

Abstract

The habilitation thesis entitled “**From supramolecular chemistry to antimicrobial agents through fine organic synthesis**” emphasizes the scientific research activity and achievements of the applicant after the Ph.D. thesis public defense (September 2014), and is organized in two main parts. The habilitation thesis is based on the most representative ISI publications of the applicant from a total number of 51 publications indexed in Web of Science, of which the applicant is the first author in 20 publications and the corresponding author for another 18 publications.

Part A covers the scientific activity of the applicant, and it is divided in 3 subchapters, as follows:

A1. Pseudo-geminal substituted [2.2]paracyclophanes. In this section is presented a scientific background regarding the chemistry of [2.2]paracyclophanes starting with their discovery in 1949 by Brown and Farthing. The investigations have been focused on the intramolecular interaction of functional groups in *pseudo-geminally* substituted [2.2]paracyclophanes, by the addition reactions of some chalcogenide halides or selenium dihalides to different *pseudo-geminal* bisacetylene systems, and also on the synthesis and characterisation of [2.2]paracyclophane derivatives containing tetrathiafulvalene units. For some [2.2]paracyclophane bis(triazole) systems intramolecular interactions were examined under photochemical conditions, and several di- and tetracarboxylic [2.2]paracyclophanes were study as potential ligands in metal-organic framework (MOF) design.

A2. 1,3-Dithiol-2-ylum derivatives. The 1,3-dithiolium ring is of special interest in organic synthesis due to its reactivity. This section presents the synthesis and structural investigation on some 1,3-dithiolium derivatives bearing different moieties at the C(2)-position, highlighting that these systems can be of interest from both medicinal and synthetical points of view. The synthesis of some new 1,3-dithiol-2-ylidene derivatives from the corresponding mesoionic compounds, via a nucleophilic attack at the C(2) position of the 1,3-dithiolium ring are also described.

A3. Synthetic flavonoids with biological activities. This section covers the scientific achievement on another field that the applicant has expertise on, namely the synthesis and characterization of synthetic flavonoids with potentially biological activities. It is known the chemistry of flavonoids is of particular interest since they have exhibited effective antimicrobial activity against a wide range of microorganisms. Various series of tricyclic flavonoids were synthesised and characterised, which differ from the typical active flavonoids through the presence of a 1,3-dithiolium cycle fused with the benzopyran core. The newly synthesized compounds were tested against both Gram-positive and Gram-negative pathogens, highlighting that these compounds exhibit good to excellent antimicrobial properties.

The academic career development plan presented in Part B of the habilitation thesis describes the evolution and the perspective of the teaching activities that will be centered on the students with regards to support and involve them in various research activities, and to encourage them to apply for study or practice mobility at national or international level, which will lead to the development of their performance and practical skills.

Rezumat

Teza de abilitare intitulată „**De la chimia supramoleculară la agenți antimicrobieni prin sinteza organică fină**” prezintă, pe scurt, cele mai importante rezultate obținute ca urmare a activității de cercetare științifică desfășurată după obținerea titlului de doctor (septembrie 2014) și este organizată în două părți principale. Teza de abilitare se bazează pe cele mai reprezentative publicații ISI dintr-un număr total de 51 de publicații indexate în Web of Science, dintre care candidatul este prim-autor pentru 20 de publicații și autor corespondent pentru alte 18 publicații.

Partea A acoperă activitatea științifică a candidatului și este împărțită în 3 subcapitole, după cum urmează:

A1. [2.2]Paraciclofani pseudo-geminal substituiți. În acest subcapitol este prezentat contextul științific referitor la chimia [2.2]paraciclofanilor începând cu descoperirea lor în anul 1949 de către Brown și Farthing. Investigațiile s-au concentrat pe interacțiunea intramoleculară a grupărilor funcționale în [2.2]paraciclofani *pseudo-geminal* substituiți, prin reacțiile de adiție a unor halogenuri de calcogenide sau dihalogenuri de seleniu la diferite sisteme bisacetilenice *pseudo-geminale*, precum și pe sinteza și caracterizarea unor derivați de [2.2]paraciclofan care conțin unități de tetratriafulvalenă. Pentru unele sisteme de tipul [2.2]paraciclofan bis(triazol) au fost investigate interacțiunile intramoleculare în condiții fotochimice, iar o serie de [2.2]paraciclofani di- și tetracarboxilici au fost studiați ca potențiali liganzi în obținerea unor MOF-suri.

A2. Derivați de 1,3-ditioliu. Ciclul de 1,3-ditioliu prezintă un interes deosebit în sinteza organică datorită reactivității sale. În acest capitol sunt prezentate sinteza și caracteristicile structurale ale unor derivați de 1,3-ditioliu diferit substituiți în poziția C(2), evidențiind faptul că aceste sisteme pot fi de interes atât din punct de vedere medicinal, cât și din punct de vedere sintetic. De asemenea, sunt descrise sintezele unor noi derivați de 1,3-ditiol-2-iliden din compușii mezoionici corespunzători, printr-un atac nucleofil la poziția C(2) a ciclului de 1,3-ditioliu.

A3. Flavonoide sintetice cu activități biologice. Acest subcapitol prezintă realizările științifice obținute în domeniu flavonoidelor sintetice cu potențiale activități biologice, pentru care sunt descrise metode de sinteză și caracterizarea acestora. Chimia flavonoidelor prezintă un interes deosebit, deoarece acești compuși prezintă activitate antimicrobiană eficientă împotriva unei game largi de microorganisme. Au fost sintetizate și caracterizate diverse serii de flavonoide tricyclice, care diferă de flavonoidele active tipice prin prezența unui ciclu de 1,3-ditioliu fuzionat cu benzopiranul. Compușii nou sintetizați au fost testați atât împotriva agenților patogeni Gram-pozitivi cât și Gram-negativi, concluzionând faptul că acești compuși prezintă proprietăți antimicrobiene promițătoare.

Planul de dezvoltare al carierei academice prezentat în Partea B a tezei de abilitare descrie evoluția și perspectiva activităților didactice care vor fi centrate pe studenți în ceea ce privește sprijinirea și implicarea acestora în diverse activități de cercetare și încurajarea acestora să aplice pentru mobilități de studiu sau practică la nivel național sau internațional, ceea ce va duce la dezvoltarea abilităților practice.