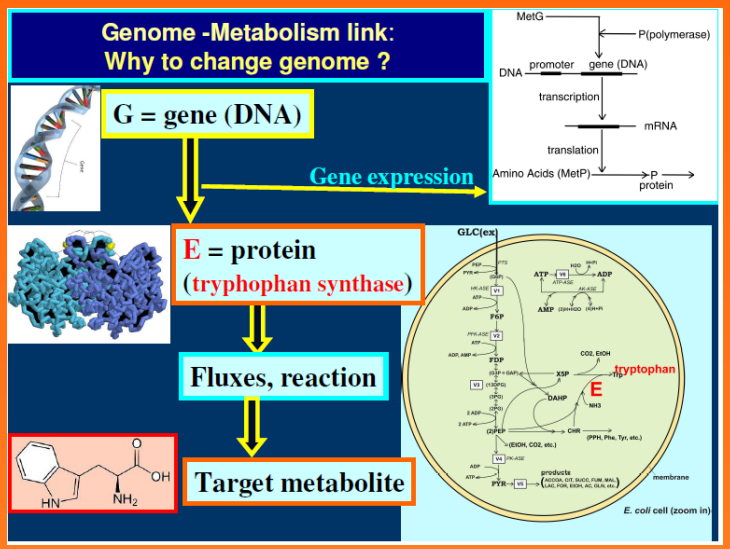
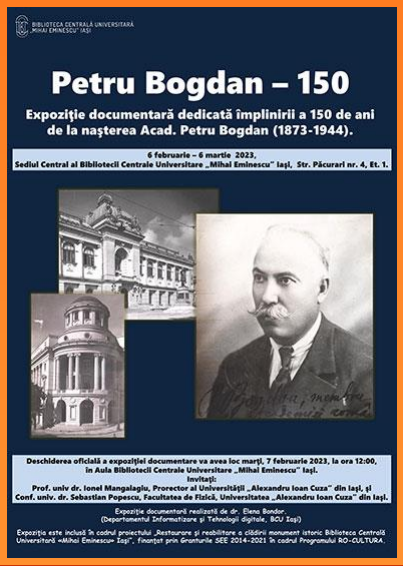
BULETINUL SOCIETĂŢII DE CHIMIE DIN ROMÂNIA FONDATĂ ÎN 1919

Nr. XXX (serie nouă) **1/2023**

1

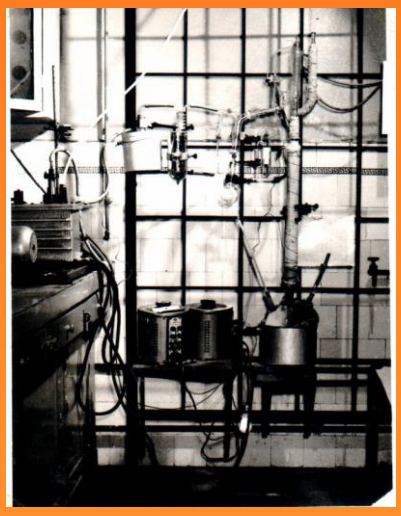


2



3

4



5

Irina-Claudia ALEXA, Oana-Irina PATRICIU, Luminiţa GROSU – *In memoriam* - Profesor univ. dr. ing. Lucian-Gheorghe GAVRILĂ

Gheorghe MARIA – Application of Biochemical Engineering Principles and Rules to Model Essential CCM Pathways in Living Cells, and to in-silico Design of GMO-s (Aplicarea principiilor și regulilor de inginerie biochimică la modelarea principalelor metabolisme din celulele vii și la proiectarea *in silico* a organismelor modificate genetic)

Monica NĂNESCU, Oana FLORESCU – Muzeul „PONI-CERNĂTESCU"- Perspectivă Expozițională

Daniela IVANOV – Petru Bogdan – 150 ani de la naştere

Eleonora-Mihaela UNGUREANU – Prof. dr. ing. Angela LUPU - specialist în tehnologie chimică organică

Andra-Cristina ENACHE, Petrişor SAMOILĂ, Marcela MIHAI – Sesiunea de Comunicări Ştiinţifice a Tinerilor Cercetători ICMPP – Poartă Deschisă Spre Viitor - MacroYouth 2022

Sînziana VLAD, Cătălina BĂLAN, Anca IFTENE, Mariana PINTEALĂ, Teodora RUSU – *Proiect* – BioMat4CAST – „Petru Poni" Institute of Macromolecular Chemistry Multi-Scale in Silico Laboratory for Complex and Smart Biomaterials

Premiile Academiei Române 2022. Secția de Științe Chimice

Manifestări științifice în 2023

Societatea de Chimie din România
Romanian Chemical Society

Universitatea POLITEHNICA din Bucureşti

e-mail: buletinschr@gmail.com
Pagina web: www.schr.org.ro
Bucureşti, România

BULETINUL
Societății de Chimie din România
1/2023

COLEGIUL EDITORIAL:

Coordonatori: Bogdan SIMIONESCU
Eleonora-Mihaela UNGUREANU

Membri: Marius ANDRUH, Gabriela Elena BADEA, Liana BOGATU, Alina BORA, Anca DUȚĂ CAPRĂ, Nicoleta CIOATERA, Lucian GAVRILĂ, Elena DIACU, Horia IOVU, Raluca ISOPESCU, Ana Maria JOȘCEANU, Carol LEHR, Marcela MIHAI, Adina MUSUC, Michaela Dina STĂNESCU, Cristina TODAȘCĂ, Aurel TĂBĂCARU, Monica TOSA

Copyright ©2013, Societatea de Chimie din România.
Toate drepturile asupra acestei ediții sunt rezervate **Societății de Chimie din România**
Adresa redacției: Universitatea POLITEHNICA din Bucureşti, Facultatea de Chimie Aplicată și Ştiința Materialelor, Str. Gh. Polizu 1-7, corp E, etaj 2, Cod 011061; Tel:4021402 39 77; e-mail: buletinschr@gmail.com, secretariatschr@yahoo.com, Pagina web: www.schr.org.ro

Coperta 1

1. *In memoriam* - Prof. dr. ing. Lucian Gavrilă
2. Legătura directă dintre o genă (G) din genomul celular, expresia enzimei codificate E și fluxul celular (de-a lungul seriei de reacții) care duce la sinteza metabolitului țintă (triptofan în acest exemplu).
3. Afișul expoziției documentare dedicat profesorului Petru Bogdan
4. Profesor dr. ing. Angela Lupu
5. Instalația de rectificare a nitrililor din laboratorul de tehnologia compușilor organici (TCO) realizată de Prof. Angela Lupu

Coperta 4

1. Sigla și sponsorii evenimentului științific MacroYouth 2022
2. Participanţi la SESIUNEA DE COMUNICĂRI ŞTIINŢIFICE A TINERILOR CERCETĂTORI ICMPP – POARTĂ DESCHISĂ SPRE VIITOR- MacroYouth 2022.
3. Echipa proiectului BioMat4CAST – Laboratorul *in silico* pentru biomateriale complexe și inteligente „Petru Poni” din Institutul de Chimie Macromoleculară „Petru Poni” (Multi-Scale in Silico Laboratory for Complex and Smart Biomaterials)
4. Holul de primire al muzeului Poni – Cernătescu
5. Petru Poni (1841-1925) - chimist, fizician, pedagog, mineralog, om politic român
6. Radu Cernătescu (1854-1958) – chimist, membru titular activ al Academiei Române, om politic român
7. Lucrări din expoziția memorialistică dedicată profesorului Petru Bogdan

Tehnoredactare:
Prof. dr. ing. Raluca ISOPESCU
Prof. dr. ing. Ana Maria JOȘCEANU
Dr. ing. Magdalena BUJDUVEANU
Informatician Liliana-Sonia MILITARU

ISSN 2066-2971

CUPRINS

Irina-Claudia ALEXA, Oana-Irina PATRICIU, Luminița GROSU
In memoriam - Profesor univ. dr. ing. Lucian-Gheorghe Gavrilă 4

Gheorghe MARIA
Application of Biochemical Engineering Principles and Rules to Model Essential CCM Pathways in Living Cells, and to in-silico Design of GMO-s (Aplicarea principiilor și regulilor de inginerie biochimică la modelarea principalelor metabolisme din celulele vii și la proiectarea *in silico* a organismelor modificate genetic)..... 11

Monica NĂNESCU, Oana FLORESCU
Muzeul „PONI-CERNĂTESCU”- Perspectivă Expozițională..... 34

Daniela IVANOV
Petru Bogdan – 150 ani de la naştere..... 45

Eleonora-Mihaela UNGUREANU
Profesor dr. ing. Angela LUPU – specialist în tehnologie chimică organică 50

Andra-Cristina ENACHE, Petrişor SAMOILĂ, Marcela MIHAI
Sesiunea de Comunicări Ştiinţifice a Tinerilor Cercetători ICMPP – Poartă Deschisă Spre Viitor – MacroYouth 2022 56

Sînziana VLAD, Cătălina BĂLAN, Anca IFTENE, Mariana PINTEALĂ, Teodora RUSU
Proiectul BioMat4CAST – „Petru Poni” Institute of Macromolecular Chemistry Multi-Scale in Silico Laboratory for Complex and Smart Biomaterials 59

Premiile Academiei Române 2022. Secția de Științe Chimice..... 63

Manifestări științifice 2023 64

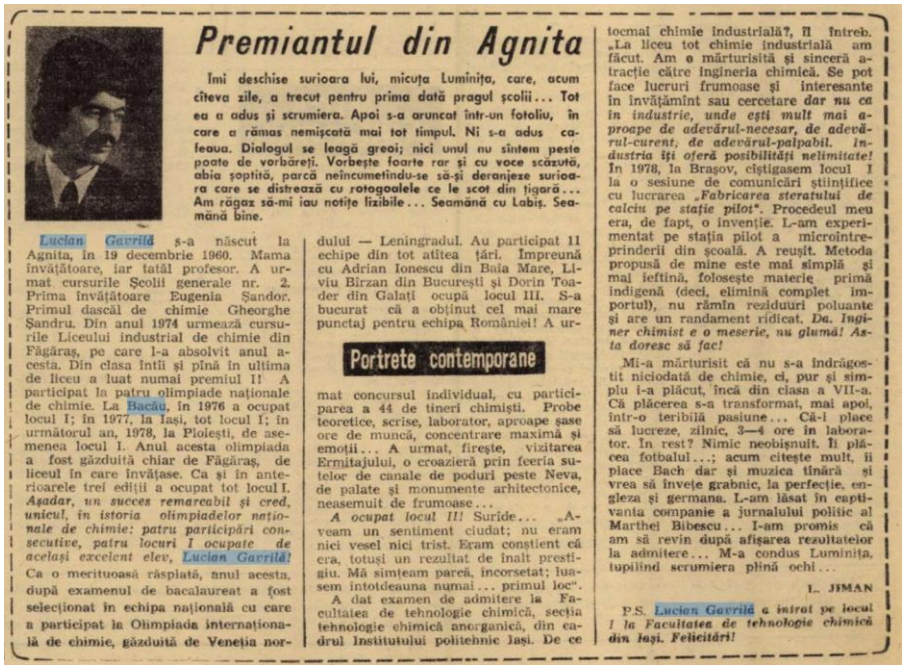
In memoriam

PROFESOR UNIV. DR. ING. LUCIAN-GHEORGHE GAVRILĂ (1960 – 2022)

Departamentul de Inginerie Chimică şi Alimentară din cadrul Facultăţii de Inginerie a Universităţii „Vasile Alecsandri” din Bacău a pierdut în data de 31 octombrie 2022 pe distinsul coleg și prieten, Prof. univ. dr. ing. Lucian-Gheorghe GAVRILĂ.

Născut pe 19 decembrie 1960 în localitatea Agnita, județul Sibiu, într-o familie de învăţători de la care a moştenit dorința de cunoaștere, tânărul Lucian Gavrilă a dezvoltat în timp o pasiune deosebită pentru chimie, pornind de la experimentele artizanale din pivnița casei. Ajuns elev al Liceului Industrial de Chimie din Făgăraş, s-a făcut remarcat prin rezultatele obţinute la numeroase concursuri naţionale, culminând cu selectarea în lotul României pentru Olimpiada Internațională de Chimie, de la Leningrad, în 1979 (Figura 1). La acea ediţie a olimpiadei, echipa României a câştigat locul al III-lea, Lucian Gavrilă obţinând locul al II-lea la proba individuală (Figura 2).

Figura 1. Lotul României, Olimpiada Internațională de Chimie, Leningrad, 1979
De la stânga la dreapta: Liviu Bîrzan, Lucian Gavrilă, Adriana Ionescu, Dorin Toader, Prof. dr. Constanța Gheorghiu, Prof. dr. Luminița Vlădescu (foto: arhiva personală)



Premiantul din Agnita

Îmi deschise surioara lui, micuța Luminița, care, acum cîteva zile, a trecut pentru prima dată pragul școlii... Tot ea a adus și scrumiera. Apoi s-a aruncat într-un fotoliu, în care a rămas nemișcată mai tot timpul. Ni s-a adus cafeaua. Dialogul se leagă greoi; nici unul nu sîntem peste poate de vorbăreți. Vorbește foarte rar și cu voce scăzută, abia șoptită, parcă neîncumetîndu-se să-și deranjeze surioara care se distrează cu rotogoalele ce le scot din țigară... Am răgaz să-mi iau notițe lizibile... Seamănă cu Labiș. Seamănă bine.

Lucian Gavrilă s-a născut la Agnita, în 19 decembrie 1960. Mama învățătoare, iar tatăl profesor. A urmat cursurile Școlii generale nr. 2. Prima învățătoare Eugenia Șandor. Primul dascăl de chimie Gheorghe Șandru. Din anul 1974 urmează cursurile Liceului industrial de chimie din Făgăraș, pe care l-a absolvit anul acesta. Din clasa întîi și pînă în ultima de liceu a luat numai premiul I! A participat la patru olimpiade naționale de chimie. La Bacău, în 1976 a ocupat locul I; în 1977, la Iași, tot locul I; în următorul an, 1978, la Ploiești, de asemenea locul I. Anul acesta olimpiada a fost găzduită chiar de Făgăraș, de liceul în care învățase. Ca și în anterioarele trei ediții a ocupat tot locul I. *Așadar, un succes remarcabil și cred, unicul, în istoria olimpiadelor naționale de chimie: patru participări consecutive, patru locuri I ocupate de același excelent elev, Lucian Gavrilă!* Ca o meritoasă răsplată, anul acesta, după examenul de bacalaureat a fost selecționat în echipa națională cu care a participat la Olimpiada internațională de chimie, găzduită de Veneția nordului — Leningradul. Au participat 11 echipe din tot atîtea țări. Împreună cu Adrian Ionescu din Baia Mare, Liviu Birzan din București și Dorin Toader din Galați ocupă locul III. S-a bucurat că a obținut cel mai mare punctaj pentru echipa României! A urmat concursul individual, cu participarea a 44 de tineri chimiști. Probe teoretice, scrise, laborator, aproape șase ore de muncă, concentrare maximă și emoții... A urmat, firește, vizitarea Ermitajului, o croazieră prin feeria sutelor de canale de poduri peste Neva, de palate și monumente arhitectonice, neasemuit de frumoase...

Portrete contemporane

A ocupat locul III! Surîde... „Aveam un sentiment ciudat; nu eram nici vesel nici trist. Eram conștient că era, totuși un rezultat de înalt prestigiu. Mă simțeam parcă, încorsetat; luasem întotdeauna numai... primul loc".

A dat examen de admitere la Facultatea de tehnologie chimică, secția tehnologie chimică anorganică, din cadrul Institutului politehnic Iași. De ce tocmai chimie industrială?, îl întreb. „La liceu tot chimie industrială am făcut. Am o mărturisită și sinceră atracție către ingineria chimică. Se pot face lucruri frumoase și interesante în învățămînt sau cercetare *dar nu ca în industrie, unde ești mult mai aproape de adevărul-necesar, de adevărul-curent, de adevărul-palpabil. Industria îți oferă posibilități nelimitate!* În 1978, la Brașov, cîștigasem locul I la o sesiune de comunicări științifice cu lucrarea *„Fabricarea steratului de calciu pe stație pilot"*. Procedeul meu era, de fapt, o invenție. L-am experimentat pe stația pilot a microîntreprinderii din școală. A reușit. Metoda propusă de mine este mai simplă și mai ieftină, folosește materie primă indigenă (deci, elimină complet importul), nu rămîn reziduuri poluante și are un randament ridicat. *Da. Inginer chimist e o meserie, nu glumă! Asta doresc să fac!*

Mi-a mărturisit că nu s-a îndrăgostit niciodată de chimie, ci, pur și simplu i-a plăcut, încă din clasa a VII-a. Că plăcerea s-a transformat, mai apoi, într-o teribilă pasiune... Că-l place să lucreze, zilnic, 3—4 ore în laborator. În rest? Nimic neobișnuit. Îi plăcea fotbalul...; acum citește mult, îi place Bach dar și muzica tînără și vrea să învețe grabnic, la perfecție, engleza și germana. L-am lăsat în captivanta companie a jurnalului politic al Marthei Bibescu... I-am promis că am să revin după afișarea rezultatelor la admitere... M-a condus Luminița, tupilînd scrumiera plină cu chi...

L. JIMAN

P.S. Lucian Gavrilă *a intrat pe locul I la Facultatea de tehnologie chimică din Iași. Felicitări!*

Figura 2. Extras din ziarul Tribuna Sibiului 1979

Pasiunea acerbă pentru chimie l-a condus mai târziu la Institutul Politehnic „Gheorghe Asachi" din Iași unde, în 1985, a absolvit cursurile Facultății de Tehnologie Chimică.

A fost o perioadă stagiar la Combinatul de Celuloză și Hârtie Letea Bacău. Dragostea pentru meseria de inginer chimist, dar și vocația de dascăl, și-au dat mâna și tânărul Lucian Gavrilă a devenit proaspăt asistent universitar la Facultatea de Chimie Industrială a Universităţii Tehnice „Gheorghe Asachi" din Iași. Începând cu anul 1993 s-a alăturat colectivului de cadre didactice titulare al Facultăţii de Inginerie, din cadrul Universității din Bacău (actuala Universitate „Vasile Alecsandri" din Bacău), după înfiinţarea în anul 1992 a specializării *Tehnologia şi Controlul Calităţii Produselor Alimentare*.

În anul 1999, a obţinut titlul de doctor în Domeniul *Chimie*, la Universitatea Tehnică „Gheorghe Asachi" din Iaşi, cu lucrarea intitulată „Cercetări privind posibilităţile de recuperare a nichelului din catalizatorii folosiţi în industria anorganică şi petrochimică", sub îndrumarea Domnului Profesor Ştefan Ivăşcan.

A parcurs toate gradele didactice, de la asistent la șef de lucrări, conferențiar și profesor în cadrul Departamentului de Inginerie Chimică și Alimentară de la Facultatea de Inginerie a universităţii băcăuane, iar între 2004 și 2011 a deținut funcția de Secretar Științific al Facultății de Inginerie. În această perioadă s-a dăruit mai mult ca niciodată facultății care era pentru el a doua familie, contribuind esențial la reușita multor acțiuni menite să consolideze prestigiul facultății.

Având în vedere faptul că în zonă a existat şi încă mai există un important potenţial în activităţi economice în care chimia are un rol deosebit, Profesorul Lucian Gavrilă a făcut parte din comitetul de iniţiativă a cadrelor didactice a Universităţii „Vasile Alecsandri" din Bacău, desfăşurând o intensă activitate în scopul promovării învăţământului şi cercetării în domeniul chimiei, incluzând afilierea la Societatea de Chimie din România în februarie 2003.

Începând din anul 2000 a fost Director al Laboratorului de „Ingineria Depoluării Activităţilor Industriale”, iar din 2006 a fost Director ştiinţific al Centrului de Cercetare „Chimie Aplicată şi Inginerie de Proces”.

Pe baza relaţiilor de colaborare stabilite pe plan local, naţional şi internaţional, în anul 2000, alături de membrii colectivului de Inginerie Chimică şi Alimentară (ICA) ai universităţii băcăuane şi cu susţinerea colegilor de la universităţile partenere din ţară şi din Franţa, Profesorul Lucian Gavrilă şi-a adus contribuţia la iniţierea şi organizarea primei ediţii a Colocviului Franco-Român de Chimie Aplicată – CoFrRoCA 2000. Această manifestare ştiinţifică menită să înlesnească schimburi ştiinţifice importante între specialiştii francofoni din domeniul chimiei a devenit un eveniment cunoscut şi apreciat printre cercetătorii din toată lumea, ajungând la a X-a ediţie în anul 2018 (Figura 3).

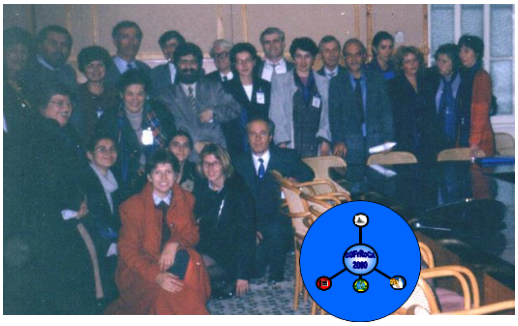
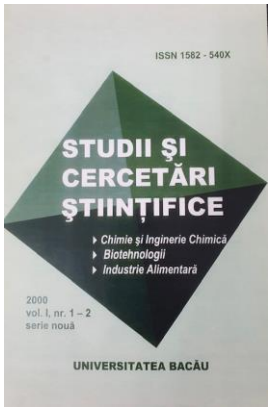


Figura 3. Prima ediţie a Colocviului Franco-Român de Chimie Aplicată – CoFrRoCA 2000 / a X-a ediţie a Colocviului Franco-Român de Chimie Aplicată – CoFrRoCA 2018

În acelaşi an - 2000, an de referinţă pentru dezvoltarea colectivului ICA, Profesorul Lucian Gavrilă s-a numărat printre co-fondatorii revistei „*Studii și Cercetări Științifice. Seria Chimie și Inginerie Chimică, Biotehnologii, Industrie Alimentară*” (*Scientific Study & Research - Chemistry & Chemical Engineering, Biotechnology, Food Industry*) al cărei Editor-șef a fost în perioada 2000-2012. Munca sa asiduă a dat roade, revista fiind inclusă în numeroase baze de date, iar începând cu anul 2015 este indexată în Web of Science Core Collection - ESCI (Emerging Sources Citation Index) (Figura 4).



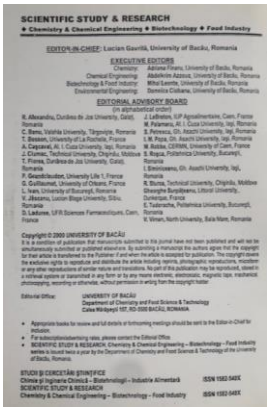


Figura 4. Revista „Studii și Cercetări Științifice. Seria Chimie și Inginerie Chimică, Biotehnologii, Industrie Alimentară” (Scientific Study & Research - Chemistry & Chemical Engineering, Biotechnology, Food Industry) 2000/2023

Profesorul Lucian Gavrilă a fost membru în Comitetul Științific a numeroase publicații:

• *Scientific Study & Research: Chemistry and Chemical Engineering – Biotechnology – Food Engineering* (Alma Mater, Bacău, Romania);

• *Annals. Food Science and Technology* (Valahia University Press, Târgovişte, Romania);

• *Buletinul Societăţii de Chimie din România* (Romanian Chemical Society, Bucharest, Romania).

De asemenea, a fost recenzor la următoarele publicaţii cotate ISI:

• *Applied Biochemistry and Biotechnology* (Springer);
• *Journal of Food Engineering* (Elsevier);
• *Letters in Organic Chemistry* (Bentham Science Publishers);
• *Separation and Purification Technology* (Elsevier);
• *Membrane Water Treatment* (TECHNO Press);
• *Canadian Journal of Microbiology* (NRC Research Press).

S-a implicat activ în comunitatea academică, atât ca membru în comitetele de organizare a numeroase manifestări științifice naționale și internaționale, cât și în calitate de coordonator în diferite parteneriate încheiate cu universități din țară și străinătate.

Membru în Comitetul de organizare şi Comitetul ştiinţific al:

• Colloque Franco-Roumain de Chimie Appliquée – CoFrRoCA, ediţiile 2000 (Bacău, România), 2002 (Bacău, România), 2004 (Slănic Moldova, România), 2006 (Clermont-Ferrand, Franţa), 2008 (Bacău, România), 2010 (Orléans, Franţa), 2012 (Bacău, România), 2014 (Montpellier, Franța), 2016 (Clermont-Ferrand, Franța); 2018 (Bacău, România);

• International Conference of Constructive Design and Technological Optimization in Machine Building - OPROTEH, Bacău, România, (2005, 2007, 2009, 2011).

• Integrated Systems for Agri-Food Production SIPA'07, Sibiu, Romania (2007);

• Innovative Materials and Processes, Iaşi, Romania (2008, 2009, 2010, 2011);

• International Conference of Applied Sciences. Chemistry and Chemical Engineering CISA, Bacău, Romania (2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015);

• IEEE International Conference on e-Health and Bioengineering, EHB, Iaşi, Romania (2011, 2013, 2015, 2017);

• International Conference on Chemical Engineering - ICCE, Iași, Romania (2014, 2016, 2018).

De asemenea, a avut calitatea de expert evaluator pentru competiţii de granturi de cercetare la: Consiliul Naţional al Cercetării Ştiinţifice (CNCS), Bulgarian National Science Fund (NSFB), French National Institute for Agricultural Research (INRA), precum şi expert evaluator al ARACIS (Romanian Agency for Quality Assurance in Higher Education) pentru domeniul Inginerie Chimică.

În perioada 1996 – 2000 a fost și Consultant tehnico-științific pe probleme de tratare, condiționare și epurare a apelor industriale la firma Gulf Coast Chemicals Inc., Houston, Texas, USA.

A desfășurat în același timp și o bogată activitate publicistică concretizată în peste 10 cărți de specialitate în domeniile în care şi-a desfăşurat activitatea didactică: *Chimie Anorganică*, *Fenomene de transfer*, *Operaţii Unitare în Industria Alimentară şi Biotehnologii*, *Tratarea şi Epurarea Apelor Uzate*, *Protecția Mediului în Industrie*, *Depoluarea Efluenților* etc. (Figura 5).

De asemenea, activitatea ştiinţifică a profesorului Lucian Gavrilă numără peste 100 de lucrări apărute în jurnale cu înaltă vizibilitate internaţională sau prezentate la conferințe din țară și străinătate, ce stau mărturie pentru dorința domniei sale de a transmite din cunoștințele sale și celor din jur (Figura 6).

Figura 5. Cărţi şi manuale publicate de Profesorul Lucian Gavrilă

Figura 6. Primul congres științific internațional la care a participat Prof. Gavrilă (International Congress Stainless Stell 1996 (Düsseldorf, Germania) (foto: arhiva personală) / Vizita laboratorului « Génie des Procédés » de la Universitatea din Orléans în cadrul Atelierului Franco-Român « Promotion de la chimie verte » 2010 (Orléans, Franţa)

Profesorul Lucian Gavrilă a fost foarte apreciat atât de către colegii din ţară, cât şi străinătate, printre cele mai fructuoase colaborări se numără cele cu Prof. Alexandru Szép de la Universitatea „Sapientia" din Cluj-Napoca (filiala Miercurea-Ciuc) şi cea cu Prof. Gholamreza Djelveh de la Institut Pascal (Clermont-Ferrand, Franţa) (Figura 7).

Figura 7. Profesorul Lucian Gavrilă împreună cu o mică parte din colegii şi colaboratorii domniei sale

De la stânga la dreapta: Irina-Claudia Alexa (Bacău), Prof. Yves Troin (Clermont-Ferrand), Luminiţa Grosu (Bacău), Oana-Irina Patriciu (Bacău), Prof. Lucian Gavrilă, Prof. Adriana-Luminiţa Fînaru (Bacău), Prof. Gholamreza Djelveh (Clermont-Ferrand), Prof. Gérald Guillaumet (Orléans)

A fost, de asemenea, un dascăl prețuit și respectat, un om dedicat, analitic, onest și demn, cu o rigurozitate ieşită din comun, înclinat spre detaliu, deschis spre nou, cu un discurs atent și presărat cu umor și ironii fine.
Domnul Profesor Lucian Gavrilă a îndrumat destinele a mii de studenţi, cărora le-a fost un dascăl apropiat. Răspundea mereu prezent la activităţile organizate de studenţi cu diferite ocazii, aceştia înconjurându-l cu multă căldură de fiecare dată (Figura 8).

Figura 8 . Fotografii de la serbările oreganizate de către studenţi, la care prof. Gavrilă participa cu mult drag

Şi-a lăsat amprenta asupra multor generații de studenţi, cărora le-a transmis cu pricepere și devotament din tainele disciplinelor predate în cei 30 ani de activitate academică.

Pentru o parte dintre ei, a fost un adevărat mentor, reușind să aprindă în ei dorința de a urma o carieră academică și de a i se alătura în nobila profesie de dascăl în cadrul facultății. Astfel, a format cu succes discipoli cărora le-a arătat că profesionalismul, seriozitatea și rigoarea sunt indispensabile atât în activitatea didactică cât și în cercetarea științifică, fiind un exemplu de generozitate, erudiție și distinsă conduită.

Omul Lucian Gavrilă ne purta cu atâta farmec prin pasiunile sale: călătoria, fotografia, scrisul şi arta culinară, pe care le îmbina cu măiestrie, creând adevărate poveşti în care punea suflet și care vor rămâne nemuritoare (blog personal *Food and beyond...*- https://luciangavrila.ro/).

Prin întreaga carieră, Profesorul LUCIAN GAVRILĂ va rămâne în amintirea tuturor ca un om cu o vastă cultură generală tehnică, o persoană riguroasă, profund morală, optimistă şi echilibrată!

Şef lucrări dr. ing. Irina-Claudia ALEXA
irinaalexa@ub.ro
Şef lucrări dr. ing. Oana-Irina PATRICIU
oana.patriciu@ub.ro
Şef lucrări dr. ing. Luminiţa GROSU
lumig@ub.ro
Universitatea "Vasile Alecsandri" din Bacău
Facultatea de Inginerie
Departamentul de Inginerie Chimică şi Alimentară

Acest material a fost redactat cu acordul familiei Prof. Lucian Gavrilă.

Cercetări recente în România

Application of Biochemical Engineering Principles and Rules to Model Essential CCM Pathways in Living Cells, and to *in-silico* Design of GMO-s

Gheorghe MARIA[1,2]

[1]Dept. of Chemical and Biochemical Engineering, Politehnica University of Bucharest, Polizu Str. 1-7, Bucharest 011061, Romania
[2]Romanian Academy, Chemical Sciences section, Calea Victoriei 125, Bucharest 010071, Romania
gmaria99m@hotmail.com , https://en.wikipedia.org/wiki/Gheorghe_Maria

Rezumat

Lucrarea este o recenzie privind principalele instrumente de modelare matematică și de calcul dezvoltate de Maria [2017A-B, 2018, 2023], inspirate din principiile și tehnicile de calcul ale ingineriei chimice și biochimice (**CBEP**) și din teoria controlului sistemelor neliniare pentru re-proiectarea *in-silico* a circuitelor de reglare genetică (**GRC**) în celulele vii, pentru a obține micro-organisme modificate genetic (**GMO**-s) cu caracteristici dorite și pentru a re-proiecta unele părți esențiale ale "metabolismului central al carbonului" (**CCM**) în celule vii. Pentru a obține astfel de rezultate sunt utilizate modele cinetice celulare complexe *deterministe, modulare, structurate* **(MSDKM**) (cu variabile continue și bazate pe mecanismul reacțiilor metabolice celulare). Sunt menționate și o serie de exemple sugestive (studii de caz).

Abstract

The paper is aiming at reviewing the main math modelling and computational tools developed by Maria [2017A-B, 2018, 2023], and inspired from the chemical and biochemical engineering principles (**CBEP**), and from the control theory of nonlinear systems to *in-silico* re-design genetic regulation circuits (**GRC**) in living cells to obtain genetically modified micro-organisms (**GMO**-s) of desired characteristics, and to re-design some essential parts of the "central carbon metabolism" (**CCM**) in living cells. To derive such results, complex *deterministic, modular, structured* cell kinetic models (**MSDKM**) (with continuous variables, and based on cellular metabolic reaction mechanisms) are used. A number of suggestive examples (case studies) are mentioned as well.

Keywords:

systems biology; synthetic biology**;** metabolic engineering; bioinformatics; cell metabolism; deterministic modelling; individual gene expression regulatory modules (**GERM**); genetic regulatory circuits (**GRC**); chemical and biochemical engineering principles (**CBEP**); Pareto design of **GMO** *E.coli* to get maximum succinate; design of cloned *E.coli* to get maximum mercury uptake from wastewaters; design **GMO** *E.coli* to obtain a genetic switch molecular biosensor; design **GMO**

E.coli with a desired glycolytic oscillator; design **GMO** *E. coli* to maximize the tryptophan (TRP) synthesis

1. Introduction

The current approach in biochemical engineering and bioengineering practice for solving design, optimization and control problems based on the math models of industrial biological reactors is to use unstructured Monod (for cell culture reactor) or Michaelis-Menten (if only enzymatic reactions are retained) by ignoring detailed representations of metabolic cellular processes. The applied engineering concepts/principles and rules/procedures are similar to those used in chemical and biochemical engineering (**CBE**) and in the control theory of nonlinear systems [Maria, 2022; Woinaroschy, 2016; Gani et al., 2020]. However, by considering only the macroscopic key-variables of the process (biomass, substrate, and product concentrations), these *unstructured* (apparent, global) math models do not adequately reflect the metabolic changes of the bioreactor biomass, being inadequate to accurately predict the cellular response to the medium disturbances through the self-regulated cellular metabolism. These models may be satisfactory for an approximate modeling of the biological process, but not for modeling of cellular metabolic processes, and they can not make any correlation between bioreactor operation and continuous adaptation of biomass metabolism to the variable conditions of the bioreactor.

The current trend to more accurately solve such engineering problems is to use *deterministic, modular, structured cellular kinetic models* (with continuous variables, and based on cellular metabolic reaction mechanism) (**MCSMD**), that consider, with a degree of detail suitable to the each approached case study, and dependent on the available experimental information, the cellular metabolic reactions and the cell key-species dynamics. These structured models can satisfactorily represent the key steps of the **CCM** at a cell scale, by also including reaction modules responsible for the synthesis of cellular metabolites of interest for the industrial biosynthesis. The same structured cellular kinetic models can satisfactorily simulate on a deterministic basis the self-regulation of cell metabolism for its rapid adaptation to the changing bioreactor reaction environment, by means of complex "genetic regulatory circuits" (**GRC**-s) of cell processes, which include chains of individual „gene expression regulatory modules" (**GERM**-s).

In this context, this paper reviewed some rules used to construct **MCSMD**, deterministic models, with continuous variables, similar to those used in chemical and biochemical engineering (**CBE**), by applying the concepts/principles and rules/procedures specific to **CBE**. These dynamic models combine the characteristics of the cellular metabolic process involving species participating to the essential reaction modules of **CCM** at a nano-scopic level, with the macro-scopic processes involving the state variables of the industrial bioreactor. In this way, more accurate predictions are obtained both for the dynamics of the biological process at the cellular level, and for the dynamics of the operating parameters of the analyzed industrial bioreactor.

The immediate application of these hybrid structured **MCSMD** models are the followings: ***(1)*** a more accurate determination of the optimal operating policy of an industrial bioreactor, and over a much longer time horizon; ***(2)*** *in-silico* evaluation of

the cell metabolic fluxes (that is the cell enzymatic reaction rates at quasi-steady-state **QSS**, the so-called homeostatic cell growing conditions); ***(3)*** based on the metabolic fluxes, these models are used to *in-silico* design of **GMO**-s of desired characteristics ("motifs").

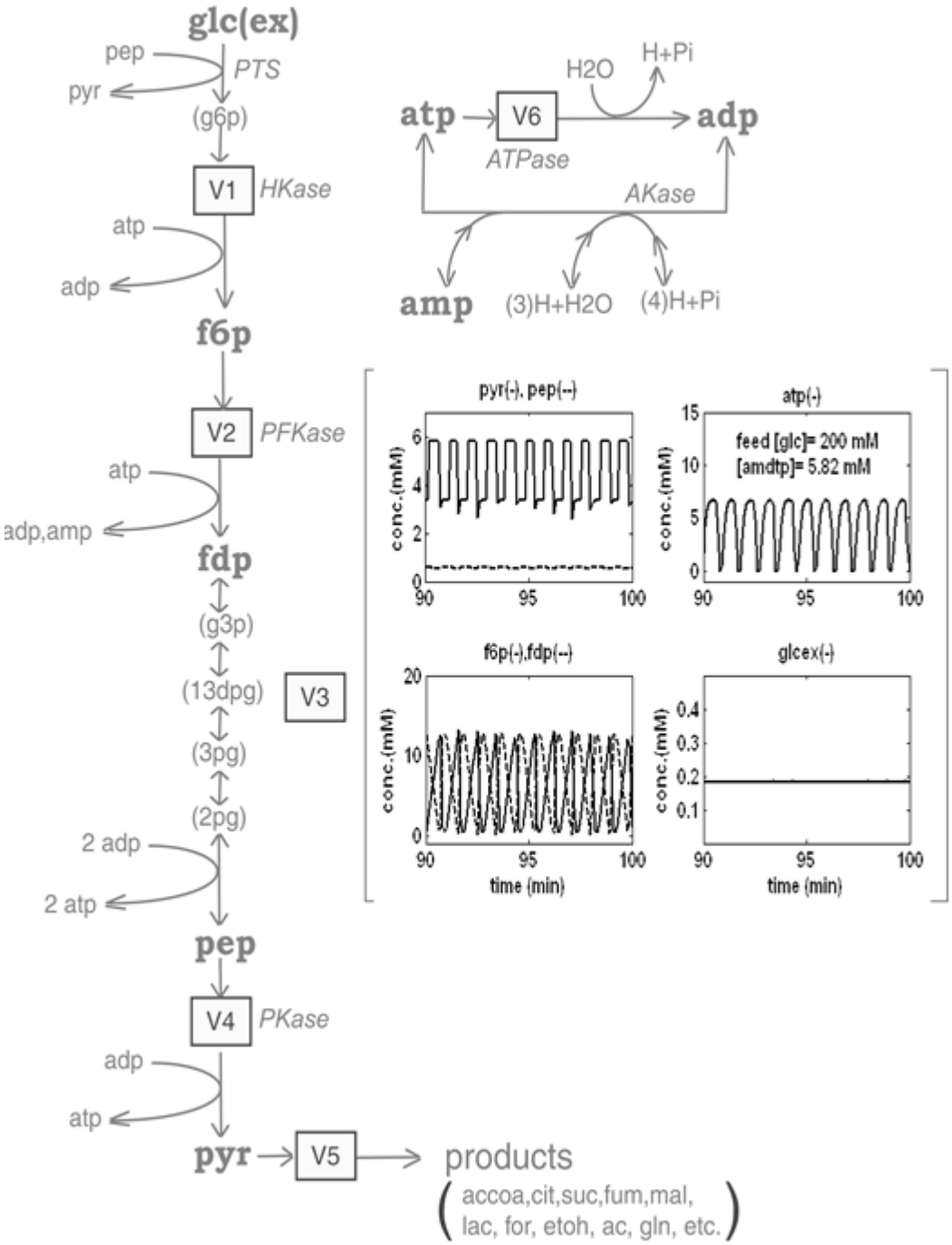


Figure 1. The simplified reaction scheme of glycolysis, and simulation of the conditions for occurrence of glycolytic oscillations. Adapted after [Maria, 2014A; Maria et al., 2020C] with the courtesy of CABEQ Jl.

These extended kinetic MCSMD models are further linked to the bioreactor dynamic models (including macro-scale state variables), thus resulting hybrid structured modular dynamic (kinetic) models (HSMDM) proved to successfully solve more accurately difficult bioengineering problems [Maria, 2018, 2023].

In such HSMDM, the cell-scale model part (including nano-level state variables) is linked to the biological reactor macro-scale state variables for improving both the model prediction quality and its validity range. Thus, such hybrid HSMDM math models realize: (i) a higher degree of the prediction accuracy, and (ii) a higher degree of the prediction detailing degree for the bioreactor dynamic parameters (at a macro- and nanoscale) and, (iii) the prediction of the biomass metabolism adaptation over tens of cell cycles to the variation of the operating conditions in the bioreactor.

As proved in the literature, the in-silico (math/kinetic model-based) numerical analysis of biochemical or biological processes by using MCSMD or HSMDM models are proved to be not only an essential but also an extremely beneficial tool for engineering evaluations aiming (a) to determine with a higher accuracy the optimal operating policies of complex multi-enzymatic reactors, [Straathof and Adlercreutz, 2005; Maria, 2012; Maria and Crisan, 2017; Maria, 2020B; Maria and Peptănaru, 2021; Maria et al., 2022], or (b) of bioreactors including the biomass adaptation to the variable bioreactor environment over hundreds of cell cycles [Maria, 2020A; Maria and Luta, 2013; Maria and Renea, 2021; DiBiasio, 1989; Miskovic et al., 2015], or even (c) to easier and quickly in-silico design, simulate, and analyse the performances/characteristics of various GMO-s alternatives, by using the “metabolic flux analysis” (MFA) [Miskovic et al., 2015; Stephanopoulos et al., 1998; Maranas and Hatzimanikatis, 2005; Feist et al., 2007; Hatzimanikatis et al., 1996], together with the gene-knock-out technique, or with the cell cloning alternative using target plasmids [Maria and Luta, 2013; Maria, 2021; Maria, 2018; Hatzimanikatis et al., 1996; Maria et al., 2011; Maria, 2023].

2. Biochemical engineering principles, concepts and rules applied to the construction of MCSMD models

One of the original achievements, of exceptional importance, brought by [Maria, 2017A-B, 2018, 2023], and reviewed and exemplified here is the way by which the concepts, principles, and calculation techniques of chemical and biochemical engineering (CBE) are successfully applied to the construction of hybrid dynamic models of the MCSMD type used at: (i) Modeling of some essential steps in CCM in cell cultures with application to high-precision optimization of the bioreactors operating policy; (ii) Calculation of cellular fluxes [the reaction rates of cellular enzymatic reactions, at quasi-stationary conditions (homeostasis) of balanced cell growth], with the immediate goal of in-silico design (based on mathematical models) of GMO-s; (iii) Simulating the adaptation of the cellular biomass to the variable conditions in the bioreactor, during a large number (hundreds) of cellular cycles; (iv) determining the operating conditions of the bioreactors that induce an oscillating dynamics of some essential sub-processes (modules) of the CCM, such as glycolysis, ATP regeneration, TRP synthesis, etc. (see the schematically represented CCM modules in Figure 4).

The CBE concepts and principles, classic and modern, are well systematized by [Maria, 2017C; Maria, 2022; Woinaroschy, 2016; Gani et al., 2020]. Thus, a brief presentation of the evolution of the theory and practice of CBE made by [Woinaroschy. 2016] revealed its usefulness when new technologies are developed that pursue the industrialization of new (bio)chemical processes. The main paradigms of CBE, in historical order, are the following:

1).- The first paradigm - *unit operations* - appeared as a necessity to systematize the physical-chemical processes involved as a result of the "explosion" of chemical industrial applications from the end of the 19th century.

2).- The second paradigm - *the transport phenomena* - appeared at the end of the 50s as a consequence of the need for a deep, scientific knowledge of the phenomena to explain what happens inside the unit operations.

3).- The third paradigm - *product engineering* - appeared in the second part of the 20th century when the importance of the properties and quality of chemical products became essential due to the competition on the market for them. Consequently, additional and even new fundamental approaches were needed.

4).- The fourth paradigm - *sustainable chemical engineering*. Nowadays, the (bio-)chemical industry is a huge consumer of raw materials, materials and energy and has a strong ecological impact. Therefore, the (bio-)chemical industry could not remain outside the requirements of sustainability. Consequently, the bases and principles of the development of a sustainable chemical engineering were formulated.

A detailed discussion of these paradigms and the evolution of CBE is made by [Woinaroschy, 2016; Maria, 2022]. The basic principles and tools used by CBE are also briefly displayed in (Figure 2). Most of them can also be "translated" into "Systems Biology" and „Bioinformatics” (Figure 3, and Figure 6) to design, by using mathematical models and numerical engineering simulators, genetically modified microorganisms (**GMO**-s) used to optimize industrial biosyntheses [Maria, 2017A-B; Maria, 2018, 2023; Maria et al., 2019].

This paragraph briefly reviews the main concepts and principles used to solve difficult biochemical or bioengineering problems by using **MCSMD** extended structured cellular kinetic models (which include nano-scale, cellular state variables) integrated into hybrid math models **HSMDM** that characterize the dynamics of biological reactors evaluated on a macroscopic scale through state variables measured directly and used to control the industrial process.

Exemplification of the use of such hybrid dynamic **HSMDM** math models that include state variables at the cellular level connected to the state variables of the industrial bioreactor (macro-scopic, molar scale) in biochemical engineering calculations is done by [Maria, 2021] with the development of a **HSMDM** hybrid model used for the study some essential modules of **CCM** in *E.coli* cell cultures, with application to the optimization of the operating policy of an industrial bioreactor. The example is made for a **MASCR** (mechanically agitated semi-continuous) bioreactor type with the aim of maximizing the production of tryptophan (TRP).

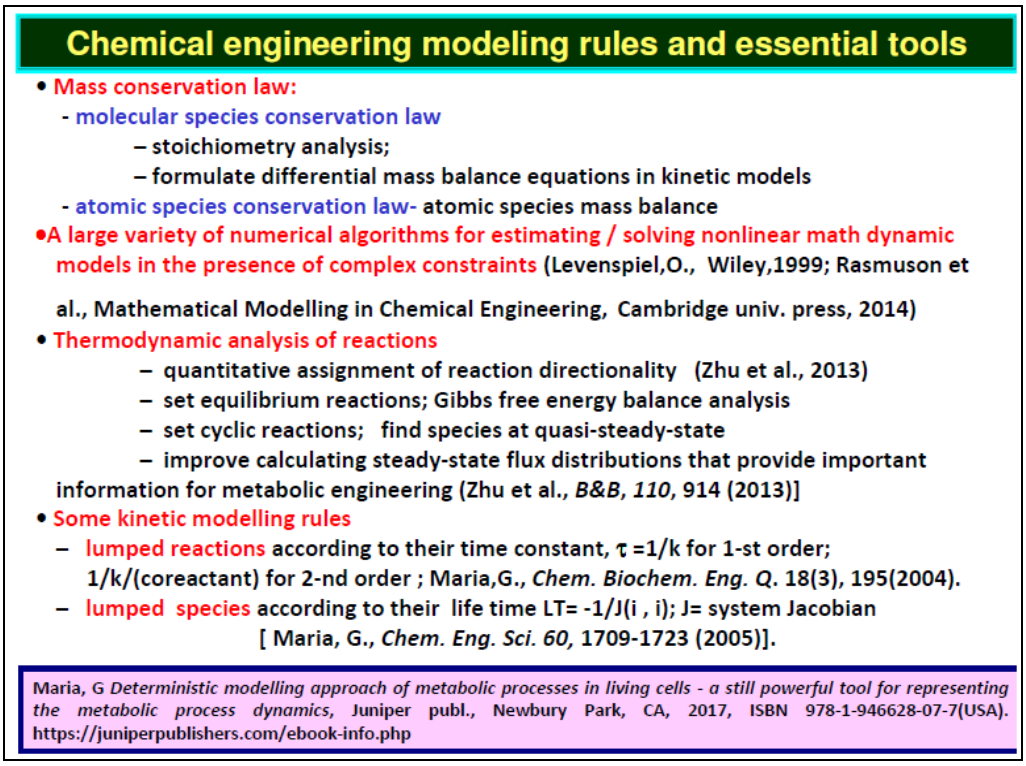


Figure 2. Chemical engineering algorithms and concepts applied in biochemical engineering and "Systems Biology", according to [Maria, 2017A; Maria, 2023].

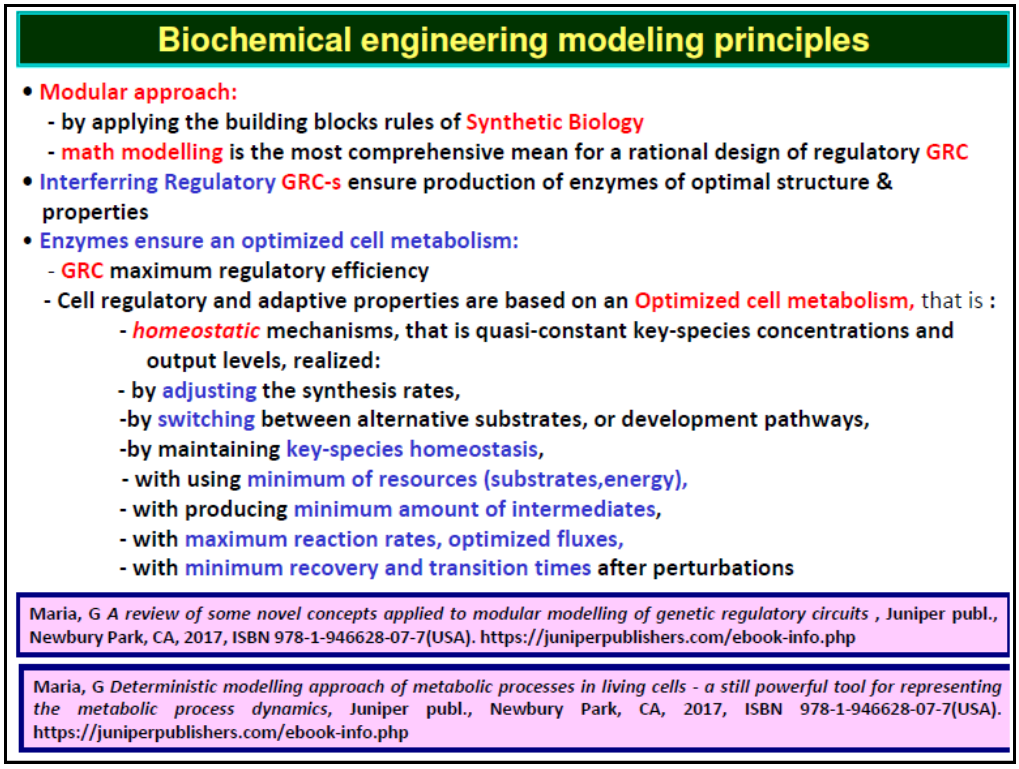


Figure 3. Algorithms and concepts of biochemical engineering, and modelling rules of biochemical processes (including the cellular ones) applied in *Bioinformatics* [Maria, 2017A-B; Maria, 2018; Maria, 2023; Maria et al., 2022B].

A similar application is presented by [Maria, 2021], who, using experimental kinetic data collected from a fed-batch bioreactor (**FBR**), obtains a hybrid structured modular kinetic model **HSMDM**, able of simulating the dynamics of the **FBR**, both at the cellular (nano-scopic) level, as well as at the bioreactor (macro-molecular) level. The used **FBR** includes an *in-silico* design **GMO** *E. coli* culture used for the production of tryptophan (TRP). Finally, this **HSMDM** complex hybrid dynamic model was used by [Maria and Renea, 2021] to obtain the optimal operating policy.

Thus, compared to a simple batch bioreactor (**BR**) using a wild *E. coli* cell culture, the **TRP** production was increased with 73% (50% due to the novel **GMO** *E. coli* strain, and 23% due to the model-based optimization of the variable feeding of the **FBR**).

As pointed out by [Maria, 2017A-B; Maria, 2018, Maria, 2023], the main advantages of *deterministic* kinetic models (based on the bioprocess mechanism) that use *continuous variables* come from the use of experience, concepts, mathematical representation, calculation procedures and algorithms of reactors and of **CBE**. The expressions of reaction rates from deterministic mathematical (kinetic) models are the usual ones of **CBE**, i.e. Michaelis-Menten or Hill type [Maria, 2017B]. Consequently, a large number of deterministic **CCM** kinetic models have been published in the specialized literature, such as [Maria, 2014A; Miskovic et al., 2015; Kurata and Sugimoto, 2017; Chassagnole et al., 2002]. A short discussion on this topic is made by [Maria, 2014A; Maria, 2021]. Such a kinetic model based on **CCM** (**Figure 4**, and **Figure 5**) was used by [Maria, 2021; Maria and Renea, 2021] to optimize the production of TRP in a **FBR**. As a rule, a **CCM** model must necessarily include several inter-connected reaction modules, respectively: glycolysis, a **GLC** (glucose) import system of the type of the phosphotransferase system (**PTS**), or an equivalent [more efficient, of the type "galactose permease/ glucokinase" (GalP/Glk)], the regeneration system and **ATP** depleted in enzymatic reactions, the pentose-phosphate reaction module (**PPP**) and the tricarboxylic acid cycle (**TCA**, or the Krebs cycle) [Maria et al., 2011; Mary, 2021].

The emergent fields of in-silico design of **GMO**-s are the followings:

Systems Biology = “the science of discovering, modelling, understanding and ultimately engineering at the molecular level the dynamic relationships between the biological molecules that define living organisms.” [Hood L., Head Inst. Systems Biology, Seattle, USA]. “Systems biology is the computational and mathematical analysis and modeling of complex biological systems. It is a biology-based interdisciplinary field of study that focuses on complex interactions within biological systems, using a holistic approach (holism instead of the more traditional reductionism) to biological research.”[wikipedia, 2023].

Systems Biology is one of the modern tools which uses advanced simulation math models for *in-silico* design of **GMO**-s that possess desired functions and characteristics.

Synthetic Biology = "putting engineering into biology” [Heinemann and Panke, 2006].

Metabolic engineering = "is the *in-silico* practice of optimizing genetic and regulatory processes within cells to increase the cell's production of a certain substances (excretable metabolites)." [wikipedia, 2023; Stephanopoulos et al., 1998]

Bioinformatics = "a field that develops methods and software tools for understanding biological data, in particular when the data sets are large and complex. It combines biology, (bio)chemistry, physics, computer science, mathematics, statistics, informatics, to analyze and interpret the biological data. Bioinformatics has been used for *in-silico* analyses of biological queries using computational and statistical techniques." [wikipedia, 2023].

There is an indissoluble link between these new emerging fields, because they use a similar mathematical apparatus. Such correspondence between *Bioinformatics* and *Systems Biology* is shown in (**Figure 6**).

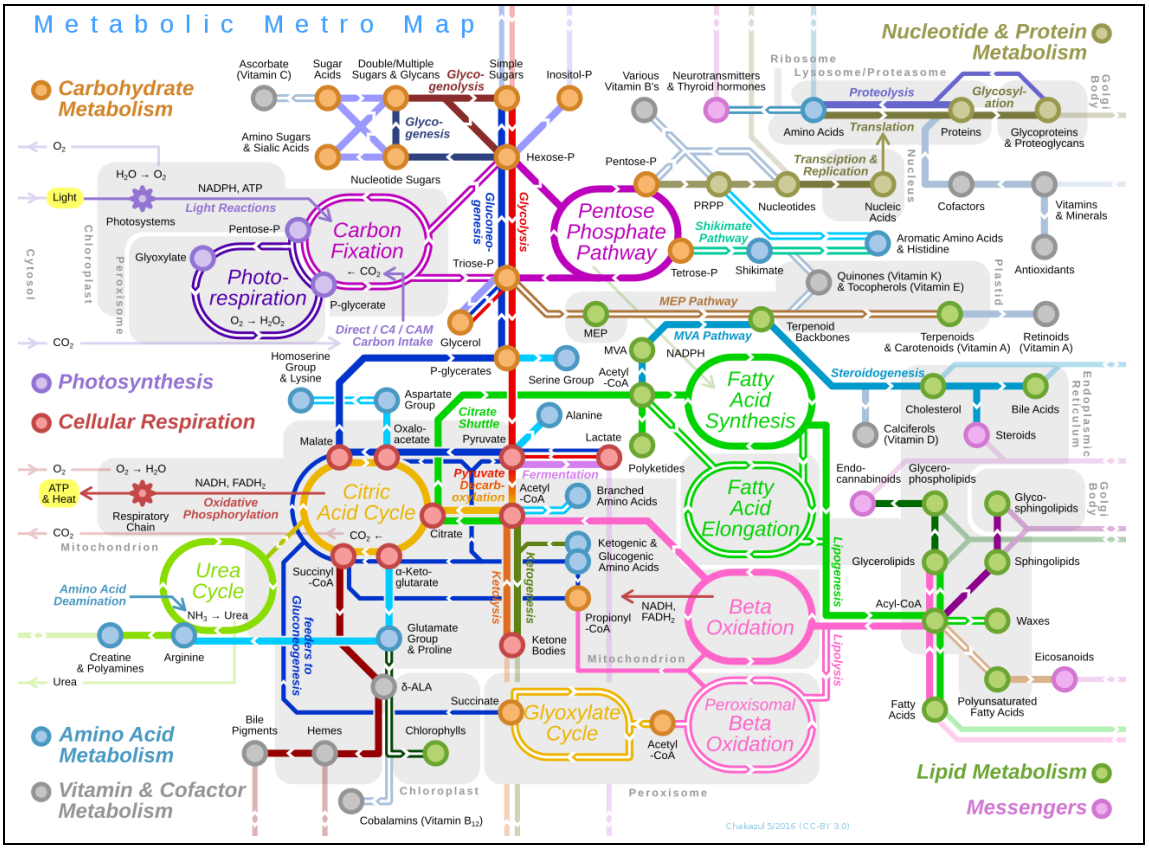


Figure 4. Schematic diagram of the CCM in an eukaryotic cell. Source = https://en.wikipedia.org/wiki/File:Metabolic_Metro_Map.svg

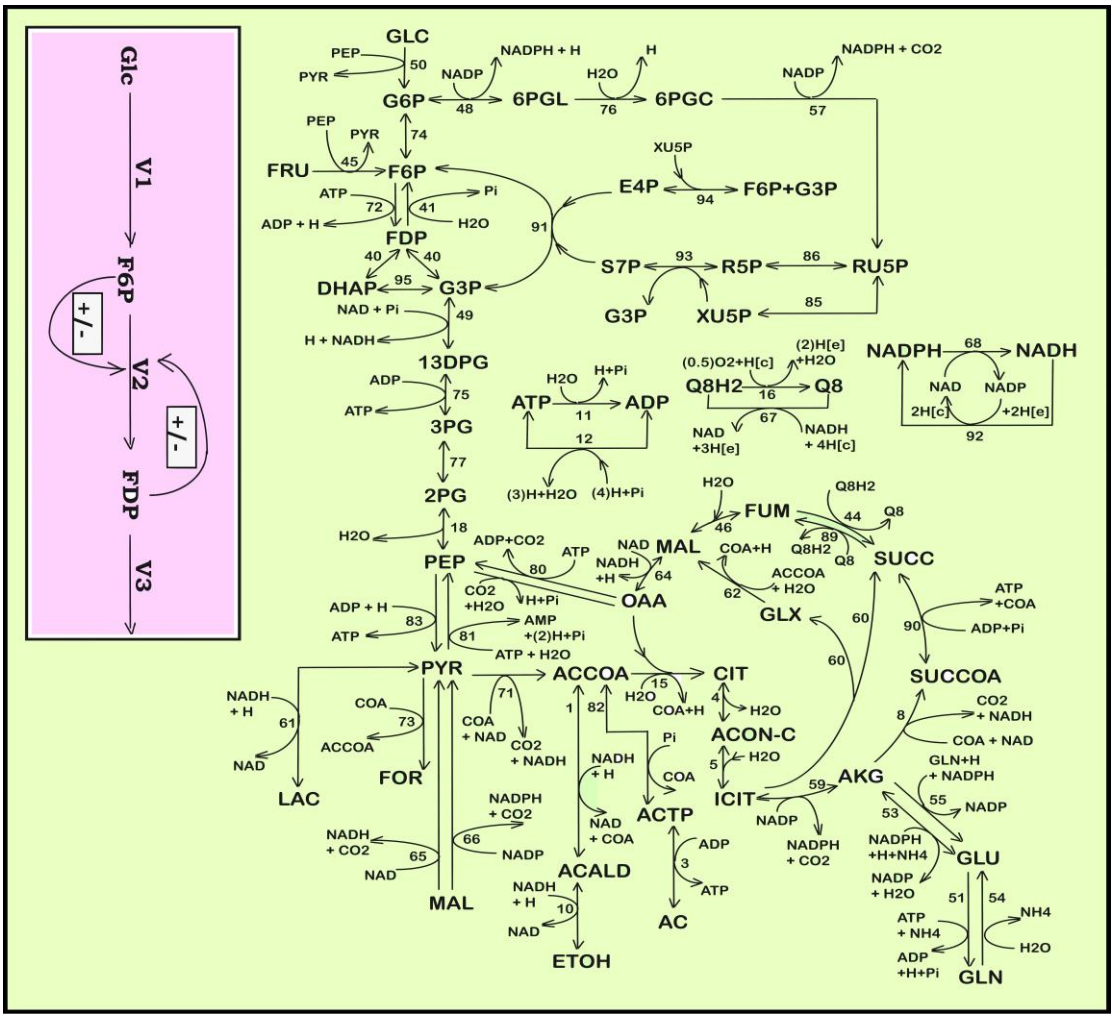


Figure 5. Simplified representation of the **CCM** pathway in *E. coli* of [Edwards & Palsson (2000)] (the "wild" cell including the PTS-system). Fluxes characterizing the membranar transport [*Metabolite*(e) ↔ *Metabolite*(c)] and the exchange with environment have been omitted from the plot (see [Maria et al., 2011] for details, and for explanations regarding the numbered reactions). Notations: [e]= environment; [c]=cytosol. Adapted from [Maria et al., 2011] with the courtesy of CABEQ Jl. The considered 72 metabolites, the stoichiometry of the 95 numbered reactions and the net fluxes for specified conditions are given by [Maria et al., 2011]. The left pink rectangle indicates the chemical node inducing glycolytic oscillations [Maria, 2020C; Maria et al., 2018B]. Notations [+], and [-] denotes the feedback positive or negative regulatory loops respectively. **GLC** = glucose; **F6P**= fructose-6-phosphate; **FDP** = fructose-1,6-biphosphate; see the abbreviation list for species names; **V1-V6** = lumped reaction rates indicated in **Figure 1**, and detailed by [Maria, 2014A]. Species notations are explained in the abbreviation list.

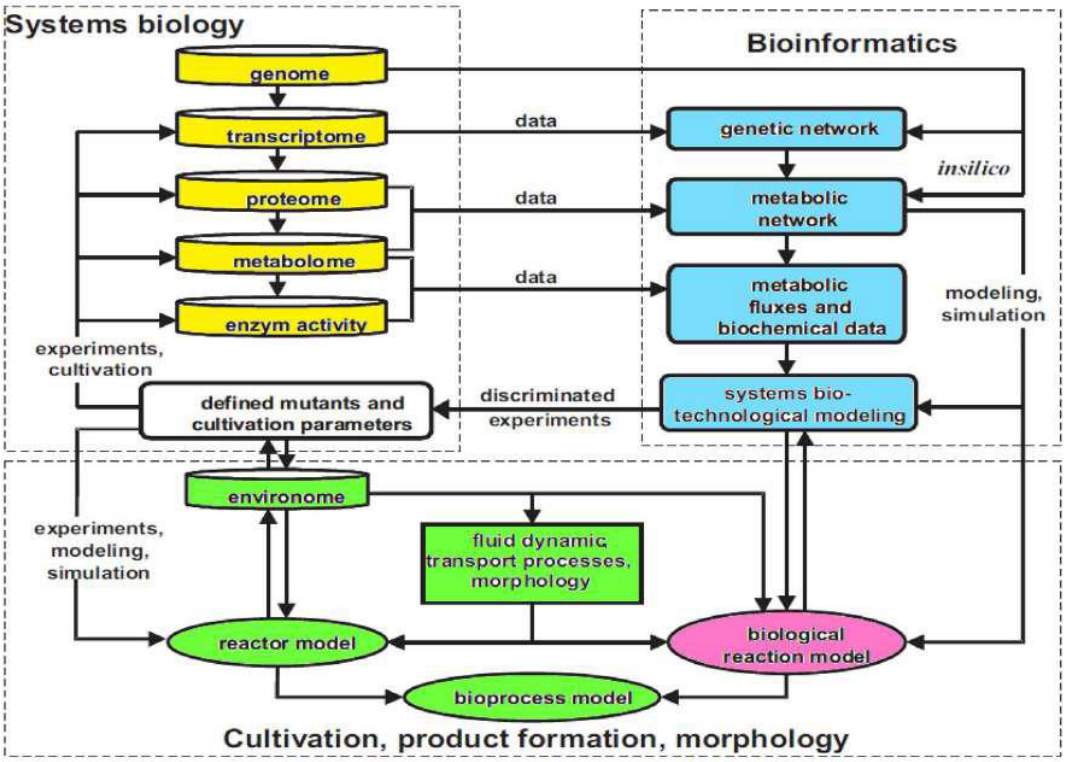


Figure 6. Correspondence between *Bioinformatics* and **Systems Biology**, according to [Hempel, 2006].

The parameters (i.e. reaction rate constants) of the **ODE** (differential-algebraic equations set) deterministic kinetic models **HSMDM** are estimated by using the concepts and calculation procedures related to **CBE** from (**Figure 2**, **Figure 3**) [Maria, 2004B; Maria, 2017B; Maria, 2018; Maria, 2023], supplemented with statistical estimation theory methods [Maria, 2004B], by using: ***(a)*** either dynamic (kinetic) data obtained in a chemostat, operated in a transient regime (for example, applying pulse-like disturbances in the influent of the bioreactor [Chassagnole et al., 2002], or ***(b)*** using data of the system at steady state (metabolite concentrations at steady state) obtained in quasi-stationary conditions of homeostasis (i.e. balanced cell growth, [Maria, 2017A-B]), by solving the mathematical model **HSMDM** written under stationary conditions, in the form of a nonlinear algebraic system dCj/dt = 0 (where "j" indexes the cellular species considered individually or grouped; C= species concentrations; t = time).

The resulted model parameter estimation problem is a complex **MINLP** problem due to the model and constraints high nonlinearity, leading to a non-convex objective function and search domain. Because the usual **MINLP** solvers included in the commercial math platforms (such as Matlab™) fail in finding a global solution for such a multi-modal **MINLP** problem, the effective adaptive random search optimization algorithm of [Maria, 2003, 2004B, 1998] has been used successfully [Maria, 2018, 2023].

Parameters estimation of the cellular kinetic **ODE** models **MCSMD** must meet the restrictions of physico-chemical significance related to the stoichiometry of

metabolic reactions. In addition, the rate constants must be limited to values consistent with cytosolic diffusion processes and in accordance with the principles of thermodynamic balance. [Maria, 2018]. This approach must respect the restrictions of the system considered as a whole ("whole-cell") [Maria 2017A-B; Maria et al., 2018D], respectively the cellular dynamic models must meet optimality restrictions. Among them are the followings:

(i).- reaction rates must be maximum, but with rates constants limited by the diffusion processes;

(ii).- the total content of enzymes (proteins) of the cell is limited by the isotonicity constraint (i.e. constant osmotic pressure, equal to that of the environment);

(iii).- the total energy of the cell (ATP) and reducing agent resources (NADH) are limited;

(iv).- the reaction intermediates level must be minimal;

(v).- the cellular kinetic model under stationary conditions (at homeostasis) must be stable, i.e. the key stationary compounds must return as quickly as possible to the same stationary state after the end of a dynamic (impulse-like) perturbation, or to the same state, or to another stationary state, following a stationary disturbance [Heinrich and Schuster, 1996; Maria, 2017B];

(vi).- the key species concentrations must be constant at homeostasis conditions.

Most of these (i-vi) aspects are extensivelly discussed and exemplified by [Maria, 2014A; Maria, 2017A-B; Maria, 2018; Maria et al., 2018D; Maria, 2023].

The use of kinetic **ODE** - **MCSMD** models has the advantage of being easily approachable from the point of view of numerical calculation, being flexible, easy to extend and suitable to be characterized using the **CBE** tools and the theory of nonlinear systems [Heinrich and Schuster, 1996], taking into account properties of the control system, ie: dynamics, forward and reverse control loops, and optimality. Such an ODE kinetic modelling approach of **CCM** allows the use of powerful tools, namely numerical algorithms and classic **CBE** modeling concepts summarized in (**Figure 2** and **Figure 3**). The most important of these, used in the activity of kinetic modeling of (bio)chemical and/or biological processes, are the following: [Maria, 2017A-B; Maria, 2018; Maria, 2023]

i).- Conservation Law of molecular species (stoichiometric analysis; check for consistency the differential mass balance set of all considered chemical species);

ii).- Conservation Law of atomic species (mass balance of atomic species);

iii).-Thermodynamic analysis of reactions (i.e. the quantitative evaluation of the directionality of reactions) [Haraldsdottir et al., 2012];

iv).- Establishing equilibrium reactions, by analyzing their energy balance using the Gibbs function; detection of cyclic reactions; identification of the species in the quasi-stationary state (possibly leading to the replacement of their associated differential balance equation with an algebraic one).

(v).- Improved evaluation (based on a re-written kinetic model under the stationary state) of the distribution of cellular metabolic fluxes at homeostasis. These mass fluxes (i.e. the enzymatic reaction rates under stationary conditions) provide important information for the metabolic engineering rules [Zhu et al., 2013], but also allow application of species or reaction grouping rules from the extended **ODE** model [Maria, 2004B; Maria, 2019]. The analysis of cell

fluxes also allows evaluation the way in which the external resources are used by the cell and allows directing actions to modify them for the desired (industrial) purpose, by using methods related to genetic engineering and the *in-silico* design of genetically modified micro-organisms (**GMO**).

3. Examples

Exemplifications of using such modular kinetic **ODE** - **MCSMD** models to characterize cellular **GRC** and **CCM** for *in-silico* design of **GMO** of industrial use include improving several bioprocesses of industrial interest. These case studies of high complexity are extensively described by [Maria, 2018; Maria, 2023; Maria, 2023B]:

1) *In-silico* design of a genetic switch in *E. coli* with the role of a molecular biosensor [Maria, 2014B; Maria, 2018];
2) *In-silico* design of a cloned *E. coli* (with mer-plasmids), with a maximized capacity of mercury uptake from wastewaters [Maria and Luta, 2013; Maria, 2010];
3) *In-silico* design of a genetically modified *E. coli* (by using a gene knock-out technique) with a maximized capacity of succinate (SUCC) production [Maria et al., 2011];
4) *In-silico* design of a genetically modified *E. coli* with a modified glycolytic oscillator [Maria et al., 2019A; Maria et al., 2019B; Maria, 2020C];
5) *In-silico* modulate the bioreactor operating conditions with an *in-silico* design genetically modified *E. coli* to maximize the production of tryptophan [Maria et al., 2018E; Maria, 2021; Maria and Renea, 2021].
6) *In-silico* re-configure the metabolic pathway for Phenyl-alanine synthesis in *E. coli* [10] to maximize its production [Hatzimanikatis et al., 1996; Maria, 2018].

4. A relevant case study

To illustrate in a simple way how a deterministic **MCSMD**structured kinetic model can be used for the *in-silico* design of a **GMO**, the case study from the literature [Hatzimanikatis et al., 1996; Maria, 2018] is presented here (**Figure 7**).

This simplified **MCSMD** model represents only a part of the *E. coli* **CCM**, but includes the essential target module of metabolic reactions responsible for the synthesis of an amino acid (phenyl-alanine - **PA**). In *biological terms*, the problem consists in finding a suitable **GMO** , that is a mutant of *E. coli* , with modified metabolic reactions to ensure the maximization of PA production. Implicitly, these modifications of the CCM involve the modification of the structure and activity of the enzymes involved in PA synthesis, but also the modification of the existing regulatory loops. The required genetic re-configuration will change the kinetics and efficiency characteristics of the target metabolic reactions catalyzed by the enzymes encoded by the target genes.

From a *mathematical point of view*, the *in-silico* design problem of such a **GMO** is "translated" through an optimization problem. The mathematical problem is one of mixed nonlinear programming (**MINLP**), with search variables both of continuous type, but also of integer type. Specifically, the search variables are the

following [Maria, 2004B]:
(1).- the tuning loops, in the form of integer variables which take the value "0" when the loop is to be removed, or the value "1" when it is to be retained in the **CCM** pathway;
(2).- the enzyme expression levels (concentrations, nM), in the form of continuous search variables [Maria, 2018, 2023];
(3).- the **MINLP** problem must also account for stoichiometric and thermodynamic restrictions of the deterministic **MCSMD**structured kinetic model.

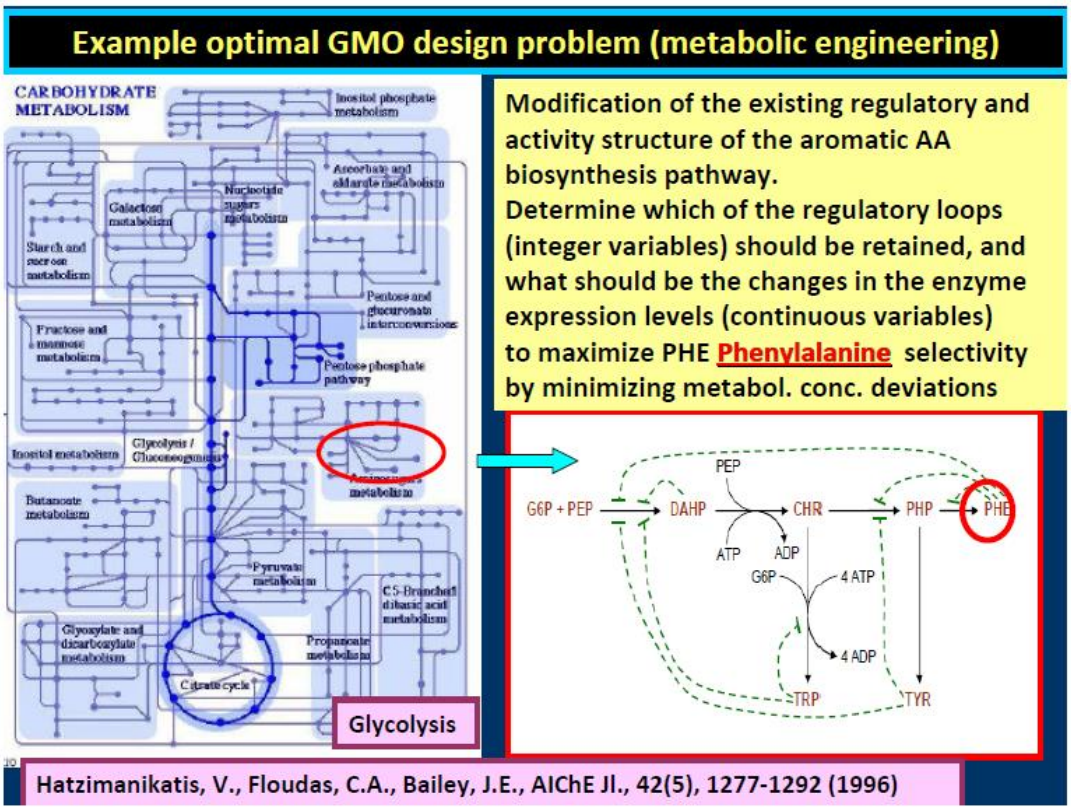


Figure 7. A simple example of an *in-silico* design problem of an *E. coli* **GMO** to re-configure the metabolic pathway for the synthesis of phenyl-alanine, in the sense of its production amplification, without causing major disturbances in the other cellular syntheses. Adapted from [Maria, 2018], after [Hatzimanikatis et al., 1996]

To solve this complex optimization problem, two simultaneous opposite objectives are formulated, respectively:
(a).- maximizing the selectivity (production) in PA, but with
(b).- minimizing the concentration deviations of the cellular metabolites involved in this cellular synthesis from the homeostatic (stationary, average) levels of them. This optimization objective is necessary and essential to avoid an unbalanced cell growth, with the exhaustion of its resources, i.e. a non-viable cell.

The elegant solution to this optimization problem is the so-called "Pareto-optimal front" (**Figure 8**). This curve drawn with the two opposing objective functions as coordinates [i.e. the above ***(a)*** and ***(b)***] represents the geometric location of the best compromise between the two opposing objectives. The choice of a certain

point-solution on this curve is a arbitrary, and subjective. Such a choice must consider practical aspects related to the physical realization of these mutants. For example, two **GMO** mutants are chosen from the Pareto curve shown in (**Figure 8**).

As can be seen, there are big differences between the two alternatives. Thus, the regulatory loops are different, characterized by different reaction rate expressions, and enzymes concentrations. However, both GMO mutants are fully achievable through genetic engineering procedures (see below). The solution indicated by the blue arrow is more favorable, because it ensures a high selectivity in PA, with a reasonable disturbance of the stationary state for the other species involved.

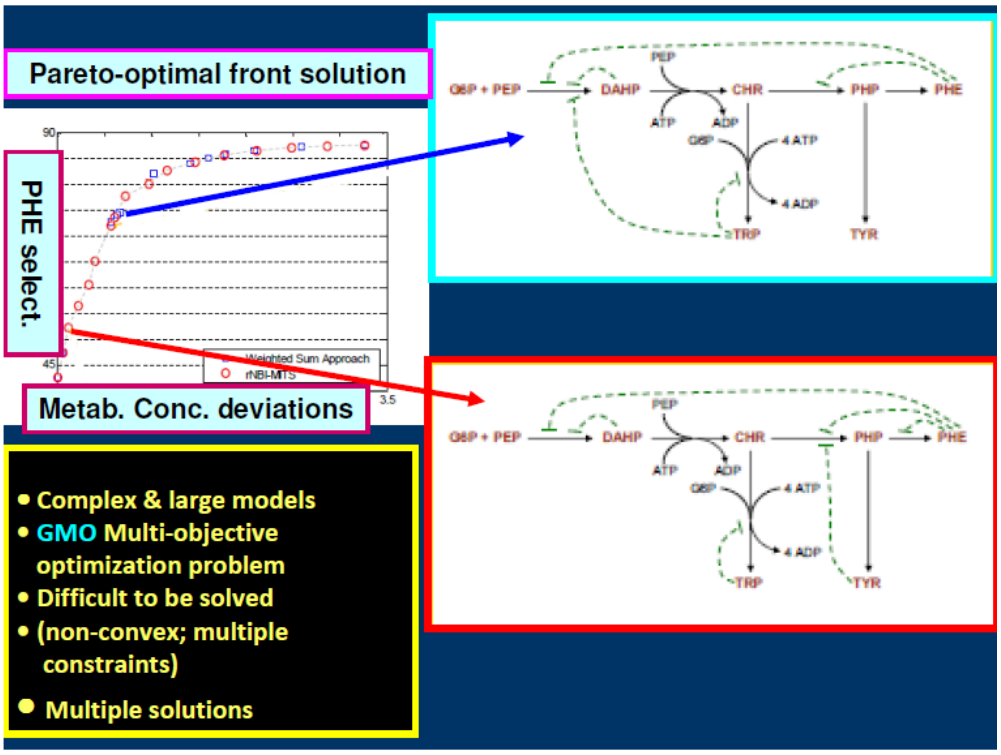


Figure 8. The Pareto-optimal front resulted from solving the *in-silico* design problem to obtain an *E. coli* **GMO** by re-configuration of the **CCM**, and the metabolic pathway used for the synthesis of phenyl-alanine (PA, PHE), in the sense of its amplification, without causing major disturbances in the other cell syntheses. The problem includes two opposite objectives, respectively: (i) the maximum selectivity in phenyl-alanine, with (ii) causing minimal deviations in the stationary concentrations of the other key metabolites of the cellular **CCM**. The two optimal solutions selected from the Pareto front (top left) lead to two alternative **GMO**-s metabolic configurations (right).

From a practical (biological) point of view, obtaining a GMO mutant starting from a "wild" strain can be done in several ways, as below mentioned. In fact, the direct gene (G) -metabolic flow relationship is achieved through the expressed enzyme (E), as exemplified in (Figure 9), following the following steps [Alberts et al., 2002; Maria, 2018, 2023]:

(i).- to modify a certain cell flow, the properties of the enzyme (protein) in question must be modified; that is,

(ii).- the expression of the gene (G) encoding the enzyme (E) in question must be modified accordingly;

These requirements can be done in various ways, that is (**Figure 10**) [Alberts et al., 2002]:

(iii).- either removing that gene from the genome ("gene knockout")[Maria et al., 2011];

(iv).- either replacing it with another gene from another microorganism;

(v).- amplify the target gene level (by cloning the cell with target plasmids), which leads to an over-expression of the target enzyme [Maria and Luta, 2013].

(vi).- modification of the gene/enzymes (G/P) pairs that control all the reactions that interfere and strongly influence the target reaction in question (**Figure 9**, **Figure 10**, **Figure 11**).

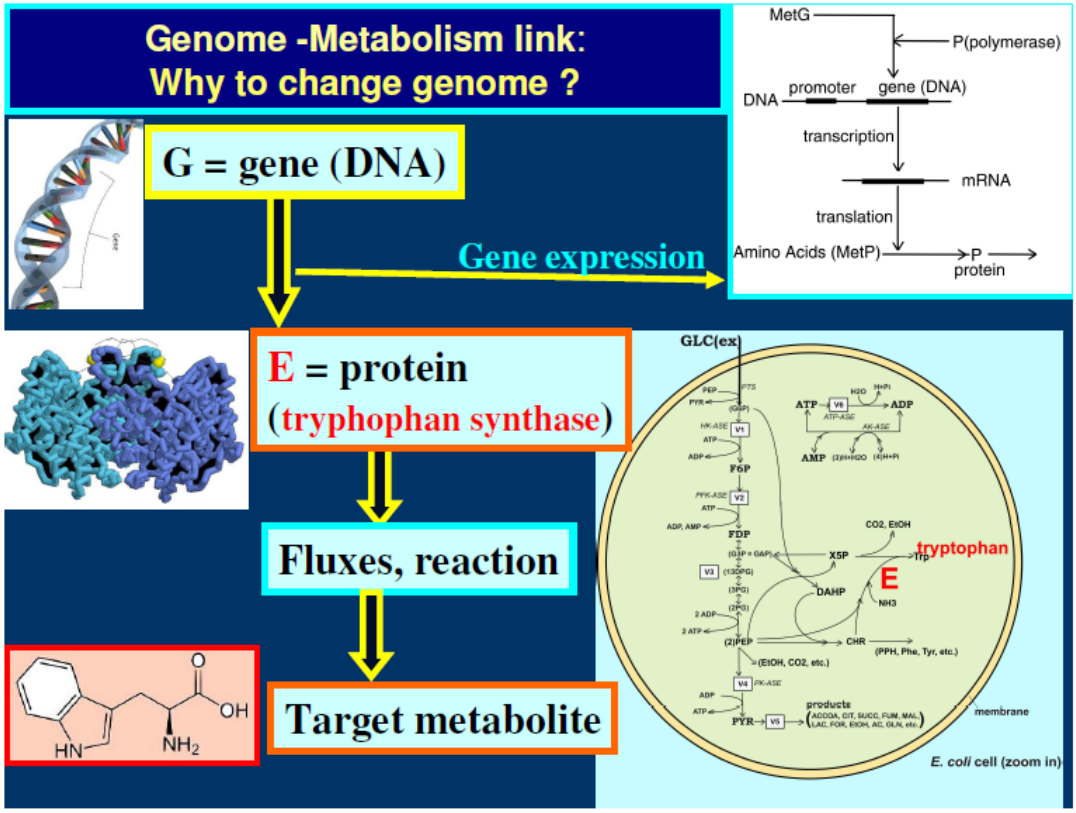


Figure 9. The direct link between a gene (G) in the cellular genome, the expression of the encoded enzyme E, and the cellular flux (over the series of reactions) that leads to the target metabolite synthesis (tryptophan here). Adapted after [Maria, 2018; Maria, 2023; Maria, 2021].

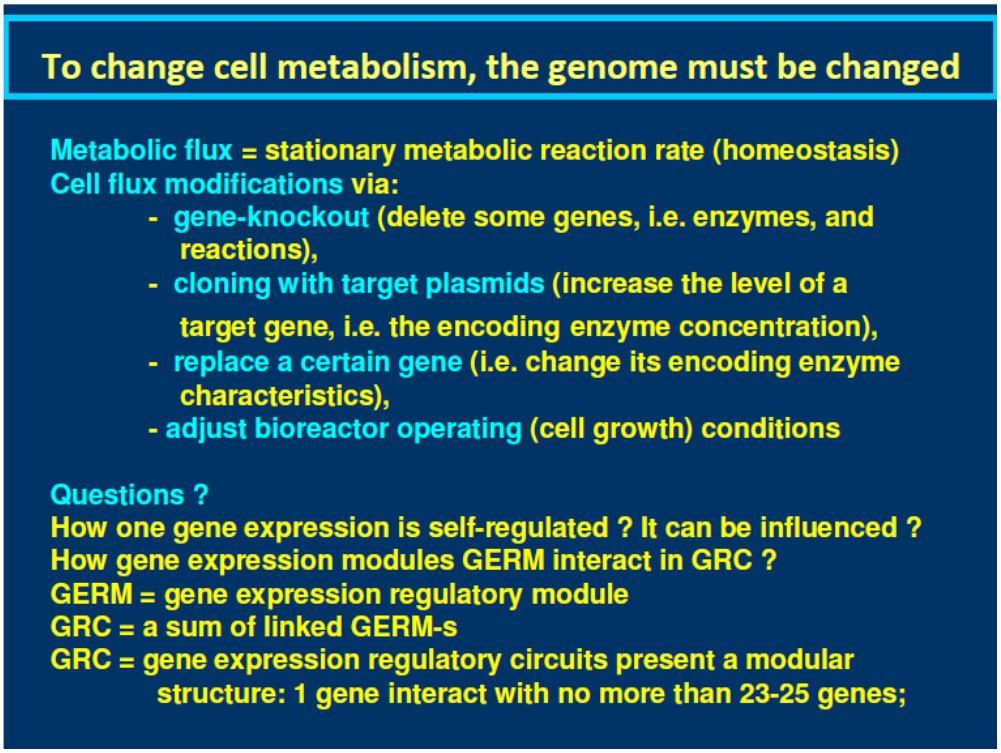


Figure 10. Some common biological methods to modify the cellular genome [Alberts et al., 2002].

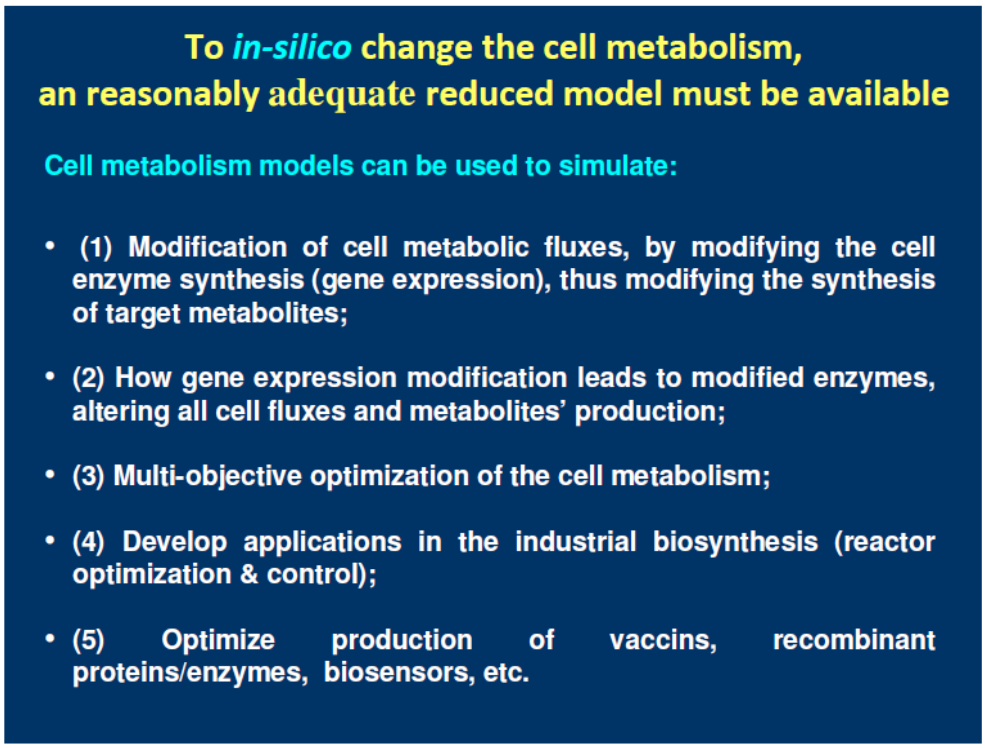


Figure 11. Problems to be solved when applying *in-silico* GMO design, according to [Maria, 2018].

Figure 12 schematically exemplifies, in the case of one or more interferring enzymes, the connection principle between the gene expression, their encoded enzymes, and the target reactions catalyzed by these enzymes.

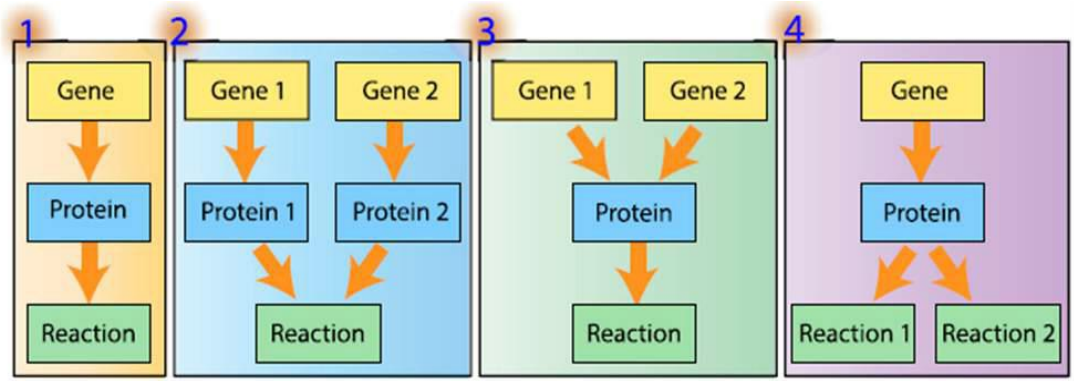


Figure 12. Examples of gene-protein-reaction associations. (1) Simple association, in which a single gene encodes a single enzyme. (2) Isozymes, in which several genes encode distinct proteins that perform the same function (catalyse only one reaction). (3) Multi-meric protein complex, in which several genes encoding distinct protein subunits come together to form a single active enzyme. (4) Multi-functional protein, where a single protein can catalyse multiple reactions. Adapted from [Mao et al., 2015].

The last way ***(vi)*** to obtain **GMO**-s is often chosen because the characteristics of an enzyme are actually a property of the entire cellular metabolic system, as demonstrated by the "Metabolic Control Analysis (**MCA**)" theory [Kacser and Burns, 1973], through the so-called the "summation theorem", from which it results that the "steps" and the control coefficients of the enzymatic activity are "global", and "systemic" properties of the entire metabolic cell system. Details on the **MCA** are presented by [Web, 2004; Heinrich and Schuster, 1996].

One of the big advantages offered by the deterministic **MCSMD**structured kinetic models is related to the quick possibility to obtain the cell metabolic fluxes. These are further analysed by the “Metabolic flux analysis” (**MFA**) [Miskovic et al., 2015; Stephanopoulos et al., 1998], and “Metabolic control analysis” (**MCA**) [Kacser and Burns, 1973] to determine the effect on the whole cell of a genetic modification. According to the "summation theorem" in Metabolic Engineering, the activity of enzymes influences each other, and the activity of the other enzymes in the cellular system also depends on the activity of one enzyme [Stephanopoulos et al., 1998]. From a practical point of view, the main methods used to obtain a **GMO** with desired characteristics are the following:

(1) Elimination of some reactions from the **CCM**, by eliminating the genes that encode the enzymes of those reactions ("knock-out genes") [Maria et al., 2011].

(2) Amplifying the concentration of a certain enzyme (P), from the G/P pair, by cloning the cell with G-plasmids in the amount necessary to obtain the desired effect (amplification of the reaction/flow), respectively, without depleting (exhaustion) the energy resources (ATP), and the reducing agents (NADH, NADPH, etc.) from the cell [Maria, 2010; Maria and Luta, 2013].

From an experimental point of view, these actions on genes in the genome are carried out with the help of "cloning vectors", respectively: viruses, plasmids (DNA fragments), or by randomly induced mutations using chemical or radioactive agents.

As stated [Nandy, 2017; Sutherland, 2005], in the following decades extraordinary applications of Systems Biology in the fields below were reported in the specialized literature.

Designing mutant, cloned cells with desired 'motifs'	Cell biology
Genetics biology or genetics	Food science
Biotechnology, Bioengineering	Immunology
Biomedical engineering	Molecular biology
Biochemistry	Biodiversity
Agricultural biology and Ecology	Bioinformatics
Biophysics	

5. Conclusions

"In the context of increasing demands for biology to be predictive, mathematical modeling and optimization are the only approaches that biology has to make predictions according to its principles..." [Banga, 2008]. Due to the computational facilities provided by the algorithmic rules developed by the **CBE** and the nonlinear systems theory, the mathematical (kinetic) models of **MCSMD** type, regarding the essential cellular **CCM** processes use a vector-matrix approach [Maria, 2018], with a continuous update of the models based on dynamic experimental data recorded in chemostats (i.e. a continuous bioreactor with perfect mixing), operated in steady state or in a dynamic regime following a disturbance applied to its supply [Chassagnole et al. 2002; Blass et al., 2017].

As proved in the literature, the ***in-silico*** (math/kinetic model-based) numerical analysis of biochemical or biological processes by using **MCSMD** or **HSMDM** models are proved to be not only an essential but also an extremely beneficial tool for engineering evaluations aiming ***(a)*** to determine with a higher accuracy the optimal operating policies of complex multi-enzymatic reactors, or ***(b)*** of bioreactors including the biomass adaptation to the variable bioreactor environment over hundreds of cell cycles, or even ***(c)*** to easier and quickly *in-silico* design, simulate, and analyse the performances/characteristics of various **GMO**-s alternatives, by using the "metabolic flux analysis" (**MFA**), together with the gene-knock-out technique, or with the cell cloning alternative using target plasmids.

Abbreviations

13dpg, pgp	1,3-diphosphoglycerate
3pg	3-phosphoglycerate
2pg	2-phosphoglycerate
AA	amino-acids
Accoa, acetyl-CoA	acetyl-coenzyme A
AC	Acetate

ADP, adp	adenosin-diphosphate
AK-ase	adenylate kinase
AMP, amp	adenosin-monophosphate
ATP, atp	adenosin-triphosphate
ATP-ase	ATP monophosphatase
BR	Batch bioreactor
BRP	Batch bioreactor with intermittent addition of biocatalyst, or substrate
CBE	Chemical and biochemical engineering
CCM	Central carbon metabolism in a living cell
CIT	Citrate
CSTR	continuously stirred tank reactor (“chemostat” type, with perfect mixing and continuous operation)
DO	dissolved oxygen
DW	dry mass
E	enzyme anthranilate synthase in the TRP synthesis model
ETOH	Ethanol
ext	In the cell environment (i.e. bioreactor bulk)
FBA	Metabolic flux analysis
FBR	Semi-continuu bioreactor (“fed-batch”)
FXBR	Continuously operated, column type reactor, with a fixed bed of immobilized biocatalyst
FDP, fdp	fructose-1,6-biphosphate
F6P, f6p	fructose-6-phosphate
GalP/Glk	galactose permease/glucokinase
G3P, g3p, GAP, gap, 3PG, 3pg	glyceraldehyde-3-phosphate
2PG, 2pg	2-phosphoglycerate
G6P, g6p	glucose-6-phosphate
GLC, glc	Glucose (glucoza)
Glc(ex), [GLC]ext	Glucose in the cell environment (i.e. bioreactor bulk)
GERM	Individual gene expression regulatory module
GMO, OMG	Genetically modified micro-organisms
GRC	Genetic regulatory circuits of the cell metabolic processes
HK-ase	Hexokinase
JWS	Silicon Cell project of [Olivier and Snoep, 2004]
LAC, lac	Lactate
MINLP	NLP with mixed variabiles (real continuous, and integers)
MABS	Mono-clonal anti-bodies (vaccines)
MA(S)CR	Mecanically agitated (semi-)continuous bioreactor
Max (x)	Maximum of (x)
MCA	Metabolic control analysis
MFA	Metabolic flux analysis
MCSMD	deterministic, modular, structured kinetic models of living cells (with continuous variables, and based on cellular metabolic reactions mechanism)
MMA	The adaptive random search optimization algorithm of [Maria, 2003, 2004B, 1998]

MRNA, mRNA	Tryptophan messenger ribonucleic acid during its encoding gene dynamic transcription, and translation (m-ARN in timpul transcrierii si trabslatiei genei TRP)
NAD(P)H	Nicotinamide adenine dinucleotide (phosphate) reduced
NLP	Nonlinear programming [Maria, 2004B]
ODE	Ordinary differential equations sets
OR	The complex between O and R (aporepressor of the TRP gene) in the TRP-expression model [Maria, 2021]
OT	the total TRP operon
PA	Phenyl-alanine
P, Pi	Phosphoric acid
PEP, pep	phosphoenolpyruvate
13DPG=PGP	1,3-diphosphoglycerate
PFK-ase	phosphofructokinase
PK-ase	pyruvate kinase
PPP	pentose-phosphate pathway
PTS	phosphotransferase, or the phosphoenolpyruvate:glucose phosphotransferase system
PYR, pyr	Pyruvate
QSS	quasi-steady-state
R5P	ribose 5-phosphate
mRNA	messenger ribonucleic acid
SCR	Semi-continuous reactor
SUCC, suc	Succinate
TCA, tca	Tricarboxylic acid cycle (TCA, or Krebs cycle)
TF	Transcription factor in the gene expression
TPFB	Continuous fluidized bed reactor, with 3 phases (G-L-S)
TRP, Trp, trp	Tryptophan
X	Biomass
Wt.	Weight
[.]	Concentration

References

Alberts, B.; Johnson, A.; Lewis, J.; Raff, M.; Roberts, K.; Walter, P., (2002), Molecular Biology of the Cell, 4th edition, Garland Science, New York.

Banga, J., (2008), Optimization in computational systems biology. 6-th Simon Stevin lecture on optimization in engineering, Leuven-Heverlee, NL. Also in BMC Systems Biology, 2, 47. doi:10.1186/1752-0509-2-47.

Blass, L.K.; Weyler, C.; Heinzle, E., (2017), Network design and analysis for multi-enzyme biocatalysis, BMC Bioinformatics, 18:366. DOI 10.1186/s12859-017-1773-y

Chassagnole, C.; Noisommit-Rizzi, N.; Schmid, J. W.; Mauch, K.; Reuss, M. (2002), Dynamic modeling of the central carbon metabolism of Escherichia coli, Biotechnology and Bioengineering 79, 53. http://dx.doi.org/10.1002/bit.10288.

DiBiasio, D., (1989), Introduction to the control of biological reactors. In: Shuler, M.L. (ed.), Chemical engineering problems in biotechnology, American Institute of Chemical Engineers, New York, pp. 351-391.

Edwards, J.S.; Palsson, B.O., (2000), The Escherichia coli MG1655 in silico metabolic genotype: its definition, characteristics, and capabilities. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 97, 5528-5533. doi: 10.1073/pnas.97.10.5528

Feist, A.M.; Henry, C.S.; Reed, J.L.; Krummenacker, M.; Joyce, A.R.; Karp, P.D.; Broadbelt, L.J.; Hatzimanikatis, V.; Palsson, B.O., (2007), A genome-scale metabolic reconstruction for

Escherichia coli K-12 MG1655 that accounts for 1260 ORFs and thermodynamic information, Molecular Systems Biology 3; Article number 121, pp. 1-18. doi:10.1038/msb4100155

Gani, R.; Bałdyga, J.; Biscans, B.; Brunazzi, E.; Charpentier, J.C.; Drioli, E.; Feise, H.; Furlong, A.; Van Geem, K.M.; de Hemptinne, J.C.; Ten Kate, A.J.B.; Kontogeorgis, G.M.; Manenti, F.; Marin, G.B.; Mansouri, S.S.; Piccione, P.M.; Povoa, A.; Rodrigo, M.A.; Sarup, B.; Sorensen, E.; Udugama, I.A.; Woodley, J.M., (2020), A multilayered view of chemical and biochemical engineering, Chemical Engineering Research and Design, 155, A133–A145. DOI: 10.1016/j.cherd.2020.01.008.

Haraldsdottir, H.S.; Thiele, I.; Fleming, R.M.T., (2012), Quantitative assignment of reaction directionality in a multicompartmental human metabolic reconstruction. Biophys J., 102(8), 1703–1711.

Heinemann, M.; Panke, S. (2006) Synthetic Biology - putting engineering into biology. Bioinformatics, 22, 2790-2799.

Heinrich, R.; Schuster, S., (1996), The regulation of cellular systems, New York, Chapman & Hall.

Hatzimanikatis, V.; Floudas, C.A.; Bailey, J.E., (1996), Analysis and design of metabolic reaction networks via Mixed-Integer Linear Optimization, AIChE Journal, 42(5), 1277-1292.

Hempel, D.C., (2006), Development of biotechnological processes by integrating genetic and engineering methods. Eng. Life Sci., 6, 443–447. doi: 10.1002/elsc.200620149

Kacser, H.; Burns, J.A., (1973), The control of flux, Symp. Soc. Exp. Biol., 27, 65-104.

Kurata, H.; Sugimoto, Y., (2017), Improved kinetic model of Escherichia coli central carbon metabolism in batch and continuous cultures, Journal of Bioscience and Bioengineering, in-press.

Mao, L.; Nicolae, A.; Oliveira, M.A.P.; He, F.; Hachi, S.; Fleming, R.M.T., (2015), A constraint-based modelling approach to metabolic dysfunction in Parkinson's disease, Computational and Structural Biotechnology, 13, 484-491.

Maranas, C.; Hatzimanikatis, V., (2005), Preface – Cell modelling, Comp. Chem. Eng. 29, 405-406. doi:10.1016/j.compchemeng.2004.08.008

Maria, G., (1998), Adaptive Random Search and Short-Cut Techniques for Process Model Identification and Monitoring, In: AIChE, Proc. FOCAPO98 Int. Conf. on Foundations of Computer Aided Process Operations, July 5-10, 1998, Snowbird (USA), pp. 351-359.

Maria, G., (2003), ARS combination with an evolutionary algorithm for solving MINLP optimization problems, In: Hamza, M.H. (Ed.), Modelling, Identification and Control; IASTED/ACTA Press, Anaheim, CA, USA, pp. 112–117.

https://www.actapress.com/Content_of_Proceeding.aspx?proceedingID=213 (last accessed on 22 October 2021).

Maria, G., (2004B), A review of algorithms and trends in kinetic model identification for chemical and biochemical systems, Chemical and Biochemical Engineering Quarterly, 18, 195-222. http://silverstripe.fkit.hr/cabeq/

Maria, G., (2010), A dynamic model to simulate the genetic regulatory circuit controlling the mercury ion uptake by E. coli cells, Revista de Chimie (Bucharest) 61(2), 172-186.

Maria, G.; Xu, Z.; Sun, J., (2011), Multi-objective MINLP optimization used to identify theoretical gene knockout strategies for E. coli cell, Chemical & Biochemical Engineering Quarterly, 25, 403-424. http://silverstripe.fkit.hr/cabeq/

Maria, G., (2012), Enzymatic reactor selection and derivation of the optimal operation policy, by using a model-based modular simulation platform, Comput. Chem. Eng., 36, 325-341. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2011.06.006

Maria, G.; Luta, I., (2013), Structured cell simulator coupled with a fluidized bed bioreactor model to predict the adaptive mercury uptake by E. coli cells, Computers & Chemical Engineering, 58, 98-115. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2013.06.004.

Maria, G., (2014A), Insilico derivation of a reduced kinetic model for stationary or oscillating glycolysis in Escherichia coli bacterium, Chemical & Biochemical Engineering Quarterly, 28(4), 509-529. doi: 10.15255/CABEQ.2014.2002

Maria, G., (2014B), Extended repression mechanisms in modelling bistable genetic switches of adjustable characteristics within a variable cell volume modelling framework, Chemical & Biochemical Engineering Quarterly, 28 (1) 35-51.

Maria, G.; Crisan, M., (2017), Operation of a mechanically agitated semi-continuous multi-enzymatic reactor by using the Pareto-optimal multiple front method, J. Process Control., 53, 95-105. DOI: 10.1016/j.jprocont.2017.02.004

Maria, G., (2017A), A review of some novel concepts applied to modular modelling of genetic regulatory circuits, Juniper publ., Irvine CA, USA, ISBN 978-1-946628-03-9; https://juniperpublishers.com/ebook-info.php

Maria, G. (2017B), Deterministic modelling approach of metabolic processes in living cells - a still powerful tool for representing the metabolic process dynamics, Juniper publ., Irvine, CA (USA), ISBN 978-1-946628-07-7.

Maria, G., (2017C), Application of (bio) chemical engineering principles and lumping analysis in modelling the living systems, Current Trends in Biomedical Engineering & Biosciences, 1(4) (Juniper publ, Irvine, CA), CTBEB.MS.ID.555566, https://juniperpublishers.com/ctbeb/volume1-issue4-ctbeb.php

Maria, G., (2018), In-silico design of Genetic Modified Micro-organisms (GMO) of industrial use, by using Systems Biology and (Bio)Chemical Engineering tools, Juniper publ., Irvine California (USA), ISBN 978-1-946628-12-1. https://juniperpublishers.com/ebook-info.php

Maria, G.; Gijiu, C.L.; Maria, C.; Tociu, C., (2018A), Interference of the oscillating glycolysis with the oscillating tryptophan synthesis in the E. coli cells, Computers & Chemical Engineering, 108 , 395-407, https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2017.10.003

Maria, G.; Mihalachi, M.; Gijiu, C.L., (2018B), Model-based identification of some conditions leading to glycolytic oscillations in E. coli cells, Chemical and Biochemical Engineering Quarterly, 32, 523-533. doi: 10.15255/CABEQ.2018.1300.

Maria, G.; Gijiu, C.L.; Maria, C.; Tociu, C.; Mihalachi, M., (2018D), Importance of considering the isotonic system hypothesis when modelling the self-control of gene expression regulatory modules in living cells, Current Trends in Biomedical Engineering & Biosciences, 12(2), CTBEB.MS.ID.555833, DOI : 10.19080/CTBEB.2018.12.555833.

Maria, G.; Mihalachi, M.; Gijiu, C.L., (2018E), In silico optimization of a bioreactor with an E. coli culture for tryptophan production by using a structured model coupling the oscillating glycolysis and tryptophan synthesis, Chemical Eng. Res. and Design,, 135, 207-221, HTTPS://doi.org/10.1016/j.cherd.2018.05.011

Maria, G., (2019), Algoritmi numerici de simplificare a modelelor cinetice ale proceselor chimice și biochimice, Printech Publ., Bucharest, 2019 (815 pagini), ISBN 978-606-23-1010-3 (in Romana).

Maria, G.; Gijiu, C.L.; Crişan, M.; Maria, C.; Tociu, C., (2019), Model-based re-design of some genetic regulatory circuits to get Genetic Modified Micro-organisms (GMO) by using engineering computational tools (a mini-review), Current Trends in Biomedical Engineering & Biosciences, 18(3), DOI: 10.19080/CTBEB.2019.18.555988.

Maria, G., (2020A), Model-based optimization of a fed-batch bioreactor for mAb production using a hybridoma cell culture, Molecules-Basel – Organic Chemistry, 25(23), 5648-5674, doi:10.3390/molecules25235648

Maria, G., (2020B), Model-based optimization of a batch reactor with a coupled bi-enzymatic process for mannitol production, Computers & Chemical Engineering, 133, 106628-106635. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2019.106628

Maria, G., (2020C), In-silico determination of some conditions leading to glycolytic oscillations and their interference with some other processes in E. coli cells, Frontiers in Chemistry, 8, 526679-526693, DOI: 10.3389/FCHEM.2020.526679.

Maria, G., (2021), A CCM-based modular and hybrid kinetic model to simulate the tryptophan synthesis in a fed-batch bioreactor using modified E. coli cells, Computers & Chemical Engineering, 153, 107450-107466. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2021.107450

Maria, G.; Renea, L., (2021), Tryptophan production maximization in a fed-batch bioreactor with modified E. coli cells, by optimizing its operating policy based on an extended structured cell kinetic model, MDPI Bioengineering-Basel, 8(12), 210-247, https://doi.org/10.3390/bioengineering8120210

Maria, G.; Peptănaru, I.M., (2021), Model-based optimization of mannitol production by using a sequence of batch reactors for a coupled bi-enzymatic process – A dynamic approach, Dynamics-Basel, 1, 134-154. https://doi.org/10.3390/dynamics1010008

Maria, G., (2022), Despre școala de inginerie și tehnologie (bio)chimică de la Universitatea Politehnica din București, Printech Publ., Bucharest, (800 pagini), ISBN 978-606-23-1354-8.

Maria, G.; Maria, C.; Renea, L. (2022B), Application of (bio-)chemical engineering concepts and rules in Bioinformatics. Review of a CCM-based modular and hybrid kinetic model used to simulate and optimize a bioreactor with genetically modified cells, Current Trends in Biomedical

Engineering & Biosciences, (Juniper publ, Irvine CA), 556039, DOI: 10.19080/CTBEB.2022.20.556039.

Maria, G., (2023), Hybrid modular kinetic models linking cell-scale structured CCM reaction pathways to bioreactor macro-scale state variables. Applications for solving bioengineering problems, Juniper publ. Inc., Irvine, California (USA) 2023, (300 pages), ISBN xxx-1(USA), in-press.

Maria, G., (2023B), Comments on several review eBooks promoting a novel kinetic modelling framework of metabolic processes and of genetic regulatory circuits in living cells, Curr Trends in Biomedical Eng & Biosci., (Juniper publ, Irvine CA, USA), 21(2): 556057. DOI: 10.19080/CTBEB.2023.21.556057, (2023B).

Maria, G.; Renea, L.; Maria, C., (2022), Multi-objective optimization of the fed-batch bi-enzymatic reactor for mannitol production, Dynamics-Basel, 2, 270-294. DOI: 10.3390/dynamics2030014

Miskovic, L.; Tokic, M.; Fengos, G.; Hatzimanikatis, V., (2015), Rites of passage: requirements and standards for building kinetic models of metabolic phenotypes, Current Opinion in Biotechnology, 36, 146–153.

Nandy, S.K. (2017), BioXYZ, what is XYZ ?, Curr Trends Biomedical Eng & Biosci., 3(2): 555606. DOI: 10.19080/ CTBEB.2017.03.555606.

Olivier, B.G.; Snoep, J.L., (2004), Web-based kinetic modelling using JWS Online, Bioinformatics, 20, 2143-2144. DOI: 10.1093/bioinformatics/bth200

Stephanopoulos, G.N.; Aristidou, A.A.; Nielsen, J., (1998), Metabolic Engineering. Principles and Methodologies, Academic Press, San Diego, CA.

Straathof, A.J.J.; Adlercreutz, P., (2005), Applied biocatalysis, Harwood Academic Publ., Amsterdam.

Sutherland, W.(2005), Optimization- this beguilingly simply idea allows biologists not only to understand current adaptations, but also to predict new designs that may yet evolve, Nature, 435.

Web, M., (2004), MCA- The Metabolic Control Analysis, Report presented to the University of Manchester, http://dbkgroup.org/metabolic-control-analysis/ (last accessing March 31, 2023)

Woinaroschy, A. (2016). A paradigm-based evolution of chemical engineering, Chinese Journal of Chemical Engineering, 24, 553-557.

Zhu, Y.; Song, J.; Xu, Z.; Sun, J.; Zhang, Y.; Li, Y.; Ma, Y., (2013), Development of thermodynamic optimum searching (TOS) to improve the prediction accuracy of flux balance analysis. Biotechnology and Bioengineering, 110, 914-923.

Evenimente științifice

MUZEUL „PONI-CERNĂTESCU” – PERSPECTIVĂ EXPOZIȚIONALĂ

Instituția muzeală are rolul de a valorifica obiecte reprezentative pentru cultura unei societăţi şi de a transmite mesaje, idei, informaţii, printr-o adresare directă publicului de toate vârstele. În general, receptivitatea pentru modernizarea tipurilor și formelor de etalare comunicaţională a muzeelor se poate materializa în forma de prezentare, ambient, arhitectură, mobilier, sisteme de iluminat, elemente muzeo-tehnice care pot conduce la stabilirea unor legături subtile între exponat şi privitor în plan fizic, intelectual şi emoțional.

Muzeul memorial poate fi perceput, în speță, asemănător unui spaţiu al poveştii, incluzând în mod titularizant şi participativ-emblematic o serie de personalităţi recunoscute din punctul de vedere al remarcabilităţii biografice în plan uman şi creaţional-cultural. Substanţa poveștii spuse-expuse se transformă, prin măiestria muzeografului, dincolo de exponate într-o descriere metaforică şi informativă totodată, ajungând în final să refacă, să (re)construiască și să constituie o matrice explicit-educativă complementară poveştii biografice propriu-zise.

Întregul parcurs stradal „Mihail Kogălniceanu” din Iași este o astfel de pagină deschisă spre trecut. Pe acest veritabil vechi bulevard al rezonanţelor culturale din al nouăsprezecelea veac, foarte aproape de casele Kogălniceanu, se întindeau în contextul arhitectonic moldovenesc târziu de odinioară parcul şi casa familiei profesorului chimist Petru Poni.

Casa, construită în 1839 de către mitropolitul Veniamin Costachi şi care a găzduit în 1918 colecţiile Bibliotecii Academiei Române, adăposteşte astăzi Muzeul „Petru Poni – Radu Cernătescu”. Istoria venerabilei clădiri consemnează o serie de proprietari cu stare materială bună şi cu înclinaţie spre spiritualitate şi educaţie. Astfel, în anul 1859, casa se afla în grija sărdarului Nicolae Goncescu, apoi, în 1864, a mitropolitului Calinic Miclescu, iar mai târziu a avocatului Dimitrie Telemaque, cel care în 1874 o vinde profesorului Petru Poni. Din 1880 imobilul, construit parcă în întâmpinarea desfătărilor intelectuale, se transformă deplin în domeniul urban al familiei Poni.

Muzeul, inaugurat oficial în anul 1991, sub numele de Muzeul Chimiei ieșene „Petru Poni”, este constituit pe baza donațiilor din anul 1971 ale profesoarei Margareta Poni, fiica savantului, care donează statului casa şi terenul aferent clădirii în scopul amenajării unui muzeu memorial dedicat părinţilor săi şi prestigiului lor în lumea ştiinţei şi artelor.

Proiectul viitoarelor expoziţii se va defini treptat, pe parcursul a două decenii, prin donaţii şi achiziţii valoroase ale unor mărturii materiale legate de epocile de pionierat ingineresc şi de consolidare a învățământului superior în Iaşi şi în ţară. Astfel, o importantă donaţie provine de la moştenitoarea familiei, profesoara Florica Mageru, fiica lui Alexandru Poni, și nepoata lui Petru Poni care oferă, în anul 1973, Complexului Muzeal Naţional „Moldova” Iaşi o serie de obiecte de mobilier, cărţi, documente, fotografii, eşantioane de minerale, corespondenţă, lucrări ştiinţifice, partituri muzicale ş.a. Din anul 1994, pe baza creșterii și diversificării patrimoniului cu piese aparținând unor importante personalități care și-au înscris cu cinste numele

în istoria chimiei din țara noastră, precum și a unei noi reorganizări tematice, muzeul adoptă numele „Poni-Cernătescu”. Un farmec aparte oferă parcului foişorul de lectură şi muzică numit pe vremuri „Chioşcul Poeziei” - obiectiv reconstruit în anul 1995 - unde odinioară citeau versuri Mihai Eminescu, Veronica Micle, Matilda Cugler-Poni.

Beneficiind în perioada 2009-2011 de o amplă şi minuţioasă reamenajare a expoziţiei de bază, circuitul interior al Muzeului „Poni–Cernătescu” pune în valoare, prin mijloace muzeotehnice moderne, o serie de exponate care se disting prin valoarea lor memorialistică, istorică şi estetică. Procesul de reamenajare a avut la bază fotografii - mărturie din epocă (ce prezintă interiorul casei „Poni – Cernătescu”, tipul de decoraţiuni, piesele de mobilier ş.a.) s-a concretizat printr-o amplă ceremonie de deschidere care a avut loc în ziua de 2 martie 2012, în prezenţa unor înalte oficialităţi ale Guvernului României: prim-ministrul, domnul Mihai Răzvan Ungureanu şi ministrul Culturii, domnul Kelemen Hunor. Proiectul de reamenajare tematică a expoziției permanente a Muzeului „Poni-Cernătescu” a fost recompensat, în anul 2012, cu Premiul ICOM România.

Circuitul interior pune astăzi în valoare prin îmbinarea elementelor tradiţionale cu mijloace muzeotehnice moderne (touchscreen-urile şi ecranele informative interactive) elemente aparţinând secvenţialităţii genealogice şi de carieră ştiinţifică şi literară ale familiei Poni. Sunt alăturate programatic o impresionantă suită de generoase exemplificări patrimoniale şi muzeografice legate de personalităţi academice ieşene care şi-au înscris cu cinste numele în istoria chimiei româneşti.

Expoziţia de bază este reamenajată astăzi în şase camere care aparţin tematic memorialisticii şi cuprinde: holul de primire, sufrageria, biroul „Petru Poni”, salonul mic dedicat Matildei Cugler-Poni, camera „Radu Cernătescu”, camera personalităţilor ieşene din domeniul chimiei.

Prima sală a muzeului reconstituie un **Hol de primire** tipic ieşean de la sfârşitul secolului al XIX-lea şi început de secol XX, unde piesele de mobilier (canapeaua şi consola cu oglindă, alături de o masă de mici dimensiuni) se află în consonanţă cu obiectele de artă decorativă (tablouri, pendula de podea şi bustul în bronz aparţinând savantului Petru Poni), marcând acordul ambiental ce propagă atmosfera specifică unui astfel de interior de epocă.

Holul de primire
(Ioan Dimitriu Bârlad, 1920)

Bust „Petru Poni”

Sufrageria este locul în care altă dată se organizau vestitele saloane literare amfitrionate de poeta Matilda Cugler – Poni, unde erau primite ca oaspeți o serie de personalități ale culturii noastre naționale, precum: Mihai Eminescu, Veronica Micle, Ion Creangă, Nicolae Iorga, Titu Maiorescu ș.a. Garnitura de mobilier, realizată din lemn de stejar acoperit cu sculpturi decorative, care îi conferă un stil tradițional maiestuos, a fost comandată special de familia Poni într-un atelier de mobilă fină din Franţa. Aspectul camerei este simplu, luminos, cu proporţii delicate, perdelele au motive florale, iar ambianţa este completată cu obiecte decorative (oglindă, lustră, vas decorativ pictat, goblen, reproduceri de artă, precum şi o delicată lucrare în marmură, opera sculptorului Fermont – donaţie conferită lui Petru Poni în anul 1900, de către regele Carol I).

Sufrageria Muzeului „Poni-Cernătescu”

Biroul Petru Poni

Biroul „Petru Poni” este conceput asemănător unui spaţiu de relaxare prin lectură şi cuprinde biblioteca propriu zisă, realizată din lemn de brad şi biroul de studiu al chimistului. Aici se păstrează un important număr de materiale documentare, peste 500 cărţi de specialitate şi beletristică, dintre care se remarcă lucrările ce atestă contribuţia adusă de Petru Poni în chimie, fizică şi istorie. Nu lipsesc obiectele pe care prestigiosul om de ştiinţă le-a utilizat drept instrumente de scris (călimara, trusa de birou) sau cele care au marcat trecerea timpului (caietul de însemnări, ceasul de birou) şi au înregistrat pe diverse suporturi amprenta dimensiunii operei ştiinţifice a savantului. Un loc aparte este consacrat exponatelor protejate în vitrine care atestă recunoaşterea pe plan european a personalităţii ştiinţifice a savantului, dintre care se disting: diploma de membru al Ordinului Francez „Legiunea de Onoare” (1902), Ordinul „Franz Joseph” (gradul Mare Cruce, 1903), Ordinul Carol I, gradul Mare Cruce (1900) şi Ordinul „Steaua României” (1905), precum și o monedă comemorativă, realizată din argint cu titlul de 999‰, având greutatea de 31,103 g, diametrul de 37 mm, și valoarea nominală de 10 lei, emisă de Banca Națională a României cu prilejul împlinirii, în 2016, a 175 de ani de la nașterea savantului Petru Poni.

Camera dedicată Matildei Cugler-Poni (soţia savantului) este amenajată în stil „salonaş”, aici fiind locul destinat odinioară conversaţiilor feminine pe teme casnice ori mondene sau pur şi simplu un refugiu mai intim pentru timpul liber al membrilor familiei. Acest spațiu conservă piese de mobilier de la sfârșitul secolului al XIX-lea și început de secol XX (dulap cu placă de marmură, bufet de sufragerie, măsuţă rotundă din lemn Thonet, consolă lemn, măsuţă cu picior spiralat), dar și

obiecte de artă decorativă (oglindă toaletă, casetă pentru prizat tutun, caseta argintată pentru bijuterii, un binoclu de sidef, o piesă din lac japonez pentru birou) și fotografii, toate descriind o traiectorie a amintirilor despre viața și opera poetei.

Camera „Radu Cernătescu” este consacrată prestigiosului chimist ieşean, nepotul lui Petru Poni, care a locuit aici începând din 1920. Amenajată cu piese de mobilier (măsuţa şi fotoliul, şifonierul, canapeaua şi fotografiile), dar şi cu pianul „Bösendorfer” (la care Radu Cernătescu interpreta partituri clasice împreună cu profesoara Margareta Poni) şi cu patefonul His Master's Voice (cu o importantă colecţie de discuri din ebonită), această cameră creionează un spaţiu cotidian destinat reflecţiei şi relaxării, sugerând ideea că muzica avea locul ei bine marcat în viaţa familiei Poni.

Camera „Matilda Cugler-Poni

Camera „Radu Cernătescu”

Figura 1. Imagini din interiorul muzeului

Camera destinată personalităţilor ieşene în domeniul chimiei adăpostește importante documente, cărţi de specialitate, diplome, fotografii şi obiecte personale ce au aparţinut unor renumiţi profesori ai renumitelor universități ieșene și anume: Nicolae Costăchescu, Anastasie Obregia, Constantin V. Gheorghiu, Ilie Matei, Gheorghe Alexa, Mihai Dima, Ion Zugrăvescu, Cristofor Simionescu. Muzeul are privilegiul de a oferi publicului prima teză de doctorat în domeniul chimiei din România, intitulată „Gazurile cuprinse în sare şi-n vulcanii de glod din România″, care a fost susţinută în anul 1905 la Facultatea de Ştiinţe din Iaşi de către Nicolae Costăchescu.

Camera Personalităților în domeniul chimiei ieșene

Expoziția Flori de mină

Figura 2. Alte incăperi de interes

Pe lângă misiunea patrimonială, instituția noastră își propune să funcționeze ca un cadru formativ, grație reconstituirii în cadrul expoziției permanente a laboratorului de chimie după modelul celui care a funcționat la universitatea ieșeană la sfârșitul secolului trecut, locul desfăşurării lecţiilor experimentale de chimie pentru elevii din ciclul gimnazial şi liceal, precum și a „minei” de secol XIX, amenajată la demisolul muzeului care găzduieşte expoziţia de flori de mină, dar şi mostre mineralogice cercetate şi studiate de Petru Poni de-a lungul timpului. Aceste exponate contribuie la menţinerea unei efervescenţe ideatice necesară dezvoltării activităţilor metaexpoziţionale destinate publicului larg.

❖

Petru Poni (1841-1925)

Petru Poni

Petru Poni a aparţinut unei generații de savanţi care și-a adus contribuţii remarcabile la dezvoltarea ştiinţei şi învăţământului românesc fiind recunoscut, alături de profesorul Constantin Istrati (Universitatea din Bucureşti) şi chimistul Adrian Ostrogovich (Universitatea din Cluj), drept unul dintre întemeietorii chimiei din ţara noastră.

Fire enciclopedică, chimistul Petru Poni a avut preocupări pentru literatură, artă, muzică ș.a., pe care le-a transmis şi urmaşilor săi. Aceste preocupări au fost împărtășite și întregite de o parteneră de viaţă distinsă, sensibilă şi talentată – poeta Matilda Cugler Poni. Începând din 1876, după căsătoria cu poeta Matilda Cugler, locuieşte pe strada „Mihail Kogălniceanu”, în apropierea caselor lui Titu Maiorescu, Calistrat Hogaş, Alexandru Phillipide, George Topârceanu şi Ionel Teodoreanu. Imobilul a fost ridicat în 1839, de către mitropolitul Veniamin Costache şi are o reverberaţie culturală deosebită. Mihai Eminescu, Veronica Micle, Titu Maiorescu, Ion Slavici, A.D. Xenopol, Ion Creangă sunt doar câteva dintre personalităţile culturii noastre naţionale care au fost oaspeţi frecvenţi ai acestei case. Astfel, în 1874, când Eminescu fusese numit bibliotecar şi îl vizitează pe Ion Slavici la Iaşi, participă împreună la şedinţele „Junimii” şi la lecturile literare din casa familiei Poni. Este interesant de semnalat faptul că, în anii grei ai Primului Război Mondial, această casă a găzduit valoroasele colecţii ale Bibliotecii Academiei Române[*], iar din 1930 a locuit aici și academicianul Radu Cernătescu.

Parcul casei, cu foişorul său, constituia locul predilect dedicat „plimbărilor academice” şi „reveriei poetice”[†] la care participau Mihai Eminescu, Veronica Micle, Matilda Cugler-Poni, Ion Slavici, A.D. Xenopol, Nicolae Iorga, Ion Ionescu de la Brad ş.a.

---

[*] Ziarul *Curierul român*, Botoșani, 2 septembrie 1898.

[†] Cugler- Poni, Matilda *Scrieri alese*, ediție îngrijită de Ion Nuță, Editura Junimea Iași, 1971, p.6.

Formarea unei personalități atât de complexe s-a datorat eminenților săi profesori August Treboniu Laurian, Simion Bărnuțiu, Nicolae Ionescu ș.a de la Academia Mihăileană din Iași, care i-au insuflat dragostea de țară și pasiunea pentru știință. Petru Poni a absolvit școala primară la Târgu Frumos și apoi a urmat la Gimnaziul Central din Iași (1852-1859). După absolvirea cursurilor gimnaziale şi a anului I de liceu de la Academia Mihăileană, a obţinut din partea Ministerului Moldovei o bursă de 240 de galbeni* pentru continuarea studiilor la Paris, oraşul în care îşi exprimau valoarea cei mai mari chimişti ai Europei acelor vremuri.

A plecat din Iaşi, însoţit de Alexandru Otescu şi Gheorghe Cernătescu, pentru a studia fizica şi chimia la Universitatea Sorbona din Paris. În timpul celor 5 ani petrecuţi la Paris, Petru Poni a locuit pe strada Bréa nr. 52† şi strada Vavin nr. 45, situate în arondismentul 5 al Parisului, în apropierea importantelor instituţii de învăţământ superior din capitala Franţei - Sorbona, Liceul Saint-Louis, Colège de France – plasate în apropierea Bulevardului Saint Michel.

Petru Poni a avut şansa să studieze cu iluştrii Louis Saint-Claire Deville, Marcelin Berthelot, Antoine Ballard. A participat la cursurile de chimie de la Sorbona, unde era susţinută teoria echivalenţilor, dar şi la cele organizate de Facultatea de Medicină, unde Würtz afirma teoria atomistă. A luat lecţii şi de la reputatul minerolog - profesorul Felix Pisani - care, din 1855, era directorul unui laborator cunoscut sub numele de Şcoala de Chimie Practică (École de Chimie Practique). La Paris, Poni s-a confruntat şi cu lipsuri materiale din cauza reducerii bursei. În 1863, se pregătea să renunţe la studii şi să se întoarcă în ţară. Nicolae Ionescu, unchiul său, l-a sfătuit să nu renunţe la studii, să mai aştepte până când Vasile Adamachi, cu care Petru Poni era bun prieten, îi va trimite bani‡. În anul 1864, Petru Poni devine licenţiat, în Ştiinţe Fizice§, la Facultatea de Ştiinţe - Universitatea Sorbona din Paris. Au urmat apoi, încă doi ani de aprofundare a studiilor în domeniile chimie, fizică şi mineralogie.

Diploma de membru a Legiunii de Onoare (1902,

După cinci ani petrecuţi în capitala Franţei, Petru Poni revine în ţară, fiind numit, în 1866, profesor la Academia Mihăileană, Institutele Unite şi Şcoala Militară. În această calitate, publică, în 1869, primul manual de chimie din ţară, intitulat *Cursu de chimie elementară,* iar, în 1874, pe cel de fizică denumit *Noţiuni de fizică***. În 1878, este numit profesor la Universitatea din Iaşi, unde activează până în 1911, urmându-i lui Ştefan Micle la Catedra de Chimie. Este ales, în 1879, membru al Academiei Române şi devine preşedinte al acestui for (în perioadele 1898 – 1901, respectiv 1918 – 1923).

În calitate de profesor, Petru Poni înfiinţează,

* Arhivele Naționale Iași, *Fond familial „Poni”*, Mapa „Petru Poni”, dosar nr. 51/1859

† Ibidem, fond.cit.nr.400.

‡ Arhivele Naționale Iași, *Fond familial „Poni”*, Mapa „Petru Poni”, dosar nr.428.

§ Arhivele Naționale Iași, *Fond familial „Poni”*, Mapa „Petru Poni”, dosar nr.66.

** Simionescu, C., Petrovanu, Magda, *Figuri de chimiști ieșeni*, Editura Didactică și Pedagogică, București, 1964, p.34.

în 1883, primul Laborator de Chimie anorganică pe care, în 1897[*], îl transferă în noua clădire a universităţii, unde susţine şi primul curs de chimie din ţară, însoţit de experienţe de laborator. A fost un neobosit cercetător, care, în 1870, descoperă broştenita (manganit de Mn, Fe şi Ca), respectiv în 1900 badenita (arsenio-bismutură de Co, Ni şi Fe). Între anii 1872 şi 1900 efectuează cercetări asupra mineralelor din ţară, iar în perioada 1877–1889 cercetează apele minerale româneşti şi compoziţia petrolului (definitivată în 1897)[†]. Aceste studii vor deschide drumul cercetărilor aplicative în industria chimică.

Omagierea memoriei savantului Petru Poni, de la a cărui naștere s-au împlinit anul acesta 182 de ani, semnifică exprimarea empatică a unei onorante datorii şi o recunoaştere din partea noastră a contribuţiei deosebite pe care prestigiosul profesor chimist ieşean a adus-o la dezvoltarea ştiinţei şi învăţământului din România.

Radu Cernătescu (1894-1958)

Muzeul „Poni-Cernătescu” deţine un valoros patrimoniu cultural mobil prin intermediul căruia pot fi puse în evidenţă preocupările şi realizările, în domeniul ştiinţei şi culturii, ale chimistului Radu Cernătescu, nepotul lui Petru Poni.

Profesor şi cercetător dedicat domeniului fascinant al chimiei, Radu Cernătescu a făcut parte din pleiada oamenilor de ştiinţă şi cultură care au onorat învăţământul superior românesc

S-a născut la Huşi, în data de 17 august 1894. Tatăl său, Emanoil, era membru al Curţii de Apel din Iaşi, iar mama Elena, fiică a profesorului Petru Poni, a fost institutoare.

La scurt timp după naşterea lui Radu, familia Cernătescu se mută în Iaşi, având domiciliul situat pe strada Păcurari. Atmosfera de familie i-a creat un sentiment de dragoste de muncă, de seriozitate şi corectitudine. În anul 1905, Radu Cernătescu a absolvit Şcoala primară de băieţi „Carol I” din Iaşi (Strada Toma Cozma), fiind clasificat al doilea din 34 de elevi.

În toamna anului 1905 se înscrie la Liceul Naţional din Iaşi, urmând cursurile gimnaziale. În 1913 a absolvit cursurile secţiei reale a Liceului Naţional, cu menţiunea „Cu laudă”, obţinând media 9,60.

Diploma de Doctor in Chimie
In Numele Majestăţii Sale Regelui CAROL II

Figura 3. Portretul lui Radu Cernătescu și Diploma de Doctor în chimie (1938)

[*] *Ibidem*, op.cit.p.38.

[†] Savul, M. *Petru Poni, unul dintre întemeietorii mineralogiei românești*, cuvântare susținută la Sesiunea Științifică a Universității din Iași, 1 iunie, 1957.

După finalizarea studiilor liceale, se înscrie la Facultatea de Ştiinţe din Iaşi, având profesori pe Petru Bogdan, N. Costăchescu, V. Buţureanu, E. Neculcea. Cu siguranţă, bunicul său, Petru Poni, l-a sfătuit să urmeze Facultatea de Ştiinţe a Universităţii ieşene, unde şi-a însuşit temeinice cunoştinţe de specialitate şi o bogată cultură generală.

În 1916 îşi trece licenţa în chimie şi, peste patru ani, îşi susţine teza de doctorat cu lucrarea „Legea lui Dalton aplicată la soluţiile concentrate" (Figura 3). Este numit asistent la Laboratorul de Chimie fizică (Prof. Petru Bogdan), unde îşi începe şi activitatea ştiinţifică. După trecerea examenului de docenţă în chimie fizică (13 septembrie 1924), devine conferenţiar suplinitor pentru disciplina de chimie analitică, iar peste trei ani, conferenţiar definitiv la această disciplină.

În perioada cât a fost asistent şi cadru didactic, Radu Cernătescu s-a ocupat cu pasiune şi de cercetarea de laborator. După transformarea conferinţei de chimie analitică în catedră, în 1932, Radu Cernătescu a fost numit profesor agregat pentru Chimie analitică a Facultăţii de Ştiinţe, iar în 1936 a devenit profesor titular.

În 1937 a luat fiinţă Școala Politehnică din Iaşi, având în componenţa ei şi Facultatea de Chimie Industrială. În perioada anilor 1938-1940, Radu Cernătescu şi-a desfăşurat activitatea şi în această catedră de chimie fizică şi analitică. S-a ocupat de organizarea unui laborator pentru studenţi şi a elaborat un curs orientat către necesităţile practice privind pregătirea inginerilor chimişti.

În timpul celui de al Doilea Război Mondial, profesorul Radu Cernătescu, împreună cu mătuşile sale, Margareta Poni şi Lucia Poni, sunt refugiaţi la Zlatna, în judeţul Alba, fiindu-le pusă la dispoziţie o locuinţă aflată în proprietatea lui George Suciu[*]. Munca de laborator l-a preocupat foarte mult în perioada războiului, dar şi după terminarea lui, când i s-a încredinţat funcția de decan al Facultăţii de Ştiinţe. A fost mult solicitat cu readucerea facultăţii de la Zlatna, unde fusese evacuată. După revenirea la Iaşi a organizat laboratoarele şi s-a ocupat de inventarul acestora.

Între anii 1948-1951, împreună cu Margareta Poni, a elaborat un tratat elementar de chimie anorganică, litografiat, în trei volume, cuprinzând 1400 de pagini.

În 1948, Radu Cernătescu a devenit membru titular al Academiei Române. Prin reorganizarea acestei instituţii, lui Radu Cernătescu i-a revenit sarcina de a coordona activitatea filialei din Iaşi, fiind ales preşedinte al acesteia. În această calitate, Radu Cernătescu a obţinut fonduri necesare înfiinţării Institutului de Cercetări Chimice din Iaşi, a cărui clădire s-a construit în zona Copoului. Acest obiectiv s-a dat în folosinţă în anul 1957.

Cercetările profesorului Cernătescu, făcute singur sau cu o serie de colaboratori grupaţi în jurul său, îmbrăţişează diferite domenii ale chimiei, astfel:

- împreună cu Th. Ionescu face un studiu experimental asupra elementelor cu două lichide nemiscibile, având o sare disolvită, arătând că rezultatele sunt în conformitate cu termodinamica şi teoria osmotică a elementelor, contrar părerii Vasilescu – Karpen, potrivit căreia nu s-ar aplica teoria lui Nernst;
- în colaborare cu E. Riegler, cercetează potenţialul metalelor faţă de lichidele pure şi găseşte că se poate stabili cu oarecare aproximaţie o valoare iniţială a potenţialului, care depinde de suprafaţa metalului;

[*] Fond familial Poni, Mapa Radu Cernătescu, Dosar nr. 51.

- în colaborare cu Eugen Papafil, studiază influenţa sărurilor asupra echilibrului păturii fenol-apă;
- în colaborare cu dr. C. Parhon, profesorul Cernătescu determină calciul şi sodiul proteic din lapte şi ser sangvin de la câine (femele) tiroparatiroidectomizat, găsind o valoare aproape dublă faţă de cea calculată pentru calciul numit coloid;
- în colaborare cu Adrian Mayer, întreprinde un studiu asupra arseniţilor alcalini, şi ajunge la concluzia că, la neutralizarea acidului arsenios cu hidroxizi alcalini, se formează un metaarsenit de tipul $MeAsO_2$;
- în colaborare cu Margareta Poni, Mariana Papafil, efectuează un studiu amplu asupra formării sărurilor complexe de diaminele ciclice ale metalelor (cadmiu, nichel, cupru, cobalt şi zinc) stabilind structura şi condiţiile de formare;
- în colaborare cu M. Poni, M. Papafil, Elena Culianu şi M. Bostan, a studiat formarea sărurilor simple şi complexe ale acidului nicotinic şi a acidului aurintricarbonic.

Profesorul Cernătescu a realizat numeroase lucrări de chimie analitică, oferind o serie de metode originale pentru dozarea cationilor şi anionilor, precum şi analiza apelor din râuri, lacuri şi limanuri.

În domeniul combinaţiilor complexe, a studiat influenţa radicalului acid la sărurile simple pe care le obţine cu acidul 5,5-dietil şi 5,5-difenil-barbituric.

A cercetat influenţa moleculelor mari de acid, precum cel nicotinic, betaoxinaftoic, 5-nitrobarbituric, hexendioic, aurintricarbonic etc. asupra capacităţii de complexare obţinând săruri simple şi complexe noi cu metale bivalente.

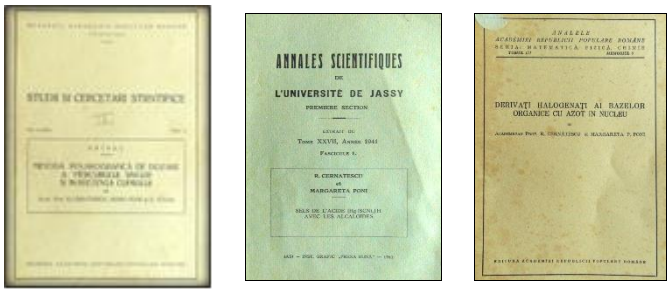


Figura 4. Diverse lucrări publicate de acad. Radu Cernătescu de-a lungul timpului

După înfiinţarea Institutului de Chimie „Petru Poni”, prof. Cernătescu a studiat, pe cale polarografică, complecşii aminelor hidrosulfitului de nichel şi cobalt cu nicotina, dozarea polarografică a nicotinamidei, dozarea mercurului şi a metalelor grele în amestec, dozarea As^{3+} în mediu alcalin, dozarea polarografică a pirocatehinei în prezenţa rezorcinei şi a hidrochinonei.

A dezvoltat o adevărată şcoală de polarografie la Iaşi, la care au venit să se iniţieze cercetători din alte centre universitare şi diverşi ingineri de la fabricile care utilizeau acest mijloc rapid de analiză.

Rezultatele lucrărilor lui Radu Cernătescu au fost publicate în revistele de specialitate din ţară şi străinătate, fiind citate şi comentate de specialiştii din străinătate.

În ultimii ani ai vieţii a locuit în Paris, la Hotel Cambon şi a fost internat în clinica Perrouet, situată în localitatea Neuilly sur Seine, pe strada Pierre Chérest. Margareta Poni, sora mamei, s-a aflat alături de el pe toată perioada spitalizării, susţinându-l şi încurajându-l după intervenţiile chirurgicale la care a fost supus.

Corpul său a fost adus, cu avionul, la Iaşi, unde i s-au organizat funeralii naţionale. Mitingul de doliu s-a desfăşurat în aula „Mihai Eminescu” din palatul universităţii. Cuvinte de omagiere au rostit: academicianul Iuliu Niţulescu, profesor la Facultatea de Medicină, academicianul Costin Neniţescu, academicianul Octav Mayer, din partea Filialei Iaşi a Academiei Române, profesorul Ion Creangă, rectorul Universităţii, profesorul Ilie Matei, apoi, la cimitirul Eternitate, profesorii Eugen Papafil şi Radu Ralea.

Bibliografie

1. Arhiva Muzeului „Poni-Cernătescu”.

2. Arhivele Naţionale Iaşi, Fond Familial Poni,

Mapa Margareta Poni, Mapa Radu Cernătescu.

3. Ifrim, S., *Contribuţii ieşene în ştiinţa chimică*, Editura Performantica, Iaşi, 2011.

4. Petrovanu, M., Herşcovici, M., *Istoria chimiei*, Editura Didactică şi Pedagogică, Bucureşti, 1967.

❖

Muzeul, prin profilul său instituţional, poate oferi prin amplasare stradală, clădire, mijloace muzeotehnice și de relaxare, acel cadru în care oamenii sunt invitaţi să exploreze, să înveţe şi să se simtă confortabil. În particular, referinţa ideatică a muzeelor memoriale devine mult mai ușor de perceput de către vizitatori, mai ales atunci când, prin mijloace specific expoziționale, este combinat interesul pentru știință cu divertismentul programat. În acest sens se justifică din punct de vedere cultural și științific dezvoltarea de-a lungul timpului a unor proiecte culturale menite să exemplifice fenomene specifice fiecărei clase de interes în parte prezente în expoziția permanentă a muzeului.

Astfel, muzeul devine locul în care elevii pot să exploreze obiecte, modele, dar şi experimente, demonstrând şi ilustrând o serie de fenomene predefinite. Din această perspectivă, participanţii la evenimente culturale au posibilitatea să acumuleze cunostinţe despre diverse faţete ale patrimoniului organizat expoziţional printr-o altă modalitate decât cea informaţională, care provoacă gândirea creativă prin metode de învăţare bazate pe explorare, descoperire, experimentare. În general, procesele educative din cadrul muzeului se bazează pe explorarea vizuală şi pluri-senzorială a obiectelor, pe baza cărora vizitatorii îşi pun întrebări şi formulează răspunsuri, construindu-şi propriul lor itinerar personalizat de investigare şi înţelegere.

De-a lungul timpului la Muzeul „Poni-Cernătescu” au fost dezvoltate o serie de proiecte educative dintre care amintim: ***Proiectul Hands on Meteo Science*** (2016); ***Microworld*** (2017), ***Flowers Rock*** (2018), ***Sun Science*** (2019), finanțate de Fundația Comunitară Iași, ***Știința alimentelor*** (2021), care s-au desfășurat în parteneriat cu instituții școlare din Iași, cum ar fi: Colegiul Național „Mihai Eminescu”, Liceul Tehnologic de Automatică și Mecatronică, Colegiul Tehnic de Electronică și Telecomunicații „Gheorghe Mârzescu”, Liceul „Miron Costin″, Liceul „Vasile Alecsandri”, Liceul Tehnologic „Petru Poni”, Colegiul Național de Artă „Octav Băncilă”. Un loc aparte l-a constituit organizarea unei serii de lecții și ateliere de chimie experimentală grupate sub genericul „Clubul de chimie”, care a cuprins programe pentru persoane individuale, familii și grupuri de vizitatori, cu o tematică diversă (chimie distractivă, să cunoaștem sarea, chimia alimentelor, nomenclatura

mineralelor, experiențe cu apă, chimie și meteorologie), conduse de muzeograful Oana Florescu, care au deschis gustul pentru cunoaștere, experimentare, divertisment.

Omagierea personalităților, cu prilejul împlinirii unei cifre rotunde de la nașterea sau dispariția lor din viață, între care menționăm: *IN MEMORIAM Gheorghe Alexa* (expoziție realizată în perioada 28 octombrie – 28 noiembrie 2015)*; 175 de ani de la naşterea lui Petru Poni* (evocare omagială la 25 ianuarie 2016), *Prof. univ. dr. C.V. Gheorghiu. Documente cu semnificaţie memorialistică, documentară şi ştiinţifică* (expoziție temporară, 16 decembrie 2016 – 14 ianuarie *2017); IN MEMORIAM Anastasie Obregia* (evocare, 14 noiembrie 2017*); Cristofor Simionescu – Cărţi, documente şi obiecte de referinţă biografică* (expoziție temporară, 7 octombrie – 20 decembrie 2017); *Radu Cernătescu – Mărturii biografice şi ştiinţifice* (expoziţie temporară, 3 noiembrie – 15 decembrie 2018); *Documente aparținând academicianului Nicolae Costăchescu (*27 septembrie – 27 octombrie 2019); *IN MEMORIAM Margareta Poni* (evocare, 30 octombrie 2019); *IN MEMORIAM Petru Poni* (evocare online, 2 aprilie 2021), *IN MEMORIAM Matilda Cugler Poni – 170 de ani de la naştere* (expoziție, 7 iunie – 31 august 2021), *Familia Petru Poni în documente de arhivă* (expoziție, 8 noiembrie 2022 – 28 februarie 2023), definește scopul principal pentru care Muzeul „Poni-Cernătescu" își conturează astăzi misiunea sa culturală.

Editarea unor cărți și broșuri, care aduc în atenție personalități omagiate la Muzeul „Poni-Cernătescu", între care amintim *Familia Poni. Pagini de corespondenţă*, autori: Oana Florescu, Monica Nănescu, Editura Palatul Culturii, seria Personalităţi, ISBN 978-606-8547-13-8, 2016; *Prof.dr. C.V.Gheorghiu (1894 – 1956). O viaţă dedicată ştiinţei şi învăţământului românesc,autori Monica Nănescu, Oana Florescu,* Editura Palatul Culturii, seria Personalităţi, 2016; *Academician Cristofor Simionescu (1920-2007). O viaţă, o operă, o personalitate*, autori Monica Nănescu, Oana Florescu, Editura Palatul Culturii, seria Personalităţi, ISBN 978-606-8547-24-4, 2017; *Profesori universitari chimişti ieşeni participanţi la Primul Război Mondial*, autori Monica Nănescu, Oana Florescu, Editura Palatul Culturii, seria Personalităţi, ISBN 978-606 8547-30-5, 2018, *Prof. univ. dr. Margareta Poni (1889 – 1973): Mărturii de referinţă biografică şi ştiinţifică,* autori Oana Florescu, Monica Nănescu, Editura Palatul Culturii, Seria Personalităţi: ISBN 978-606-8547-39-8, 2019, constituie o altă preocupare a muzeografilor și cercetătorilor realizată în ideea de a evidenția dimensiunea istorică și științifică a marilor noștri profesori care și-au înscris cu cinste numele în istoria chimiei din țara noastră.

Evenimentele culturale organizate cu prilejul Nopții Internaționale a Muzeelor, concertele de muzică clasică, spectacolele de dans și teatru, dialogurile filosofice organizate în parteneriat cu Asociația Noua Acropolă au completat paleta manifestărilor cultural artistice organizate de muzeu de-a lungul timpului, contribuind la formarea unui segment de public avizat, dornic de-a evolua odată cu instituția muzeală.

Monica NANESCU,
Complexul Muzeal Național „Moldova" Iași
Ștefan cel Mare și Sfânt nr. 1, 700028, Iași
mona_nanescu@yahoo.com

Oana FLORESCU,
Muzeul „Poni-Cernătescu"
Mihail Kogălniceanu nr. 7B, Iași
oana_poni@yahoo.com

Petru Bogdan – 150 ani de la naştere

Motto: *Într-o perioadă istorică şi într-o societate în care valorile sunt inversate, devine imperios necesară cinstirea intelectualilor autentici, a creatorilor de şcoală, a personalităţilor a căror operă va dăinui peste veacuri*. (acad. Bogdan C. Simionescu, la aniversarea a 145 de ani de la naşterea savantului Petru Bogdan, Filiala Iaşi a Academiei Romane, 2018)

Petru Bogdan (29 ianuarie 1873, Cozmeşti, jud. Iaşi – 28 martie 1944, Mediaş) a fost un ilustru savant român. La îndrumarea magistrului Petru Poni care l-a remarcat, obține o bursa de studii la Universitatea „Friedrich Wilhelm" din Berlin unde i-a avut ca profesori pe Jacobus Henricus van't Hoff (primul laureat al Premiului Nobel pentru chimie), Hans Heinrich Landolt (directorul celui de-al doilea Institut de Chimie al Universității din Berlin), Hans Jahn (chimie fizicală), Emil Fischer (chimie minerală), și pe Friedrich Paulsen (filozofie). Și-a susținut în 1901 teza de doctorat, obținând titlul de doctor în filozofie „magna cum laude". După susținerea doctoratului s-a mutat la Universitatea din Leipzig (1901 – 1903), lucrând cu profesorii Max Bodenstein și R. Luther, apoi în laboratorul de chimie fizicală al profesorului Wilhelm Ostwald (viitor laureat al Premiului Nobel pentru chimie).

Întors în țară, devine cel dintâi profesor de chimie fizică din România la Universitatea din Iaşi (1906–1940), unde a înfiinţat prima catedră de chimie fizică din ţara (1913). Ulterior Catedra de Chimie Fizică a căpătat statut independent, devenind prima catedră de profil din ţară (1921). Ca personalitate ştiinţifică complexă, a suplinit Catedra de Căldură şi Electricitate (1905-1907), a fost conferenţiar de matematici generale la Secţia Electrotehnică (1913) şi director al Institutului Electrotehnic (1918-1925). În calitate de decan, prorector şi rector al Universităţii din Iaşi (1926–1932) a influenţat decisiv construcţia, printre altele, a aripei noi a Universităţii ieşene. Dintre numeroşii săi studenți şi discipoli, s-au remarcat viitorii academicieni Horia Hulubei, Theodor V. Ionescu, Alexandru Cişman, Radu Cernătescu.

Ca o recunoaştere a activității sale ştiintifice, Universitatea din Nancy (Franța) i-a acordat titlul de „doctor honoris causa" (1924) şi a fost ales membru titular al Academiei Române (1926). Guvernul Legionar îi impune pensionarea forţată de la Universitatea din Iaşi (1940). Prin Decret Regal, este numit membru în Consiliul Fundaţiilor Culturale Regale ale României, în calitate de Director al Fundaţiei „Regele Ferdinand I" (din 1941 până la sfârşitul vieții).

Prieten din tinereţe cu Garabet Ibrăileanu, Dumitru D. Pătrăşcanu, C. Stere, Mihai Carp, Mihail Sadoveanu, G. Topîrceanu, a făcut parte din prima grupare a revistei Viaţa Românească, ocupându-se de rubrica de ştiintă a revistei. A fost de asemenea administrator de plasă în județul Iaşi, în timpul Răscoalelor din 1907.

În activitatea de cercetare, a studiat toate domeniile de atunci ale chimiei şi fizicii, şi a publicat primul mare tratat de chimie fizică din România, în patru volume (I. Teoria Cinetică; II. Termodinamica; III. Electrochimia; IV. Radioactivitatea, 1924). A lăsat numeroase lucrări şi studii: Influenţa neelectrolitelor asupra tensiunii de vapori a acidului acetic (1903); L'équation de Van der Waals et l'état liquide

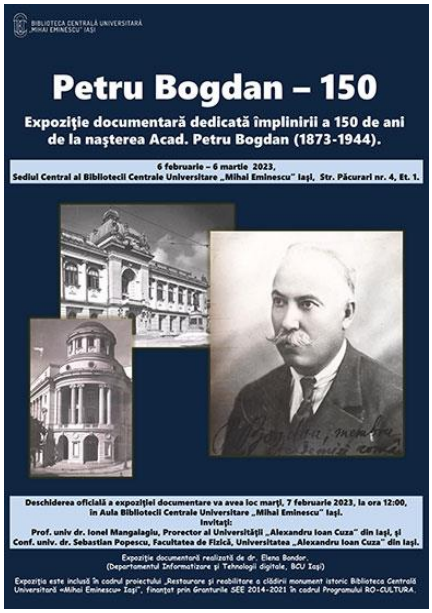
(1906); Starea de disociere la acidul azotic (1906); Teoria electrolitică a materiei (1906); Fondul molecular al lichidelor (1912); Repejunea sunetului la corpurile lichide (1913); Nouvelles applications de la théorie de Van der Waals (1916); Introducere în studiul chimiei fizice (2 vol., 1921, 1924); Introducere în electrochimie (1928); Radioactivitatea şi structura materiei (1929); Cercetări asupra numerelor de transport ale ionilor (1930); Considérations sur la constitution des substances liquides (2 vol., 1933–1934); Polarisation moléculaire et la constante capillaire (1938); La tension superficielle des corps liquides (1943); La théorie cynétique des corps liquides (1943) ş.a. În 1937 i-a apărut lucrarea Le developpement de la chimie en Roumanie.

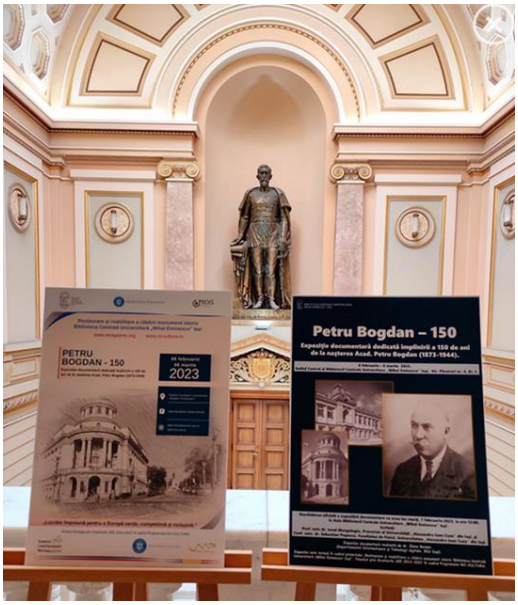
În primavara lui 1944 s-a stins din viaţă la Mediaş (în drum spre Petroşani), în timpul evacuării Fundaţiei „Regele Ferdinand I”. Inițial a fost înmormântat la Petroşani, cu onoruri militare ; un an mai târziu a fost deshumat şi, ajuns la Iaşi, a fost reînhumat pe data de 15 septembrie 1945, în Cimitirul Eternitatea. Casa din Iași în care a locuit Profesorul Petru Bogdan, cunoscută sub numele de Casa Bogdan-Culianu, Casa Ianov, sau Casa cu pridvor de lemn, este inclusă pe Lista monumentelor istorice.

Expoziţia documentară Petru Bogdan – 150

Cu ocazia împlinirii a 150 de ani de la naşterea ilustrului savant român, Biblioteca Centrală Universitară BCU „Mihai Eminescu” din Iaşi a organizat, în perioada 6 februarie - 6 martie 2023, o expoziţie documentară. Expoziţia a fost organizată cu sprijinul doamnei dr. Elena Bondor (Departamentul Informatizare şi Tehnologii digitale al BCU Iasi). Evenimentul a fost susţinut în cadrul unui proiect finanțat prin Granturile SEE 2014 – 2021, în cadrul Programului RO-CULTURA.

Deschiderea oficială a expoziţiei documentare a avut loc în data de 7 februarie 2023, în Aula BCU „Mihai Eminescu” Iaşi, invitaţi fiind Prof. univ dr. Ionel Mangalagiu (Prorector al Universităţii „Alexandru Ioan Cuza” din Iaşi), şi Conf. univ. dr. Sebastian Popescu (Facultatea de Fizică, Universitatea „Alexandru Ioan Cuza” din Iaşi), care au adus un omagiu personalităţii de excepţie a prof. Petru Bogdan.





Expoziţia cuprinde atât fotografii inedite, documente rare din Arhiva familiei Culianu-Petrescu (prin intermediul doamnei Tereza Culianu-Petrescu, nepoata savantului Petru Bogdan), precum şi documente originale din fondurile BCU Iaşi, după cum a precizat în cuvântul de deschidere Conf. univ. dr. Ioan Milică, directorul general al BCU Iaşi.

Prof. univ dr. Ionel Mangalagiu a evocat reperele semnificative din viața profesorului, savantului, academicianului, rectorului, omului de cultură, și personalității copleșitoare, care a fost Petru Bogdan.

Referitor la expoziția "Petru Bogdan – 150", d-sa a precizat "Sunt o mulțime de comori, acolo, comori care consider că ar trebui aduse la cunoștința publicului larg și sper că televiziunile care au fost, să fi filmat măcar parțial tot ce este prezentat, întrucât profesorul Petru Bogdan merită o astfel de comemorare. Merită să fie cunoscut de întrega comunitate de români din Iași și din întreaga țară". Expunerea a punctat personalitatea lui Petru Bogdan profesorul (îndeosebi contribuției în domeniul chimiei fizice), rectorul (extinderea Palatului Universitar din Iaşi şi convingerea Guvernului şi Parlamentului de a înființa Școala Politehnică "Gheorghe Asachi" din Iaşi – 1937) şi directorului Fundaţiei „Regele Ferdinand I" (în cadrul Palatul Fundației Universitare „Regele Ferdinand I" din Iași funcționând BCU "Mihai Eminescu").

Conf. univ. dr. Sebastian Popescu, în calitate şi de coordinator al selecției şi pregătirii lotului național al României la Olimpiada Internațională de Fizică, a menționat „Astfel de oameni, astfel de personalități, precum Petru Bogdan, și-au asumat fără să clipească acest efort uriaș, având în vedere ce se întâmpla în spațiul românesc, de a dezvolta și mai mult știința și nivelul de educație față de cel care era până atunci. Aș vrea să subliniez acum foarte clar și de la început, faptul că el poate constitui oricând pentru elevii de toate vârstele, un exemplu demn de urmat. Petru Bogdan a avut un rol foarte important la Universitate, având în vedere că a avut un fler extraordinar de a alege oameni, de a ține lângă el doar oamenii buni cu care a ales să lucreze și care aveau să ajungă peste timp membri ai Academiei Române". A fost îndeosebi punctată pregătirea enciclopedică a profesorului Petru Bogdan care ajunsese să predea cursuri atât de chimie fizică, cât şi de fizică şi matematică.

A fost apreciată îndeosebi activitatea savantului Petru Bogdan care s-a desfăşurat în vremuri cumplite, practic între războiul de independență Ruso-Turc până la finele celui de al doilea Război Mondial, cu toate vicisitudinile. Mai mult, asemenea celorlalți corifei ai şcolii româneşti ai acelor vremuri, dupa ce s-a remarcat în străinatate la marile universitați europene, dintr-un patriotism responsabil asumat, a ales în mod firesc să revină în țară unde să contribuie decisiv la dezvoltarea şcolii româneşti, prin eforturi imense, şi nu la dezvoltarea prestigiului personal.

Bibliografie

Ioan Dafin, Figuri ieșene, ed. II, Iași, 1926;

V. Ababi, M. Şchiopu, Petru Bogdan, Bucureşti, 1964; D. Moroianu, I. M. Ştefan, Întemeietorul chimiei fizice în ţara noastră: P. Bogdan, în „Maeştrii ingeniozităţii româneşti", Bucureşti, 1976; Personalităţi româneşti ale ştiinţelor naturii şi tehnicii. Dicţionar, Bucureşti, 1982;

Enciclopedia marilor personalităţi din istoria, ştiinţa şi cultura românească de-a lungul timpului (ed. Ion Văduva Poenaru), vol. I, Bucureşti, 1999;

Discursuri de recepție. V (1919–1936), vol. îngr. și indice general de Dorina N. Rusu, București, 2005;

Ionel Maftei, 1000 personalităţi ieşene. Lexicon, Iaşi, 2008;

Ecaterina Țarălungă, Enciclopedia identității românești. Personalități, București, 2011.

http://www.bcu-iasi.ro/Petru-Bogdan-150-expozitie-documentara-virtuala

Dr. Daniela IVANOV
Institutul de Chimie Macromolculară "Petru Poni" Iasi
dani@icmpp.ro

Profiluri de specialiști

Profesor dr. ing. Angela LUPU – specialist în tehnologie chimică organică

În specializarea *Tehnologie chimică organică* au excelat mulți ingineri chimiști din producție, cercetare, proiectare și mediul universitar. Tradiția *Facultății de Inginerie Chimică și Biotehnologii* din București, prin cadrele didactice și personalul auxiliar din departamentul de *Chimie Organică C. D. Nenițescu* precum și din colectivul de *Tehnologie chimică organică* din cadrul departamentului de *Bioresurse și Știința Polimerilor* are ca bază rezultatele remarcabile obținute de industria chimică din România de-a lungul istoriei acesteia.

Realizările unor cercetători și profesori de excepție din domeniul tehnologiei chimice organice ne-au îndemnat să încercăm o rememorare a unor momente importante din activitatea acestora în cadrul unei vizite făcute doamnei profesor dr. ing. Angela Lupu, în prezent pensionar, care a lucrat alături de Iosif Drimuș, Ion Iliuță, Corneliu Tărăbășanu, Florin Urseanu, etc.

Doamna Prof Angela Lupu s-a născut în București unde a urmat școala primară, gimnaziul și liceul. În anul 1955 a fost admisă la *Facultatea de Chimie Industrială* pe care a absolvit-o în anul 1960. Din această perioadă doamna Prof. Lupu își amintește de profesorii excepționali din punct de vedere profesional și uman, personalități care au constituit exemple pentru viitoarea ei carieră.

Vă prezint în continuare câteva aspecte privitoare la activitatea îndelungată a doamnei profesor dr. ing. Angela Lupu din cadrul Facultății de Chimie Industrială. Ele vizează îndeosebi activitatea de cercetare a cadrelor didactice implicate în proiecte alături de studenți, activitate nedespărțită de cea didactică a colectivului din care doamna profesor a făcut parte. O mare parte din proiectele de cercetare au fost coordonate de dna Prof. Angela Lupu și s-au finalizat cu brevete și apoi cu implementare practică în întreprinderile industriale. Cele mai importante dintre

acestea au fost: “Instalație pentru fabricarea nitrililor alifatici” (autori dr. ing. Dumitru Savu, ing. Jean Vasilescu, ing. Dragoș Ionescu, dr. ing. Angela Lupu) și “Instalație pentru sinteza aminelor și poliaminelor alifatice și a derivaților lor” (autori dr. ing. Angela Lupu, ing. Jean Vasilescu, ing. Ion Florea, dr. ing. Dumitru Savu). Aceste rezultate ale cercetării au stat la baza realizării unei instalații de 100 t/an pentru fabricarea de inhibitori de coroziune de tip aminic și derivați care a funcționat în perioada 1981-2010 la întreprinderea Stela București. Proiectarea și implementarea instalației s-au efectuat sub coordonarea și cu responsabilitatea directă a dnei. Prof. dr. ing. Angela Lupu.

O altă realizare a colectivului dnei. Prof. dr. ing. Angela Lupu a fost stabilirea tehnologiei pentru fabricarea inhibitorilor de tip imidazolinic, implementată la întreprinderea MARCHIM, combinatul Chimic CIPA-Oltchim și la VERACHIM din Giurgiu. Acești inhibitori au fost utilizați în multe întreprinderi: Danubiana-București, Dacia-Pitești, Construcții piese metalice-București, etc. Aceste realizări sunt prezentate în lucrarea monografică coordonată de prof. Valeriu Jinescu sub egida Academiei de Științe Tehnice din România intitulată “Pagini din istoria dezvoltării industriei României” [1]. Dna. Prof. Angela Lupu A infiintat Asociatia Biodiesel în anul 1993, împreună cu un grup de cercetători din cadrul Societății ChiminformData.

Pe lângă cercetarea contractuală (60 contracte) concretizată prin 25 de brevete și implementări practice, doamna prof A. Lupu a adus și o contribuție teoretică importantă în domeniul tehnologiei organice cuprinsă în publicații numeroase: 41 articole în reviste de specialitate, 19 îndrumare litografiate, 11 cărți tipărite și 21 îndrumare litografiate pentru studenți. O parte din cercetările efectuate au fost diseminate în 27 comunicări științifice.

Doamna Angela Lupu a fost profesor titular al disciplinelor: *Tehnologie chimică organică, Substanțe tensioactive, Bazele fizico-chimice ale proceselor chimice organice, Tehnologii neconvenționale pentru sinteze organice, Inhibitori de coroziune (Master)*. A condus peste 200 proiecte de diplomă ale inginerilor pregătiți la această disciplină, a participat la numeroase conferințe de specialitate și a contribuit la introducerea și dezvoltarea unor domenii noi de studiu în facultate (electrochimia organică), sprijinind cadrele didactice tinere.

Doamna profesor Angela Lupu și-a exprimat aprecierea asupra sistemului de învățământ chimic românesc, care a fost fondat pe programe bine gândite, cu cadre didactice bine pregătite, cu o disciplină a muncii ordonată și cu multă dăruire. Noile cerințe ale industriei și noile condiții mondiale, care au dus la un declin al marii industrii chimice în România, au impus propunerea unor diversificări, actualizări spre noile tendințe ale științei și tehnicii, ale căror roade sunt așteptate în viitor. Principala preocupare a cadrelor didactice de azi trebuie să fie aceea legată de resursa umană, astfel încât să se insufle colaboratorilor și studenților dorința de performanță, ambiția realizării unor țeluri, întărindu-le capacitatea de a munci pentru atingerea lor și făcându-i conștienți de bucuria muncii împărtășite pe drumul cunoașterii.

INTERVIU

I1. Doamna profesoara spuneți-mi când s-a mai scris despre dumneavoastră și realizările dvs.?
R1. S-a scris înainte de anul 1989 despre realizările mele profesionale în *Viața studențească* [2] și în ziarul *Informația Bucureștiului* [3], patru articole dedicate instalației construite de mine la Fabrica STELA - București, de 100 t/an inhibitori de coroziune pe bază de amine după brevetul de invenție 78454/26.11.1981. Aceasta a fost atribuită ulterior Colectivului de detergenți de la ICECHIM, deși nu era concepția lor. Și în anul 1988 în cadrul emisiunii radiofonice ORIZONT 2000 redactor Mircea Muntean am fost invitată la două ediții (noutăți științifice și producția de mic tonaj). După anul 1990 am fost menționată în Dicționarul specialiștilor un WHO'S WHO în știința și tehnica românească [4] și la împlinirea a 70 de ani de viață am fost menționată de Revista de Chimie în anul 2008 [5].

I2. Care era concepția instalației de la Fabrica STELA – București?
R2. Am conceput-o ca o instalație pilot în care să se sintetizeze prototipuri de substanțe aminice folosite în diverse domenii ca: inhibitori de coroziune, aditivi pentru industria textilă, izolații, etc. Despre aceste produse, lansate sub marca *COSINTAM,* a scris prof. V. V. Jinescu [1].

I3. Povestiți-ne câteva date despre copilăria dumneavoastră. Unde v-ați născut?
R3. M-am născut pe ultima stradă din București, str. Brătășanca 118, sector 5. În clasele I-IV am învățat în fiecare an în clase improvizate în clădiri aflate pe Șoseaua Alexandriei, fiecare încălzită cu godin, iar clasele V-VII în Școala nr.52 din str. Amurgului, foarte bună și frumoasă, cu terenuri de volei, muzeu de păsări împăiate, cu pian, la care profesoara de muzică ne acompania corul. În clasa a șaptea a venit ca profesoară de chimie dna. Babeș care a organizat și laboratorul de chimie. Dânsa a susținut să mă înscriu la Școala Medie Tehnică de Chimie de pe str. Batiștei, în vila lui Nicolae Filipescu (fost primar al Bucureștiului în perioada 1893-1895). Și astfel am pornit-o în viață cu *CHIMIA*. Toate profesoarele veneau din centrul Bucureștiului la ore. Au fost minunate și profesional și pedagogic. În anul 1952 am devenit elevă la Școala Medie de Chimie de unde trebuia să ies tehnician după 4 ani. N-a fost să fie așa, pentru că după 3 ani a venit reforma și s-a transformat în *profesională*. Norocul meu a fost că directorii Florescu și Ioan m-au ajutat să dau diferențe pentru clasele VIII-X la Liceul Caragiale și iată-mă cu examenul de maturitate luat în anul 1955. Am intrat la Facultatea de Chimie Industrială în anul 1955, pe care am terminat-o în anul 1960. În liceu am avut alți profesori de excepție, pe cât de bine pregătiți, pe atât de dăruitori și iubitori de profesie, sentimente pe care ni le-au insuflat și nouă. Mulți colegi au ajuns cadre didactice universitare, profesori de liceu și cercetători.

I4. Cum ați ajuns cadru didactic în Facultate?
R4. Domnul Profesor Drimuș, care a fost conducătorul științific al proiectului meu de diplomă, intitulat *Oxidarea parafinelor în câmp de radiații UV*, mi-a propus să vin la catedră în anul absolvirii mele (1960), după ce m-a inclus într-un proiect de cercetare pe care l-am realizat împreună și de care a fost foarte mulțumit

Foto 1. Angela Lupu în 1960 lucrând la proiectul de diplomă

Foto. 2. Angela Lupu împreună cu Prof. Iosif Drimuș după susținerea tezei de doctorat, 1973

I5. Lucrând la disciplina de Tehnologie organică sub conducerea profesorului dr. docent Iosif Drimuș ați colaborat cu întreprinderile?

R5. De la început, adică din anul 1960 și până în anul 2008, când am ieșit din învățământ prin pensionare, am avut contracte de colaborare cu multe întreprinderi. Cea mai valoroasă performanță a fost realizarea unei instalații de fabricare a tensidelor cationice folosite și ca inhibitori de coroziune cu capacitatea de 100 t/an, eu fiind responsabilă de proiectare, realizare și punere în funcțiune după brevetele noastre.

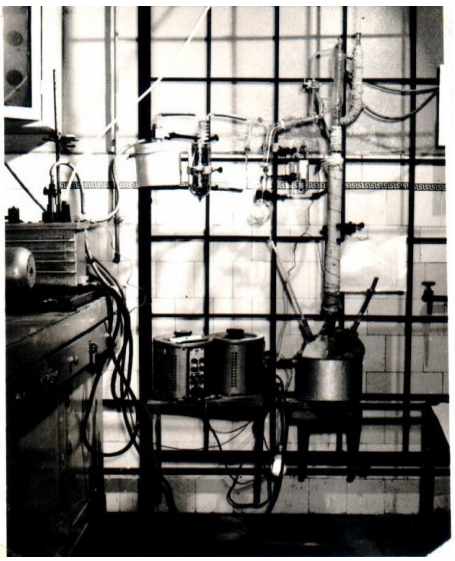


Foto 3. Instalația de rectificare a nitrililor din laboratorul de tehnologia compușilor organici (TCO)

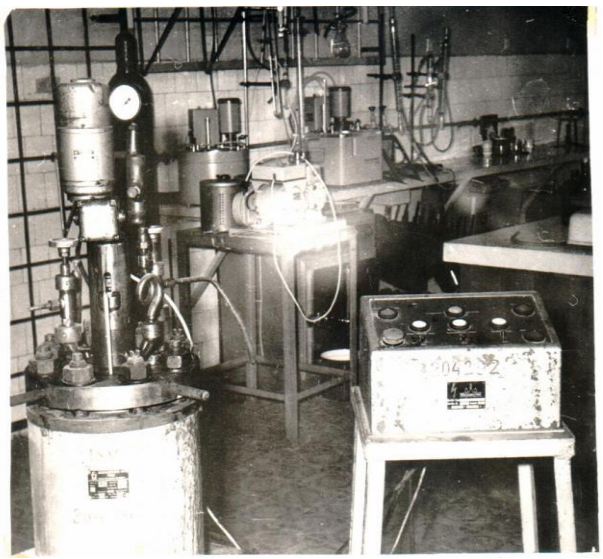


Foto 4. Reactorul pentru hidrogenarea nitrililor la amine destinat cercetării în laboratorul de TCO

I6. Aveți amintiri frumoase despre aceasta?
R6. Dimpotrivă, este o poveste dureroasă pentru mine, deoarece nu mi s-a recunoscut contribuția adusă, nici de ICECHIM și nici de colegi, care m-au chinuit (acesta e cuvântul) cu atitudinea lor. Am fost printre puținele cadre didactice din facultate care au realizat așa ceva.

I7. Cum a fost viața dvs. de cadru didactic?
R7. Am lucrat cu drag la teza de doctorat *Contribuții la polietoxilarea aminelor grase și naftenice în vederea elaborării tehnologiei de fabricare a unor tenside,* încheiată sub coordonarea domnului Profesor Drimuș in 1973. Viața de cadru didactic a fost foarte dură, concursuri de promovare (firești), ședințe de partid, intrigi, *tras sfori* de către invidioși, leneși, dar dornici de mărire și posturi de *șefi*.

I8. Din câte știu, nu ati avut funcții de conducere. Așa este?
R8. Așa este. Numai funcții *de muncă* (ex. Director educativ la Cămin P1). Eram singura femeie din catedră – restul erau bărbați. Am luat-o ca pe o pedeapsă.

I9. Știu că ați avut o activitate laborioasă de cercetare și elaborare de cursuri, cărți sau manuale. Puteți menționa câteva?
R9. Am publicat articole in diferite reviste de specialitate, cărți în edituri încă din anul 1975 – fiind autor al manualelor de tehnologie organică pentru licee cl. XI si a XII-a, coautor la cartea *Inhibitori de coroziune pentru protecția metalelor* [6]. Dintre realizările de care sunt mândră trebuie să menționez publicarea lucrării *Mică enciclopedie de tehnologie chimică* [7], *Termeni de chimie și chimie industrială. Dicționar explicativ* [8] și cartea intitulată Biocombustibili. Biodiesel, bioetanol, sun diesel, biobutanol, biometanol, bioaditivi [9] făcută de mine împreună cu Gheorghe Hubcă. De altfel, ați enumerat lucrările elaborate de mine.

I10. Ce părere aveți de calitatea studenților și de învățământul actual?
R10. Aveam un sistem de învățământ foarte bun cu programe gândite cu cadre didactice bine pregătite și cu o disciplină a muncii ordonate și cu pasiune. După anul 1990 s-au încercat diverse modificări, în scopul ,,îmbunătățirii'' lui... dar, până când nu vor gândi modalitățile prin care elevii sau studenții să se dedice cu sufletul, gândirea lor proprie și voința, nu se vor obține performanțele așteptate. Un rol important îl are și competiția!

I11. Cred ca sunteți o fire optimistă și ați trecut peste toate greutățile. Ca dovadă, suntem împreună după atâția ani și mă bucur să vă găsesc într-o casă primitoare și îngrijită, înconjurată de familie și de prietenii care au rămas. I-ați iertat pe cei care v-au necăjit? Vă lipsește recunoașterea oficială?
R11. I-am iertat pe cei care m-au necăjit și mă bucur de ceea ce am realizat, chiar și fără o recunoaștere oficială.

I12. Ce părere aveți despre calitatea învățământului tehnic superior în general și despre cel de chimie și inginerie chimică? Ce sugestii aveți pentru dezvoltarea lui?
R12. Trebuie să colaboreze cu producția prin contracte; să rezolve probleme noi, performante, chiar cu societăți private mai mici sau mai mari - prin brevetarea soluțiilor. Nu se poate dezvolta industria chimică fără aportul științei cu soluții proprii

– nu numai cumpărând produsele altor țări. Și toate acestea se rezolvă numai printr-o pregătire profesională temeinică, progresivă și cu pasiune.

I13. Ce părere aveți despre nivelul și calitatea cercetării științifice în învățământul de inginerie chimică?
R13. Cercetarea științifică proprie este garanția progresului tehnic și a celui material. Cadrele didactice trebuie să identifice talentele, să îi asocieze pe studenți ca parteneri și viitori creatori. Evident că aceasta presupune o pregătire profesională temeinică și o pasiune manifestă și antrenantă și pentru alți colegi. Colaborarea e benefică. Lucrul în echipă e sinergic pentru reușită.

I14. Ce vă doriți în prezent?
R14. Multe:

- Sănătate mai multă decât am!
- Să mă viziteze fostele studente sau studenți pe care i-am iubit și ajutat uneori în defavoarea băiatului meu pe care îl lăsam să se descurce singur!
- Să aud numai de bine!
- Inginerii chimiști să realizeze cât mai multe invenții aplicate, lucrări științifice cu răsunet și peste hotare!
- Să fie fericiți în toate!

În încheierea interviului i-am mulțumit doamnei Prof. dr. ing. Angela Lupu pentru timpul acordat și i-am dorit ca toate să se împlinească.

Doamna Prof. dr. ing. Angela Lupu mulțumește și felicită colectivul de redacție al Buletinului SChR pentru recunoașterea trecutului drept garanție pentru viitor.

Bibliografie

1. *Pagini din istoria dezvoltării industriei României*, Coordonatori: V.V. Jinescu, I. Avram, S. Necula, Editura AGIR, 2016
2. *Viata studențească* din 10.10.1985
3. *Informația Bucureștiului* din 29.10.1986
4. *Dicționarul specialiștilor*, Vol. 1, Ediția I, Editura Tehnică București, 1996
5. Revista de Chimie nr. 7 din 2008
6. A. Lupu, M. Constantinescu, I. Drimuș - *Inhibitori de coroziune pentru protecția metalelor*, Ed. Tehnică, București, 1982
7. A. Lupu, Gh. Jinescu ș.a, coordonator Al. Balaban, *Mică enciclopedie de tehnologie chimică*, Editura Zecasin, vol. I-1999, vol. II-2001
8. A. Lupu, D. Turtoi, M. Bulearcă, D. C.A. Ștefan– *Termeni de chimie și chimie industrială. Dicționar explicativ*, Editura Semne, București, 2002
9. A. Lupu, Gh. Hubcă, *Biocombustibili. Biodiesel, bioetanol, sun diesel, biobutanol, biometanol, bioaditivi.* Editura MatrixRom, 2013

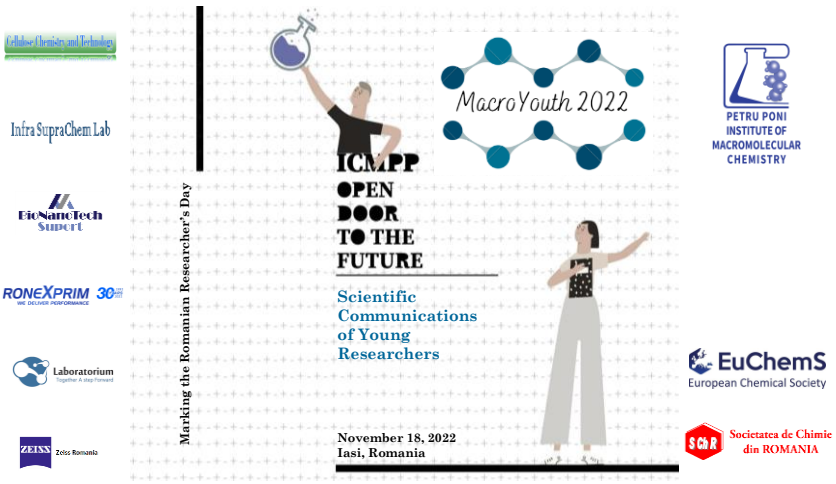
Profesor Emerit Eleonora-Mihaela UNGUREANU
Școala Doctorală Chimie și Biotehnologii
Facultatea de Inginerie Chimică și Biotehnologii,
Universitatea Politehnica din București
em_ungureanu2000@yahoo.com

Evenimente științifice

A treia ediţie a

SESIUNII DE COMUNICĂRI ŞTIINŢIFICE A TINERILOR CERCETĂTORI ICMPP – POARTĂ DESCHISĂ SPRE VIITOR MacroYouth 2022

Ajunsă la cea de-a 3-a ediție, Sesiunea de comunicări științifice a tinerilor cercetători, MacroYouth 2022, a fost organizată de Institutul de Chimie Macromoleculară „Petru Poni” - ICMPP, în data de 18 noiembrie 2022, pentru a marca Ziua Cercetătorului din România. Încă de la prima ediţie, dedicată centenarului nașterii Acad. Cristofor I. Simionescu, acest eveniment oferă tinerilor cercetători (masteranzi, doctoranzi și postdoctoranzi) oportunitatea de a prezenta rezultate științifice originale, acoperind subiecte din chimia organică, anorganică și macromoleculară precum și din fizica polimerilor și a materialelor polimere. Pentru a oferi un cadru cât mai larg, la fel ca în cazul ediţiilor precedente, manifestarea ştiinţifică din acest an s-a desfăşurat în sistem hibrid, atât on-site cât și on-line (în special pentru participanții a căror prezenţă la Iași nu a fost posibilă), sesiunea fiind de această dată cu participare internațională, prezentările orale fiind susținute în limba engleză.



Sesiunea de comunicări științifice a fost deschisă de directorul ICMPP, dr. Valeria Harabagiu, care a accentuat importanța acestui eveniment pentru tinerii cercetători, ca oportunitate de a-şi prezenta rezultatele într-o atmosferă adecvată, de a schimba informații și de a crea noi legături cu colegi ale căror interese științifice și experiență sunt similare şi/sau complementare. În continuare, secretarul științific al ICMPP, dr. Marcela Mihai, a prezentat succint informații referitoare la Societatea de Chimie din România (SChR), responsabilă de publicații precum Buletinul Societății Române de Chimie, Revista de Chimie, Chimia, dar și la Societatea Europeană de Chimie (EuChemS), o platformă pentru discuții științifice, care reprezintă societățile naționale de chimie și alte organizații conexe de chimie, din Europa, inclusiv SChR.

În plus, cele două societăți au secții dedicate tinerilor chimiști, invitând particianții la MacroYouth să adere la acestea.

Începând cu ediția a doua, organizatorii au oferit șansa tinerilor participanți la MacroYouth să audieze în deschiderea manifestării științifice o prelegere susținută de o personalitate marcantă din domeniul chimiei. Astfel, la cea de-a doua ediţie a fost invitată pentru a susţine o conferinţă plenară dna. dr. Dorina M. Opriş (Laboratoarele Federale Elvețiene pentru Știința și Tehnologia Materialelor – Empa; Laboratorul de Polimeri Funcționali, Dübendorf, Elveția). La ediția de anul acesta, dl. Acad. Marius Andruh, vicepreședinte al Academiei Române, Director al Institutului de Chimie Organică și Supramoleculară „C. D. Nenițescu" al Academiei Române, București a susținut o conferință plenară prezentând o abordare interdisciplinară a chimiei coordinative.

Programul științific al MacroYouth 2022 a cuprins 23 de prezentări orale ale tinerilor cercetători de la Institutul de Chimie Macromoleculară „Petru Poni" Iași, Institutul de Chimie Fizică „Ilie Murgulescu" București, Facultatea de Chimie a Universităţii din Bucureşti, Universitatea „Dunărea de Jos" din Galați, Academia Tehnică Militară „Ferdinand I" București, Institutul Național de Cercetare – Dezvoltare pentru Chimie și Petrochimie – ICECHIM București, Institutul de Polimeri din cadrul Academiei Bulgare de Științe (Sofia, Bulgaria) și Institutul de Chimie Teoretică și Fizică al Fundației Naționale Elene de Cercetare din Atena (Grecia). În plus, rezultatele științifice prezentate au fost obținute în urma diferitor colaborări cu cercetători de la instituții de renume din străinătate, precum Institutul de Cercetare a Polimerilor din Dresda (Germania), Institutul de Microbiologie „Stephan Angeloff", Plovdiv (Bulgaria) sau prestigioase insituții naționale, precum Centrul de Cercetări pentru Protecţia Mediului și Tehnologii Ecologice (București), Facultatea de Inginerie Chimică și Biotehnologii (București), Institutul de Chimie Organică și Supramoleculară „C. D. Nenițescu" (București), Facultatea de Farmacie - Universitatea „Titu Maiorescu" (București), Universitatea de Științe Agronomice și Medicină Veterinară (București), Facultatea de Biologie a Universității din București, Facultatea de Inginerie și Agronomie din Brăila (Galați), Facultatea de Chimie din cadrul Universității „Alexandru Ioan Cuza" (Iași), Facultatea de Inginerie Chimică și Protecţia Mediului „Cristofor Simionescu" din cadrul Universităţii Tehnice „Gheorghe Asachi" (Iași).

Conferința s-a finalizat cu o ceremonie de premiere a celor mai bune prezentări orale, după evaluarea calității științifice a prezentărilor de către comitetul științific al MacroYouth 2022, oferindu-se următoarele premii:

- Premiul I (500 lei): Mihai Răducă pentru lucrarea „Binuclear complexes bearing paramagnetic compartmental ligands synthesized from 2,6-bis(hydroxymethyl)-p-cresol";
- Premiul II (400 lei): Irina Apostol pentru lucrarea „Natural polymers-based materials as adsorbents for anionic dyes";

- Premiul III (300 lei): Elvira Turcu pentru lucrarea: „Study of sunflower and corn stalk pith as raw materials in preparation of carbonaceous adsorbents”;
- Diploma „Sorin I. Roşca” a Societăţii de Chimie din România: Marin Trofin pentru lucrarea „Zwitterionic grafted gellan: synthesis, solution and gel properties”.

În plus, au fost oferite și celorlați participanți materiale publicitare din partea sponsorilor manifestării științifice – Societatea de Chimie din România (SChR), BioNanotech, Cellulose Chemistry and Technology, Infra SupraChem Lab, Ronexprim, Zeiss și Laboratorium.

La încheierea MacroYouth 2022, d-na dr. Marcela Mihai și dl. Acad. Marius Andruh au exprimat aprecieri privind calitatea și complexitatea lucrărilor ştiinţifice prezentate de către tinerii cercetători. În plus, a fost formulată invitaţia de participare la cea de-a 4-a ediţie a MacroYouth, în 2023, cu încurajarea tinerilor cercetători de a participa în număr cât mai mare la această manifestare științifică, deschizându-le astfel calea spre cunoaștere, împărtășire a rezultatelor și deschiderea de colaborări între aceștia. De asemenea, s-au adresat mulţumiri echipei care a contribuit la organizarea acestei manifestări științifice, un grup de tineri entuziaști care au investit timp și energie pentru reușita MacroYouth 2022.

Dr. Andra-Cristina ENACHE Dr. Petrişor SAMOILĂ Dr. Marcela MIHAI
Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni
Website: www.icmpp.ro; e-mail: samoila.petrisor@icmpp.ro

Proiect

BioMat4CAST – „Petru Poni" Institute of Macromolecular Chemistry
Multi-Scale In Silico Laboratory For Complex And Smart Biomaterials

Centrul de Cercetări Avansate pentru Bionanoconjugate și Biopolimeri (IntelCentru) din cadrul Institutului de Chimie Macromoleculară „Petru Poni" (ICMPP), a câștigat competitiv și implementează proiectul BioMat4CAST - Multi-Scale in Silico Laboratory for Complex and Smart Biomaterials.

Proiectul, cu o valoare totală de 2 500 000 Euro și o perioadă de implementare de 60 luni (5 ani), este finanțat prin Orizont Europa: HORIZON-WIDERA-2022-TALENTS-01-01 — ERA Chairs.

Obiectivul strategic al proiectului BioMat4CAST este implementarea unei schimbări structurale în paradigma managementului științific al Institutului de Chimie Macromoleculară „Petru Poni" (ICMPP), Iași, România, prin înființarea unui grup de cercetare competitiv în domeniul chimiei computaționale sub supravegherea unui cercetător remarcabil în domeniul chimiei computaționale, prof. Aatto Laaksonen (Laboratorul Arrhenius, Universitatea Stockholm, Suedia). Obiectivele proiectului BioMat4CAST se adresează direct țintelor programului Orizont Europa: „susținerea organizațiilor de cercetare pentru a atrage cercetători și/sau inovatori remarcabili în acest domeniu științific astfel încât să atingă excelența pe o bază durabilă".

Realizarea de legături mai bune, mai strânse și mai trainice între actorii din cercetare și inovare din Spațiul European de Cercetare și nu numai reprezintă o cerință dacă Europa în ansamblu dorește să-și valorifice excelența la nivelul Uniunii Europene. Pentru a încuraja dezvoltarea științifică și managerială a instituțiilor de cercetare din statele cu participare mai modestă în Programul Cadru de Cercetare European, acțiunile ERA Chairs își propun să atragă, într-o manieră durabilă, oameni de știință remarcabili de la universități sau organizații de cercetare de prestigiu din Europa sau din lume. Crearea unui grup de cercetare permanent și înalt calificat în domeniul științific ales, va asigura excelența, vizibilitatea și o mai bună integrare în

Spațiul European de Cercetare (ERA), precum și stimularea competitivității în finanțarea cercetării și promovarea reformelor instituționale aliniate la prioritățile ERA.–Proiectele de tip ERA Chair vor sprijini universitățile sau organizațiile de cercetare din țările eligibile să atragă și să mențină resurse umane de înaltă calitate sub conducerea unui cercetător remarcabil și manager de cercetare („ERA Chair holder”) și să pună în aplicare schimbări structurale pentru a atinge excelența într-un mediu durabil. În acest spirit, proiectul BioMat4CAST vine în completarea direcțiilor de cercetare din institut, propunându-și ancorarea acestora în tendințele cercetării moderne așa cum sunt ele structurate atât din perspectiva Strategiei pentru Sustenabilitate pentru Produse Chimice (CSS), cât și din punct de verere al Pactului Verde European. Aceste tendințe se regăsesc, de asemenea, în Strategia de Specializare Inteligentă a României 2021-2027 și în Strategia Națională de Cercetare, Inovare și Specializare Inteligentă 2022-2027.

Proiectul BioMat4CAST va fi implementat în Centrul de Cercetare Avansată pentru Bionanoconjugate și Biopolimeri (INTEL) din cadrul Institutului de Chimie Macromoleculară „Petru Poni” - INTEL Centru, departament care a fost construit din prima generație de Fonduri Structurale (2012) printr-o investiție de 5 milioane euro. Dr. Mariana Pinteală, coordonatorea Intel Centru, are o permanentă preocupare, încă de la crearea centrului, în 2012, pentru atragerea de fonduri pentru echipa pe care o coordonează şi confirmă faptul că atragerea de fonduri în sinergie reprezintă o adevărată provocare pentru ea și echipa pe care o coordonează.

Proiectul BioMat4CAST va ridica standardele științifice ale activității de cercetare atât în cadrul Intel Centru, cât și în ICMPP, introducând în tematica institutului o direcție de cercetare extrem de modernă, care în prezent nu este abordată într-o manieră sistematică nici în regiunea de NE, nici la nivel național în România, respectiv chimia computațională. Cu toate acestea, chimia computaţională reprezintă piatra de bază a cercetării în domeniul chimiei moderne, fiind un suport în previzionarea proprietăților compușilor dezvoltați, permițând totodată reducerea numărului de experimente preliminare generării noilor compuși, reducerea costurilor cercetării, a timpilor de lucru și cu impact benefic asupra mediului. Chimia computațională permite generarea structurilor dorite (cu proprietăți prestabilite) întâi pe calculator și, ulterior, transpunerea acestora în practică. La ora actuală, la nivel național se fac abia primii pași în acest domeniu astfel încât proiectul BioMat4CAST poate fi considerat un pionerat științific. O provocare majoră o reprezintă și pregătirea echipei care va lucra în domeniul chimiei computaționale. Profesorul Aatto Laaksonen, cu notorietate în acest domeniu, se va ocupa în mod special de acest aspect, iar alături de el și-au arătat disponibilitatea și alti cercetători de prestigiu, care vor contribui la formarea echipei, dintre care menționăm: Prof. Florian Müller-Plathe

– Universitatea Tehnică Darmstadt, Germania; Prof. Dr. Leif Eriksson – Universitatea Göthenburg, Suedia; Prof. Claudiu T. Supuran – Universitatea din Florența, Neurofarba Dept., Italia; Dr. Marc Baaden – Laboratorul de Biochimie Teoretică Paris CNRS, Franța; Prof. Xiaoyan JI – Universitatea Tehnică Luleå, Suedia; Prof. Jozef Uličný – Institutul de Fizică al Facultății de Ştiințe „P. J. Šafárik" al Universității din Košiciach, Slovacia etc.

Domeniile specifice care vor fi abordate se axează pe:

- modelarea și studiul teoretic al entităţilor nano- şi micro-structurate pentru aplicaţii biomedicale specific,
- modelarea și studiul teoretic al sistemelor supramoleculare micro- şi nanostructurate,
- modelarea și studiul theoretic al senzorilor electrochimici.

Echipa din cadrul Intel Centru (Dr. Tudor Vasiliu, Dr. Andrei Neamțu și Dr. Dragoș Isac), care reprezintă nucleul de pornire al proiectului BioMat4CAST, precum și idea găsirii unei soluții pentru dezvoltarea unui grup de chimie computerizată, a apărut în cadrul implementării unui proiect de tip ERA Chair din Orizont 2020: SupraChem Lab Laboratory of Supramolecular Chemistry for Adaptive Delivery Systems ERA Chair initiative (H2020 WIDESPREAD 2-2014: ERA Chairs Project no.667387; 2015 – 2020). Proiectul SupraChem Lab a fost declarat proiect de succes la nivel european și reprezintă un reper în dezvoltarea atât a Intel Centru, cât și a ICMPP. Proiectul SupraChem Lab a adus suplimentar în ICMPP două proiecte în sinergie: un proiect din programul PNIII, care a finanțat activități de cercetare pentru echipa SupraChem Lab, proiect în valoare de 250 000 Euro, precum și primele proiecte în sinergie cu Fondurile Structurale în valoare de 4 milioane Euro. Obiectivul general al proiectului finanțat prin fonduri structurale Infra SupraChem Lab constă în crearea unei infrastructuri avansate care să deservească grupul de lucru în domeniul chimiei supramoleculare SupraChem Lab.

Redactarea proiectului BioMat4CAST a fost realizată în parteneriat cu Centrul Suport Proiecte Orizont 2020 BioNanoTech, centru suport menit să ajute beneficiarii să redacteze proiecte Orizont2020/Orizont Europa și să ofere consultanță în redactarea propunerii, precum și în implementarea proiectelor finanțate. Obiectivul general al proiectului BioNanoTech este de a crea un centru suport capabil să îmbunătățească participarea în proiectele de cooperare europeană la Orizont 2020/Europa în domeniul științei materialelor: eco-nano-tehnologii și materiale avansate (inclusiv nanomateriale, nanomedicină etc.). Aceste subiecte fac parte din domeniile Strategii de Specializare Inteligentă pentru următoarea perioadă de programare și reprezintă totodată și o componentă de bază în cadrul programului de cercetare Orizont Europa. Pentru a-și atinge țelul ambițios, proiectul BioNanoTech Suport conține mai multe obiective specifice care presupun, pe lângă crearea centrului, și realizarea unei rețele de cooperare națională și internațională care să îmbunătățească participarea instituțiilor din regiunea de NE a României la Orizont 2020/Orizont Europa). Consultanță și sprijin în formularea de propuneri și gestionarea proiectelor în cadrul Programului-Cadru european, reprezintă un alt obiectiv de bază în cadrul activității centrului.

Astfel proiectul BioMat4CAST reprezintă succesul implementării coerente a unui număr însemnat de proiecte și se bazează pe experiența astfel asimilată pentru a-

și atinge obiectivele propuse. Persoanele interesate de evoluția echipei, cât și de rezultatele acesteia, pot urmări desfășurarea proiectului accesând linkul: https://intelcentru.ro/biomat4cast/index.php.

Mulţumiri

Articolul a beneficiat de suport din partea priectului finanțat prin POC Acțiunea 1.1.3: Crearea de sinergii cu acțiunile de CDI ale programului-cadru ORIZONT 2020 al Uniunii Europene și alte programe CDI internaționale:

- ***Proiect BioNanoTech*** – Centru suport proiecte Europene: contract de finanțare: 241/27.04.2020 Cod MySmis: 107524

Sînziana VLAD, Cătălina BĂLAN, Anca IFTENE, Mariana PINTEALĂ, Teodora RUSU
BioNanoTech Centru Suport Proiecte,
Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni" Iaşi
teodora.rusu@bionanotech.ro

Premiile Academiei Române pentru anul 2022
Secția de Științe Chimice

Academia Română oferă anual premii pentru cele mai valoroase creații științifice și artistice. Potrivit regulamentului, sunt premiate rezultatele remarcabile obținute în urmă cu doi ani, rezultate care au fost în acest timp validate de comunitățile științifice și artistice. Premiile sunt acordate în cadrul celor paisprezece secții științifice ale Academiei Române: literatură și filologie; ştiinţe istorice şi arheologie; ştiinţe matematice; ştiinţe fizice; ştiinţe chimice; ştiinţe biologice; ştiinţe geonomice; științe tehnice; ştiinţe agricole şi silvice; ştiinţe medicale; ştiinţe economice, juridice şi sociologie; ştiinţa şi tehnologia informației; psihologie, filosofie, psihologie şi pedagogie; arte, arhitectură şi audiovizual.

În anul 2022, decernarea premiilor a avut loc în data de 7 decembrie, în Aula Academiei Române din București, în prezența membrilor Academiei Romane. În cadrul evenimentului, Secția de Științe Chimice a acordat două din cele cinci premii ale secției, după cum urmează:

1. Premiul „Costin D. Nenițescu“ – nu s-a acordat
2. Premiul „I. G. Murgulescu“ – nu s-a acordat
3. Premiul „Gheorghe Spacu“ – nu s-a acordat
4. Premiul „Nicolae Teclu“ – a fost acordat domnului dr. Florin Bucătariu, de la Institutul de Chimie Macromoleculară ”Petru Poni” din Iași pentru grupul de lucrări: *Compozite polimerice miez/multistrat polielectrolitic pentru îndepărtarea unor poluanţi din ape contaminate* și, în egală măsură, domnilor dr. Florentina Neaţu, dr. Ştefan Neaţu şi Mihaela-Mirela Trandafir de la Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Fizica Materialelor din București pentru grupul de lucrări: *Catalizatori heterogeni cu aplicaţii catalitice şi fotocatalitice*
5. Premiul „Cristofor I. Simionescu“ a revenit d-rei dr. Daniela Ailincăi, cercetător științific la Institutul de Chimie Macromoleculară ”Petru Poni” pentru grupul de lucrări: *Formulări pe bază de polimeri pentru eliberare controlată de medicamente*

Ceremonia a fost, ca în fiecare an, una deosebită, premianții simțind emoţia momentului primirii unui premiu oferit de Academia Română, cea mai înaltă instituţie de ştiinţă şi cultură a ţării.

Manifestări științifice 2023

1. *CONFERINȚA NAȚIONALĂ DE CHIMIE – ÎNVĂȚĂMÂNT PREUNIVERSITAR* Ediția a XI-a
Perioada (probabilă): 21-22 aprilie 2023
Organizator(i): UPG Ploiești

2. CONFERINŢA INTERNAŢIONALĂ *STUDENTS FOR STUDENTS* ediţia a XIX-a
Perioada: 26 - 30 aprilie 2023, Cluj-Napoca
Organizator(i): Organizația Studenților Chimiști din Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică din Universitatea Babeș-Bolyai din Cluj-Napoca, Partener: Societatea de Chimie din România, Filiala Cluj
Link: http://www.chem.ubbcluj.ro/studenti/ICSFS2023/

3. WORKSHOP EXPLORATORIU *TEHNOLOGII INOVATIVE TRANS-SECTORIALE* (INNOVATIVE CROSS-SECTORAL TECHNOLOGIES), NeXT-Chem, ediția a V-a
Perioada: 22-23 mai 2023, ICECHIM București
Organizator(i): Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Chimie și Petrochimie – ICECHIM București, Filiala nr 3 București a Societății de Chimie din România (SChR) și EUCHEMS
Link: www.icechim.ro/Next-chem/

4. *MULTIDISCIPLINARY CONFERENCE ON SUSTAINABLE DEVELOPMENT* (2023). SECTION: FOOD CHEMISTRY, ENGINEERING & TECHNOLOGY
Perioada (probabilă): 25-26 Mai 2023, Timişoara
Organizator(i): Universitatea de Ştiinţele Vieţii "Regele Mihai I" din Timişoara – Facultatea de Inginerie Alimentară; Academia de Ştiinţe Agricole şi Silvice "Gheorghe Ionescu-Şişeşti" – filiala Timişoara; Asociaţia Specialiştilor de Industrie Alimentară din România – filiala Timişoara; Societatea de Chimie din România – filiala Timişoara
Link (în construcţie): https://www.usab-tm.ro/ro/cercetare-48/manifestari-stiintifice-10852; https://www.usab-tm.ro/ro/cercetare-16/manifestari-stiintifice-10068

5. *YOUNG RESEARCHERS INTERNATIONAL CONFERENCE ON CHEMISTRY AND CHEMICAL ENGINEERING* (YRICCCE IV)
Organizator(i): Filiala Cluj a Societății de Chimie din România (Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică) în colaborare cu Societatea de Chimie din Ungaria.
Perioada: 1 - 3 iunie 2023, Debrecen, Ungaria
Link: https://yriccce2023.mke.org.hu/

6. THE 15TH EDITION OF THE CONFERENCE "*NEW TRENDS IN CHEMISTRY RESEARCH*"
Perioada: 20-21 Septembrie 2023, Timişoara

Organizator(i): Institutul de Chimie "Coriolan Drăgulescu", Timișoara, SChR
Link: www.newtrends-timisoara.ro

7. 26th INTERNATIONAL SYMPOSIUM "*ENVIRONMENT AND INDUSTRY" SIMI 2023*
Perioada: 28-29 Septembrie 2023, Biblioteca Academiei Române, Calea Victoriei nr.125, București
Organizator: INCD ECOIND
Link: https://simiecoind.ro/

8. 17TH INTERNATIONAL CONFERENCE OF PHYSICAL CHEMISTRY ROMPHYSCHEM-17
Perioada: 25 – 27 Septembrie 2023, Biblioteca Academiei Române, București
Organizator(i): Institutul de Chimie Fizică „Ilie Murgulescu" al Academiei Române, Facultatea de Chimie – Universitatea din București, Asociația ALPHA
Link: https://gw-chimie.math.unibuc.ro/romphyschem/

9. 27TH *INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON SEPARATION SCIENCES*" (ISSS 2023)
Perioada: 24–27 septembrie 2023, Cluj-Napoca
Organizator(i): Secția Științele Separării SChR, Universitata Babeș-Bolyai (UBB), Central European Group for Separation Sciences (CEGSS) și European Society for Separation Science (EuSSS). SChR este membră CEGSS din 2008 și EuSSS din 2009
Link: https://isss2023.conference.ubbcluj.ro

10. THE 29TH EDITION OF THE *PROGRESS IN ORGANIC AND MACROMOLECULAR COMPOUNDS CONFERENCE*, MACRO IASI 2023
Perioada: 4–6 octombrie 2023, Iași, ICMPP
Organizator(i): Institutul de Chimie Macromoleculară Petru Poni, SChR
Link: https://icmpp.ro/macroiasi2021/ (în construcție)

11. SIMPOZIONUL INTERNAȚIONAL „*PRIORITAȚILE CHIMIEI PENTRU O DEZVOLTARE DURABILA*" – PRIOCHEM 2023, EDITIA A XIX-A
Perioada: 11 - 13 octombrie 2023, ICECHIM București
Organizator(i): Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Chimie și Petrochimie – ICECHIM București, Filiala nr 3 București a Societății de Chimie din România (SChR) si EUCHEMS
Link: www.icechim.ro/priochem

12. THE 11TH *INTERNATIONAL CONFERENCE ON WATER IN FOOD* (EFW2023)
Perioada (foarte probabilă): 11-13 Octombrie 2023, Timişoara
Organizator(i): Association "EuroFoodWater"; Universitatea Politehnica Timişoara – Facultatea de Chimie Industrială şi Ingineria Mediului; Universitatea de Ştiinţele Vieţii "Regele Mihai I" din Timişoara – Facultatea de Inginerie Alimentară; Societatea de Chimie din România – filiala Timişoara
Link (în construcţie): http://www.eurofoodwater.eu/efw2020/; http://www.eurofoodwater.eu/efw2023/

13. A XV-A EDIȚIE A SIMPOZIONULUI NAȚIONAL DE CHIMIE „*CONTRIBUȚII LA CREȘTEREA CALITĂȚII ÎNVĂȚĂMÂNTULUI ȘI CERCETĂRII ÎN DOMENIUL CHIMIEI*”.
Perioada: 26-27 Octombrie 2023, Craiova
Organizator(i): Departamentul de Chimie al Facultății de Științe și Centrul de Cercetare Interdisciplinară în Științe din Universitatea din Craiova, în parteneriat cu Inspectoratul Școlar Județean Dolj și Societatea de Chimie din România (filiala Craiova)
Link: https://chimie.ucv.ro/snchcv2023/

14. A VII-A EDITIE A CONFERENCE FOR *SUSTAINABLE ENERGY* (CSE 2023)
Perioada: 26-28 Octombrie 2023, Brașov
Organizator(i): Universitatea Transilvania din Brașov
Link: cse.unitbv.ro

15. 6TH INTERNATIONAL CONFERENCE *EMERGING TECHNOLOGIES IN MATERIALS ENGINEERING* – EMERGEMAT2023
Perioada: 9-10 noiembrie 2023, București, România
Organizatori: Institutul Național de Cercetare Dezvoltare pentru Metale Neferoase și Rare-INCDMNR-IMNR
Link: https://imnr.ro/wp/en/emerging-technologies-in-materials-engineering-emergemat/

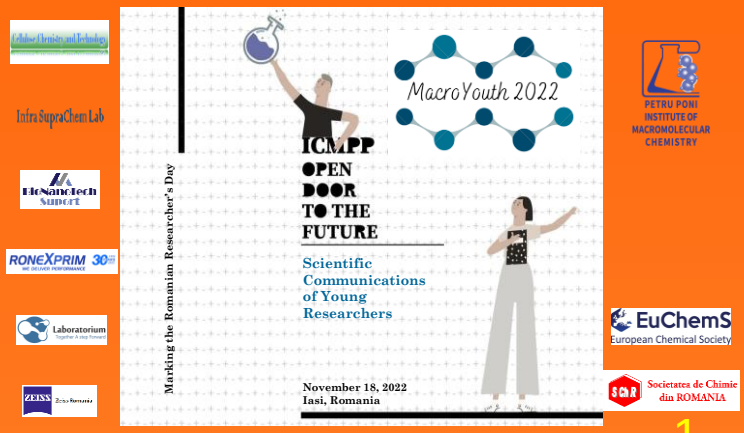
16. CONFERINTA NATIONALA *CHIMIE. MEDIU. ENERGIE* – Editia a V-a. Conferința este adresată studenților și elevilor din clasele a XI-a și a XII-a
Perioada: 10 noiembrie 2023, Ploiești
Organizator(i): UPG Ploiești
Link: https://tpp.upg-ploiesti.ro/studenti/manifestari-stiintifice

17. THE 4TH ICMPP - *OPEN DOOR TO THE FUTURE. SCIENTIFIC* COMMUNICATIONS OF YOUNG RESEARCHERS, MACROYOUTH 2023
Perioada: 19 noiembrie 2023, Iași
Organizator(i): Institutul de Chimie Macromoleculară Petru Poni, SChR
Link: https://icmpp.ro/macroyouth2022/ (în construcție)

18. INTERNATIONAL SCIENTIFIC SYMPOSIUM “*YOUNG RESEARCHERS AND SCIENTIFIC RESEARCH IN LIFE SCIENCES*” FOR BACHELOR, MASTER AND PH.D. STUDENTS (2023)
Perioada (probabilă): 23-24 Noiembrie 2023, Timişoara
Organizator(i): Universitatea de Ştiinţele Vieţii “Regele Mihai I” din Timişoara – Facultatea de Inginerie Alimentară; Academia de Ştiinţe Agricole şi Silvice “Gheorghe Ionescu-Şişeşti” – filiala Timişoara; Asociaţia Specialiştilor de Industrie Alimentară din România – filiala Timişoara; Societatea de Chimie din România – filiala Timişoara
Link (în construcţie): https://www.usab-tm.ro/ro/studenti-46/simpozionul-international-al-tinerilor-cercetatori

BULETINUL
SOCIETĂŢII DE CHIMIE DIN ROMÂNIA
FONDATĂ ÎN 1919

Nr. XXX (serie nouă) **1/2023**



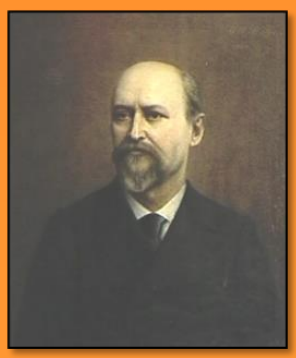
1

2

3

4

7



5

6

ISSN 2066-2971