structures, magnetic and biological properties. *RSC Adv.* 2022, **12(45)**, 29034—29047. ISSN 2046-2069. Doi: [10.1039/d2ra04868j](https://doi.org/10.1039/d2ra04868j) (IF: 4,036).
 18. URECHE, D.; BULHAC, I.; CIOCARLAN, A.; ROSHCA, D.; LUPASCU, L.; **BOUROSH, P.** Novel vic-dioximes: synthesis, structure characterization, and antimicrobial activity evaluation. *Turk J Chem.* 2021, **45(6)**, 1873—1881. Doi: 10.3906/kim-2104-24; <https://journals.tubitak.gov.tr/chem/vol45/iss6/18/> (IF: 1,236).

4.2. în alte reviste din străinătate recunoscute

1. RAMALINGAM, K.; SARAVANAN, M.; BOCELLI, G.; RIGHI, L.; **CHUMAKOV, Y.**; CANTONI, A. Pyrrolidinecarbodithioate as a planarity chuck in the search for cis-platin analogues of nickel: Spectral, single crystal X-ray structural, BVS, and CSM analysis of some planar nickel(II) mixed ligand complexes. *Eur J Chem.* 2022, **13(1)**, 117—125. ISSN 2153-2249. Doi: [10.5155/eurjchem.13.1.117-125.2214](https://doi.org/10.5155/eurjchem.13.1.117-125.2214).

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

1. URECHE, D.; BULHAC, I.; SHOVA, S.; BOUROSH, P. Novel Zn(II) binuclear and Ni(II) 1D polymeric coordinating compounds based on dianilineglyoxime and dicarboxylic acids: synthesis and structure. *Chemistry Journal of Moldova.* 2022 (acceptat), ISSN 1857-1727. Doi: <http://dx.doi.org/10.19261/cjm.2022.954>
2. ZVEAGHINTSEVA, M.; STINGACI, E.; POGREBNOI, S.; LUPASCU, L.; BARBA, A.; DUCA, GH.; VALICA, V.; UNCU, L.; KRAVTSOV, V.; TERTEAC, D.; BRINZAN, A.; MACAEV, F. Resin acids as raw material for fabrication of antimicrobial micro- and nanoparticles of dehydroabiatic acid loaded with cyclodextrin and chromenol hybrid. *Chemistry Journal of Moldova.* 2022 (acceptat). ISSN 1857-1727. Doi: <http://dx.doi.org/10.19261/cjm.2022.942>

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

6.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

7. Teze ale conferințelor științifice

7.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

1. TAPU, D.; MELNIC, E.; FONARI, M.; CHISCA, D. Evaluation of Intermolecular Interactions in Organic Cocrystal of 2-Nitroterephthalic Acid and 1,2-Bis(4-pyridyl)ethane Using Hirshfeld Surface Analysis. În: *Virtual Abstract Book - Poster Session Papers*. International Colloquium 'Physics of Materials - PM7', November 10-11, 2022, Bucharest, Romania
2. CRACIUN, N.; CHISCA, D.; MELNIC, E.; FONARI, M. Hirshfeld Surface Analysis of Supramolecular Synthons in Cocrystal of 2,4-Diamino-6-Phenyl-1,3,5-Triazine with Adipic Acid. În: *Virtual Abstract Book - Poster Session Papers*. International Colloquium 'Physics of Materials - PM7', November 10-11, 2022, Bucharest, Romania.
3. LOZOVAN, V.; CHUMAKOV, YU.M.; KRAVTSOV, V.CH.; COSTRIUCOVA, N.V.; FONARI, M.S. Synthesis, crystal structures and modeling of CO₂ binding sites in Zn(II) and Cd(II) mofs based on 4,4'- biphenyldicarboxylate and azine ligands. In: *Book of-Abstracts*. New Trends and Strategies in the Chemistry of Advanced Materials with Relevance in Biological Systems, Technique and Environmental Protection, 14th Edition, October 20-21, 2022, Timisoara, Romania. p. 56—57. <https://www.newtrends-timisoara.ro/docs/Book-of-abstracts-new-trends-2022.pdf>
4. CRACIUN, N.; MELNIC,; CHISCA, D. Synthesis, crystal structure and hirshfeld surface analysis of ionic adduct of 2,4-diamino-6-phenyl-1,3,5- triazine with malonic acid. In: *Book of-Abstracts*. New Trends and Strategies in the Chemistry of Advanced Materials with Relevance in Biological Systems, Technique and Environmental Protection, 14th Edition, October 20-21, 2022, Timisoara, Romania. p. 57—58. <https://www.newtrends-timisoara.ro/docs/Book-of-abstracts-new-trends-2022.pdf>
5. CHUMAKOV, YU.; DARIU, M.; KRAVTSOV, V.CH.; HAUSER, J.; KRÄMER, K.; LEUSEN, J. VAN; DECURTINS, S.; KÖGERLER, P.; LIU, SHI-XIA; BACA, S.G. DFT calculations of magnetic interactions in {Mn₂Ln₂, Ln = Gd, Tb, Dy} coordination clusters. In: *Book of-Abstracts*. New Trends and Strategies in the Chemistry of Advanced Materials with Relevance in Biological Systems, Technique and Environmental Protection, 14th Edition, October 20-21, 2022, Timisoara, Romania. p. 59—60. <https://www.newtrends-timisoara.ro/docs/Book-of-abstracts-new-trends-2022.pdf>
6. BELEAEV, E.; KRAVTSOV, V.CH.; BACA, S.G. Synthesis and characterization of a multi-ionic polymeric compound involving hexaamminecobalt(III), potassium, 4-sulfobenzoic, and chloride ions. In: *Book of-Abstracts*. New Trends and Strategies in the Chemistry of Advanced Materials with Relevance in Biological Systems, Technique and Environmental Protection, 14th Edition, October 20-21, 2022, Timisoara, Romania. p. 63—64. <https://www.newtrends-timisoara.ro/docs/Book-of-abstracts-new-trends-2022.pdf>
7. STATI, D.; LEUSEN, J. VAN; KRAVTSOV, V.CH., KÖGERLER, P.; BACA, S.G. A small structural rearrangement in {Co^{III}₂Dy^{III}₄} SMMs affects magnetization quantum tunneling. In: *Book of-Abstracts*. New Trends and Strategies in the Chemistry of Advanced Materials with Relevance in Biological Systems, Technique and Environmental Protection,

14th Edition, October 20-21, 2022, Timisoara, Romania. p. 68—69.
<https://www.newtrends-timisoara.ro/docs/Book-of-abstracts-new-trends-2022.pdf>

8. **PODGORNII, D.**; LEUSEN, J. VAN; **KRAVTSOV, V.CH.**, KÖGERLER, P.; **BACA, S.G.** Heterometallic hexanuclear {Fe₄Ln₂, Ln = Dy, Gd} pivalate clusters. In: *Book of Abstracts. New Trends and Strategies in the Chemistry of Advanced Materials with Relevance in Biological Systems, Technique and Environmental Protection*, 14th Edition, October 20-21, 2022, Timisoara Romania. p. 70—71. <https://www.newtrends-timisoara.ro/docs/Book-of-abstracts-new-trends-2022.pdf>
9. GELMBOLDT, V.O.; LYTVYNCHUK, I.V.; SHYSHKIN, I.O.; KHROMAGINA, L.M.; **FONARI, M.S.**; **KRAVTSOV, V.C.** Synthesis, crystal structures, solubility and biological activity of 2-, 3-, 4-carboxyethyl pyridinium hexafluorosilicates. În: *Proceedings "Euroasian Scientific Discussions" (SCI-CONF.COM.UA)*. II Internatioanl Scientific and Practical Conference, March 13-15, 2022, Barcelona, Spain, p. 45—50. ISBN: 978-84-15927-32-7.

7.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

1. **BELEAEV, E.** Investigația structurală și analiza suprafeței Hirshfeld a compusului multi-component al [Co(NH₃)₆]³⁺ cu ligandul 3-piridinsulfonic. În: *Proceedings. Book of Abstracts. Volume II Chemistry*. Conferința științifico-practică internațională "Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă". Ediția a IX-a. 19-20 martie 2022, Chișinău, Republica Moldova, p. 57—61. ISBN: 978-9975-76-389-9.
2. **CAIMAC, N.**; **CHIȘCA, D.** 4,4'-Diaminodifenilmetan și 4,4'-diaminodifeniletan în compușii coordinativi. sinteză, structură și proprietăți. În: *Proceedings. Book of Abstracts. Volume II Chemistry*. Conferința științifico-practică internațională "Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă". Ediția a IX-a. 19-20 martie 2022, Chișinău, Republica Moldova, p. 62—70. ISBN: 978-9975-76-389-9.
3. **CAZACIOC, N.**; **CHIȘCA, D.** Compuși coordinativi cu acidul 3(M)-aminobenzoic: analiza literaturii privind sinteza, structura și aplicare. În: *Proceedings. Book of Abstracts. Volume II Chemistry*. Conferința științifico-practică internațională "Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă". Ediția a IX-a. 19-20 martie 2022, Chișinău, Republica Moldova, p. 71—79. ISBN: 978-9975-76-389-9.
4. **COȘCODAN, E.**; **CHIȘCA, D.** Compuși coordinativi cu liganzi piridindicarboxilici. analiza literaturii. Structură și proprietăți. În: *Proceedings. Book of Abstracts. Volume II Chemistry*. Conferința științifico-practică internațională "Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă". Ediția a IX-a. 19-20 martie 2022, Chișinău, Republica Moldova, p. 103—114. ISBN: 978-9975-76-389-9.
5. **DANILESCU, O.**; **CROITOR, L.**; **BULHAC, I.**; **BOUROȘ, P.**; **COCU, M.** Arhitectura compușilor coordinativi ionici ai Fe(III) cu hidrazone în baza 2,6-diacetilpiridinei. În: *Proceedings. Book of Abstracts. Volume II Chemistry*. Conferința științifico-practică internațională "Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă". Ediția a IX-a. 19-20 martie 2022, Chișinău, Republica Moldova, p. 115—122. ISBN: 978-9975-76-389-9.
6. **LOZOVAN, V.**; **KRAVȚOV, V.**; **FONARI, M.** Polimer coordinativ 2D al Zn(II) în baza acidului dicarboxilic 4,4'-(hidrazin-1,2-diilidenbis(metanililiden)) dibenzoic. În: *Proceedings. Book of Abstracts. Volume II Chemistry*. Conferința științifico-practică

- internațională ”Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă”. Ediția a IX-a. 19-20 martie 2022, Chișinău, Republica Moldova, p. 138—139. ISBN: 978-9975-76-389-9.
7. URECHE, D.; BULHAC, I.; **BOUROȘ, P.** Sinteza și structura complexului bimetalic $[\text{Sr}(\text{L})_3][\text{Co}^{\text{II}}(\text{NCS})_4]$. În: *Proceedings. Book of Abstracts. Volume II Chemistry*. Conferința științifico-practică internațională ”Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă”. Ediția a IX-a. 19-20 martie 2022, Chișinău, Republica Moldova, p. 153—155. ISBN: 978-9975-76-389-9.
 8. **CHUMAKOV, Y.; DARIU, M.; NIRCA, E.; KRAVTSOV, V.; BOUROSH, P.; BACA, S.** Ab initio study of hexaammine cobalt(III) cations interaction with mono- dianions and neutral molecules in multi-component compounds. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry-2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 59—60. ISBN: 978-9975-159-07-4. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
 9. **FONARI, M.; KRAVTSOV, V.** Multiple component ionic complexes of hexamminecobalt chloride with two pharmacophoric acids. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry-2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 60—61. ISBN: 978-9975-159-07-5. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
 10. **STATI, D.; KRAVTSOV, V.; LABLIUC, S.; DVORNINA, E.; CLAPCO, S.; CILOCI (DESEATNIC), A.; BACA, S.** Application of bis(triethanolamine)-cobalt(II) dinitrate in the production of enzymes by microorganisms. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry -2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 63 . ISBN: 978-9975-159-07-6. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
 11. **CAIMAC, N.; MELNIC, E.; CHIȘCA, D.** A 2D cadmium coordination host framework with inclusion of 4,4'-diaminodiphenylmethane and 4,4'-bipyridine guest molecules. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry -2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 65 . ISBN: 978-9975-159-07-7. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
 12. **FONARI, M.; LOZOVAN, V.; KRAVTSOV, V.** 2D and 3D Nd(III) coordination polymers assembled via bridging 1,4-benzenedicarboxylate and oxalate linkers. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry -2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 66 . ISBN: 978-9975-159-07-8. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
 13. **BELEAEV, E.; KRAVTSOV, V.; BACA, S.** Crystal structure and hirshfeld surface analysis of a multi-component compound comprising hexaammine Co(III) cations and 3-pyridinesulfonate anions. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry-2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 71—72. ISBN: 978-9975-159-07-9. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>

14. COȘCODAN, E.; MELNIC, E.; PETUHOV, O.; CHIȘCA, D. Synthesis, structural characterization and thermal analysis of Co(II) monomer based on 2,3-pyridinedicarboxylic acid. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry -2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 72—73. ISBN: 978-9975-159-07-10. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
15. PODGORNÎ, D.; BACA, S.; KRAVTSOV, V. A hexanuclear {Fe₆} pivalate cluster based on aminoalcohol ligands. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry -2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 74. ISBN: 978-9975-159-07-12. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
16. ZVEAGHINTSEVA, M.; STYNGACH, E.; POGREBNOI, S.; LUPAȘCU, L., VALICA, V.; UNCU, L.; KRAVTSOV, V.; TERTEAC, D.; BRÎNZAN, A.; MAKAEV, F. Resin acids as raw material for fabrication of antifungal micro- and nanoparticles of dehydroabietic acid loaded with cyclodextrin and chromenol hybrid. În: *Abstract Book, Volume 1*. The 7th International Conference Ecological and environmental chemistry-2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 165. ISBN: 978-9975-159-07-14. Doi: 10.19261/eec.2022.v1. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>

7.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

7.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

Notă: vor fi considerate teze și nu articole materialele care au un volum de până la 0,25 c.a.

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

8.1. cărți (cu caracter informativ)

8.2. enciclopedii, dicționare

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

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

1. URECHE, Dumitru, MD; BULHAC, Ion, MD; **BOUROȘ, Pavlina**, MD; ROȘCA, Daniel, MD; LUPAȘCU, Lucian, MD. Bis-(N,N'-bis(4-tolil)diaminogloximă)-4-metilnilin-trihidrat pentru utilizare în calitate de remediu antibacterian în agricultură. *Brevet de invenție MD 4762 CI din 28.02.2022.* <http://www.db.agepi.md/Inventions/details/a%202019%200090>
2. LOZOVAN V.; FONARI, M.; KRAVȚOV, V.; SIMINEL, N.; COROPCEANU, E.; KULIKOVA, O.; COSTRIUCOVA, N. *Polimer coordinativ unidimensional al cadmiului (II) în baza liganzilor 1,2-bis(piridin-4-ilmtilen)hidrazină și acid 2-aminobenzoic, care manifestă activitate fotoluminescentă și capacitate de schimb al moleculelor de solvent.* <http://www.db.agepi.md/Inventions/registru/a%202020%200076>.

Hotărâri de acordare a brevetelor:

1. BULHAC, Ion, MD; URECHE, Dumitru, MD; CILOCI, Alexandra, MD; **BOUROȘ, Pavlina**, MD; TIURINA, Janeta, MD; LABLIUC, Steliana, MD.

Tetra(izotiocianat)cobaltat(II) de tris(dimetil piridin-2,6-dicarboxilat)stronțiu cu proprietăți de biostimulator al activității lipolitice pentru tulpina de fungi *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03. *Hotărâre nr. 10137 din 27.09.2022 de acordare a brevetului de invenție.*

2. CILOCI, A.; BACA, S.; CLAPCO, S.; TIURINA, J.; LABLIUC, S.; DVORNINA, E.; BIVOL, C.; DARII, M.; KRAVTOV, V. Aplicarea compusului coordinativ diaqua-nitrato-(2,4,6-tris(2-piridil)-s-triazină)-mangan (II) nitrat ca stimulator al sintezei proteazelor la tulpina de fungi miceliali *Fusarium gibbosum* CNMN FD 12. *Hotărâre nr. 10003 din 25.02.2022 de acordare a brevetului de invenție.*
3. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., BOUROȘ, P., CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., MATROI, A. Nitrat de 2,6-diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-bis(aqua)fier(III)-hidrat(1/2,5) cu proprietăți de stimulator al sintezei lipazelor exocelulare pentru tulpina de fungi *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03 și mediu nutritiv pentru cultivare. Nr. 10118 din 2022.08.26 (CBI a 2021 0014).

Cerere de brevet de invenție:

1. DANILESCU, O., BULHAC, I., COCU, M., BOUROȘ, P., CILOCI, A., CLAPCO, S., LABLIUC, S., MATROI, A. Perclorat de 2,6-diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-bis(aqua)fier(III)-hidrat(1/2,5) cu proprietăți de stimulator al sintezei lipazelor exocelulare pentru tulpina de fungi *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03. Cerere de brevet de invenție. Institutul de Chimie. Institutul de Fizică Aplicată. Institutul de Microbiologie și Biotehnologie. Nr. depozit a 2022 0005. Data depozit 2022. 02.04.
2. DANILESCU, O., BULHAC, I., CROITOR, L., BOUROȘ, P., KULICOVA, O. Nitrat de 2,6-diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-(aqua)(nitrato)cadmiu(II)-monohidrat cu proprietăți fotoluminescente. Cerere de brevet de invenție. Institutul de Chimie. Institutul de Fizică Aplicată. Nr. depozit a 2022 0015. Data depozit 2022. 03.24.

Materiale la saloane de inventică:

1. LOZOVAN, V.; FONARI, M.; KRAVTOV, V.; SIMINEL, N.; COROPCEANU, E.; KULIKOVA, O.; COSTRIUCOVA, N. Cadmium(II) one-dimensional coordination polymer based on 1,2-bis(pyridin-4-ylmethylene)hydrazine and 2-aminobenzoic acid ligands, which shows a photoluminescent activity and an ability to solvent exchange. În: *Proceedings. The 14th Edition of EUROINVENT European Exhibition of Creativity and Innovation, May 28, 2022, Iași, România, p.192. ISBN: 2601-4564. https://www.euroinvent.org/cat/EUROINVENT_2022.pdf*
2. BULHAC, I.; URECHE, D.; BOUROȘ, P.; COCU, M.; CILOCI, A.; CONDRUC, V.; DVORNINA, E. Tris(2,6-dimethyl pyridinecarboxylate-1kONO)-di-μ-(isothiocyano-1,2kN)-(diisothiocyano-2kN)barium(II)cobalt(II) with biostimulatory properties of the synthesis of bioactive principles on fungi. În: *Proceedings. The 14th Edition of EUROINVENT European Exhibition of Creativity and Innovation, May 28, 2022, Iași, România, p. 194. ISBN: 2601-4564. https://www.euroinvent.org/cat/EUROINVENT_2022.pdf*
3. BACA, S.; SULTANOVA, O.; DARII, M.; BOUROȘ, P. Employing of hexaamminecobalt(III) trichloride bis(1,10-phenanthroline) with antibacterial properties against tumor growth in grapevine. În: *Proceedings. The 14th Edition of EUROINVENT European Exhibition of Creativity and Innovation, May 28, 2022, Iași, România, p. 212. ISBN: 2601-4564. https://www.euroinvent.org/cat/EUROINVENT_2022.pdf*

4. CILOCI, A.; **BACA, S.**; CLAPCO, S.; TIURINA, J.; LABLIUC, S.; DVORNINA, E.; BIVOL, C.; **DARII, M.**; **KRAVTOV, V.** Application of coordination compound diaqua-nitrato-(2,4,6-tris(2-pyridyl)-s-triazine)-manganese(II) nitrate as stimulator of protease synthesis in fungal strain *Fusarium gibbosum* CNMN FD 12. În: *Proceedings*. The 14th Edition of EUROINVENT European Exhibition of Creativity and Innovation, May 28, 2022, Iași, România, p. 220 . ISBN: 2601-4564. https://www.euoinvent.org/cat/EUROINVENT_2022.pdf
5. CILOCI, A.; **BACA, S.**; CLAPCO, S.; TIURINA, J.; LABLIUC, S.; DVORNINA, E.; BIVOL, C.; **DARII, M.**; **KRAVTOV, V.** Application of coordination compound diaqua-nitrato-(2,4,6-tris(2-pyridyl)-s-triazine)-manganese (II) nitrate as stimulator of protease synthesis in fungal strain *Fusarium gibbosum* CNMN FD 12. În: *INVENTICA 2022*. The 26th International Exhibition of Inventions, June 22-24, 2022, Iași, România , p. 279 . ISBN: 1844-7880.
6. CILOCI, A.; **BACA, S.**; CLAPCO, S.; TIURINA, J.; LABLIUC, S.; DVORNINA, E.; BIVOL, C.; **DARII, M.**; **KRAVTOV, V.** Aplicarea compusului coordinativ diaqua-nitrato-(2,4,6-tris(2-piridil)-s-triazină)-mangan (II) nitrat ca stimulator al sintezei proteazelor la tulpina de fungi miceliali *Fusarium gibbosum* CNMN FD 12. În: *CATALOG OFICIAL, Colecția "ȘTIINȚE TEHNICE"*. Salonul internațional de invenții, inovații "Traian Vuia", ediția a VIII-a, 08-10 octombrie 2022, Timișoara, România, p. 129 . ISBN: 978-606-35-0496-9.
7. DANILESCU, O.; BULHAC, I.; COCU, M.; **BOUROȘ, P.**; CILOCI, A.; CLAPCO, S.; LABLIUC, S.; MATROI, A. Nitrat de 2,6-diacetilpiridin-bis(picolinoilhidrazon)-bis(aqua)fier(III)-hidrat(1/2,5) cu proprietăți de stimulator al sintezei lipazelor exocelulare pentru tulpina de fungi *Rhizopus arrhizus* CNMN FD 03 și mediu nutritiv pentru cultivare. În: *CATALOG OFICIAL, Colecția "ȘTIINȚE TEHNICE"*. Salonul internațional de invenții, inovații "Traian Vuia", ediția a VIII-a, 08-10 octombrie 2022, Timișoara, România, p. 146 . ISBN: 978-606-35-0496-9.
8. LOZOVAN, V.; **FONARI, M.**; **KRAVTOV, V.**; SIMINEL, N.; COROPCEANU, E.; KULIKOVA, O.; **COSTRIUCOVA, N.** Polimer coordinativ unidimensional al cadmiului(II) în baza liganzilor 1,2-bis(piridin-4-ilmetilen)hidrazină și acid 2-aminobenzoic, care manifestă activitate fotoluminescentă și capacitate de schimb a moleculelor de solvent. În: *CATALOG OFICIAL, Colecția "ȘTIINȚE TEHNICE"*. Salonul internațional de invenții, inovații "Traian Vuia", ediția a VIII-a, 08-10 octombrie 2022, Timișoara, România, p. 147 . ISBN: 978-606-35-0496-9.
9. BULHAC, I.; URECHE, D.; **BOUROȘ, P.**; COCU, M., CILOCI, A., CONDRUC, V.; DVORNINA, E. Tris(2,6-dimethyl pyridinecarboxylate-1kONO)-di-μ-(isothiocyanato-1,2kN)-(diisothiocyanato-2kN)barium(II)cobalt(II) with biostimulatory properties of the synthesis of bioactive principles on fungi. În: *CATALOG OFICIAL, Colecția "ȘTIINȚE TEHNICE"*. Salonul internațional de invenții, inovații "Traian Vuia", ediția a VIII-a, 08-10 octombrie 2022, Timișoara, România, p. 147—148. ISBN: 978-606-35-0496-9.
10. **BACA, S.**; SULTANOVA, O.; **DARII, M.**; **BOUROȘ, P.** Aplicarea compusului hexaaminăcobalt(III) triclorură bis(1,10-fenantrolină) trihidrat în calitate de inhibitor al dezvoltării cancerului la vița de vie. În: *CATALOG OFICIAL, Colecția "ȘTIINȚE TEHNICE"*. Salonul internațional de invenții, inovații "Traian Vuia", ediția a VIII-a, 08-10 octombrie 2022, Timișoara, România, p. 154 . ISBN: 978-606-35-0496-9.

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
(la data raportării)**

Cifrul proiectului: ANCD 20.80009.5007.15

Denumirea	Cod		Anul de gestiune	
	Eco (k6)	Aprobat	Modificat +/-	Precizat
Remunerarea muncii	211180	1446,4	+13,9	1460,3
Contribuții de asigurări sociale de stat obligatorii	212100	419,4	+4,0	423,4
Servicii informaționale	222210	5,0		5,0
Indemnizații pentru incapacitatea temporară de muncă achitate din mijloace financiare ale angajatului.	273500	4,0		4,0
Procurarea materialelor pentru scopuri didactice, științifice și alte scopuri	335110	12,3		12,3
Procurarea materialelor de uz gospodăresc și rechizitelor de birou	336110	5,5		5,5
Total		1892,6		1910,5

Conducătorul organizației  / MACOVEI Mihai

Economist șef  / Larisa MITROȘENCO

Conducătorul de proiect  / KRAVTOV Victor

Data: 17.11.2022



Componența echipei proiectului

Cifrul proiectului ANCD 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	03.01.2022	
2.	Baca Svetlana	1961	dr. șt. chim.	1.00	03.01.2022	
3.	Bouroș Pavlina	1959	dr. șt. chim.	1.00	03.01.2022	
4.	Ciumacov Iurii	1952	dr. șt. fiz.-mat.	1.00	03.01.2022	
5.	Fonari Marina	1959	dr. șt. chim.	1.00	03.01.2022	
6.	Croitor Lilia	1984	dr. șt. chim.	1.00	03.01.2022	
7.	Botezat Olga	1985	dr. șt. chim.	1.00	03.01.2022	
8.	Melnic Elena	1979		1.00	03.01.2022	
9.	Chișca Diana	1982	dr. șt. chim.	0.50	03.01.2022	
10.	Gorobeț Anastasia	1994		1.00	03.01.2022	
11.	Vitiu Aliona	1985	dr. șt. chim.	1.00	03.01.2022	
12.	Darii Mariana	1990		0.50	03.01.2022	
13.	Podgornîi Daniel	1995		1.00	03.01.2022	
14.	Costriucova Natalia	1946		1.00	03.01.2022	
15.	Capbătut Olga	1997		1.00	03.01.2022	
16.	Beleav (Nirca) Ecaterina	1997		1.00	03.01.2022	

Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor conform contractului de finanțare	31%
--	-----

Modificări în componența echipei pe parcursul anului 2022					
Nr	Nume, prenume	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării
1.	Podgornîi Daniel	1995		-0.5	01.10.2022
2.	Statî Dumitru	1995		+0.5	01.10.2022

Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor la data raportării	35%
---	-----

Conducătorul organizației MACOVEI Mihai

Economist șef Larisa MITROȘENCO

Conducătorul de proiect KRAVTOV Victor

Data: 17.11.2022

LS

