

	<p>experimentului cu raze X pe pulberi.</p>	<p>unghiurile de valență din componentele cristalului, cât și parametrii interacțiilor intermoleculare din cristal: legăturile de hidrogen clasice $O-H\cdots O$, $N-H\cdots O$ și fine de tipul $C-H\cdots O$, $C-H\cdots\pi$ și $\pi\cdots\pi$. A fost studiată influența punților de hidrogen asupra modului de împachetare a componentelor în cristal. S-a obținut cantitatea de substanță necesară, ce a permis studiul cu raze X pe pulberi, care a determinat omogenitatea compușilor dimetiletanolaminei cu 2-cloro-4-nitrobenzoat.</p>
2.	<p>Va fi investigată natura interacțiilor intermoleculare în cristalele compușilor carboxilici aromatici cu alcanolamine substituie, obținuți de echipa din România. Cu ajutorul razelor X va fi finisată structura compușilor formați în baza acidului 4-nitrobenzoic și etanolamina, metiletanolamina, etiletanolamina, dietanolamina, trietanolamina, vor fi stabiliți parametrii interacțiilor intermoleculare în cristal, inclusiv parametrii legăturilor de hidrogen $O-H\cdots O$, $N-H\cdots O$ și fine de tipul $C-H\cdots O$. Se vor evidenția formele polimerfe/sovate obținute în funcție de condițiile diferite de sinteză. Va fi stabilită structura și arhitectura supramoleculară a unor cloronitroderivați ai acidului benzoic cu alcanolamine. Se vor determina formele polimorfe ori solvate și modul de asamblare a componentelor în cristal. Se vor stabili parametrii interacțiilor intermoleculare dintre componentele edificiului cristalin ce determină structura supramoleculară a acestora. Se va încerca să se evidențieze corelația dintre structură și celelalte măsurători.</p>	<p>A fost investigată natura interacțiilor intermoleculare în cristalele compușilor carboxilici aromatici cu alcanolamine substituie. A fost finisată precizarea structurii compușilor formați în baza acidului 4-nitrobenzoic cu diverse amine, au fost stabiliți parametrii interacțiilor intermoleculare în cristal, inclusiv parametrii legăturilor de hidrogen $O-H\cdots O$, $N-H\cdots O$ și fine de tipul $C-H\cdots O$. A fost stabilită structura și arhitectura supramoleculară a unor cloronitroderivați ai acidului benzoic cu alcanolamine. Au fost stabilite formele polimorfe și modul respective de asamblare a componentelor în cristal. Au fost stabiliți parametrii interacțiilor intermoleculare dintre componentele edificiului cristalin ce determină structura supramoleculară a acestora. Au fost efectuate un șir de măsurători fizico-chimice și testări biologice și au fost efectuate încercări pentru a evidenția corelația dintre structură și celelalte măsurători. Au fost analizate rezultatele din Baza de Date Structurale Cambridge referitor la compușii cunoscuți din această clasă, ce au stabilit noutatea obiectelor de studiu și perspectiva următoarelor sinteze.</p>
3.	<p>Vor fi creați noi compuși non-toxici carboxilici aromatici pe bază de materii prime biologic active: acizi benzoici, substituiți/derivați ai acestora și alcanolamine. Compușii noi vor fi obținuți în solvenți și gradienti de temperatură diferiți pentru a mări probabilitatea obținerii formelor polimorfe și caracterizați prin diferite metode spectroscopice, analiză termică, accentul fiind pe studiul cu raze X. Prin analiză termogravimetrică se va determina stabilitatea termică a compușilor, iar prin metode calorimetrice se va investiga comportamentul de topire. Structura moleculară și cristalină a compușilor derminată prin difracția cu raze X va permite stabilirea atât a distanțelor interatomice și a unghiurilor de valență din componentele cristalului, cât și a parametrilor interacțiunilor intermoleculare</p>	<p>Au fost creați noi compuși non-toxici carboxilici aromatici pe bază de materie primă biologic activă: acizi benzoici, substituiți/derivați ai acestora și alcanolamine. Compușii noi au fost obținuți în solvenți și gradienti de temperatură diferiți ceea ce a dus la obținerea formelor polimorfe, care au fost caracterizate prin diferite metode spectroscopice, analiză termică, accentul fiind pe studiul cu raze X. Prin analiză termogravimetrică s-a determinat stabilitatea termică a compușilor, iar prin metode calorimetrice a fost investigat comportamentul de topire. A fost stabilită structura compușilor în fază monocristalină. O analiză detaliată a structurii a permis evidențierea modului de împachetare a componentelor în cristalele formelor polimorfe. Purity și omogenitatea cristalelor a fost stabilită în baza</p>

din cristal. O analiză detaliată a structurii va permite evidențierea modului de împachetare a componentelor în cristalele formelor polimorfe. Compușii obținuți vor fi investigați ca reglatori de creștere a plantelor. Se va efectua testarea noilor compuși asupra înrădăcinării răsadurilor la specii de legume și vor fi cercetate efectele aplicării podușilor asupra intensității creșterii organelor plantelor.

experimentului cu raze X pe pulberi. Testarea noilor compuși asupra înrădăcinării și creșterii răsadurilor la roșii a evidențiat efectele aplicării podușilor asupra intensității creșterii organelor plantelor.

Reușite au fost încercările de a obține compuși metalici cu aceste componente: au fost obținuți 2 compuși cu Ni(II) și Ca(II). Au fost studiați structural sovații bis(iminofosforan)etanului.

- XI. Lista lucrărilor științifice (monografii, articole, obiecte de proprietate intelectuală, teze de licență, masterat, doctorat susținute sau pregătite) cu referință la proiectul realizat

Articol din revista cu factor de impact :

1. CRISAN, M.; HALIP, L.; BOUROSH, P.; CHICU, S, A.; CHUMAKOV, Yu. Synthesis, structure and toxicity evaluation of ethanalamine nitro/ chloronitrobenzoates: a combined experimental and theoretical study. *Chemistry Central Journal*. 2017, 11(129), 1-10. ISSN: 1752-153X (electronic version). doi: [org/10.1186/s13065-017-0346-5](https://doi.org/10.1186/s13065-017-0346-5) (IF: 1.027).
2. CRISAN, M.; VLASE, G.; PLESU, N.; PETRIC, M.; CROITOR, L.; KRAVTSOV, V.; Chumakov, Yu.; BOUROSH, P. VLASE, T. Ethylethanolammonium 4-nitrobenzoate: synthesis, structural characterization, thermal analysis, non-isothermal kinetic investigations and corrosion inhibitor efficiency". *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. 2018, **134**, 343-352. ISSN 1388-6150. doi: [org/10.1007/s10973-018-7296-6](https://doi.org/10.1007/s10973-018-7296-6). (IF 1.953).
3. GOROBET, A.; CRISAN, M.; PETRIC, M.; BOUROSH, P.; CROITOR L. Structural study of Ca(II) coordination compound with triethanolamine and 4-nitrobenzoic acid. *Revue Roumaine de Chimie* ISSN 0035-3930 (IF. 0.370) (acceptat).
4. CROITOR, L.; PETRIC, M.F.; SZERB, E.I.; VLASE, G.; BOUROSH, P.N.; CRISAN M.E. Insights into controlling crystallization process and the solid-state transformations of organic acid-base multicomponent. *Crystal Growth and Design*. ISSN: 1528-7483. (IF. 3.972) (trimis).

Teze la conferințe

1. CRISAN, M.; BOUROSH, P.; CHUMAKOV, Yu. Solid forms of dimethylethanalamine salt of 2-chloro-4-nitrobenzoate: structural characterization. *8th International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics MSCMP 2016, September 12-16, 2016*. Chișinău, Moldova Republic, *ABSTRACTS*. p. 176 . ISBN: 978-9975-751-819-6.
2. CRISAN, M.; PETRIC, M.; PLESU, N.; MELNIC, E.; CROITOR, L.; KRAVTSOV, V.; BOUROSH, P. Supramolecular architectures of ionic crystals based on 4-nitrobenzoic acid and alkanolamines. *The 6th International Conference "Ecological & Environmental Chemistry"*, March 2-3, 2017, Chisinau, Republic of Moldova, *ABSTRACTS*. p. 79 . ISBN: 978-9975-51-810-9.
3. CRISAN, M.E.; MAFFEL, M.E.; BOUROSH, P.; SUMALA, R.; BODNARESCU, F. Ethanalammonium salts of substituted benzoic acids as alternative plant growth regularors. *The 6th International Conference "Ecological & Environmental Chemistry"*, March 2-3, 2017, Chisinau, Republic of Moldova, *ABSTRACTS*. p. 151 . ISBN: 978-9975-51-810-9.
4. PLESU, N.; CRISAN, M.; PETRIC, M.; CROITOR, L.; KRAVTSOV, V.; BOUROSH, P. Structural and conductance studies of ethylethanalamine 4-nitrobenzoate. *The 10th Edition of the Symposium with International Participation "New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection"*, June 08-09, 2017, Timișoara, Romania, *ABSTRACTS*. p. 63 . ISBN: 2065-0760.
5. CRISAN, M.; PETRIC, M.; CROITOR, L.; BOUROSH, P. Supramolecular architectures of isomeric methylethanalamine chloronitrobenzoates. *The 10th Edition of the Symposium with International Participation "New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection"*, June 08-09, 2017, Timișoara, Romania, *ABSTRACTS*. p. 66 . ISBN: 2065-0760.
6. PETRIC, M.; CRISAN, M.; CROITOR, L.; BOUROSH, P.; KRAVTSOV, V.; MICLE, A.; ILIA, Gh. synthesis and structural study 2:1 clathrate inclusion complexes of

- bis(iminophosphorane)ethane with different solvents guest molecules. *The 10th Edition of the Symposium with International Participation "New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection"*, June 08-09, 2017, Timișoara, Romania, *ABSTRACTS*. p. 75 . ISBN: 2065-0760.
7. CRISAN, M.; PLESU, N.; VLASE, T.; PETRIC, M.; CROITOR, L.; KRAVTSOV, V.; BOUROSH, P. Synthesis, structural characterization, thermal studies, and corrosion inhibitor properties of ethylethanolammonium 4-nitrobenzoate organic salt. *4th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry*, 28-31 August 2017, Chișinău, Moldova, *ABSTRACTS*. p. 495 . ISBN: 978-3-940237-47-7.
 8. CRISAN, M.; VLASE, T.; BOUROSH, P.; CHUMACOV, Yu.; SZERB, E.I.; PETRIC, M. An investigation into the crystal formation and thermal induced processes of dimethylethanolammonium 4-nitrobenzoate. *4th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry*, 28-31 August 2017, Chișinău, Moldova, *ABSTRACTS*.p. 494 . ISBN: 978-3-940237-47-7.
 9. CRISAN, M.; PETRIC, M.; PLESU, N.; MELNIC, E.; CROITOR, L.; KRAVTSOV, V.; BOUROSH, P. Structural study of protic triethanolammonium ionic liquid based on 4-nitrobenzoic acid and their Ni(II) complex. *Zilele Academice Ieșene. A XXVI-a Sesiune de Comunicări Științifice a Institutului de Chimie Macromoleculară „Petru Poni” Iasi. Progrese în Știința Compușilor Organici și Macromoleculari*. 5-6 Octombrie, 2017, Iași, România, *Rezumatele Lucrărilor*, P02.
 10. CRISAN, M.; PETRIC, M.; BOUROSH, P.; CROITOR L. *The 11th Edition of the Symposium with International Participation "New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection"* 11th Edition, June 28-29, 2018. Timisoara, Romania. *ABSTRACTS*.p.71.
 11. 11. PETRIC, M.; CRISAN, M.; CROITOR, L.; KRAVTSOV, V.; BOUROSH, P.; ILIA Gh. The impact of solvents on the formation of diverse crystallization forms of iminophosphoranes. *The 11th Edition of the Symposium with International Participation "New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection"* 11th Edition, June 28-29, 2018. Timisoara, Romania. *ABSTRACTS*. p.80.
 12. 12. CRISAN, M.; PETRIC, M.; BOUROSH, P.; CROITOR L. New alkanolamines salts of p-aminobenzoic acid synthesis and structural analysis. Supramolecular assemblies via hydrogen bond interactions of new triethanolammonium chloronitrobenzoates. *9th International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics MSCMP 2018, September 25-28, 2018*. Chișinău *ABSTRACTS. DSCM P14*. p. 125 . ISBN: 978-9975-142-35-9.

- XII. Lista propunerilor de proiecte prezentate/ câștigate în cadrul concursurilor naționale și internaționale cu tangență la tematica cercetării proiectului realizat
- XIII. Lista colaborărilor inițiate în cadrul proiectului
 Facultatea de Chimie, Biologie, Geografie din cadrul Universității de Vest Timișoara,
 Facultatea de Horticultură și Silvicultură din cadrul Universității de Științe Agricole și Medicină Veterinară a Banatului "Regele Mihai I al României" din Timișoara
- XIV. Lista evenimentelor organizate / la care s-a participat în cadrul proiectului
- Euroinvent 2018, Iași. **Diploma și medalia de aur.**
 - Euroinvent 2018, Iași. **Diploma și medalia de argint.**
 - EUROINVENT 2018, Iași, **Diploma de excelență** EUROINVENT 2018, Iași.
 - *8th International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics MSCMP 2016, September 12-16, 2016*. Chișinău, Moldova Republic.
 - *The 6th International Conference "Ecological & Environmental Chemistry"*, March 2-3, 2017, Chisinau, Republic of Moldova.
 - *The 10th Edition of the Symposium with International Participation "New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection"*, June 08-09, 2017, Timișoara, Romania.
 - *4th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry*, 28-31 August 2017, Chișinău, Moldova.

- *Zilele Academice Ieșene. A XXVI-a Sesiune de Comunicări Științifice a Institutului de Chimie Macromoleculară „Petru Poni” Iasi. Progrese în Știința Compușilor Organici și Macromoleculari.* 5-6 Octombrie, 2017, Iași, România.
- *The 11th Edition of the Symposium with International Participation “New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection”* 11th Edition, June 28-29, 2018. Timisoara, Romania.
- *9th International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics MSCMP 2018, September 25-28, 2018.* Chișinău.

XV. Lista de mobilități efectuate în cadrul proiectelor

1. dr. în chimie **Manuela Elena Crisan**, dr. în chimie **Mihaela Florina Petric**, cerc. șt. **Nicoleta Simona Plesu**, au fost în deplasare la Chișinău (în cadrul Acordului de colaborare dintre AȘM și AR, deoarece au obținut delegația, iar mai târziu au fost anunțate rezultatele concursului proiectelor moldo-române) au fost în delegație la Institutul de Fizică Aplicată al Academiei de Științe a Moldovei, Laboratorul Metode Fizice de Studiere a Solidului „T. Malinowski” **de la 10 octombrie 2016 până la 16 octombrie 2016.**
2. doctorandul **Florin-Valentin Bodnărescu** de la Universitatea de Științe Agricole și Medicină Veterinară a Banatului, Facultatea de Horticultură și Silvicultură a fost în delegație la Conferința Internațională „Chimia Ecologică și Chimia Mediului 2017”, ediția a IV, ce a avut loc la Chișinău, **2-3 martie 2017** și la Institutul de Fizică Aplicată al Academiei de Științe a Moldovei, Laboratorul Metode Fizice de Studiere a Solidului „T. Malinowski”,
3. profesorul **Titus Vlase** de la Universitatea de Vest din Timișoara, Facultatea de Chimie-Biologie-Geografie a fost în delegație la Conferința Internațională CEEC-TACA „4-th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry”, ce a avut loc la Chișinău **de la 28 până la 31 august 2017** și la Institutul de Fizică Aplicată al Academiei de Științe a Moldovei, Laboratorul Metode Fizice de Studiere a Solidului „T. Malinowski”,
4. dr. în chimie **Manuela Elena Crișan** și dr. în chimie **Mihaela Florina Petric** au fost în delegație la Institutul de Fizică Aplicată AȘM de la **30 octombrie până la 3 noiembrie 2017** pentru a participa la efectuarea lucrărilor experimentale, la discuția rezultatelor obținute și la planificarea lucrărilor pentru 2018 în cadrul proiectului,
5. **dr. P. Bouroș, dr. V. Kravțov, dr. L. Croitor și E. Melnic**, colaboratori ai Laboratorului Metode Fizice de Studiere a Solidului „T. Malinowski” IFA au fost în delegație de la **5 iunie 2017 până la 10 iunie 2017** la Institutul de Chimie Timișoara al Academiei Române, Timișoara, România, iar la 8, 9 iunie 2017 s-a participat la Simpozionul internațional – “Noi tendințe și startegii în chimia materialelor avansate, cu relevanță în sisteme biologice, tehnică și protecția mediului”, Ediția a 10-a, Timișoara.
6. **dr. L. Croitor**, colaborator al Laboratorului Metode Fizice de Studiere a Solidului „T. Malinowski” IFA a fost în delegație **de la 24 noiembrie 2017 până la 29 noiembrie 2017** la Institutul de Chimie Timișoara al Academiei Române, Timișoara, România, având ca scop finisarea unor rezultate pentru publicare.

XVI. Informații despre infrastructura utilizată în realizarea proiectului

Difractometru Xcalibur E.
Microscop optic.

XVII. Dificultăți/ impedimente apărute pe parcursul realizării proiectului

Nu totdeauna au ajuns finanțe pentru participări la conferințe.

XVIII. Relevanța rezultatelor științifice obținute (până la 200 de cuvinte).

În cadrul proiectului s-a reușit obținerea a 30 compuși noi, 22 din care au fost studiați mai detaliat. În calitate de reactanți au fost utilizați acizii benzoici diferit substituiți și alcanolamine primare, secundare și terțiare, mai puțin toxice comparativ cu alifatică și heterociclice. Cu ajutorul razelor X a fost stabilită structura cristalină, iar o analiză a rezultatelor din Baza de Date Structurale Cambridge a fost siguranța creării compușilor noi.

Investigarea structurii compușilor a demonstrat în ei transferul de proton de la acidul aromatic la amină și formarea sărurilor organice. În 10 compuși componentele ionice formează între ele *synthoni* moleculari $R^2_2(9)$ prin intermediul a două legături de hidrogen de tip charge-assisted $N^+-H\cdots O^-$ și clasică $O-H\cdots O$, iar în 5 s-a depistat că cele două unități de bază sunt unite

printr-o singură legătură de hidrogen. În acești compuși în sistemul de legături de hidrogen sunt antrenate ca donori de proton atât toate grupările N-H, O-H, cât și C-H, iar ca acceptori doar atomii de oxigen din grupările carboxilice.

Un șir de compuși au fost antenați la testări biologice ce au ținut de germinarea unor semințe de roșii, înrădăcinarea și creșterea răsadurilor de roșii în seră, ce au evidențiat rezultate pozitive.

XIX. Beneficiarul (ministere, instituții de stat sau private, întreprinderi etc.)

Rezultatele obținute au o valoare importantă, deoarece sunt acele rezultate cumulative din Baza de Date Structurale Cambridge, care aduc un aport la elaborarea designului dirijat atât al compușilor noi în parte, cât și al arhitecturii supramoleculare cu proprietăți avansate. Se poate menționa și importanța și impactul acestor rezultate asupra dezvoltării științei și educației, beneficiari ai rezultatelor fiind diverse centre științifice de chimie și facultățile de chimie ale Universităților din R. Moldova și România.

Director proiect dr. Pavlina BOUROȘ