

# CURRICULUM VITAE

## INFORMAȚII PERSONALE

Nume și prenume  
Telefon / Fax  
E-mail  
Naționalitate  
Locul și data nașterii

## Humelnicu Ionel

0232-201102/2454  
ionel@uaic.ro  
română  
Trușești – Botoșani, 27 mai 1967

## EXPERIENȚA PROFESIONALĂ

### DOMENII DE COMPETENȚĂ

Chimie teoretică, structură moleculară, chimie cuantică, spectroscopie, modelare moleculară, dinamică moleculară, mecanisme de reacție, reactivitate moleculară

### ACTIVITATEA ȘTIINȚIFICĂ

#### CĂRȚI / ARTICOLE PUBLICATE:

- **Cărți**, cursuri universitare și manuale de lucrări practice: 5
- **articole științifice** publicate în reviste de specialitate: 50, din care: 14 cu ISI in reviste din străinătate, 12 cu ISI in reviste din țară, 22 in reviste non ISI din țara.
- **participări** la manifestări științifice 78, din care în străinătate 11

**Citări** lucrări indexate/recenzate în baze de date internaționale: 26; în SCOPUS, CAPLUS and MEDLINE, de Institute for Scientific Information (ISI), Chemical Abstracts, Current Contents etc. Indice Hirsh = 6

**Coordonator științific:** lucrări de licență - 47, lucrări de disertație -15, lucrări metodic-științifice pentru obținerea gradului I în învățământul preuniversitar - 10.

**Referent științific:** Journal of Fluorine Chemistry

### EXPERIENȚĂ DE LUCRU ÎN CERCETARE ȘI INSTRUIRE

**DIRECTOR / RESPONSABIL GRANTURI DE CERCETARE / DEZVOLTARE:** cu finanțare internă: 1

**Colaborator în granturi de cercetare:** cu finanțare internă: 17

**2004 – conferențiar universitar**, prin concurs (Ordinul Ministrului Educației și Cercetării nr. 3895 / 25.05.2004), la Facultatea de Chimie, Universitatea „Alexandru Ioan Cuza” din Iași;

**1997 – 2004: lector universitar**, prin concurs, la Facultatea de Chimie, Universitatea „Alexandru Ioan Cuza” din Iași;

**1994 – 1997: asistent universitar**, prin concurs, la Facultatea de Chimie, Universitatea „Alexandru Ioan Cuza” din Iași;

**1991 – 1994:** preparator universitar, prin concurs, la Facultatea de Chimie, Universitatea „Alexandru Ioan Cuza” din Iași;

**2005-2008** Șef catedră, Catedra de Chimie fizică, teoretică și Chimia materialelor, Facultatea de Chimie, Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași.

**2012** aprilie – prodecan cu activitate didactică și probleme studentești, Facultatea de Chimie, Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași.

SPECIALIZĂRI  
POSTUNIVERSITARE

EDUCAȚIE

STAGII DE PREGĂTIRE ȘI  
MOBILITĂȚI

MEMBRU ÎN SOCIETĂȚI  
ȘTIINȚIFICE

CUNOȘTINȚE UTILIZARE  
COMPUTERE

LIMBI STRĂINE  
CUNOSCUTE

**2001 – 2002** (10 luni, iunie – martie), bursă de cercetare **postdoctorat** obținută prin competiție internațională la Universitatea Westfälische Wilhelms din Münster, Institutul de Chimie Organică, Münster, Germania

**2000** Doctor în chimie, specialitatea chimie fizică, cu tema de doctorat: "Investigații asupra structurii electronice și reactivității moleculare în soluție", Universitatea "Alexandru Ioan Cuza", Iași

**1991** iunie, examen de licență, Facultatea de Chimie, secția Chimie-Fizică 5 ani, Universitatea "Alexandru Ioan Cuza", Iași

**1985** iunie, examen de bacalaureat, Liceul de Chimie industrială "Mihai Eminescu", Botoșani, profilul chimie;

**1981** Școala Generală, Trușești, județul Botoșani

- **1992** septembrie, Timișoara: cursurile de la Școala de Vară de Chimie Cuantică și QSAR organizată de Academia Română și Facultatea de Chimie Timișoara;

- **1993** septembrie, București: cursurile de la Școala de Vară "Efectul Jahn-Teller" organizată de Institutul de Chimie Fizică "I.G. Murgulescu" și Academia Română;

- **1995** mai, Brașov: cursurile "Internațional Workshop / Symposium on Modern Nuclear Magnetic Resonance" organizat de Fundația Culturală Română și Academia Română

- **1997** iulie, Iași: cursurile francofone de la Școala de Vară "Glycobiologie et glycotecnologies" organizate de Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași, de Serviciile Culturale, Științifice și de Cooperare a Ambasadei Franței în România și de Université des Sciences et Technologies de Lille, Franța

- **2006** July, Iași: Summer School «Physics and chemistry of the atmosphere: from laboratory experiments to field campaigns», Organizers: "Alexandru Ioan Cuza" University of Iasi, Romania; ARCUS Program French Ministry of Foreign Affairs Nord/Pas-de-Calais Region, France; "Petru Poni" Institute of Macromolecular Chemistry, Iasi, Romania; Regional Agency for the Environmental Protection, Iasi, Romania

**Membru** al Societății Române de Chimie,

**Operare PC:** Microsoft Office, programe specifice de chimie și chimie teoretică, operare aparate spectrale etc.

Engleză, Franceză

## Publicații științifice

1. C. Ghirvu, M. Constantinescu, **I. Humelnicu**, Some Investigations on the Reactions of Ethylene and Acetylene with Hydrogen Atom, *An. St. Univ. "Al.I. Cuza" Iași*, Tom II, s. Chimie, 25-32 (1994).
2. C. Ghirvu, M. Constantinescu, **I. Humelnicu**, Some Investigations on the Reactions of Ethylene and Acetylene with Methyl Radical, *An. St. Univ. "Al.I. Cuza" Iași*, Tomul III, Sc.I, Chimie, 5-12 (1995).
3. **I. Humelnicu**, Iuliana Ghirvu, M. Constantinescu, C. Ghirvu, The ESR Study of the Interaction Between the  $\alpha, \alpha'$ -diphenyl- $\beta$ -Picrylhydrazyl Radical and 8-hydroxyquinoline in Benzene Solutions, *An. St. Univ. "Al.I. Cuza" Iași*, Tom IV, Sc.I, Chimie, 13-18 (1996).
4. I. Mangalagiu, I. Druță, M. Constantinescu, **I. Humelnicu**, Magda Petrovanu, Pyridazinium Ylides. Regiochemistry, *Tetrahedron*, (1996) **52** (26), 8853-8862.
5. St. Dima, I. Mangalagiu, Maria Caprosu, M. Constantinescu, **I. Humelnicu**, Magda Petrovanu, The regiochemistry of the cycloaddition of 1-methylphthalazinium ylides to non-symmetrically substituted olefins, *J. Serb. Chem. Soc.*, **62**(2), 105-111 (1997).
6. Iuliana Voicu, **I. Humelnicu** and C. Ghirvu, Theoretical investigation of the electronic spectra of some N-heteroaromatic molecules, *An. Șt. Univ. "Al.I. Cuza" Iași*, s. Chimie, tom V, 5-12 (1997).
7. **I. Humelnicu**, I. Crețescu, C. Ghirvu and M. Macoveanu, A quantum chemical study for oxidation of some benzene aminoderivatives, *An. Șt. Univ. "Al.I. Cuza" Iași*, VI, s. Chimie, 65-76 (1998).
8. I. Druță, Rodica Dinică, Elena Băcu and **I. Humelnicu**, Synthesis of 7,7'-Bisindolizines by the Reaction of 4,4'-Bipyridinium-Ylides with Activated Alkynes, *Tetrahedron*, **54**, 10811-10818 (1998).
9. T. Rugină, C. Ghirvu, I. Humelnicu and M. Constantinescu, Comportamentul suprafețelor de siliciu în timpul chemosorbției unor gaze II. Chemosorbția pe suprafețe de tip intrinsec, *Rev. Chim. (București)*, **49**, nr. 12, 837-845 (1998).
10. I. Crețescu, **I. Humelnicu**, C. Ghirvu and M. Macoveanu, Theoretical investigations on the synthesis of some N, N-dialkyl-p-phenyldiamines, *An. Șt. Univ. "Al.I. Cuza" Iași*, VII, s. Chimie, 227-230 (1999).
11. N. Aelenei, D. Bontea et **I. Humelnicu**, Viscosity – temperature relationship for silylcelluloses/o-xylene dilute solutions, *An. St. Univ. "Al.I. Cuza" Iași*, seria Chimie, tom VII, (1) 21-30 (1999).
12. Șt. Dima, I. Mangalagiu, Maria Caprosu, **I. Humelnicu**, Mihaela Roman et Magda Petrovanu, L'action des 1-méthylphthalazinium ylures sur les hétérocumulènes, *An. St. Univ. "Al.I. Cuza" Iași*, Tomul VII, Sc. I, Chimie, 131-136 (1999).
13. Geanina Mangalagiu, I. Mangalagiu, **I. Humelnicu** and Magda Petrovanu, 4-Methylpyrimidinium Ylides, *Eur. J. Org. Chem.*, **3**, 703-706 (1999).
14. C. Ghirvu, Iuliana Voicu and **I. Humelnicu**, Observation Concerning the Number of Inequivalent, Irreducible Representations of a Molecular Symmetry Point Group, *An. St. Univ. "Al.I. Cuza" Iași*, s. Chimie, VIII-2, 281-287 (2000).
15. Gh. Nemțoi, Camelia Beldie, Carmen Tîrcolea, Iuliana Popa, I. Crețescu, **I. Humelnicu**, Doina Humelnicu, Behavior of the poly(maleic anhydride-co-vinyl acetate) copolymer in aqueous solutions, *European Polymer Journal*, **37** (4), 729-735 (2001).
16. **I. Humelnicu**, V. Melnig, and Dana Dorohoi, „Spectral and Theoretical Studies of Carbanion Monosubstituted Pyridazinium Ylid Dimerization in Ethanol Solutions”, *An. St. Univ. "Al.I. Cuza" Iași*, s. Chimie, X-2, 227-236 (2002).

17. V. Melnig, **I. Humelnicu** and Dana Dorohoi, „Structural features of 3+3 Thermal Dimerization of 3-(p-bromo-phenyl)-pyridazinum methylid in Solutions”, *An. St. Univ. “Al.I. Cuza” Iași*, s. Ib, Fizică, tom **XLVIII**, s. Fizica plasmei si spectroscopie, 61-69 (2002).
18. **I. Humelnicu**, M. Constantinescu, Iuliana Voicu and C. Ghirvu, „On the Interaction Between the H Atom and HCl Molecule”, *Revue Roumaine de Chimie*, vol.**47** nr.8-9, 817-823 (2002).
19. A. Vlahovici, **I. Humelnicu**, “Experimental and Theoretical Study of Fluorescent Compounds Obtained by Photochemical Reactions Between 6-bromo Derivatives of 2,3-diphenylbenzo[b] furan and phenantrobenzo[b]furan with Aniline”, *An. Șt. Univ. “Al. I. Cuza” Iași*, Tomul **XLVIII**, s. Fizica plasmei și spectroscopie, 99-111 (2002).
20. L. Cires, V. Botomei, **I. Humelnicu**, H. Ofenberg, R. Neier, „An Efficient Synthesis of 10-substituted benzo[β]phenantro[9,10-d]furans”, *Revue Roumaine de Chimie*, vol.**48**, nr.1, 33-37 (2003).
21. D. Bontea, M. Gașpar, **I. Humelnicu**, N. Aelenei, D. Ionescu, „Thermogravimetric analysis of some silylcellulose derivatives”, *Cell. Chem. and Technol*, **37** nr. 1-2, 35-41 (2003).
22. C. Ghirvu, I. Voicu and **I. Humelnicu**, “Some Considerations Concerning the Derivation of the Hartree-Fock Equations”, *An. St. Univ. “Al.I. Cuza” Iasi*, s. Chimie, **XI**, 81-87 (2003).
23. C. Ghirvu, I. Voicu and **I. Humelnicu**, „On the Time Evolution of the Density Operator”, *An. St. Univ. “Al.I. Cuza” Iasi*, s. Chimie, **XI**, 89-96 (2003).
24. D. Humelnicu, D.G. Cozma, **I. Humelnicu**, „Studiul sistemului  $UO_2^{2+}$  - acid 4-amino-naftalen 1,5 - disulfonic (ANDS) în soluție”, *Rev. Chim. Bucharest*, **54**, nr. 9, 759-762 (2003).
25. N. Heße, R. Fröhlich, **I. Humelnicu** and E-U Würthwein, „1,3,5-Triazapentadienes as Chelating Ligands: 1,2,4-Triphenyl-1,3,5-triazapentadiene Complexes of Cobalt(II), Nickel(II), Palladium(II), Copper(II) and Zinc(II)”, *Eur. J. Inorg. Chem.* **11**, 2189–2197 (2005)
26. A. Onu and **I. Humelnicu**, „Thermodynamic study of the iodine-iodide-triiodide equilibrium in water”, *An. St. Univ. “Al.I. Cuza” Iasi*, s. Chimie, **XIII**, 5 (2005).
27. D. Dîrțu, **I. Humelnicu** and L. Odochian, „Contributions to the mechanism of ammonia thermal decomposition III”, *An. St. Univ. “Al.I. Cuza” Iasi*, s. Chimie, **XIII**, 19 (2005).
28. D. Humelnicu, **I. Humelnicu** and D.G. Cozma, “Study of the  $UO_2^{2+}$  - acid-2-amino-1-naphtalen sulphonic (ANS) System in Solution”, *Revue Roumaine de Chimie*, **51**(2), 109-115 (2006).
29. D. Dîrțu, L. Odochian, A. Pui and **I. Humelnicu**, „Thermal decomposition of ammonia.  $N_2H_4$  - an intermediate reaction product”, *Central European Journal of Chemistry*, **4**(4), 666 - 673 (2006).
30. C. Ghirvu, **I. Humelnicu**, „Considerations concerning the group and semi group. Properties of the evolution operators”, *An. St. Univ. “Al.I. Cuza” Iasi*, s. Chimie, **XV**, nr. 1, 7 - 14 (2007).
31. E. Filip, **I. Humelnicu** and C. Ghirvu, „Studies on the 1,1-diphenyl-2-picrylhydrazyl (DPPH) in water-ethanol systems”, *An. St. Univ. “Al.I. Cuza” Iasi*, s. Chimie, **XV**, nr. 1, 15 (2007).
32. V. Melnig, **I. Humelnicu** and D. Dorohoi, „Thermal dimerization kinetics of 3-(p-bromo-phenyl)-pyridazinium benzoyl methylid in solutions”, *International Journal of Chemical Kinetics* **40** (5), 230-239, (2008).
33. A. Pui, Doina Humelnicu, **I. Humelnicu**, C. Tănase, „Synthesis of some complexes of dioxouranium(VI) with di-halogeno-tetra-methyl salen ligands”, *Revue Roumaine de Chimie*, **53**(3), 177-182 (2008).
34. M. Dimitriu, E. Filip, **I. Humelnicu**, „Theoretical Study of some benzene derivatives in water”, *Rev. Chim. Bucharest*, **59** (9), 1009-1013 (2008).
35. E. Filip, **I. Humelnicu**, C. Ghirvu, „Computer Simulations and Experimental Investigations on the UV-VIS Electronic Spectra of the DPPH Radical”, *The Annals of the “Dunărea de jos” University of Galați Mathematics, Physics, Chemistry, Informatics* Fascicle II, Supplement, Year II (**XXXI**) 200-207 (2008).

36. M. Dimitriu, E. Filip, D.O. Dorohoi, **I. Humelnicu**, "The Solvent Influence of Some Substituted Phenols Structures", *The Annals of the "Dunărea de jos" University of Galați Mathematics, Physics, Chemistry, Informatics Fascicle II*, Supplement, Year II (XXXI) 120-124 (2008).
37. F. Cimpoesu, Marilena Ferbințeanu, Adela Mihai, **I. Humelnicu**, „The Symmetry Blueprints of the Molecular Edifices”, special issue "Symmetry in Nanostructures" of the journal *Symmetry: Culture and Science*, Vol. 19, No. 4, 397-414 (2008).
38. Josette Weinberg, F. Cimpoesu, D. Lerner and **I. Humelnicu** „The Association of Dehydro-Epiandrosterone and Adenosine Triphosphate Acid. A DFT Study of Interactions between Prototypic Biologically Active Molecules" *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, (2009) **912** (1-3) 32-37
39. Elena M. Filip, **I.V. Humelnicu** and C.I. Ghirvu, „Some aspects of 8-hydroxyquinoline in solvents”, *Acta Chem Iași*, **XVII**, nr. 1, 85-96 (2009).
40. Elena Filip, Mihaela Dimitriu, Dana-Ortansa Dorohoi, **I. Humelnicu**, „Structure and Stability of Some Aromatics Derivatives in Water-Ethanol Mixtures”, *Buletinul Institutului Politehnic Iași*, Secția Matematică, Mecanică Teoretică, Fizică, (2009) **LV(LIX)**, 2, 109-116
41. C. Nadejde, D.E. Creanga, **I. Humelnicu**, E. Filip, D.O. Dorohoi, "Study on the Intermolecular Interactions in Rifampicin Ternary Solutions – Calculation of Microscopic Parameters of Rifampicin Molecules", *Journal of Molecular Liquids*; (2009) **150** (1-3) 51-55;
42. R.I. Olariu, Doina Humelnicu, I. Sandu, **I. Humelnicu**, Cecilia Arsene, „Physico-Chemical Characterization of a New Silica-Polyoxometalate Thermally Modified Unit”, *Rev. Chim. Bucharest*, (2009) **60**, Nr. 11, 1216-1219.
43. Doina Humelnicu, R.-I. Olariu, Cecilia Arsene and **I. Humelnicu**, "New isopolyoxomolybdates derived from heptamolybdate with  $UO_2^{2+}$  and  $Th^{4+}$  ions", *Ovidius University Annals of Chemistry*, (2009) **20**, 2, 227-231
44. Doina Humelnicu, R.-I. Olariu, I. Sandu, **I. Humelnicu**, A.V. Sandu, Cecilia Arsene, "Studies on Chemical Interferences on Uranium (VI) and Thorium (IV) Reaction with (iso)polyoxometalates" *Rev. Chim. Bucharest*, (2009) **60**, Nr. 12, 1264-1269.
45. Doina Humelnicu, Cecilia Arsene, Bety Burghel, Mihaela Bertescu, **I. Humelnicu**, I. Sandu, Dorina Mantu, R.-I. Olariu, "Interaction of Actinide Cations with Heteropolyoxotungstate Ions  $[SiW_{11}O_{39}]^{8-}$  and  $[SiW_{12}O_{40}]^{4-}$ ", *Rev. Chim. (Bucharest)*, (2010) **61**, Nr. 9, 841-844
46. Lucia Odochian, Lorela Iancu, **I. Humelnicu**, Anca Mihaela Mocanu, Adriana Băiceanu, „Contributions to the reaction mechanism of photochemical decomposition of hydrogen peroxide in aqueous solution”, *Rev. Chim. (Bucharest)*, (2011) **62**, No. 10, 1012-1016
47. **I. Humelnicu**, E-U Würthwein, G. Haufe, „The Conformers of 3-Fluoroalanine. A Theoretical Study Influence of a Fluorine Substituent on the Physicochemical Properties and Chemical Reactivity of Fluorinated Amino Acids. Part 1", *Organic & Biomolecular Chemistry*, (2012) **10** (10), 2084-2093
48. C. Oprea, P. Panait, F. Cimpoesu, **I. Humelnicu**, Marilena Ferbințeanu, M. Gîrțu, „Broken symmetry DFT calculations of exchange coupling constants for manganese-porphyrin quasi-one-dimensional molecular magnets”, *Theoretical Chemistry Accounts: Theory, Computation, and Modeling (Theoretica Chimica Acta)*, *Theor Chem Acc* (2012) **131** (7) 1249-1261
49. D. Maftai, Gh. Zbancioc, **I. Humelnicu**, I. Mangalagiu "Conformational Effects on the Lowest Excited States of Benzoyl-Pyrrolopyridazine. Insights from PCM Time- Dependent DFT" *The Journal of Physical Chemistry A*, (2013) **117** (15) pp 3165–3175.
50. I.-C. Popescu Hoștuc, P. Filip, D. Humelnicu, **I. Humelnicu**, Th. B. Scott, R. A. Crane „Removal of uranium (VI) from aqueous systems by nanoscale zero-valent iron particles suspended in carboxy-methyl cellulose" *Journal of Nuclear Materials*, (2013) **443** (1-3), 250-255

Conf.dr. Ionel Humelnicu

