

Memoriu de activitate științifică

Bogdan-Constantin Enache

Doctorand, Facultatea de Chimie, Universitatea din București

Titlul tezei de doctorat: „*Expanding Heteroaryl Azo Toolbox — Synthetic Approaches of Novel Molecules and Evidence of their Photoswitching Ability*”

Conducător științific: Conf. Dr. Habil. Mihaela Matache

Subsemnatul, Bogdan-Constantin Enache, născut la data de 17 august 1997, am absolvit Colegiul Național „Mihail Sadoveanu” din Pașcani, profilul Științe ale naturii, în anul 2016. Încă din perioada liceului am manifestat un interes deosebit pentru chimie, concretizat prin rezultatele obținute la **Olimpiada Națională de Chimie** (locul 4 în 2015, clasa a XI-a; locul 7 în 2016, clasa a XII-a) și prin selecția în **Lotul lărgit pentru Olimpiada Internațională de Chimie** (top 20 la nivel național) în 2016. Aceste experiențe competiționale mi-au oferit o primă expunere la rigoarea gândirii chimice și la abordarea creativă a problemelor de sinteză și mecanistică, constituind fundamentul formării mele ulterioare.

Am urmat studiile universitare de licență la **Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică a Universității Babeș-Bolyai din Cluj-Napoca**, în perioada 2016–2019. Studiile le-am finalizat cu lucrarea de licență intitulată „*Synthesis and spectroscopic characterisation of 2-[Me(i-Pr)NCH(Me)]C₆H₄Si(H)Me₂*”, realizată sub îndrumarea **Conf. Dr. Ciprian Raț și a Prof. Dr. Cristian Silvestru**, în cadrul Departamentului de Chimie Organometalică al Centrului de Chimie Supramoleculară Organică și Organometalică, lucrarea fiind notată cu 10/10. Pe parcursul realizării acestei lucrări am dobândit competențe esențiale în sinteza organometalică, în speță lucrul în condiții de atmosferă inertă pe linie Schlenk, dar și experiență practică în caracterizarea structurală a compușilor chimici prin spectroscopie RMN și spectrometrie de masă de înaltă rezoluție (HRMS). Am beneficiat de bursă de merit pe toată durata studiilor de licență și am fost implicat în activități extracurriculare, îndeplinind funcția de secretar al organizației studentești [AEGEE-Cluj-Napoca](#) (2017–2018). Prima participare la o conferință științifică a avut loc în 2019, cu o prezentare orală la conferința internațională „*Students for Students*” de la Cluj-Napoca.

În perioada 2019–2021 am urmat programul de masterat „*Chimia Medicamentelor și Cosmeticelor*” la **Facultatea de Chimie a Universității din București**, pe care l-am finalizat cu lucrarea de disertație intitulată „*Fotocomutatori moleculari heteroaril azo*”, lucrare elaborată sub îndrumarea **Conf. Dr. Mihaela Matache**, fapt care a marcat debutul activității mele de cercetare în domeniul fotocomutatorilor moleculari. În cadrul studiilor de master am deprins competențe aprofundate din sfera fotochimiei și implicit a spectroscopiei UV-Vis, dezvoltând protocoale de iradiere și monitorizare pentru studiul proceselor de fotoizomerizare. Am realizat primele studii spectroscopice sistematice pentru o serie de fotocomutatori arilazopirazol și, ca urmare a contextului pandemic, mi-am consolidat competențele de chimie computațională, utilizând software-ul ORCA, Gaussian și Spartan pentru calcule de tip DFT. Calitatea lucrării de disertație a fost recunoscută prin **Premiul „Cea mai bună lucrare de disertație în Științe Exacte și Inginerie”** acordat la Gala Premiilor Senatului Universității din București, ediția a V-a, 2021, iar pe toată durata masteratului am beneficiat de bursă de merit academic. Tot în această perioadă am participat la două conferințe internaționale: 21st Tetrahedron Symposium (2021, poster) și [3rd Young Researchers' International Conference on Chemistry and Chemical Engineering \(YRICCE III\)](#), Cluj-Napoca (2021, poster), prezentând rezultatele obținute pe parcursul studiilor de masterat.

Studiile doctorale le-am început la 1 octombrie 2021 în cadrul **Școlii Doctorale în Chimie a Facultății de Chimie, Universitatea din București**, activând în cadrul laboratorului coordonat de **Conf. Dr. Habil. Mihaela Matache**. Teza de doctorat, intitulată „*Expanding Heteroaril Azo Toolbox — Synthetic Approaches of Novel Molecules and Evidence of their Photoswitching Ability*”, abordează proiectarea, sinteza și caracterizarea a trei clase de fotocomutatori moleculari de tip heteroaril azo: **arilazopirazoli cu substituenți 3,5-bis(trifluorometil) sau decorați cu fragmente 1,3,4-oxadiazoli, respectiv derivați arilazo-1,3,4-tiadiazol și -1,3,4-oxadiazol**. Noutatea cercetării constă în explorarea unor platforme moleculare fotocomutabile ce prezentau lacune semnificative în literatura de specialitate, mai ales în cazul arilazo-1,3,4-tiadiazolilor, pentru care nu existau studii sistematice de fotocomutare la momentul începerii doctoratului. Am dezvoltat metodologii sintetice originale pentru accesarea acestor compuși, am realizat caracterizarea lor structurală completă prin spectroscopie RMN, spectrometrie de masă de înaltă rezoluție (HRMS) și difracție de raze X pe monocristal (XRD), iar performanța lor ca fotocomutatori a fost evaluată prin spectroscopie UV-Vis și RMN sub iradiere controlată.

Componenta computațională a tezei a inclus calcule DFT pentru elucidarea geometriilor izomerilor Z și a interacțiunilor intramoleculare inaccesibile experimental, dar și pentru dezvoltarea unei metodologii computaționale corelate experimental ce permite altor cercetători curioși de subiect simularea performanței acestor fotocomutatori, mai exact caracteristicile lor spectrale prin TD-DFT și cinetica din spatele procesului de conversie termală $Z \rightarrow E$. Pe parcursul doctoratului am colaborat cu Dr. Anamaria Hanganu pentru realizarea studiilor avansate de RMN, cu Conf. Dr. Augustin Mădălan pentru analiza structurală prin difracție de raze X pe monocristal și cu Lect. Dr. Cristina Tăbleț pentru chimia computațională.

Un capitol distinct al tezei este dedicat unei **colaborări interdisciplinare între chimie și artă performativă**: proiectarea și implementarea la scară largă a reacției oscilante Briggs–Rauscher pentru instalația „[Attune](#)” a **artistei internaționale Alexandra Pirici**, prezentată la **muzeul Hamburger Bahnhof din Berlin** (ianuarie–octombrie 2024). Acest capitol valorifică experiența mea industrială în amplificarea proceselor chimice și aduce o dimensiune neconvențională cercetării doctorale, demonstrând potențialul chimiei de a dialoga cu alte domenii ale cunoașterii.

Activitatea doctorală a fost susținută financiar prin multiple proiecte de cercetare finanțate, activând până de curând în cadrul [ResPonSE](#) (*Competence centre for nature-based community development, ecosystems protection and restoration in the Lower Danube Basin - NW Black Sea coast*, Conducător proiect prof. Corina Bradu, PNRR/2022/C9/MCID/I5, 760010/30.12.2022, 18/16.11.2022) ca asistent cercetător responsabil pentru sinteza și dezvoltarea de metodologii de sinteză a unor derivați ai ramnozei cu scopul obținerii de SUPRAs. În prezent activez tot ca asistent cercetător în cadrul proiectelor [ProLip](#) (*Novel probes for dissecting the cellular roles of lipids*, Conducător proiect prof. dr. Adrian Șalic, PNRR/2022/C9/MCID/I8, 760056/23.05.2023, 235/29.11.2022), [PROTON DREAMS](#) (*Turning tautomeric molecular switches into nanoscale molecular motors*, Conducător proiect Conf. Dr. Mihaela Matache UEFISCDI - MAPS. 8ROCH/01/07/2025), fiind responsabil de sinteza și dezvoltarea de metodologii de sinteză pentru derivați Si-Rhodamine cu rol în monitorizarea lipidelor, respectiv pentru noi comutatori moleculari tautomerici cu potențială activitate ca motoare moleculare.

În paralel cu studiile de masterat și cu cele doctorale, începând cu martie 2020 îmi desfășor activitatea profesională ca cercetător chimist în **Departamentul de Cercetare-Dezvoltare al companiei [Microsin SRL](#) din București**, singura companie producătoare de active farmaceutice din România, având un portofoliu larg și divers de produse pentru clienți naționali, dar

preponderent internaționali. În cadrul acestei activități am dezvoltat procese de sinteză pentru substanțe farmaceutice active (API) de la scara de laborator până la scara de producție (~250 kg), aducând la validare de proces substanțele Cloramină-T, Bromometilat de Octatropină și Acetil-L-carnitină Clorhidrat. Am realizat evaluări de impurități mutagene conform ghidului ICH M7 (utilizând QSAR Toolbox), profilare generală de impurități (ICH Q3A), evaluări de risc pentru nitrozamine și calcule de factori de purjare, contribuind la elaborarea documentației CMC. Am coordonat studenți în stagii de practică organizate de către UniBuc în cadrul Microsin SRL și am asigurat formarea unor tineri cercetători doritori de a se focaliza pe cercetare în chimie organică (Costache George, Magdi El Fergani, Oumaima Khabbach, Titouan Fournier, Youenn Berthou, Noé Rocq, Mădălina Marinaș) din departamentul de cercetare. Această experiență industrială, acumulată pe o perioadă de peste șase ani, a îmbogățit substanțial cercetarea doctorală, formându-mi o mentalitate de optimizare a proceselor, o abordare sistematică a design-ului experimental și o familiarizare cu aspectele de ridicare la scală și reproductibilitate, aspecte ce se reflectă atât în metodologiile sintetice dezvoltate în teză, cât și în capitolul dedicat reacției Briggs–Rauscher.

Rezultatele cercetării doctorale au fost diseminate până în prezent în două articole științifice publicate ca prim autor în jurnale internaționale cu factor de impact: Enache, B.-C. *et al.* „Exploring Arylazo-3,5-Bis(Trifluoromethyl)Pyrazole Switches”, *ACS Omega* **2022**, 7, 39122–39135, DOI: [10.1021/acsomega.2c04984](https://doi.org/10.1021/acsomega.2c04984) și Enache, B.-C. *et al.* „Light-Responsive Oxadiazole-Based-(Hetero)Aryl-Azobenzenes”, *Synthesis* **2025**, DOI: [10.1055/a-2675-3787](https://doi.org/10.1055/a-2675-3787). Două manuscrise, dedicate fotocomutatorilor arilazo-1,3,4-tiadiazol și -1,3,4-oxadiazol, sunt în curs de publicare.

Pe parcursul formării academice am participat la nouă conferințe științifice, dintre care șase internaționale și trei naționale. Contribuțiile internaționale au inclus postere prezentate la [KAUST Research Conference - Advances in Sustainable Catalysis](#) (Jeddah, Arabia Saudită, 2023), [8th EuChemS Chemistry Congress](#) (Lisabona, Portugalia, 2022), [17th Belgian Organic Synthesis Symposium](#) (Namur, Belgia, 2022), [21st Tetrahedron Symposium](#) (2021) și [YRICCCE III](#) (Cluj-Napoca, 2021), precum și o prezentare orală la conferința [Students for Students](#) (Cluj-Napoca, 2019). La nivel național, am susținut prezentări orale la [Sesiunea de Comunicări Științifice Studentești](#) (București, 2024), [Sesiunea de Comunicări Științifice „Zi de Chimie”](#) (București, 2024) și în cadrul workshop-ului [Transboundary chemistry at the forefront of molecular sciences, Smart Diaspora](#) (Timișoara, 2023).

Pe lângă activitatea de cercetare, am fost implicat în activități de diseminare și popularizare a științei. Am susținut seminarii de chimie organică pentru elevii selecționați în Lotul Lărgit al Olimpiadei de Chimie și pentru participanții la tabăra [APEX Chemistry 2025](#). Am fost membru al comitetului de chimie pentru competiția [Science On](#) (o alternativă a Olimpiadei de Chimie organizată în contextul incert al pandemiei), unde am contribuit la propunerea subiectelor și la corectare, și am fost membru al juriului concursului [LicArt](#) (fotografie și poezie) destinat liceenilor (2019-2020) pentru secția poezie. Am participat la workshop-ul [„Redactarea propunerilor și gestionarea proiectelor pentru programul UE Horizon Europe”](#) (mai 2025) și la școala de vară [„Catalysis for promising future”](#) (Băile Govora, 2022).

Traectoria mea profesională și academică îmbină experiența Olimpiadelor Naționale de Chimie din perioada liceului, cercetarea fundamentală în chimia organometalică și organică, aprofundarea fotochimiei și a dinamismului molecular prin studiul fotocomutatorilor moleculari heteroaril, experiența industrială în dezvoltarea proceselor de sinteză a substanțelor farmaceutice active și colaborarea interdisciplinară artă-știință - rezultând un profil de cercetător cu competențe integrate în sinteză organică, fotochimie, analiză structurală, chimie computațională, chimie industrială și redactare de documentație tehnică. Activitatea descrisă din cadrul proiectelor de cercetare conexe tezei de doctorat, unele active în prezent, implică o deschidere spre continuarea acestor cercetări sub un statut post-doctoral.