

CUPRINS / CONTENT

<i>S. Băncilă, L. Hăbășescu, G. Drochioiu</i>	
Interacțiunea acidului salicilic și peptidei glicil-L-triptofan cu dinitroderivați și metale grele... 2	2
The interaction of salicylic acid and peptide glycyl-L-tryptophan with dinitroderivates and heavy metal ions..... 3	3
<i>R. A. Cristache, I. Sandu, V. Vasilache, O. Cristache</i>	
Studiul unor caracteristici arheometrice și a stării de conservare a unei icoane din secolul al XIX-lea..... 4	4
Study of some archeometric characteristics of a panel painted icon from XIX th century..... 5	5
<i>C. Bairac</i>	
Considerații energetice privind procesul de uscare a fructelor în aer cald..... 6	6
Energetic considerations regarding the drying of fruits in hot air process..... 7	7
<i>A. Manea</i>	
Sinteza și caracterizarea unui complex heteronuclear Fe/Co cu trietanolamina..... 8	8
Synthesis and characterization of a heteronuclear Fe/Co coordination cluster with triethanolamine..... 9	9
<i>A. I. Borhan, P. Samoilă, V. Hulea, A. R. Iordan, M. N. Palamaru</i>	
Activitatea fotocatalitică a nanoparticulelor ZnFe _{2-x} Cr _x O ₄ la îndepărtarea colorantului Orange I din soluții apoase..... 10	10
Photocatalytic activity of ZnFe _{2-x} Cr _x O ₄ nanoparticles on Orange I azo dye removal from aqueous solution..... 11	11
<i>A. C. Druc, A. I. Borhan, G. Nedelcu, L. Leontie, A. R. Iordan, M. N. Palamaru</i>	
Relația dintre proprietățile dielectrice și structură în ferita de magneziu substituită cu cupru.... 12	12
Structure-dielectric properties relationships in copper-substituted magnesium ferrites..... 13	13
<i>S. Feraru, A. I. Borhan, P. M. Samoilă, G. G. Nedelcu, A. R. Iordan, M. N. Palamaru</i>	
Studiu asupra structurii și proprietăților dielectrice ale perovskitelor dubli A ₂ DyBiO ₆ (A=Mg, Ca, Sr, Ba)..... 14	14
Study on structure and dielectric properties of double perovskites A ₂ DyBiO ₆ (A=Mg, Ca, Sr, Ba)..... 15	15
<i>M. A. Crețu, L. N. Acatrinei, C. B. Michitiuc</i>	
O analiză din punct de vedere al impactului asupra mediului a levigatului din gropile de gunoi. Situația României..... 16	16
An analysis regarding the environmental impact of leachate from waste deposits. The situation of Romania..... 17	17
<i>M. A. Crețu, A. Tomașciuc, I. Sandu</i>	
Model de organizare a unui institut de cercetare și analiză a calității produselor alimentare..... 18	18
A model of organization of a research and food quality analysis institute..... 19	19

<i>A. Hrib</i>	
Metamerismul pigmenților în arta conservării.....	20
Metameric pigments in art conservation.....	21
<i>I. Moise, A. Ghineț, C. Abuhaie, E. Bîcu</i>	
Sinteza și activitatea antitubulină a unor noi analogi ai fenstatinei.....	22
Synthesis and antitubulin activity of new analogues of phenstantin.....	23
<i>A.-C. Cojocărașu, D. Belei, E. Bîcu</i>	
Sinteza de noi derivați fenotiazinici cu potențială acțiune antitumorală.....	24
Synthesis of new phenothiazine derivatives with potential antitumor activity.....	25
<i>G. M. Dumitriu, A. Moraru, A. Condrea, D. Belei, A. Ghineț, J. Dubois, E. Bîcu</i>	
Noi derivați fenotiazinici N-substituiți ce conțin rest propargilic. Sintează și evaluare biologică	26
New phenothiazine derivatives N-substituted. Synthesis and biological evaluation.....	27
<i>L. Lucescu, A. Bejan, D. Belei, A. Ghineț, E. Bîcu</i>	
Sinteza unor noi derivați azaheterociclici cu potențială activitate biologică.....	28
Synthesis of some new aza-heterocyclic derivatives with potential biological activity.....	29
<i>C. Dumea, A. Rotaru, A. Enachi, A. Ghineț, E. Bîcu, D. Belei</i>	
Sinteza și evaluarea biologică a unor noi derivați 1,2,3-triazolici ce conțin nucleul carbazolic și fenotiazinic.....	30
Synthesis and biological evaluation of new 1,2,3-triazole derivatives containing phenothiazine and carbazole moiety.....	31
<i>A. Pîrțac, S.-M. Cucu-Man</i>	
Sorbția tetraciclinei pe soluri agricole.....	32
Sorption of tetracycline on agricultural soils.....	33
<i>D. Isac, I. Humelnicu, D. Maștei</i>	
Studiul teoretic și experimental al unor structuri moleculare cu acțiune antiinflamatoare din clasa medicamentelor nesteroidiene.....	34
Theoretical and experimental study on the structures of several non-steroidian antiinflammatory drugs.....	35

INTERACȚIUNEA ACIDULUI SALICILIC ȘI PEPTIDEI GLICIL-L-TRIPTOFAN CU DINITRODERIVAȚI ȘI METALE GRELE

Sabina BĂNCILĂ¹, Laura HĂBĂȘESCU¹, Gabi DROCHIOIU¹

¹Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași, Facultatea de Chimie, Bd. Carol I, nr 11, 700506 Iasi, Romania,

Pentru a investiga proprietățile optice a doi fluorofori, acidul salicilic (SA) și peptida glicil-L-triptofan (GW), s-a folosit metoda fluorescenței. Mecanismul de stingere a fluorescenței acidului salicilic de către dinitroderivați a fost stabilit ca fiind unul static. Pentru a investiga modificările conformaționale ale peptidei GW s-au folosit ioni ai metalelor grele [1]. Excitarea moleculei de acid salicilic s-a realizat la 297 nm, emisia maximă fiind înregistrată la 410 nm. Intensitatea fluorescenței acidului salicilic s-a modificat în funcție de concentrația și de structura stingătorului (2,4-dinitrofenol, dinitro-*orto*-crezol, dinitroanisol). De asemenea, s-a observat o deplasare către lungimi de undă mai mari. Spectre similare s-au obținut în prezența dinitro-*orto*-crezolului și dinitroanisolului (100 μM). O posibilă explicație a acestui comportament ar fi aceea că în cazul dinitroanisolului gruparea hidroxilică (răspunzătoare pentru stingerea fluorescenței) este blocată de o grupare metil, -CH₃. S-a studiat fluorescența celui de-al doilea fluorofor, glicil-L-triptofan, precum și influența ionilor metalelor grele. S-a observat că toți ionii metalici utilizați modifică intensitatea fluorescenței peptide. Ionii de cupru au determinat scăderea intensității fluorescenței peptidei GW, iar ionii de nichel au condus la creșterea acesteia [2].

Studiile de fluorescență a compușilor investigați au permis obținerea de date științifice importante despre interacțiunea ionilor metalelor tranziționale cu peptidele fiziologic active din corp.

Cuvinte cheie: acid salicilic, glicil-L-triptofan, dinitroderivați, ionii metalelor grele, fluorescență

Bibliografie:

1. Bojidarka, B. Ivanova and Michael Spiteller, *Biopolymers*, **93**, 727-734 (2010).
2. Tabak, M., Sartor, G., Neyroz, P., Spisni, A., and Cavatorta P., *J. Luminisc.*, **46**, 291-299 (1990).

THE INTERACTION OF SALICYLIC ACID AND PEPTIDE GLYCYL-L-TRYPTOPHAN WITH DINITRODERIVATES AND HEAVY METAL IONS

Sabina BĂNCILĂ¹, Laura HĂBĂȘESCU¹, Gabi DROCHIOIU¹

¹*“Alexandru Ioan Cuza” University of Iasi, Faculty of Chemistry, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania*

A fluorescence method was used to investigate the optical properties of two fluorophors, namely salicylic acid (SA) and peptide glycyL-L-tryptophan (GW). The quenching mechanism of fluorescence of SA, based on a static quenching by dinitroderivates, was discussed. We used heavy metal ions bound to GW to investigate the conformational changes in peptides [1]. The excitation of salicylic acid was made at 297 nm and the maximum emission was found at 410 nm. The intensity of SA fluorescence changed depending on the concentration and on the structure of the quencher (2,4-dinitrophenol, dinitro-*ortho*-cresol, dinitroanisol). It was noticed an important shift to higher wavelenghts, as well. Similar spectra were obtained in the presence of dinitro-*ortho*-cresol and dinitroanisol at 100 μM. A possible explanation for this behavior is that in the case of dinitroanisol the hydroxylic group -OH (responsible for the fluorescence quenching) was blocked (with methyl -CH₃ group). It was studied the fluorescence of the second fluorophore, glycyL-L-tryptophan and its influence on the heavy metal ions. We observed that all the investigated ions modified the fluorescence intensity of the peptide. While copper ions decreased the intensity of the fluorescence of peptide GW, nickel ions increased it [2].

Fluorescence studies applied to the compounds investigated in this paper allow the acquiring of important scientific data about the transitional metal ions and their interaction with physiological active peptides in the body.

Keywords: salicylic acid, glycyL-L-tryptophan, dinitroderivates, heavy metal ions, fluorescence.

References:

1. Bojidarka, B. Ivanova and Michael Spitteller, *Biopolymers*, **93**, 727-734 (2010).
2. Tabak, M., Sartor, G., Neyroz, P., Spisni, A., and Cavatorta P., *J. Luminisc.*, **46**, 291-299 (1990).

STUDIUL UNOR CARACTERISTICI ARHEOMETRICE ȘI A STĂRII DE CONSERVARE A UNEI ICOANE DIN SECOLUL AL XIX-LEA

Raluca Anamaria CRISTACHE¹, Ion SANDU^{1,2}, Viorica VASILACHE^{1,2}, Oana CRISTACHE¹

¹Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași, Platforma ARHEOINVEST, Bd. Carol I, nr. 11, 700506 Iași, România

²Forumul Inventatorilor Români, Str Sf. Petru Movila 3, L11, III/3, 700089 Iași, România

Lucrarea prezintă rezultatele studiului fizico-chimic asupra icoanei „Maica Domnului Îndurerată” din secolul al XIX-lea. Icoana este executată de un pictor anonim, în tempera, pe suport din lemn de tei. Persoana este înfățișată în semiprofil, până la bust, cu capul aplecat, încadrată de un chenar. Culorile predominante ale icoanei sunt albastru ultramarin, ocru și brun-roșcat, foită de aur sau bronz. Canturile suportului au fost acoperite cu tempera în tonurile icoanei. Pe cantul drept se poate vedea o inscripție făcută cu tuș albastru, indescifrabilă. Stratul pictural prezintă lacune, cracluri, desprinderi, murdărie aderentă, verni degradat și desprins (Figura 1). Suportul este din lemn de tei, *Tillia cordata*, format dintr-o singură placă, tăiată transversal, fără traverse. Studiul se axează pe identificarea unor caracteristici arheometrice privind suportul de lemn și stratul pictural. Pentru analiza materialelor picturale și a stării de conservare a icoanei, s-au folosit Spectrometria Infraroșu cu Transformată Fourier (Micro-FTIR) și Microscopie Electronică de Scanare cuplată cu Dispersie de Raze-X (SEM-EDX). Cu ajutorul acestora s-au putut identifica pigmentii utilizați și starea de degradare a suportului de lemn. Prin analiza spectrului FTIR s-a dovedit că stratul pictural conține albastru ultramarin (Figura 2), grund și mult praf, concluzie sprijinită de analiza SEM-EDX.



Figura 1. Detaliu al stratului pictural.

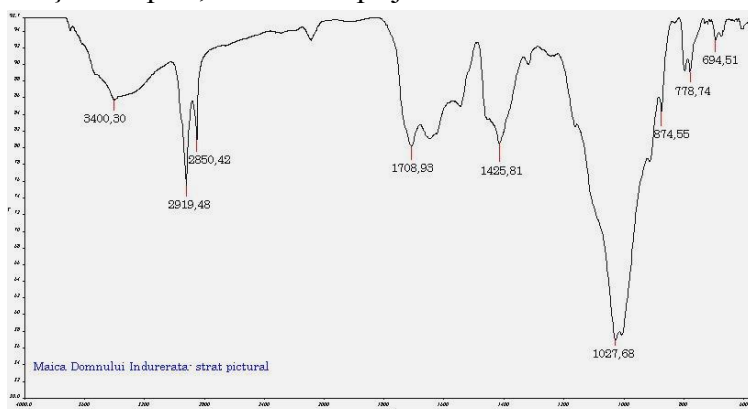


Figura 2. Spectrul FTIR al stratului pictural.

Cuvinte cheie: icoană, Micro-FTIR, SEM-EDX.

Bibliografie:

1. Zieba-Paulus, J., Ligeza, M., *Problems of Forensic Sciences*, **XLVII**, 418 (2001).
2. Derrick, M. R., Stulik, D., Landry, J. M., "Scientific tools for Conservation", The Getty Conservation Institute, Los Angeles, 252 (1999).

STUDY OF SOME ARCHEOMETRIC CHARACTERISTICS OF A PANEL PAINTED ICON FROM XIXTH CENTURY

Raluca Anamaria CRISTACHE¹, Ion SANDU^{1,2}, Viorica VASILACHE^{1,2}, Oana CRISTACHE¹

¹“Alexandru Ioan Cuza” University of Iasi, ARHEOINVEST Platform, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania

²Romanian Inventors Forum, 3 Sf. Petru Movila Str, L11, III/3, 700089 Iasi, Romania

The paper presents a physicochemical study on the orthodox icon “The grieving Mother” from XIXth century. The icon is made by an anonymus painter, in tempera pigments, on a lime wood support, *Tillia cordata*. God’s Mother is represented from one side, only the bust, with the head down, framed by a white border. The predominant colors of the icon are ultramarine blue, ocher, red-brown, with gold leaf or bronze. The edges of the panel were painted with tempera pigments as the border. On the right edge an inscription in blue ink, can be seen, but is unreadable. The painting layer has gaps, fissures, detachments, dirt, degraded and scaly varnish (Figure 1). The panel is made from lime wood, *Tillia cordata*, from a single board, transversally cut, without crossbeams. The study is based on the identification of some archeometric characteristics of the wood panel and of the pigment layer. For the analysis of the painting materials and of the conservation state, the Fourier Transform Infrared Spectroscopy (Micro-FTIR) and the Scanning Electron Microscope coupled with Energy Dispersive X-ray spectroscopy (SEM-EDX) were used. With their help it was able to identify the pigments used and the state of degradation of the panel. The FTIR spectrum analysis showed that the pigment layer contains ultramarine blue (Figure 2), ground and dust, a conclusion supported by SEM-EDX analysis.



Figure 1. Detail of the pigment layer.

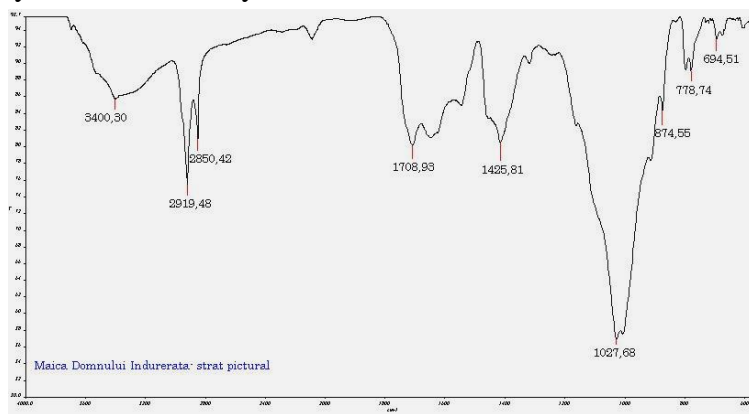


Figure 2. FTIR spectrum of the pigment layer.

Key words: icon, Micro-FTIR, SEM-EDX.

References:

1. Zieba-Paulus, J., Ligeza, M., *Problems of Forensic Sciences*, **XLVII**, 418 (2001).
2. Derrick, M. R., Stulik, D., Landry, J. M., “*Scientific tools for Conservation*”, The Getty Conservation Institute, Los Angeles, 252 (1999).

CONSIDERAȚII ENERGETICE PRIVIND PROCESUL DE USCARE A FRUCTELOR ÎN AER CALD

Cristina BAIAC

Universitatea „Ștefan cel Mare” din Suceava, Facultatea de Inginerie Alimentară, str. Universității nr.13, 720229, Suceava, România

În această lucrare este analizat din punct de vedere energetic procesul de uscare, în general, și de uscare a fructelor, în particular. Scopul este acela de a stabili condițiile optime de uscare, atât în ceea ce privește consumul de energie, cât și în privința conservării proprietăților organoleptice ale produselor. În lucrare sunt prezentate ecuațiile ce descriu fenomenul de uscare, precum și rezultatele obținute din experimentele de uscare a merelor și prunelor, care au fost comparate cu cele din literatura de specialitate.

Cuvinte cheie: aer cald, energie, exergie, fructe, uscare

Bibliografie:

1. Dincer I., Rosen, M. A. „*Exergy: Energy, Environment and Sustainable Development*”, First Ed., Elsevier, 2007.
2. Cengel, Y.A., Boles, M. A., „*Thermodynamics: An Engineering Approach*”, Fifth Ed., McGraw-Hill, 2006.
3. Prommas, R., Rattanadecho, and P., Cholaseuk, D., *International Communications in Heat and Mass Transfer*, **37**, 372-378 (2010).
4. Icier, F., Colak, N., Erbay, Z., Kuzgunkaya, E. H., and Hepbasli, A., *Drying Technology*, **28**, 193-204 (2010).
5. Corzo, O., Bracho, N., Vasquez, A., Pereira, A., *J. Food Engineering*, **86**, 151-161 (2008).
6. Akpınar, E. K., *International Communications in Heat and Mass Transfer*, **31**, 1165-1176 (2004).
7. Cay, A., Tarakcioglu, I., Hepbasli, A., *Drying Technology*, **28**, 1359-1367 (2010).
8. Akyol, U., Kahveci, K., Cihan, A., *Journal of the Textile Institute*, **104**, 170-177 (2013).

ENERGETIC CONSIDERATIONS REGARDING THE DRYING OF FRUITS IN HOT AIR PROCESS

Cristina BAIAC

*“Stefan cel Mare” University of Suceava, Faculty of Food Engineering, 13th Universitatii Street,
720229 Suceava, Romania*

This work presents an energetic analysis on drying process in general and drying of fruits in particular. The aim of this work is to find optimal conditions for drying, both regarding energy consumption and preserving of organoleptic properties of the products. In the first section equations describing the drying process are presented. Exergy represents in thermodynamics the maximum useful work obtained in a process, or the maximum extractible energy. The equations are based on exergy determination, because the loss of exergy could indicate the stages of the process where it is possible to obtain an improvement of efficiency. Some data experimentally obtained during apples and prunes drying are presented as well. Analyzes indicate that recovering of some energy of hot air is a way for efficiency improvement.

Keywords: hot air, energy, exergy, fruits, drying.

References:

1. Dincer I., Rosen, M. A. „*Exergy: Energy, Environment and Sustainable Development*”, First Ed., Elsevier, 2007.
2. Cengel, Y.A., Boles, M. A., „*Thermodynamics: An Engineering Approach*”, Fifth Ed., McGraw-Hill, 2006.
3. Prommas, R., Rattanadecho, and P., Cholaseuk, D., *International Communications in Heat and Mass Transfer*, **37**, 372-378 (2010).
4. Icier, F., Colak, N., Erbay, Z., Kuzgunkaya, E. H., and Hepbasli, A., *Drying Technology*, **28**, 193-204 (2010).
5. Corzo, O., Bracho, N., Vasquez, A., Pereira, A., *J. Food Engineering*, **86**, 151-161 (2008).
6. Akpınar, E. K., *International Communications in Heat and Mass Transfer*, **31**, 1165-1176 (2004).
7. Cay, A., Tarakcioglu, I., Hepbasli, A., *Drying Technology*, **28**, 1359-1367 (2010).
8. Akyol, U., Kahveci, K., Cihan, A., *Journal of the Textile Institute*, **104**, 170-177 (2013).

SINTEZA ȘI CARACTERIZAREA UNUI COMPLEX HETERONUCLEAR Fe/Co CU TRIETANOLAMINA

Alexandru MANEA¹

¹ *Universitatea din București, Bd. M. Kogălniceanu 36-46, Sector 5, 050107, București, România*

Lucrarea de față descrie sinteza și caracterizarea unui complex heteronuclear Fe/Co, având ca liganzi trietanolamină și acid pivalic.

Caracterizarea complexului a fost realizată prin intermediul metodelor spectrale IR și UV-Vis, precum și prin difracție de raze X pe monocristal. De asemenea, vor fi prezentate rafinarea succesivă a structurii și eventuale proprietăți interesante.

Cuvinte cheie: complex heteronuclear, trietanolamină, acid pivalic.

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF A HETERONUCLEAR FE/CO COORDINATION CLUSTER WITH TRIETHANOLAMINE

Alexandru MANEA¹

¹ *University of Bucharest, 36-46 Kogălniceanu Blvd., 050107 Bucharest, Romania*

The paper describes the synthesis and characterization of a heteronuclear coordination cluster of iron and cobalt, having triethanolamine and pivalic acid as ligands.

The characterization was performed by means of IR and UV-Vis spectroscopy and by single crystal X-ray diffraction. Also, further refinements of the structure and/or interesting properties will be presented where possible.

Keywords: coordination cluster, heteronuclear, triethanolamine, pivalic acid.

ACTIVITATEA FOTOCATALITICĂ A NANOPARTICULELOR $ZnFe_{2-x}Cr_xO_4$ LA ÎNDEPĂRTAREA COLORANTULUI ORANGE I DIN SOLUȚII APOASE

Adrian I. BORHAN¹, Petrișor SAMOILA², Vasile HULEA³, Alexandra R. IORDAN¹,
Mircea N. PALAMARU¹

¹ Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași, Facultatea de Chimie, Bd. Carol I, nr. 11, 700506 Iași, România

² Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni", nr 41A, Aleea Gr. Ghica Voda, 700487 Iași, România

³ Institut Charles Gerhardt, UMR 5253, CNRS-UM2-ENSCM-UMI, Matériaux Avancés pour la Catalyse et la Santé, 8 rue de l'Ecole Normale, 34 296 Cedex 5, France

Poluarea resurselor de apă de către coloranții din industria textilă, hârtiei, materialelor plastice, pielăriei, produselor cosmetice este o problemă serioasă de mediu din cauza toxicității lor, afectând calitatea vieții pentru generațiile viitoare [1]. Activitatea fotocatalitică sub lumină UV a pulberilor de $ZnFe_{2-x}Cr_xO_4$ ($x=0, 0,25, 0,50, 1,0, 1,50, 2,0$) a fost evaluată prin experimente de degradare a colorantului Orange I în soluție apoasă. Orange I este un colorant azoic foarte stabil și degradarea lui prin iradiere cu o lampă de Hg, în prezența nanocatalizatorului $ZnFe_2O_4$, a fost relativ lentă. În 45 min de iradiere a fost eliminată doar 36.80% din cantitatea inițială de colorant. Eficiența îndepărtării colorantului a fost îmbunătățită până la 92.80% prin introducerea cationilor Cr^{3+} în rețeaua octaedrică a $ZnFe_2O_4$. De asemenea, a fost studiată eficiența fotocatalizatorului $ZnFe_{0.50}Cr_{1.50}O_4$ în lumină vizibilă. Viteza de decolorare în lumina vizibilă a fost de două ori mai scăzută, respectiv 49% în 45 min. În figura 1 este prezentată scăderea intensității culorii (%) prin iradiere cu lumină din domeniul UV, în funcție de conținutul de Cr^{3+} .

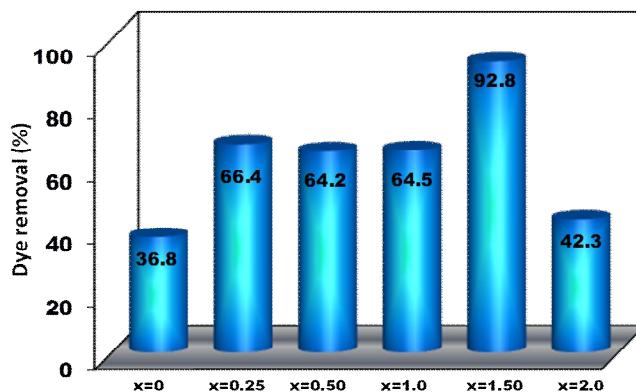


Figura 1. Scăderea intensității culorii la creșterea conținutului de $Cr^{3+}(x)$

Se poate concluziona faptul că $ZnFe_{0.50}Cr_{1.50}O_4$ conține dozajul optim de crom pentru degradarea fotocatalitică a Orange I sub acțiunea luminii UV. Rezultatele obținute în lumină vizibilă sunt în acord cu cele prezentate în literatura de specialitate [2].

Cuvinte cheie: fotocatalizator, fotodegradare, Orange I.

Bibliografie:

- Sharma, P.S, *Physica B*, **414**, 83–90 (2013).
- Liang, C. H., Li, F. B., Liu, C. S., Lu, J. L., and Wang, X. G., *Dyes Pigments*, **76**, 477-484 (2008).

PHOTOCATALYTIC ACTIVITY OF $\text{ZnFe}_{2-x}\text{Cr}_x\text{O}_4$ NANOPARTICLES ON ORANGE I AZO DYE REMOVAL FROM AQUEOUS SOLUTION

Adrian I. BORHAN¹, Petrișor SAMOILA², Vasile HULEA³, Alexandra R. IORDAN¹,
Mircea N. PALAMARU¹

¹ "Alexandru Ioan Cuza" University of Iasi, Faculty of Chemistry, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania

² "Petru Poni" Institute of Macromolecular Chemistry, 41A Gr. Ghica Voda Alley, 700487 Iasi, Romania

³ Institut Charles Gerhardt, UMR 5253, CNRS-UM2-ENSCM-UM1, Matériaux Avancés pour la Catalyse et la Santé, 8 rue de l'Ecole Normale, 34 296 Cedex 5, France

The pollution of water resources by the dyes from industries such as textile, paper, plastic, leather, and cosmetics has become a serious environmental problem because of their toxicity, affecting the quality of life for generation to come [1]. The photocatalytic activity of $\text{ZnFe}_{2-x}\text{Cr}_x\text{O}_4$ ($x=0, 0.25, 0.50, 1.0, 1.50, 2.0$) powders under UV light was evaluated by performing experiments on the degradation of Orange I in aqueous solution. Orange I was a very stable azo dye and the physical degradation using ZnFe_2O_4 photocatalyst under Hg lamp irradiation was relatively slow and only 36.80% of Orange I could be removed in 45 min irradiation time. The removal efficiency was enhanced to 92.80% when Cr^{3+} cations were introduced in octahedral lattice of ZnFe_2O_4 . We further studied photocatalytic activity under visible light irradiation of $\text{ZnFe}_{0.50}\text{Cr}_{1.50}\text{O}_4$ above Orange I dye solution. The decolorization rate under visible light is two times lower, ie 49% in 45 min. Figure 1 shows the percentual color removal with increasing Cr^{3+} content (x) under UV light irradiation.

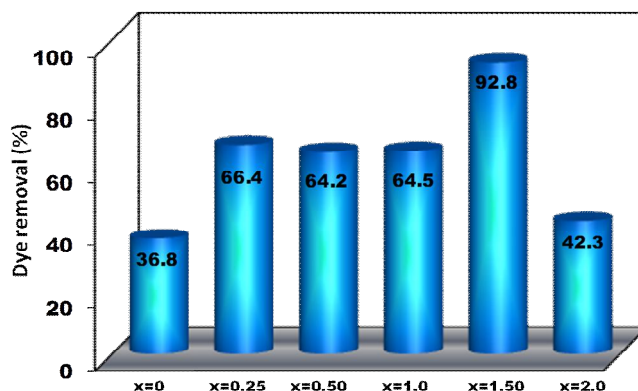


Figure 1. Color removal with increasing Cr^{3+} content (x).

Therefore, we conclude that $\text{ZnFe}_{0.50}\text{Cr}_{1.50}\text{O}_4$ contains chromium optimal dosage for photocatalytic degradation of Orange I under UV light. The results obtained under visible light are in agreement with literature [2].

Keywords: photocatalyst, photodegradation, Orange I.

References:

1. Sharma, P.S, *Physica B*, **414**, 83–90 (2013).
2. Liang, C. H., Li, F. B., Liu, C. S., Lu, J. L., and Wang, X. G., *Dyes Pigments*, **76**, 477-484 (2008).

STRUCTURE-DIELECTRIC PROPERTIES RELATIONSHIPS IN COPPER-SUBSTITUTED MAGNESIUM FERRITES

Alin C. DRUC¹, Adrian I. BORHAN¹, George NEDELICU², Liviu LEONTIE²,
Alexandra R. IORDAN¹, Mircea N. PALAMARU¹

¹ "Alexandru Ioan Cuza" University of Iasi, Faculty of Chemistry, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania

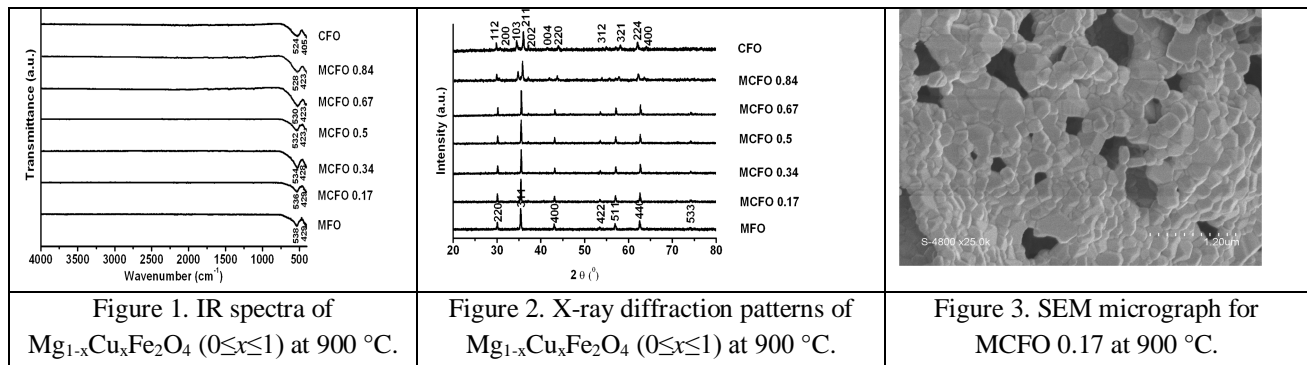
² "Alexandru Ioan Cuza" University of Iasi, Faculty of Physics, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania

Spinel ferrites, with general formula of AB_2O_4 , where $B = Fe^{3+}$ is a cation from octahedral positions and $A = Mg^{2+}, Cu^{2+}, Co^{2+}$ is a cation located in tetrahedral positions, are a very important class of materials, due to their electric [1] and magnetic properties [2]. These materials, which have significant features such as low toxicity, high chemical and thermal stability, play a major role in many application areas.

Nanocrystalline powders of copper-substituted magnesium ferrites with general formula $Mg_{1-x}Cu_xFe_2O_4$ ($x = 0.00, 0.17, 0.34, 0.50, 0.67, 0.84, 1.00$) were prepared for the first time by sol-gel auto-combustion method [3], using glycine as fuel agent.

Solid phase chemical reactions and the occurrence of spinel structure were monitored by using infrared spectroscopy (Figure 1). X-ray diffraction analysis confirmed the spinel single-phase formation (Figure 2). A shift from cubic structure to tetragonal structure starting with $x = 0.84$ was also observed. Microstructure of the samples was analyzed by scanning electron microscopy and particle size was estimated from the micrographs (Figure 3).

Analysis of dielectric properties revealed very low values of dielectric loss at frequencies over 10 MHz.



Keywords: ferrites, sol-gel auto-combustion method, dielectric properties.

References:

- Rane, K. S., Verenkar, V. M. S., and Sawant, P. Y., *Bull. Mater. Sci.*, **24**, 323, (2001).
- Oliver, S. A., Willey, R. J., Hamdeh, H. H., Oliveri, G., and Busca, G., *Scripta Metall. Mater.*, **33**, 1695, (1995).
- Druc, A. C., Dumitrescu, A. M., Borhan, A. I., Nica, V., Iordan, A. R., and Palamaru, M.N., *Cent. Eur. J. Chem.*, **11**, 1330, (2013).

STUDIUL ASUPRA STRUCTURII ȘI PROPRIETĂȚILOR DIELECTRICE ALE PEROVSKIȚILOR DUBLII A_2DyBiO_6 ($A=Mg, Ca, Sr, Ba$)

Simona FERARU¹, Adrian I. BORHAN¹, Petrișor M. SAMOILA², George G. NEDELCU³,
Alexandra R. IORDAN¹, Mircea N. PALAMARU¹

¹Universitatea „Alexandru Ioan Cuza” din Iași, Facultatea de Chimie, Bd. Carol I, nr. 11, 700506 Iași, România

²Institutul de Chimie Macromoleculară “Petru Poni”, nr 41A, Aleea Gr. Ghica Voda, 700487 Iași, România

³Universitatea „Alexandru Ioan Cuza” din Iași, Facultatea de Fizică, Bd. Carol I, nr. 11, 700506 Iași, România

În lucrare sunt prezentate studiile asupra structurii și proprietăților dielectrice ale perovskitelor dublii A_2DyBiO_6 ($A = Mg, Ca, Ba, Sr$) sintetizate prin metoda sol-gel auto-combustie [1]. Progresul sintezei a fost monitorizat cu ajutorul spectroscopiei în infraroșu (FTIR), faza fazelor de tip perovskit au fost evaluate prin difracție de raze X (XRD). Morfologia probelor obținute la 900 °C, a fost investigată prin intermediul microscopiei de scanare cu electroni (SEM).

Dependența permitivității dielectrice (Figura 1a) și a pierderilor dielectrice (Figura 1b) de frecvență a fost investigată cu un aparat de tip Agilent 4292-1, în domeniul de frecvență 40 Hz – 10 MHz, la temperatura camerei.

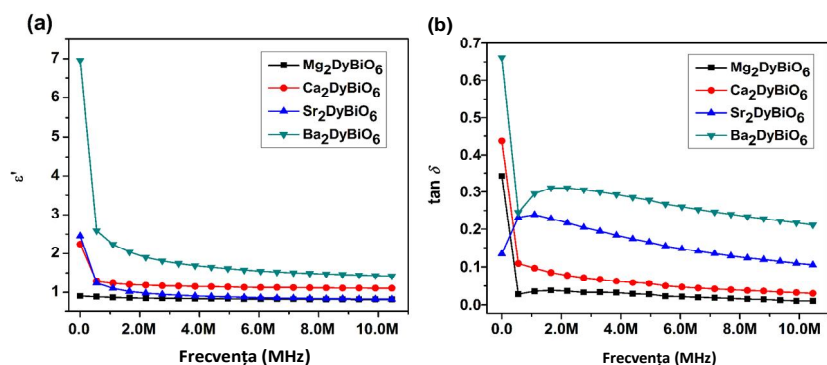


Figura 1. Variația permitivității (a) și a pierderii dielectrice (b) cu frecvența pentru A_2DyBiO_6 ($A=Mg, Ca, Sr, Ba$).

Din datele experimentale s-a observat faptul că prin substituția cationului din poziția $A=Ca$ cu $A=Sr$ și Ba , permitivitatea dielectrică crește, fenomen care poate fi corelat cu scăderea concentrației dipolilor datorită creșterii volumului celulei elementare. Pentru Mg_2DyBiO_6 constanta dielectrică atinge un palier, la valori mici ale frecvenței, cauzat cel mai probabil de defectele ce apar în structura de tip piroclor [2].

Cuvinte cheie: perovskit dublu, sol-gel auto-combustie, proprietăți dielectrice.

Bibliografie:

1. Vijayakumar, C., Kumar, H. P., Kavitha, V.T., Solomon, S., Thomas, J. K., Wariar, P. R. S., and Koshy, J., *J. Alloys Compd.*, **475**, 778 – 771, (2009).
2. Senthil, S. K., Nair, K. V. O., and James J., *J. Solid State Chem.*, **177**, 3873 – 3878, (2004).

STUDY ON STRUCTURE AND DIELECTRIC PROPERTIES OF DOUBLE PEROVSKITES A_2DyBiO_6 ($A=Mg, Ca, Sr, Ba$)

Simona FERARU¹, Adrian I. BORHAN¹, Petrișor M. SAMOILA², George G. NEDELICU³,
Alexandra R. IORDAN¹, Mircea N. PALAMARU¹

¹ "Alexandru Ioan Cuza" University of Iasi, Faculty of Chemistry, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania

² "Petru Poni" Institute of Macromolecular Chemistry, 41A Gr. Ghica Voda Alley, 700487 Iasi, Romania

³ "Alexandru Ioan Cuza" University of Iasi, Faculty of Physics, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania

The present paper presents the study on structure and dielectric properties of double perovskites A_2DyBiO_6 ($A = Mg, Ca, Ba, Sr$) synthesized by sol-gel auto-combustion method [1]. The synthesis progress was monitored by using IR spectroscopy (FTIR), whereas the perovskite structures were evaluated by X-ray diffraction (XRD). The morphology of the sintered powders at 900 °C was investigated by scanning electron microscopy using a Vega Tescan-type scanning transmission electron microscope.

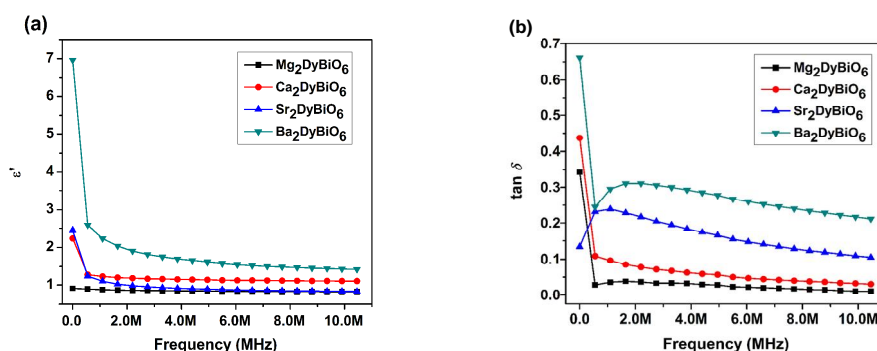


Figure 1. Dependence of dielectric permittivity (a) and dielectric losses (b) on frequency for A_2DyBiO_6 ($A=Mg, Ca, Sr, Ba$)

Dependence of dielectric permittivity (Figure 1a) and dielectric losses (Figure 1b) on frequency were studied using an Agilent 4292-1 device, in the range of 40 Hz – 10 MHz, at room temperature. The experimental data indicated that by changing A from Ca to Sr and Ba, the permittivity increases, which may be related to a decrease in concentration of dipoles due to the increase in unit-cell volume. For Mg_2DyBiO_6 , dielectric constant reach to the linear plateau at low frequency, caused probably by the defects presented in pyrochlore structure [2].

Keywords: double perovskites, sol-gel auto-combustion method, dielectric properties.

References:

1. Vijayakumar, C., Kumar, H. P., Kavitha, V.T., Solomon, S., Thomas, J. K., Wariar, P. R. S., and Koshy, J., *J. Alloys Compd.*, **475**, 778 – 771, (2009).
2. Senthil, S. K., Nair, K. V. O., and James J., *J. Solid State Chem.*, **177**, 3873 – 3878, (2004).

O ANALIZĂ DIN PUNCT DE VEDERE AL IMPACTULUI ASUPRA MEDIULUI A LEVIGATULUI DIN GROPILE DE GUNOI. SITUAȚIA ROMÂNIEI

Monica Anca CREȚU¹, Lilioara Nica ACATRINEI², Cristina Beatrice MICHITIUC²

¹Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași, Platforma ARHEOINVEST, Bd. Carol I, nr. 11, 700506 Iași, România

²Universitatea „Ștefan cel Mare” din Suceava, Facultatea de Inginerie Alimentară, Str. Universității, nr. 13, 720229 Suceava, România

Monitorizarea depozitelor de deșeuri este o necesitate pentru a asigura securitatea acestora. Folosind modelele de curgere cunoscute, este necesară realizarea unei baze statistice privind scurgerea levigatului. Descompunerea reziduurilor în gropile de gunoi este un proces lent, care poate dura între 50 și 100 de ani, până când deșeurile se transformă într-o masă stabilă, în timp ce apa de scurgere (poluată) va fi produsă în mod constant. Scurgerea apei peste gunoaie creează un amestec chimic. Acest lichid este numit levigat sau lixiviat și este adesea responsabil de contaminarea pânzei freatice în imediata vecinătate a depozitelor.

Cuvinte cheie: levigat, monitorizare, depozite de deșeuri, mediu

Bibliografie:

1. Abu Rukah, Y. and Al-Kofahi, O. , *J.Arid Environ.*, 49, 615 - 630 (2001).
2. Bou-Zeid, E. and El-Fadel, M., *Science Direct, Waste Management*, 24, 681 - 689 (2004).
3. Fatta, D., Papadopoulos, A., and Loizidou M., *Kluwer Academic Publishers*, **21**, 175-190 (1999).

AN ANALYSIS REGARDING THE ENVIRONMENTAL IMPACT OF LEACHATE FROM WASTE DEPOSITS – THE SITUATION OF ROMANIA

Monica Anca CREȚU¹, Lilioara Nicai ACATRINEI², Cristina Beatrice MICHITIUC²

¹“Alexandru Ioan Cuza” University of Iasi,, ARHEOINVEST Platform, Laboratory of Scientific Investigation and Cultural Heritage Conservation, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania

²“Stefan cel Mare” University of Suceava, Faculty of Food Engineering, 13th Universitatii Street, 720229 Suceava, Romania

Monitoring of waste deposits represents a necessity to assure their security. Using known liquid flow models it is necessary to establish a statistical data base regarding leachate regress. Decomposition of substances from waste deposits is a slow process, which could subsist between 50 and 100 years, until the body of the wastes is transformed in a stable phase. The polluted flowing water will be produced continuous. The flow of the water beyond the wastes creates a chemical mixture. This mixture is named leachate and it is often responsible for the contamination of groundwater in the vicinity of the deposits. This work presents the state-of-art of studies in Romania and summarizes the issues.

Keywords: leachate, monitoring, waste deposits, environment.

References:

1. Abu Rukah, Y. and Al-Kofahi, O. , *J.Arid Environ.*, 49, 615 - 630 (2001).
2. Bou-Zeid, E. and El-Fadel, M., *Science Direct, Waste Management*, 24, 681 - 689 (2004).
3. Fatta, D., Papadopoulos, A., and Loizidou M., *Kluwer Academic Publishers*, **21**, 175-190 (1999).

MODEL DE ORGANIZARE A UNUI INSTITUT DE CERCETARE ȘI ANALIZĂ A CALITĂȚII PRODUSELOR ALIMENTARE

Monica Anca CREȚU¹, Andra TOMAȘCIUC², Ion SANDU¹

¹Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași, Platforma ARHEOINVEST, Bd. Carol I, nr. 11, 700506 Iași, România

²Universitatea „Ștefan cel Mare” din Suceava, Facultatea de Inginerie Alimentară, Str. Universității, nr. 13, 720229 Suceava, România

În această lucrare este prezentat cazul unui institut de analiză a calității produselor alimentare, organizat ca și societate comercială. Activitatea institutului, numit generic IAA (Institut de Analize Alimentare), nu se va limita strict la ceea ce se înțelege în mod obișnuit prin laborator de analize, ci va fi una legată și de activitatea de cercetare în domeniul alimentației și chimiei alimentare. Acest institut va funcționa ca orice firmă în economia liberă, obținând finanțare strict din proiectele de cercetare la care va participa individual sau în colaborare cu alte institute și din analizele de calitate a produselor alimentare solicitate de diverși clienți.

Clienții institutului vor fi de asemenea agenți economici, agenții guvernamentale, institute de cercetare, atât din țară cât și din Europa. Marele avantaj al sistemelor actuale de comunicații este că fac să dispară distanțele. Am prezentat organigrama institutului, inspirată după cea a altor institute private care funcționează cu succes în străinătate și de asemenea am prezentat fișa postului pentru un cercetător. Desigur toate cele exprimate sunt perfectibile.

Cuvinte cheie: cercetare, laborator de analize, produse alimentare, competitivitate, societate comercială

Bibliografie:

- 1.*** Strategia Națională a CDI 2007-2013.
- 2.*** „Modele și indicatori de evaluare a calității cercetării științifice în universități în contextul societății bazate pe cunoaștere” – CEREX/2006.
- 3.*** - „Dicționarul Enciclopedic”, vol. I (A-C), Editura Enciclopedica, (1993).
4. Ph Kotler, „Marketingul locurilor”, Editura Teora București, (2001).
5. Voiculescu, D., „Competiție și competitivitate”, Editura Economică, București, (2001).

A MODEL OF ORGANIZATION OF A RESEARCH AND FOOD QUALITY ANALYSIS INSTITUTE

Monica Anca CREȚU¹, Andra TOMAȘCIUC², Ion SANDU¹

¹*“Alexandru Ioan Cuza” University of Iasi,, ARHEOINVEST Platform, Laboratory of Scientific Investigation and Cultural Heritage Conservation, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania*

²*“Stefan cel Mare” University of Suceava, Faculty of Food Engineering, 13th Universitatii Street, 720229 Suceava, Romania*

This article studies the case of a food quality analyses institute organized similar to a company. The activity of the institute, called generically IAA, will not be limited strictly to food analyses, but will be closed to scientific research activity in alimentation and food chemistry domains.

This institute will work similar to every company in market economy, getting funds both from research projects and food quality analyses, solicited by different clients. Research projects could be managed individually or in collaboration with other institutes.

The clients of the institute will be different companies, government agencies and other research institutes in Romania and Europe. A great advantage of actual communication systems is the disappearance of the distances.

We presented the organization chart of the institute, being inspired from other private institutes which successfully activate overseas, we presented the data sheet of an employee researcher, too. Of course all the presented data could be perfectible.

Keywords: research, analyses laboratory, food products, competitively, company

References:

- 1.*** Strategia Națională a CDI 2007-2013.
- 2.*** „Modele și indicatori de evaluare a calității cercetării științifice în universități în contextul societății bazate pe cunoaștere” – CEREX/2006.
3. *** - „Dicționarul Enciclopedic”, vol. I (A-C), Editura Enciclopedica, (1993).
4. Ph Kotler, „Marketingul locurilor”, Editura Teora București, (2001).
5. Voiculescu, D., „Competiție și competitivitate”, Editura Economică, București, (2001).

METAMERISMUL PIGMENȚILOR ÎN ARTA CONSERVĂRII

Andrei HRIB

¹ *Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași, Facultatea de Fizică, Bd. Carol I, nr. 11, 700506 Iași, România*

Metamerismul în conservare-restaurare are o importanță deosebită în ceea ce privește reintegrarea cromatică a picturilor. Utilizarea pigmenților sintetici în restaurare, prin formarea de mixturi ce vor suplini colorimetric și spectral straturile picturale lipsă, are avantajul de a fi economică. Dezavantajul major îl constituie faptul că intervențiile de reintegrare, astfel obținute, sunt mai greu de observat și de îndepărtat, încălcând astfel unul din principiile restaurării, cel al reversibilității tratamentului.

Cuvinte cheie: pigmenți, spectru, conservare.

METAMERIC PIGMENTS IN ART CONSERVATION

Andrei HRIB

“Alexandru Ioan Cuza” University of Iasi, Faculty of Physics, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania

Metamerism in conservation-restoration is very important in terms of reintegration of paintings. Using synthetic pigments in the formation of mixtures restoration that will replace - colorimetric and spectral - lack pictorial layers has the advantage of being economical. The major disadvantage is the fact that reintegration interventions thus obtained are less noticeable and removed in violation of one of the principles of restoration, the reversibility of treatment.

Keywords: pigments, spectra, conservation.

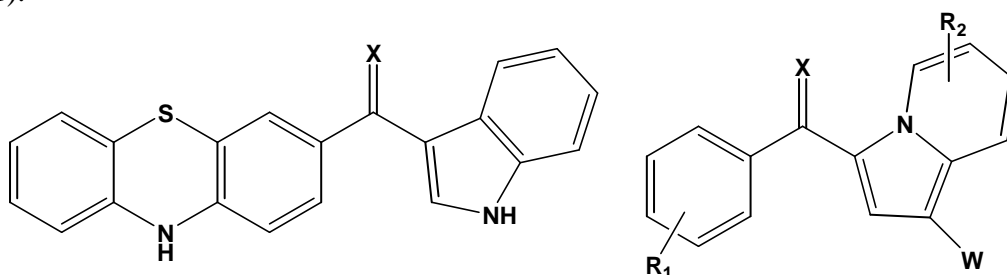
SINTEZA ȘI ACTIVITATEA ANTITUBULINĂ A UNOR NOI ANALOGI AI FENSTATINEI

Iuliana MOISE¹, Alina GHINET¹, Cristina ABUHAIE¹, Elena BÎCU¹

¹ Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași, Facultatea de Chimie, Bd. Carol I, nr. 11, 700506 Iași, România

Tubulina este un heterodimer format din proteinele globulare α - și β -tubulină strâns legate între ele, capabil să polimerizeze sub formă de microtubuli. Sistemul de microtubuli este implicat în numeroase funcții esențiale ale celulei, iar importanța acestuia în diviziunea celulară face din microtubuli o țintă de interes pentru medicamentele anticancer [1].

Cercetările asupra combretastatinei A-4, pentru a îmbunătăți activitatea *in vivo*, au dus la descoperirea fenstatinei [2] și apoi a izocombretastatinei A-4 [3]. În acești compuși, dispunerea cisoidă a celor două nuclee aromatice precum și inelul A 3,4,5-trimetoxifenil sunt considerate esențiale pentru activitatea biologică [4]. Totuși, s-a demonstrat că unele modificări asupra inelului A au condus la o activitate egală sau îmbunătățită, iar modelul de farmacofor indică faptul că alți acceptori de legături de hidrogen ar putea înlocui grupul trimetoxi [5]. În acest sens am decis să sintetizăm analogi ai fenstatinei conținând fenotiazină sau fenil substituit ca inel A și diferite inele B (indol și indolizină) pentru a explora relațiile structură-activitate în această familie de compuși (Schema 1).



Schema 1. Structura compușilor urmăriți, potențiali inhibitori ai polimerizării tubulinei (X: O, S, N-OH)

Cuvinte cheie: fenstatină, fenotiazină, indolizină.

Bibliografie:

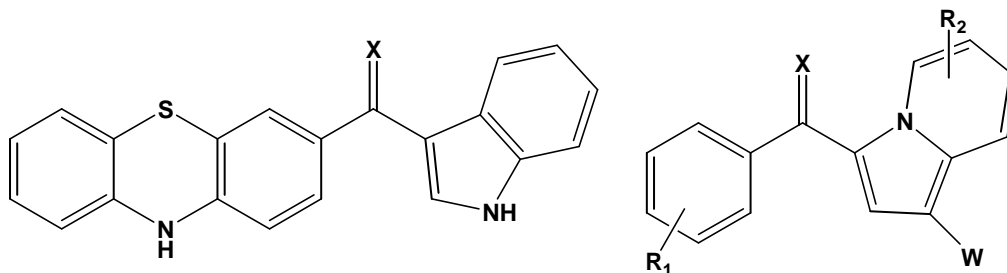
1. Dumontet, C. and Jordan, M., *Nat. Rev. Drug Disc.*, **9**, 790 (2010).
2. Pettit, G. R. și colab., *J. Med. Chem.*, **41**, 1688 (1998).
3. Alvarez, R. și colab., *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **17**, 6422 (2009); Messaoudi, S. și colab., *J. Med. Chem. Lett.*, **52**, 4538 (2009); Hamze, A. și colab. *Chem. Med. Chem.*, **19**, 4 (2009).
4. Tron, G. C. și colab., *J. Med. Chem.*, **49**, 3033 (2006); Ty, N. și colab., *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **19**, 1318 (2009); Ghinet, A. și colab., *Bioorg. Med. Chem.*, **19**, 6042 (2011).
5. Marrelli, M. și colab., *Curr. Med. Chem.*, **18**, 3035 (2011); Nguyen, T. L. și colab., *J. Med. Chem.*, **48**, 6107 (2005).

SYNTHESIS AND ANTITUBULIN ACTIVITY OF NEW ANALOGUES OF PHENSTATIN

Iuliana MOISE¹, Alina GHINET¹, Cristina ABUHAIE¹, Elena BÎCU¹¹ "Alexandru Ioan Cuza" University of Iasi, Faculty of Chemistry, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania

Tubulin is a heterodimer of closely related and tightly linked globular α - and β -tubulin proteins, capable to polymerize in hollow tubes called microtubules. The microtubule system is involved in many essential cell functions and their importance in cell division makes microtubules an important target for anticancer drugs [1].

Research on combretastatin A-4 in order to improve its *in vivo* activity led to the discovery of phenstatin [2], then later of *isocombretastatin* A-4 [3]. In these compounds, the cisoid disposition of the two aromatic rings and the 3,4,5-trimethoxyphenyl ring A are considered both essential for the biological activity [4]. However, it has been demonstrated that some modifications of the A-ring led to equal or better activity, and pharmacophore model indicates that other hydrogen bond acceptors could replace the trimethoxy group [5]. In this context, we decided to synthesize phenstatin analogs containing phenothiazine and substituted phenyl as an A-ring and different B-rings (indole and indolizine) in order to explore some structure-activity relationships in this family of compounds (Scheme 1).



Scheme 1. Structure of targeted compounds, potential inhibitors of tubulin polymerization (X: O, S, N-OH).

Keywords: phenstatin, phenothiazine, indolizine.

References:

1. Dumontet, C. and Jordan, M., *Nat. Rev. Drug Disc.*, **9**, 790 (2010).
2. Pettit, G. R. și colab., *J. Med. Chem.*, **41**, 1688 (1998).
3. Alvarez, R. și colab., *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **17**, 6422 (2009); Messaoudi, S. și colab., *J. Med. Chem. Lett.*, **52**, 4538 (2009); Hamze, A. și colab. *Chem. Med. Chem.*, **19**, 4 (2009).
4. Tron, G. C. și colab., *J. Med. Chem.*, **49**, 3033 (2006); Ty, N. și colab., *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **19**, 1318 (2009); Ghinet, A. și colab., *Bioorg. Med. Chem.*, **19**, 6042 (2011).
5. Marrelli, M. și colab., *Curr. Med. Chem.*, **18**, 3035 (2011); Nguyen, T. L. și colab., *J. Med. Chem.*, **48**, 6107 (2005).

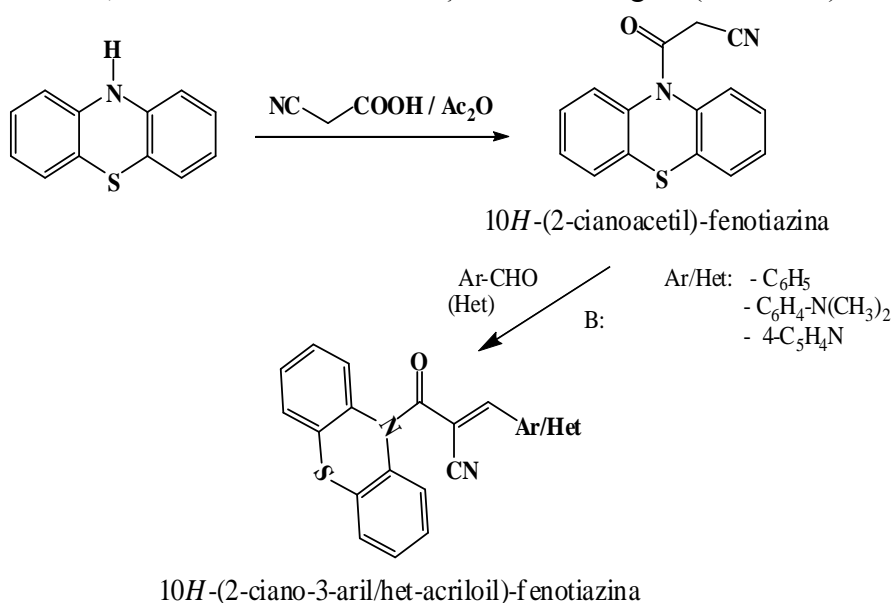
SINTEZA DE NOI DERIVAȚI FENOTIAZINICI CU POTENȚIALĂ ACȚIUNE ANTITUMORALĂ

Ancuța-Cătălina COJOCARAȘU¹, Dalila BELEI¹, Elena BÎCU¹

Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași, Facultatea de Chimie, Bd. Carol I, nr.11, 700506 Iași, România

Calconele (1,3-difenil-2-propen-1-one) constituie o clasă de compuși naturali sau de sinteză, ce prezintă un spectru larg de activități biologice: antibacteriană, anti-inflamatoare și antitumorală [1]. Derivații heteroarilici ai calconelor se leagă de glicoproteina-P [2] și de asemenea inhibă polimerizarea tubulinei [3], fiind utilizați în tratarea cancerului uman.

Ținând cont de aceste aspecte s-au sintetizat noi derivați de heteroaril-calcone, ce includ nucleul fenotiazinic, cunoscut datorită activităților sale biologice (Schema 1).



Schema 1. Sinteza 10H-(2-ciano-3-aryl/het-acriloil)-fenotiazinelor.

Noii compuși sintetizați au fost caracterizați spectral (IR, ¹H-RMN și ¹³C-RMN).

Cuvinte cheie: heterocalcone, fenotiazine, antitumoral.

Bibliografie:

1. Nowakowska, Z., *Eur. J. Med. Chem.*, **42**, 125-137 (2007).
2. Valdameri, G. și colab., *Eur. J. Med. Chem.*, **55**, 3193-3200 (2012).
3. Ruan, B.-F. și colab., *Bioorg. Med. Chem.*, **19**, 2688-2695 (2011).

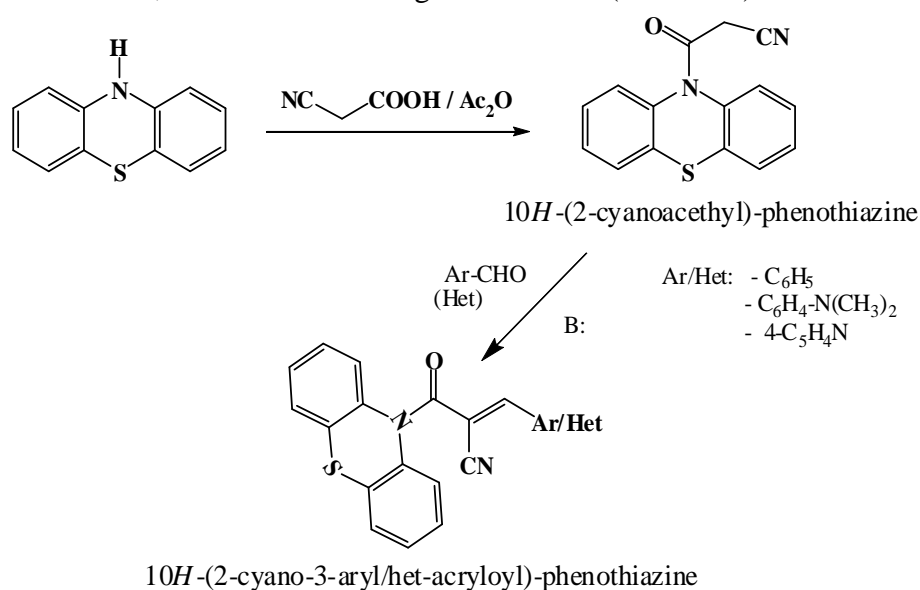
SYNTHESIS OF NEW PHENOTHIAZINE DERIVATIVES WITH POTENTIAL ANTITUMOR ACTIVITY

Ancuța-Cătălina COJOCARAȘU¹, Dalila BELEI¹, Elena BÎCU¹

¹ "Alexandru Ioan Cuza" University of Iasi, Faculty of Chemistry, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania

Chalcones (1,3-diphenyl-2-propen-1-ones) are a class of natural or synthetic compounds which have a wide spectrum of biological activities, such as antibacterial, anti-inflammatory and antitumor [1]. A number of heteroaryl chalcones bind to P-glycoprotein [2] and also inhibits tubulin polymerization [3] being used for cancer treatment.

Considering these aspects, we have synthesized novel heteroaryl chalcones, including the phenothiazine skeleton, known for its biological activities (Scheme 1).



Scheme 1. Synthesis of 10H-(2-cyano-3-aryl/het-acryloyl)-phenothiazine.

The new compounds were characterized by IR, ¹H-RMN and ¹³C-RMN spectra.

Keywords: chalcone, phenothiazine, antitumor.

References:

1. Nowakowska, Z., *Eur. J. Med. Chem.*, **42**, 125-137 (2007).
2. Valdameri, G. și colab., *Eur. J. Med. Chem.*, **55**, 3193-3200 (2012).
3. Ruan, B.-F. și colab., *Bioorg. Med. Chem.*, **19**, 2688-2695 (2011).

NOI DERIVAȚI FENOTIAZNICI N-SUBSTITUIȚI CE CONȚIN REST PROPARGILIC. SINTEZĂ ȘI EVALUARE BIOLOGICĂ

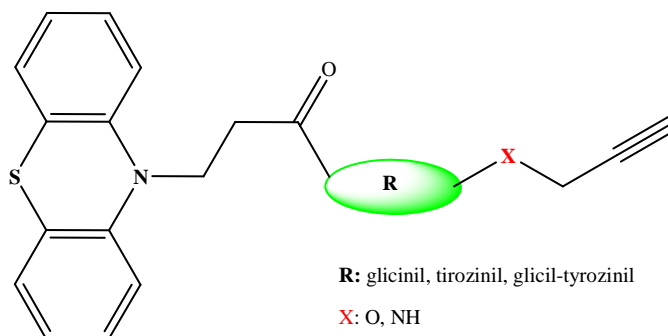
Gina-Mirabela DUMITRIU¹, Alexandra MORARU¹, Alina CONDREA¹, Dalila BELEI¹, Alina GHINET¹, Joëlle DUBOIS², Elena BÎCU¹

¹Universitatea „Alexandru Ioan Cuza” din Iași, Facultatea de Chimie, Bd. Carol I, nr. 11, 700506 Iași, România

²Institut de Chimie des Substances Naturelles, UPR2301 CNRS, Centre de Recherche de Gif, Avenue de la Terrasse, F-91198 Gif-sur-Yvette Cedex, France

Gruparea acetilenică este un motiv structural comun, întâlnit în diverse produse naturale, prezentând un mare interes și în chimia medicală și industria farmaceutică [1]. De asemenea, este o unitate farmacoforă cheie în antibioticele acetilenice [2], iar prezența ei în compușii anticancer [3] și antituberculari [4] este remarcabilă.

Potrivit datelor menționate anterior, au fost sintetizate noi fragmente promoatoare din seria compușilor acetilenici (derivați propargil amidici și esterici) evaluându-se activitatea inhibitorie asupra *farneziltrasferazei* (FTaze) umane.



Noi compuși sintetizați au fost caracterizați spectral (IR, ¹H-RMN, ¹³C-RMN).

Cuvinte cheie: fenotiazina, propargil derivați, inhibitori Ftaze.

Bibliografie:

- Hans, R. H., Guantai, E. M., Lategan, C., Smith, P. J., Wanc, B., Franzblau, S. G., Gut, J., Rosenthal, P. J., and Chibale, K., *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **20**, 942 (2010).
- Maretina, I. A. and Trofimov, B. A., *Russ. Chem. Rev.*, **75**, 825 (2006).
- Siddiq, A. and Dembitsky, V., *Anticancer Agents Med. Chem.*, **8**, 132 (2008).
- Deng, S., Wang, Y., Inui, T., Chen, S. N., Farnsworth, N. R., Cho, S., Franzblau, S. G., and Pauli, G. F., *Phytother Res.*, **22**, 878 (2008).

NEW PHENOTIAZINE DERIVATIVES N-SUBSTITUTED. SYNTHESIS AND BIOLOGICAL EVALUATION

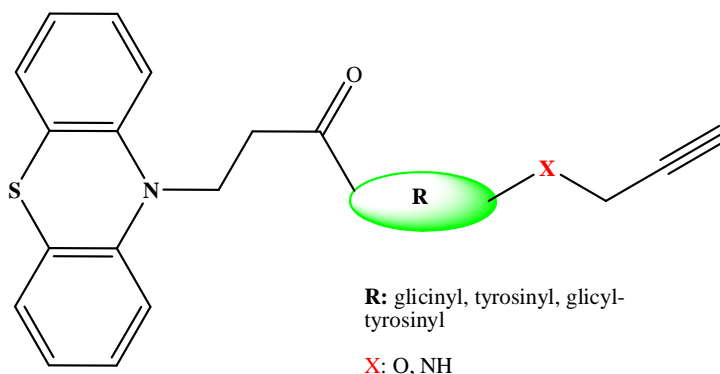
Gina-Mirabela DUMITRIU¹, Alexandra MORARU¹, Alina CONDREA¹, Dalila BELEI¹, Alina GHINET¹, Joëlle DUBOIS², Elena BÎCU¹

¹*Department of Organic Chemistry, 'Al. I. Cuza' University of Iasi, Faculty of Chemistry, Bd. Carol I nr. 11, 700506 Iasi, Romania*

²*Institut de Chimie des Substances Naturelles, UPR2301 CNRS, Centre de Recherche de Gif, Avenue de la Terrasse, F-91198 Gif-sur-Yvette Cedex, France*

Acetylenic group is common structural motifs found in various natural products and also great interest in medicinal chemistry and the pharmaceutical industry [1]. It moreover functions as a key pharmacophoric unit in acetylenic antibiotics [2] and its presence in anticancer [3] and antitubercular [4] agents is noteworthy.

Due to above-mentioned reasons, a new promoters fragments in the series of acetylenic compounds (propargyl amide and esters derivatives) were synthesized and evaluated their inhibitory activity against human *farnesyltransferase* (Ftase).



The new synthesized compounds were spectrally characterized (IR, ¹H-RMN, ¹³C-RMN).

Keywords: phenothiazine, propargyl derivatives, Ftase inhibitors

References:

- Hans, R. H., Guantai, E. M., Lategan, C., Smith, P. J., Wanc, B., Franzblau, S. G., Gut, J., Rosenthal, P. J., and Chibale, K., *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **20**, 942 (2010).
- Maretina, I. A. and Trofimov, B. A., *Russ. Chem. Rev.*, **75**, 825 (2006).
- Siddiq, A. and Dembitsky, V., *Anticancer Agents Med. Chem.*, **8**, 132 (2008).
- Deng, S., Wang, Y., Inui, T., Chen, S. N., Farnsworth, N. R., Cho, S., Franzblau, S. G., and Pauli, G. F., *Phytother Res.*, **22**, 878 (2008).

SINTEZA UNOR NOI DERIVAȚI AZAHETEROCICLICI CU POTENȚIALĂ ACTIVITATE BIOLOGICĂ

Liliana LUCESCU¹, Andrei BEJAN¹, Dalila BELEI¹, Alina GHINET¹, Elena BÎCU¹

¹ Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași, Facultatea de Chimie, Bd. Carol I, nr. 11, 700506 Iași, România

Fenstatina este un inhibitor cunoscut al polimerizării tubulinei, însă efectele sale adverse nu au permis introducerea acesteia în terapie. Astfel, în literatura de specialitate s-au descris numeroase farmacomodulații la nivelul fenstatinei [1]. În scopul de a păstra acțiunea farmacologică și de a îndepărta efectele adverse, s-au sintetizat noi analogi ai fenstatinei cu schelet indolizinic. Astfel, s-a urmărit înlocuirea ciclului B al fenstatinei cu un nucleu indolizinic diferit substituit și substituirea ciclului A cu un azaheterociclu de tip indazol (Figura 1).

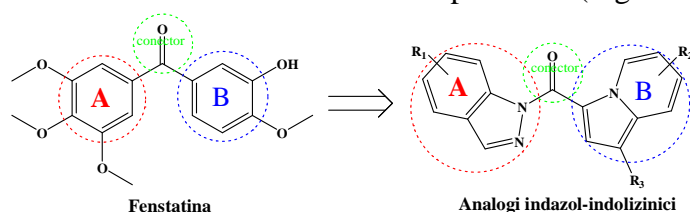
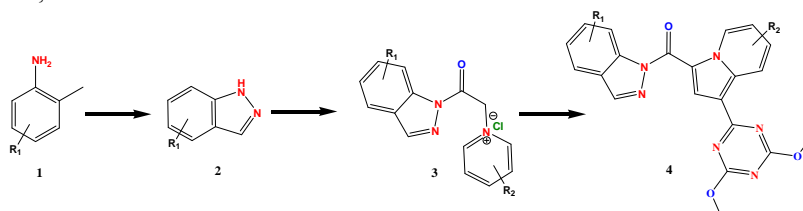


Figura 1. Conceperea unor noi analogi ai fenstatinei.

Ținând cont de datele din literatură, care indică importanța și numeroasele aplicații ale heterocicurilor azotate regăsite în structura compușilor urmăriți (indazol, indolizină, *s*-triazină), ne-am propus asocierea acestor fragmente heterociclice azotate, cunoscute ca având acțiune farmacologică, care prin crearea unor sinergisme favorabile conduc la dezvoltarea de noi molecule cu proprietăți îmbunătățite.



Schema 1. Calea de sinteză a noilor derivați azaheterociclici.

Noii compuși sintetizați au fost caracterizați spectral (IR, ¹H RMN, ¹³C RMN) și urmează a fi evaluați din punct de vedere biologic.

Cuvinte cheie: tubulină, indazol, indolizină, *s*-triazină.

Bibliografie:

- Ghinet, A., Rigo, Hénichart, B., J.-P., Le Broc-Ryckewaert, D., Pommery, J., Pommery, N., Thuru, X., Quesnel, B., and Gautret, P., *Bioorg. Med. Chem.*, **19**, 6042 (2011).
- Arnautu, A., Collot, V., Ros, J. C., Alayrac, C., Witulski, B., and Rault, S., *Tetrahedron Lett.*, **43**, 2695 (2002).
- Oudir, S., Rigo, B., Henichart, J.-P., and Gautret, P., *Synthesis*, **17**, 2845 (2006).
- Abuhaie, C.-M., Bîcu, E., Rigo, B., Gautret, P., Belei, D., Farce, A., Dubois, J., and Ghinet, A., *Bioorg. Med. Chem.*, **23**, 147 (2013).

SYNTHESIS OF SOME NEW AZA-HERETOCYCLIC DERIVATIVES WITH POTENTIAL BIOLOGICAL ACTIVITY

Liliana LUCESCU¹, Andrei BEJAN¹, Dalila BELEI¹, Alina GHINET¹, Elena BÎCU¹

¹ "Alexandru Ioan Cuza" University of Iasi, Faculty of Chemistry, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania

Phenstatin is a known inhibitor of tubulin polymerization, but its side effects did not permit its introduction in therapy. Thus, in the literature there are described many modulation of phenstatin structure [1]. In order to preserve the pharmacological properties and remove the adverse effects, we propose the synthesis of some new phenstatin analogues containing indolizine frame. Our interest was the replacement of cycle B in phenstatin structure with an indolizine core and the substitution of cycle A with an azaheterocyclic fragment, like indazole (Figure 1).

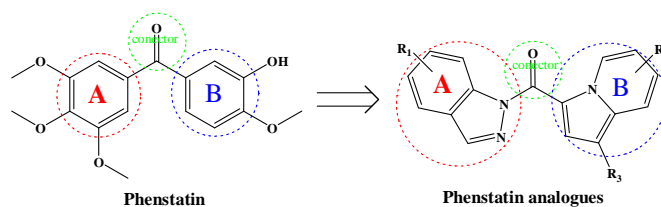
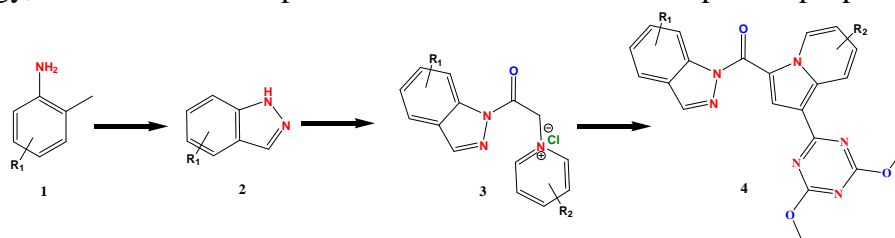


Figure 1. Design of some new phenstatin analogues.

Taking into account the literature data indicating the importance of the numerous applications of azaheterocyclic compounds, we propose the combination of these azaheterocyclic fragments, known to have pharmacological properties, that by creating positive synergy, leads to the development of new molecules with improved properties.



Scheme 1. Synthetic pathway of target compounds

All new synthesized compounds were IR, RMN characterized and in the future, will be biological evaluated.

Keywords: phenstatin, indazole, indolizine, *s*-triazine.

References:

1. Ghinet, A., Rigo, Hénichart, B., J.-P., Le Broc-Ryckewaert, D., Pommery, J., Pommery, N., Thuru, X., Quesnel, B., and Gautret, P., *Bioorg. Med. Chem.*, **19**, 6042 (2011).
2. Arnautu, A., Collot, V., Ros, J. C., Alayrac, C., Witulski, B., and Rault, S., *Tetrahedron Lett.*, **43**, 2695 (2002).
3. Oudir, S., Rigo, B., Henichart, J.-P., and Gautret, P., *Synthesis*, **17**, 2845 (2006).
4. Abuhaie, C.-M., Bîcu, E., Rigo, B., Gautret, P., Belei, D., Farce, A., Dubois, J., and Ghinet, A., *Bioorg. Med. Chem.*, **23**, 147 (2013).

SINTEZA ȘI EVALUAREA BIOLOGICĂ A UNOR NOI DERIVAȚI 1,2,3-TRIAZOLICI CE CONȚIN NUCLEUL CARBAZOLIC ȘI FENOTIAZINIC

Carmen DUMEA¹, Alexandra ROTARU¹, Andreea ENACHI¹, Alina GHINET¹,
Elena BÎCU¹, Dalila BELEI¹

¹Universitatea „Alexandru Ioan Cuza” din Iași, Facultatea de Chimie, Bd. Carol I, nr. 11, 700506 Iași, România

Derivații de carbazol și fenotiazină sunt o clasă de compuși heterociclici importantă în chimia medicală. În funcție de natura substituenților, acești compuși heterociclici pot avea diferite proprietăți biologice, unii dintre ei prezentând activitate antitumorală, anticonvulsivantă și antimicrobiană [1, 2].

Derivații triazolo-fenotiazinici cu structura generală **1** (Figura 1) sunt inhibitori ai farnesil-transferazei, *in vitro*, unii compuși prezentând valori ale IC₅₀ în domeniul micromolar [3]. În scopul de a crește activitatea inhibitorie am realizat modificări structurale ale compușilor cu structura generală **1**. Compușii obținuți prezintă structura generală **2** (Figura 1).

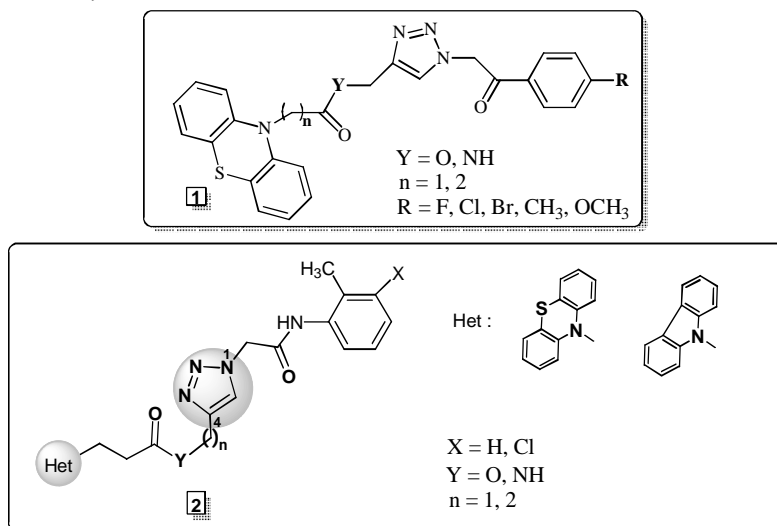


Figura 1. Structurile noilor compuși sintetizați

Structurile noilor compuși sintetizați au fost caracterizate prin spectroscopie IR și RMN (¹H, ¹³C). Compusul în care Het = 10H-fenotiazina, Y=NH, n=1, X=Cl, a fost evaluat în vederea determinării activității antiproliferative pe 60 de linii celulare canceroase la NCI (SUA). Acest compus prezintă activitate inhibitorie selectivă asupra celulelor canceroase, *in vitro*, cu 80% inhibiție asupra liniei celulare OVCAR-4 de cancer ovarian, și 62% inhibiție asupra liniei celulare SNB-75, cancer al SNC.

Cuvinte cheie: 1,2,3-triazol, fenotiazină, carbazol.

Bibliografie:

- Laronze, M., Boisburn, M., Leonce, S., Pfeiffer, B., Renard, P., Lozach, O., Meijer, L., Lansiaux, A., and Bailly, C., *Bioorg. Med. Chem.*, **13**, 22-63 (2005).
- Pluta, K., Morak-Mlodawska, B., and Jelen, M., *Eur. J. Med. Chem.*, **46**, 31-39 (2011).
- Belei, D., Dumea, C., Samson, A., Farce, A., Dubois, J., Bicu, E., and Ghinet, A., *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **22**, 4517- 4522 (2012).

SYNTHESIS AND BIOLOGICAL EVALUATION OF NEW 1,2,3-TRIAZOLE DERIVATIVES CONTAINING PHENOTHIAZINE AND CARBAZOLE MOIETY

Carmen DUMEA¹, Alexandra ROTARU¹, Andreea ENACHI¹, Alina GHINET¹,
Elena BÎCU¹, Dalila BELEI¹

¹ "Alexandru Ioan Cuza" University of Iasi, Faculty of Chemistry, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania

Carbazole and phenothiazine derivatives are an important class of heterocyclic compounds in medicinal chemistry. Depending of the substituents, this heterocycles can induce different biological properties, some of them exhibited anticancer, anticonvulsant and antimicrobial activity. [1][2]

Phenothiazin-triazole derivatives with general structure **1** are inhibitors of farnesyltransferase, *in vitro*, some compounds showed IC₅₀ values in the micromolar range.[3]

In order to enhance inhibitory activity we achieved structural modifications of the compounds with general structure **1**. The obtained compounds have general structure **2**.

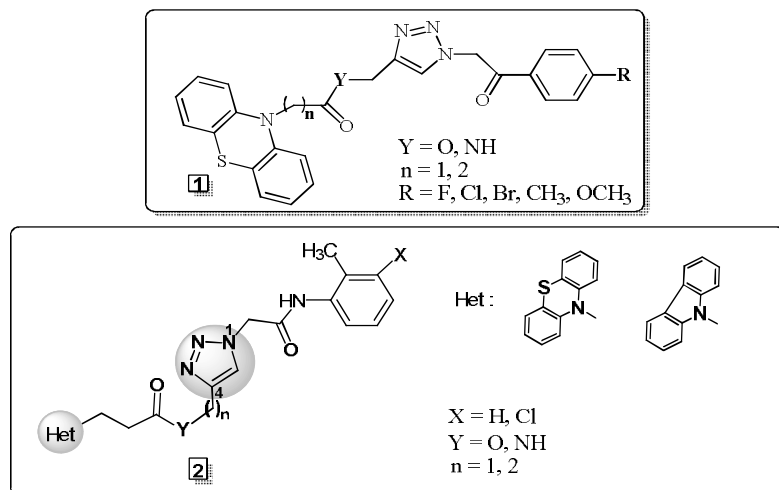


Figure 1. Structures of new compounds.

Structures of new compounds obtained were characterized by IR and NMR spectroscopy (¹H, ¹³C). The compound with Het = 10H-phenothiazine, Y=NH, n=1, X=Cl, was evaluated for their antiproliferative activity on a NCI-60 cancer cell line panel (SUA). This compound exhibited selectiv cell growth inhibitory activity, *in vitro*, with 80% inhibition of OVCAR-4 cell lines ovarian cancer, and 62% inhibition of SNB-75 cell lines CNS cancer.

Keywords: 1,2,3-triazole, phenothiazine, carbazole.

References:

1. Laronze, M., Boisburn, M., Leonce, S., Pfeiffer, B., Renard, P., Lozach, O., Meijer, L., Lansiaux, A., and Bailly, C., *Bioorg. Med. Chem.*, **13**, 22-63 (2005).
2. Pluta, K., Morak-Mlodawska, B., and Jelen, M., *Eur. J. Med. Chem.*, **46**, 31-39 (2011).
3. Belei, D., Dumea, C., Samson, A., Farce, A., Dubois, J., Bicu, E., and Ghinet, A., *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **22**, 4517- 4522 (2012).

SORBȚIA TETRACICLINEI PE SOLURI AGRICOLE

Ancuța PÎRȚAC¹, Simona-Maria CUCU-MAN¹

Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași, Facultatea de Chimie, Bd. Carol I, nr. 11, 700506 Iași, România

A fost investigată adsorbția tetraciclonei pe soluri agricole colectate din apropierea a două ferme de creștere a suinelor (situate în județele Neamț (S1) și Bistrița-Năsăud (S2), România). S-a urmărit influența unor factori asupra echilibrului de sorbție: pH-ul, concentrația inițială a soluției de antibiotic, timpul de contact al fazelor sol-antibiotic, temperatura, prezența unor cationi (Na^+ , K^+ , Ca^{2+} și Mg^{2+}). Solurile au fost caracterizate prin pH, conductivitate electrică și conținut de carbon organic. În cazul ambelor soluri rezultatele indică adsorbția maximă la pH 3, după care o scădere la valori aproximativ constante odată cu creșterea pH-ului în domeniul 4-9. Această dependență de pH indică probabil adsorbția antibioticului în principal prin schimbul ionic al speciilor cationice și complexarea speciilor amfionice. În prezența ionului Na^+ scade adsorbția pe solul S1, iar prezența ionului Mg^{2+} conduce la scăderea adsorbției pe solul S2. În scopul investigării mecanismului de sorbție au fost utilizate trei modele cinetice: modelul cinetic de pseudo-ordin unu, modelul cinetic de pseudo-ordin doi și modelul difuziei intraparticule. Parametrii modelelor cinetice au fost obținuți prin procedee de liniarizare, urmate de analiza prin regresie liniară. Rezultatele arată că procesul de reținere decurge după o cinetică de pseudo-ordin doi. Datele de adsorbție la echilibru se conformează modelului Langmuir. Capacitatea maximă de adsorbție calculată pe baza modelului Langmuir a fost de $62,1 \text{ mg g}^{-1}$ și $22,8 \text{ mg g}^{-1}$ pentru adsorbția tetraciclonei pe solul S1, respectiv pe solul S2.

Cuvinte cheie: tetraciclina, sol, adsorbție, izoterme, modele cinetice.

SORPTION OF TETRACYCLINE ON AGRICULTURAL SOILS

Ancuta PIRTAC¹, Simona-Maria CUCU-MAN¹

¹ “Alexandru Ioan Cuza” University of Iasi, Faculty of Chemistry, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania

Batch adsorption experiments of tetracycline on agricultural soils collected from two different sites located near pig farms (Neamt (S1) and Bistrita-Nasaud (S2) counties, Romania) were conducted. The effect of various parameters such as: pH, initial antibiotic concentration, contact time, temperature, background electrolyte cations (Na^+ , K^+ , Ca^{2+} and Mg^{2+}) was investigated. Measured soil characteristics included pH, electrical conductivity and organic carbon. The results showed that tetracycline was greatly adsorbed by both soils at pH 3. Adsorption decreased with the increase of pH in the range 4-9, indicating tetracycline adsorption mainly through ion exchange of cations species and complexation of zwitterions species. Adsorption of tetracycline decreased on soil S1 and S2 in the presence of Na^+ and Mg^{2+} , respectively. In order to investigate the mechanism of sorption and rate-controlling steps, pseudo first- and second-order equations, intraparticle diffusion equation have been used. The rate constants for the tested models have been determined and the correlation coefficients have been calculated in order to assess which model fit the best. The rate of adsorption was found to conform with good correlation to pseudo-second-order kinetics. The adsorption equilibrium is best described by Langmuir isotherm model. The maximum adsorption capacity is 62.1 mg g^{-1} and 22.8 mg g^{-1} for adsorption of tetracycline on S1 and S2, respectively.

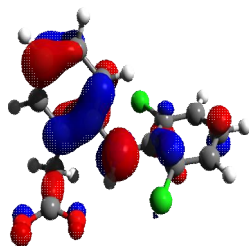
Keywords: tetracycline, soil, adsorption, isotherms, kinetics.

STUDIUL TEORETIC ȘI EXPERIMENTAL AL UNOR STRUCTURI MOLECULARE CU ACȚIUNE ANTIINFLAMATOARE DIN CLASA MEDICAMENTELOR NESTEROIDIENE

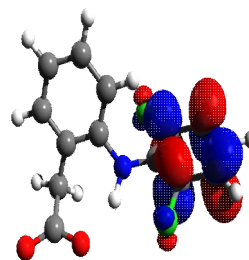
Dragoș ISAC¹, Ionel HUMELNICU¹, Dan MAFTEI¹

¹ Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași, Facultatea de Chimie, Bd. Carol I, nr. 11, 700506 Iași, România

Pentru a furniza o estimare cât mai precisă în descrierea interacțiunilor moleculelor de diclofenac, ibuprofen, flurbiprofen și piroxicam, în vederea descrierii acestor sisteme de particule în evaluarea proprietăților fizice și chimice, s-au utilizat calcule *ab initio* pe baza teoriei funcționale de densitate dependentă de timp (TD-DFT). Sunt calculate densitățile de sarcină pe baza teoriei TD-DFT folosindu-se funcționalele B3LYP, PBE0 și setul de orbitale 6-31+G(d) pentru optimizarea și prezicerea detaliată a tranzițiilor ce au loc de pe starea fundamentală pe stările excitate considerate. În urma rezultatelor obținute sunt comparate spectrele teoretice cu cele experimentale obținându-se informații importante în vederea caracterizării proprietăților energetice și spectrale ale unui sistem chimic.



HOMO



LUMO

Bibliografie:

[1]. *Gaussian 09, Revision B.1*, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, Ö. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, (2009).

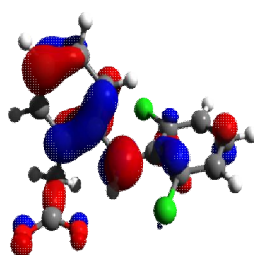
THEORETICAL AND EXPERIMENTAL STUDY ON THE STRUCTURES OF SEVERAL NON-STEROIDIAN ANTIINFLAMATORY DRUGS

Dragoș ISAC¹, Ionel HUMELNICU¹, Dan MAFTEI¹

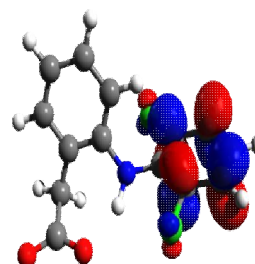
¹ "Alexandru Ioan Cuza" University of Iasi, Faculty of Chemistry, 11 Carol I Blvd., 700506 Iasi, Romania

In this study *ab initio* calculations were used based on the time dependent density function theory (TD-DFT) in order to obtain an accurate estimation concerning the interactions between the diclofenac, ibuprofen, flurbiprofen and piroxicam molecules as to describe this particle system's physical-chemical properties.

The charge density has been calculated based on the TD-DFT theory using the B3LYP, PBE) functionals and the 6-31+G(d) orbitals, in order to optimize and accurately describe the transitions from the fundamental state to the excited levels taken into consideration. The *ab initio* theoretical results are compared to those obtained from experimental spectral studies, thus obtaining useful information about the properties of these chemical systems.



HOMO



LUMO

References:

[1]. *Gaussian 09, Revision B.1*, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, Ö. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, (2009).