MEMORIU DE ACTIVITATE

Subsemnatul Dr. Ing. **Cezar C. Comanescu** am absolvit Universitatea Politehnica din București (UPB), Facultatea de Inginerie Chimica in Limbi Străine (FILS, engleza), secția compuși macromoleculari, in anul 2008, cu media generala 9.76, clasându-mă primul din serie (șef de promoție). Am urmat in cadrul UPB cursurile de **master** "Modern Inorganic Syntheses" ("Sinteze anorganice speciale", 2008-2010), obținând media generala 10. Simultan (in 2008), m-am înscris la **doctorat** in cadrul UPB, Facultatea de Chimie Aplicata si Știința Materialelor (FCASM), domeniul chimie anorganica - materiale mezoporoase, sub îndrumarea d-nei Prof. Dr. Cornelia Guran, si am obținut diploma de doctor in 2011, cu teza intitulata "New siloxanic materials: Synthesis, characterization and applications". Am fost încadrat, in luna septembrie a aceluiași an, ca ACS (asistent de cercetare științifică) in Laboratorul de Magnetism si Supraconductibilitate (Laboratorul 20) al INCDFM (Institutului National de Cercetare-Dezvoltare pentru Fizica Materialelor), unde am activat pana in prezent

In martie 2012 am obținut o **bursa postdoctorala in SUA** (Statele Unite ale Americii), in Indiana, *University of Notre Dame*, unde am lucrat in domeniul chimiei organometalice (2 ani si 8 luni: martie 2012 - septembrie 2014), in cadrul Departamentul de Chimie si Biochimie, sub îndrumarea Prof. Dr. V. Iluc. Am reluat activitatea in Institut (INCDFM) pe poziția de ACS in perioada sep. 2014- sep. 2015, ocupându-mă de sinteza si caracterizarea materialelor nanoporoase cu funcționalitate magnetica. In octombrie 2015 am obținut o **bursa postdoctorala in Spania**, Santiago de Compostela, *USC - CiQUS - Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares*, in Departamentul de Chimie Organica, sub îndrumarea Prof. Dr. J. L. Mascareñas (1 an si 6 luni) Am revenit in Romania in cadrul Lab. 20, INCDFM, unde ocup actualmente poziția CS III (concurs, nov. 2017 – prezent). In oct. 2020 m-am înscris la al doilea doctorat cu tema intitulata „S*isteme de nanoparticule magnetice funcționalizate, activate prin hipertermie, pentru aplicații biomedicale și catalitice*", in domeniul fizica (FSC – fizica stării condensate), obținând media 9,50 la examenele susținute, cu prospectul susținerii tezei pana la finalul anului 3 de doctorat, respectiv finele lui 2023.

Activitatea științifică

Activitatea de cercetare științifică a fost efectuata in cadrul: *Catedrei de Chimie Anorganica a Facultății de Chimie Aplicata si Știința Materialelor* (CASM, UPB, master si a doctorat, 2008-2011), *Departamentului de Inginerie Fizica, Universita degli studi di Padova, Italy (*stagiu doctoral, 2010-2011*), Departamentului de Chimie si Biochimie, University of Notre Dame, USA* (postdoc, 2012-2014*), Departamentului de Chimie Organica, Universidade de Santiago de Compostela, CIQUS – USC, Spain (*postdoc, 2015-2017*),* si *Laboratorului 20 (INCDFM; master, doctorat, cercetator ACS-CS-CSIII, 2009-2022).*

Preocupările științifice s-au axat pe următoarele direcții principale:

- nanomateriale mezoporoase ordonate de tip siloxanic si carbonic (sinteza, caracterizare)

- aplicații ale materialelor siloxanice mezoporoase direcționate către drug carriers si cataliză
- oxizi metalici mezoporoși si mezoporoși ordonați in cataliza (sinteza, caracterizare, activitate catalitica)
- studiul proprietăților **stocatoare de energie (hidrogen)** într-o serie de compuși micști de tip hidruri metalice reactive (RMH), amiduri si borohidruri metalice complexe
- studiul proprietăților stocatoare de hidrogen a unor nanocompozite de tip borohidruri metalice – suport carbonic nanoporos
- sinteza unor complecși metalici ai Pd, Rh, Cu si Pt cu liganzi difosfinici **cu preferință coordinativă *trans*** (caracterizare structurală completă)
- **sinteza unor carbene de Pd** ("R_2C=Pd") prin dehidrohalogenarea complecșilor Pd - difosfinici
- reactivitatea fascinantă a carbenei nucleofile de Pd, in reacții de **activare a legăturilor E-H** (E=C, O, N) sau fata de legături dihalogen $\mathbf{X_2}$ (oxidări)
- **sinteza benzazepinelor** prin reacții de cuplare de tip (5+2) catalizate de Pd^{2+} a alenelor substituite cu o-alkenylanilide triflice.

Cercetările legate de sisteme nanoporoase au avut un caracter inovator in catedra de Chimie Anorganica, si au avut ca obiectiv sinteza unor materiale cu schelet siloxanic (-Si-O-Si-) de tip silice mezoporoasa ordonata, si stabilirea unei relații sinteza-structura-proprietăți pentru a înlesni utilizarea ulterioara a acestora ca site transportoare de enzime sau medicamente (sisteme cu eliberare controlata), oxizi nanoporoși activați cu activitate catalitica mare (prevenind sinterizarea la temperaturi înalte prin nanoconfinare), sau sisteme de stocare a hidrogenului bazate pe hidruri metalice reactive (RMH). Lucrările publicate in aceasta perioada au fost realizate, in buna parte, prin colaborarea dintre Catedra de Chimie Anorganica (UPB) si Laboratorul de Magnetism (INCDFM, prin dl. Dr. Palade Petru si dl. Dr. Kuncser Victor), in cadrul proiectului național PNCDI-2 No. 72-196 / 2008 "New complex hydrides for hydrogen storage in hydride tank suitable for vehicular applications" – STOHICO. Acest proiect s-a concretizat printr-un brevet național acceptat ("HYDROGEN-STORING MATERIALS BASED ON MIXTURES OF AMIDES-HYDRIDES-BOROHYDRIDES", Palade, P; **Comanescu, C;** Guran, C; Chihaia, V; Coldea, ID, Nr. Înregistrare: RO128919-A2, Nr. si data deciziei de acordare: Nr./01-01-2014) si 4 lucrări ISI publicate. Elaborarea studiilor de literatura si educarea in direcția investigației științifice prin sintezele de laborator au fost piloni definitorii in evoluția mea profesionala ulterioară.

In cadrul *Departamentului de fizica* al *Universita Degli Studi di Padova,* sub îndrumarea Prof. Dr. A. Maddalena si a Prof. G. Principi, am studiat si aprofundat diferite nanocompozite pe baza de borohidruri metalice complexe ($Mg(BH_4)_2$, $Ca(BH_4)_2$, cu sau fără aditivi de tipul $TiCl_3$) înglobate in matrici mezoporoase concepute special pentru aceste aplicații stocatoare si sintetizate "*in-house*". S-au urmărit determinarea si compararea efectelor de *nanoconfinement* vs. *bulk* asupra capacității de stocare reversibile a hidrogenului in aceste nanocompozite. Cercetările întreprinse in stagiul predoctoral din Padova, Italia, coroborate cu efortul Lab. 20, INCDFM au avut atât un caracter fundamental (elucidarea influentei reducerii la nanoscala a materialelor stocatoare de hidrogen asupra capacității stocatoare) cat si unul aplicativ

(realizarea unui stocator experimental capabil sa furnizeze energia necesara aplicațiilor vehiculare, obiectiv al proiectului PNCDI-2 mai sus-menționat). Totodată, perioada petrecuta in Padova, într-un laborator complet dotat si sub îndrumarea Prof. Principi si a Prof. Maddalena, a contribuit decisiv la lărgirea orizontului meu profesional.

Urmând scopul dezvoltării profesionale si însușirii de noi tehnici experimentale de sinteza si analiza, am efectuat un stagiu de ~3 ani in SUA, University of Notre Dame, unde am inițiat, la sugestia Prof. V. Iluc, o cercetare fundamentala in domeniul liganzilor diforfinici cu aplicații directe in cataliza – formare de legături C-C sau substituția legăturilor C-H. Cercetarea a prilejuit sinteza **primei** carbene non-NHC a paladiului, un compus extrem de reactiv ("hot molecule"), care a reușit dezvoltarea domeniului carbenelor suportate de metale tranziționale. Chimia bogată si fascinantă pe care aceste carbene de Pd o prezintă cuprinde activarea majorității legăturilor E-H (E = B, C, Si, Ge, N, O), activarea calcogenilor (O, S, Se, Te) prin formarea unor legături de coordinație η^2, precum si reducerea dihalogenilor X_2 (X=Cl, Br, I) sau reacția cu acizii Lewis tipic utilizați in cataliză ($BAr^F{}_3$). Rezultatele obținute au deschis noi perspective in cataliza complecșilor grupei 10 a sistemului periodic, si un nou plan de activități in cadrul laboratorului de chimie organometalică al *University of Notre Dame*, bazate pe experimente de înalta finețe, dublate de calcule DFT menite sa confirme rezultatele experimentale anticipate.

In ultimele decenii, datorita epuizării resurselor de combustibili fosili, in contextul unui ritm tot mai accentuat de dezvoltare a societății si a unei necesități energetice tot mai mari, a devenit un deziderat comun activarea legăturilor C-H din hidrocarburi saturate, abundente (alcani), si transformarea acestora pe cale catalitica in compuși cu funcționalitate organica variata, mult mai valoroși din punct de vedere industrial (alcooli, acizi, cetone etc). Astfel, activarea legăturilor C-H deosebit de stabile ale alcanilor, ceea ce părea pana nu demult o iluzie in comunitatea științifică, a fost posibila gratie design-ului unor complecși organometalici foarte reactivi, iar stagiul meu din USA se înscrie in aceasta direcție de cercetare.

Rezultatele stagiului postdoctoral din USA s-au concretizat prin publicarea a **10** lucrări ISI cu factor de impact cuprins intre **2** (*Polyhedron*) si **9** (*Chemical Science*), ***majoritatea*** dintre acestea (7 / 10) fiind elaborate ca ***prim autor*** si reprezentând exclusiv rezultatele cercetării proprii.

Impulsionat de rezultatele legate de activarea substraturilor de tip "small molecule" din postdoc-ul din SUA, am efectuat un stagiu postdoctoral de 1 an si 6 luni in Spania, la CiQUS – Universidad de Santiago de Compostela, unde mi-am propus descoperirea unor noi strategii de sinteza, mai specific sinteza si utilizarea unor complecși ai Rh(III) in reacții de anulare/ciclare, urmărirea reacțiilor catalitice prin izolarea complecșilor intermediari de reacție, formați înainte si după activarea legăturilor C-H din substratul organic utilizat. Acest demers deosebit de dificil a fost parțial încununat de succes, publicând un articol (*Organic Letters*, IF=6.8), si altul in *Angewandte Chemie* (IF=11.9).

Experiența dobândită in cercetarea fundamentala, in domeniul chimiei materialelor (PhD), chimiei-anorganice – organometalice si organice (postdoc-uri), mi-a permis calificarea multidisciplinară necesară pentru abordarea si dezvoltarea unor teme noi de cercetare

fundamentală si aplicativă in aceste domenii. Drept exemplu ilustrativ, propunerea de la programul de "Tinere echipe" 2018 (indicativ proiect finanțat TE 84 / 2022), propune extinderea conceptului de FLP (Frustrated Lewis Pairs) din chimia organometalica la nanocompozite stocatoare de hidrogen, pentru o capacitate reversibila de stocare superioara, si o cinetica îmbunătățita. Prin aceasta, proiectul TE 84 câștigat in calitate de Director de Proiect este o extensie a pregătirii postdoctorale din USA pe care doresc sa o dezvolt in tara, inclusiv sinteza organometalica prin producerea de MOF-uri substituite. In prezent mai sunt implicat in sinteza unor sisteme nanocompozite magnetice prin sinteze de tip *nanocasting*, si într-un proiect cu aplicabilitate in medicina-farmacie, respectiv imobilizarea unor derivați organici cu activitate antitumorala (de tipul *dopaminei*, folosita in tratamentul bolii Parkinson; teza PhD si TE 91 / 2022) pe suprafața nanoparticulelor de oxizi de fier printr-o strategie de funcționalizare a suprafeței acestora, precum si in modularea proprietăților magnetice in compuși de tip garnet $RE_3Fe_5O_{12}$.

Elemente de apreciere globala a activității

Consider următoarele elemente ca fiind indici importanți ai recunoașterii naționale si internaționale a activității mele didactice si științifice:

- ***42*** lucrări științifice, multe in reviste de prestigiu, ***2*** brevete naționale acordate
- Peste ***500*** citări in literatura de specialitate (excluzând autocitările)
- ***Referend*** de specialitate al unor publicații științifice (*Journal of the American Chemical Society*, *Catalysis Science & Technology*, *Nanoscience & Nanotechnology-Asia*, *Arabian Journal of Chemistry*, *Journal of Nanoparticle Research*, etc.)
- ***Premiul Societății de Chimie din Romania*** (acordat in 2002 **si** 2004) – Premiul I, concursul de chimie "Costin D. Nenițescu", ediția a X-a, secțiunea *chimie fizica*, 2002; si Premiul I, concursul profesional de *chimie analitica* "Petru Spacu", 2004
- ***Premii*** obținute la concursurile naționale de chimie (inclusiv premiul I), si diferite premii la fazele locale ale olimpiadelor de fizica, chimie si matematica (gimnaziu si liceu), precum si ***diploma de selecție in lotul olimpic lărgit de chimie*** (2013).
- ***2 burse postdoctorale (USA si Spania)*** *câștigate prin competiție*
- ***membru in colectivul editorial*** *in cadrul* ***Materials*** *(IF$_{2021}$=3.748, ISSN: 1996-1944)*
- ***membru*** *al* ***ACS*** *(American Chemical Society)*
- ***1 proiect național tip Tinere Echipe (TE 84 / 2022)*** câștigat in calitate de director de proiect vizând o tema de importanta actuala majora, sinteza si optimizarea unor nanocompozite bazate pe hidruri nanostructurate, pentru stocarea energiei "verzi", ceeace ilustrează capacitatea de a propune teme de cercetare noi, de actualitate.
- ***participant*** in proiecte naționale (tip PD, TE si PED) pe tematici de actualitate, in cadrul laboratorului 30 din INCDFM, dovedind capacitatea de lucru in echipa a candidatului, dar si inițiativa de a aborda si dezvolta tematici conexe experienței profesionale cumulate anterior.

Data: **30/04/2026** **Dr. Cezar Comanescu**