

**Conf. Univ. Dr. Chimie Dipl. Fizică**

*Chimie Fizică Structurală și Computațională*

Universitatea de Vest din Timișoara

Departmentul de Biologie-Chimie

Str. Pestalozzi NO. 16, RO-300115, Timișoara

Tel: +40-256-592628, Fax: +40-256-592620

mvputz@cbg.uvt.ro, mv\_putz@yahoo.com

www.mvputz.iqstorm.ro

Timișoara | 29 Noiembrie 2012

## SINTEZA LUCRĂRII

*cu titlul*

### **CUANTIFICAREA LEGĂTURII CHIMICE ÎN SPAȚII ORTOGONALE DE REACTIVITATE. APLICAȚII LA MOLECULE DE INTERES BIO-, ECO-, ȘI FARMACO-LOGIC**

*cuprinzând activitatea desfășurată și rezultatele obținute în raport cu obiectivele realizate în cadrul grantului de cercetare*

**CNCS-UEFISCDI-TE/16/2010-2013, Contractul 94 din 03.08.2010**

*în anul 2012.*

### **Abstract**

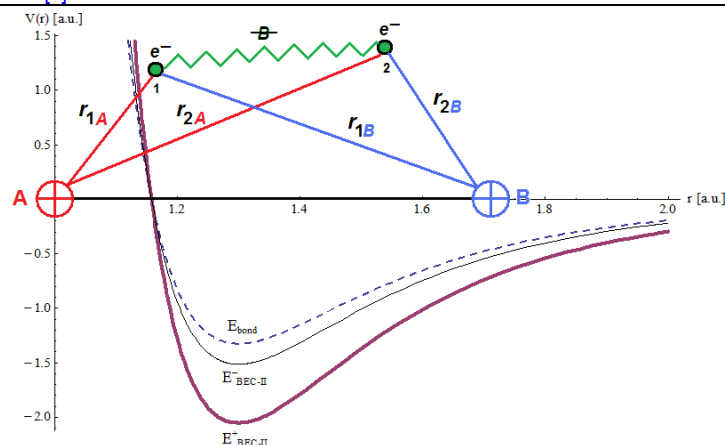
Etapa 2012 a prezentului grant marchează conjuncția tot mai importantă a principiilor topologice ale structurii atomice și moleculare, cu cele ale reactivității chimice și a activității biologice. Astfel, prin elaborarea de modele multidimensional ortogonale pentru legătura chimică din sisteme biochimice cu impact carcinogenic, de elucidare a mecanismelor moleculare din sisteme ecotoxicologice pe baze atomice și nanostructurale, cât și pentru corelarea reactivității chimice cu activitatea bio-eco-farmacologică pe baze cuantice, nano-informatică și spectrale, prezenta etapă de cercetare contribuie semnificativ la formularea unei viziuni unitare fermionic-bosonice și a informației cuantice undă-particulă în modelarea (explicare și prezicere a) legăturii chimice și a interacțiilor acestora în structuri moleculare extinse (nano și mesosisteme).

### **Obiective și Rezultate**

#### **1. Elaborarea de modele multidimensional ortogonale ale legăturii chimice din sisteme chimice și biochimice cu impact carcinogenic (lucrările [1- 9]).**

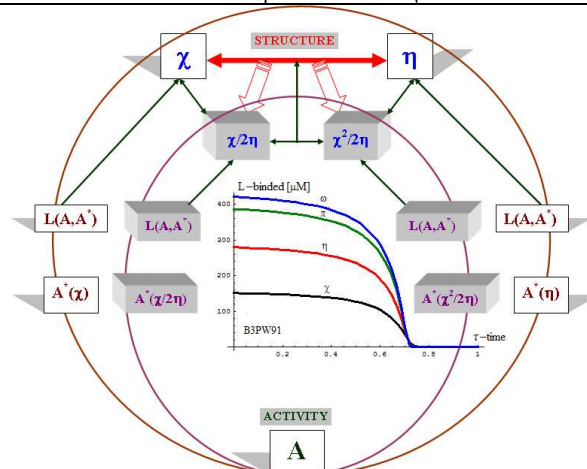
Unificarea teoriilor bosonice și fermionice ale materiei este realizată la nivel conceptual prin intermediul Teoriei Funcționalei Densitate (TFD), cu ajutorul ecuațiilor Hohenberg-Kohn extinse și a funcționalelor de energie corectate cu parametrul de ordine, specific condensării Bose-Einstein (CBE). În mod special, prin intermediul formulării analitice generale a funcționalei de schimb și corelare, cu ajutorul transformatelor de tip Bogoliubov astfel ca parametrul de ordine/condensare bosonică să apară natural, se reușește formularea contextului TFD în care ecuația Gross-Pitaevsky specifică CBE apare automat. Caracterul non-linear astfel obținut ca generalizare a ecuației Schrödinger permite conectarea TFD cu CBE prin intermediul aproximației de tip Thomas-Fermi, și apoi folosită pentru generalizarea modelului clasic Heitler-London al legăturii chimice, aici pentru legătura homopolară, dar suficient de consistent pentru a se constitui ca premisă pentru abordarea și a sistemelor ciclice, aromatice, saturate cu hidrogen. Prezentul tratament are în centru noua particulă cuantică responsabilă de legătura chimică – bosonul bondon – cu consecința condensării acestuia în legarea chimică, explicitând astfel paradigma orbitalică a nivelelor de legătură-antilegătură cu noi nivele specifice CBE, neexplorate încă în mod explicit în manieră experimentală (Figura 1). Modelul este verificat conceptual prin predicția de interzicere a legării chimice He-He, chiar și prin particula bondonică, prezicând în schimb noi stări de legare pentru molecula H<sub>2</sub> susceptibile de a fi detectate experimental în condițiile de condensare Bose-Einstein (temperaturi de ordinul nano-Kelvin).

**Figura 1.** Ilustrarea formării legăturii chimice bi-atomice prin contribuția bondonic-bosonică la interacția inter-electronică; modelul este suprapus cu stările hidrogenului molecular astfel tratat, cu reliefarea nivelelor de condensare Bose-Einstein (BEC în figură) de tip legare (linia groasă) și antilegare (linia subțire), ambele situate sub nivelul de legare "normală" din molecular în stare gazoasă [1].



Legătura de hidrogen este deosebit de importantă în interacțiile chimico-biologice, atât la nivelul ADN-ului cât și în legarea toxicanților cu biomoleculele receptoare din organisme. În acest context, modelul logistic al cineticii de legare ligand (chimic)-receptor (biologic) este avansat ca un mecanism inovator în ierarhizarea corelațiilor de tip structură chimică – activitate biologică (QSAR) pe baza principiilor fundamentale de reactivitate, cu referire specială la cele ale electronegativității, tăriei chimice, puterii chimice, și electrofilicității, deopotrivă calculate în varii contexte computaționale de tipul TFD pentru moleculele înverdate analizei toxicologice *in silico* (Figura 2). Modelul este ilustrat pentru hidrocarburile aromatice policiclice clorinate (Cl-PAHs) în interacțiune biologică cu celulele canceroase MCG-7 ale sânnului uman, precum și cu speciile *Pimephales promelas* și *Rattus Norvegicus*; regulile conceptual-computaționale derivate din ierarhizarea corelațiilor în funcție de contextul computațional și al celui de reactivitate chimică generează așa numitele mecanisme BioAct-ChemReact ale interacțiilor chimico- toxi/eco/bio/farmacologice, deosebit de utile în precizarea hazardului chimic și de mediu pentru interacții similare sau în aceeași clasă de compuși chimici sau/și specii biologice.

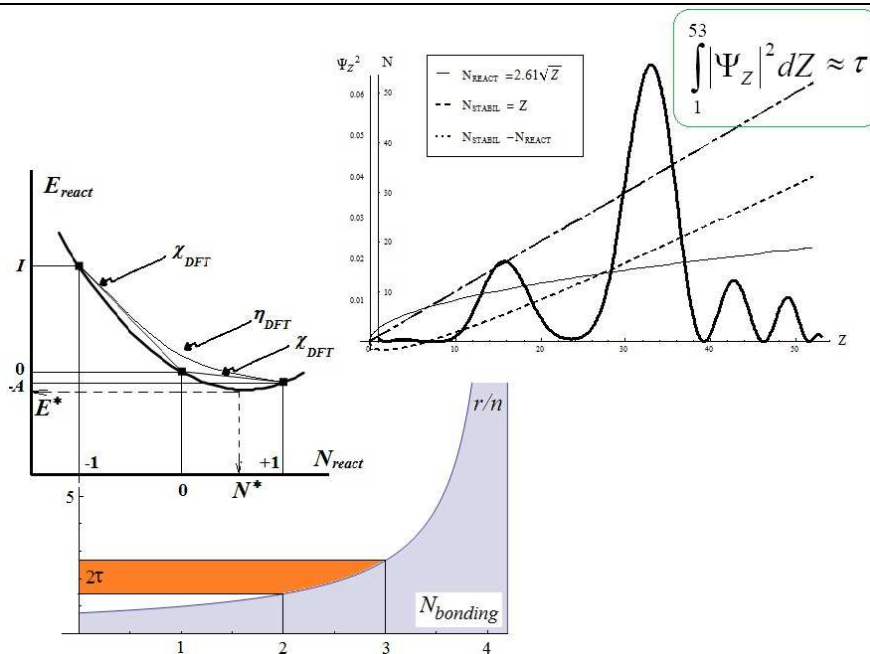
**Figura 2.** Algoritmul corelării structură chimică-activitate biologică prin intermediul teoriei funcționalei densitate computaționale (calculul energiilor E pentru orbitalele moleculare cele mai înalt ocupate HOMO și mai joase libere LUMO) și conceptuale prin utilizarea HOMO și LUMO în calculul electronegativității  $\chi = -0.5(E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}})$ , tăriei chimice  $\eta = 0.5(E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}})$ , puterii chimice ( $\chi/2\eta$ ) și electrofilicității ( $\chi^2/2\eta$ ); corelațiile obținute cu activitățile observate (A) generează modelele QSAR cu activitățile prezise (A\*) care împreună reglează prin feed-back curbele de progresie temporală ale ligandului (L), prin a căror ierarhie intra-specie (cu baze computaționale diferite) sau inter-specie (în același context computațional) prezic modelul mecanismului de reactivitate/toxicitate chimică implicată în interacția cu mediul bio sau eco-logic [2].



## 2. Elaborarea de modele multidimensional ortogonale ale mecanismelor moleculare din sisteme ecotoxicologice pe baze atomice și nanostructurale (lucrările [10-14]).

În contextul semi-determinist al densității electronice pe baza funcției de undă pătratică, al teoriei funcționalei densitate, descrierea mecanic cuantică a materiei este considerată în varianta Bohmiană, pentru a fi conjugată cu așa numita imbalanță Heisenberg ( $\Delta O \times O = n_o h$ ) cu generarea unei noi paradigme a reactivității chimice în general și a stării de valență în special, ocazie cu care este clarificată și diferența conceptual-analitică dintre starea fundamentală și cea reactivă (cu sarcina electrică critică) în sistemele chimice (atomi și molecule). Astfel se rezolvă paradoxul tratării reactivității chimice din TFD cu o ecuație energetică cubică, cea corect parabolică fiind recuperată prin așa numitul mecanism variațional dublu aplicat abordării bohmiene cu potențialul cuantic combinat cu rația de aur dintre numărul atomic și cel de electroni,  $0.618 = \tau = Z/N$ , generalizând starea fizică, non-reactivă și mono-variațională ( $1 = Z/N$ ) pentru sistemele multielectronice. Consecințele sunt fundamentale, în special în explicarea contribuției fracționare a electronilor în legarea chimică, limitarea naturală a ordinului de legătură chimică, în formularea unor valori de reper “universal” pentru electronegativitate și tăria chimică, precum și formularea unei așa numite “unde de sarcină atomică” calibrate la nivel atomic și cu perspectiva modelării interacțiilor atomilor-în-molecule (Figura 3).

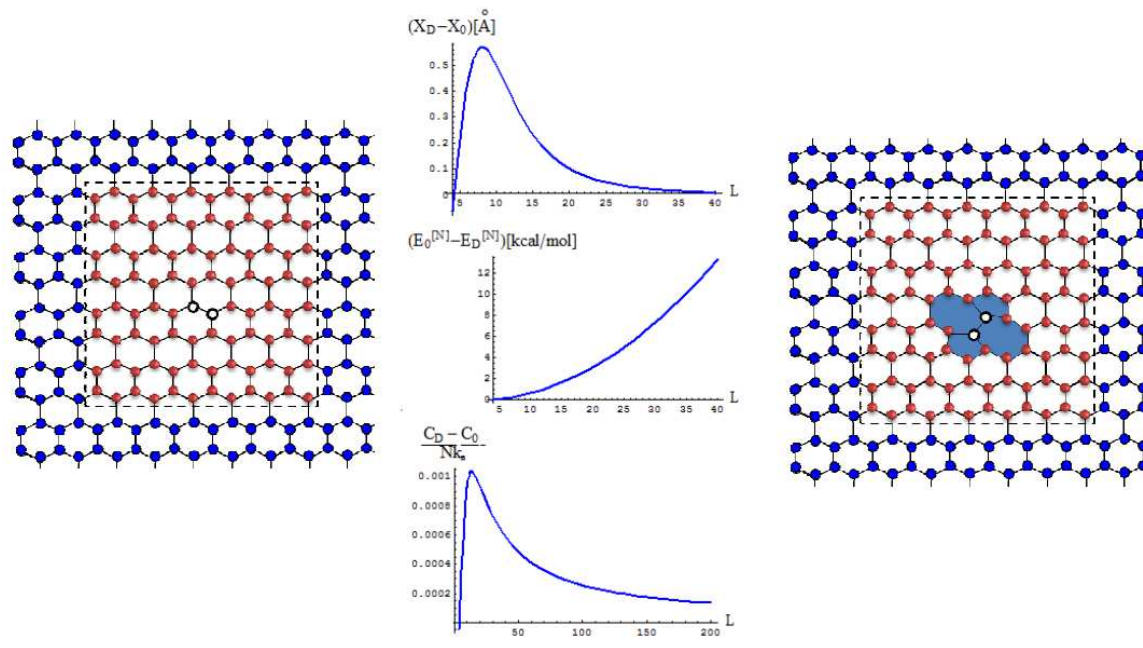
**Figura 3.** Medalion stânga: curba de energie reactivă prin dependența parametrică a energiei totale de electronegativitate ( $\chi$ ) și tăria chimică ( $\eta$ ) în teoria funcționalei densitate (DFT în figură) vs. numărul de electroni angajați în reactivitate ( $N_{react}$ ), alături de curba dependenței lungimii de legătură covalentă (direct corelată cu raza atomică în starea de valență) de ordinul de legătură (direct corelat cu numărul de electroni din legătura chimică); medalion dreapta: funcția de undă a sarcinii atomice, suprapusă dependențelor reactive și non-reactive ale numărului de electroni de valență (critici) de-a lungul primelor perioade ale sistemului periodic al elementelor, pe baza aplicării algoritmului dublu-variațional implicând descrierea bohmiiană a stărilor energetice reactive cu potențialul cuantic și cu rația de aur ( $\tau = Z/N$ ) [10].



Abordarea bohmiiană a descrierii cuantice a materiei permite cuantificarea legăturii chimice prin intermediul quasi-particulei bondon, capabilă să explice prin masa, energia și lungimea specifică de acțiune legarea chimică a sistemelor extinse (pentru grafene, în domeniul 15 -30 Å), nanostructuri și transformările de fază ale acestora (Figura 4). Aplicațiile la grafene oferă o premiză valoroasă proiectărilor viitoare în designul suporturilor reactive pentru compuși farmaceutici și cosmetici, datorită proprietăților conductoare, magnetice, de flexibilitate și de saturare chimică - unice ale acestor tipuri noi de materiale (precum recunoscut și prin acordarea Premiului Nobel în Fizică în anul 2010). Alte utilități și direcții promițătoare de cercetare, bazate pe modelul bondonic al nanostructurilor conțin: descrierea ramurilor optice și acustice prin interacția bondon-fonon, descrierea tranzițiilor de fază prin

propagatori bondonici de ordinul 4 (egal cu maximul ordinului de legătură în sistemele chimice), studiul tranzițiilor de fază pe baze defective (de tipul ordine-dezordine), modelarea nanostructurilor de tipul "fagure de miere" prin câmpul chimic asociat și transformările de etalonare (gauge) specifice, cuantificarea la distanță a acțiunii Columbiene, identificarea bondonice în spectrele IR și Raman ale compușilor chimici, ca măsură a reactivității acestora – bază a activității și toxicității bio-, eco- și farmaco-logice

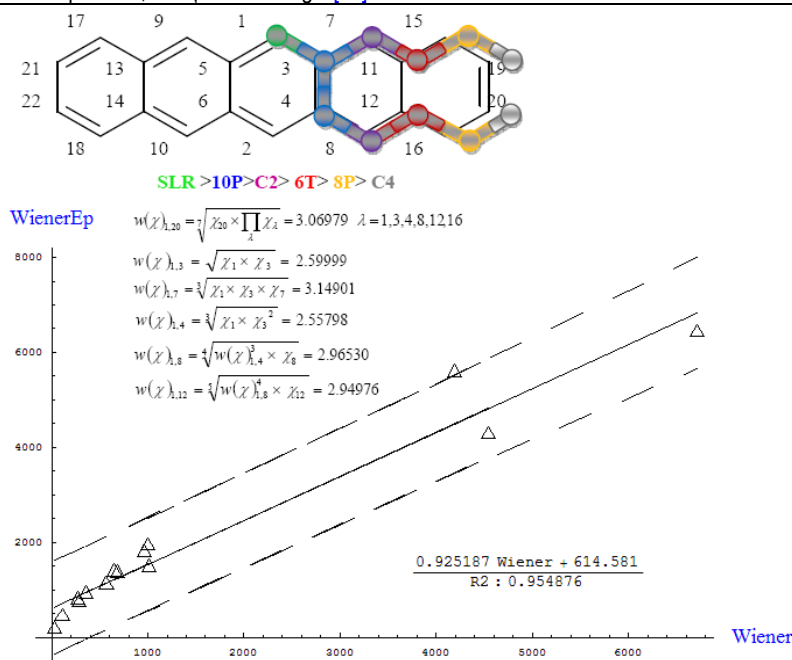
**Figura 4.** Reprezentarea 2D unei super-celule de grafen obținută prin extensia legăturilor chimice aromatice, în variantă genuină (ideală, "0") în stânga și în cea modificată topologic ("D") prin transformarea Stone-Wales (SW) de tipul (rotațiilor) 5/7/7/5; în centru sunt reprezentate variațiile în diferența de rază de acțiune, de energie de rețea, și de capacitate calorică, calculate pe baza informațiilor statistice bondonice evaluate între cele două extreme nanostructurale (fără și cu transformarea topologică SW) în raport cu lungimea legăturii nanosistemice (relevantă până la cca. 6 supercelule consecutive) [11].



### 3. Elaborarea de modele multidimensional ortogonale pentru reactivitatea chimică corelată cu activitatea bio-eco-farmacologică pe baze cuantice, nano-informatic și spectrale (lucrările [15-21]).

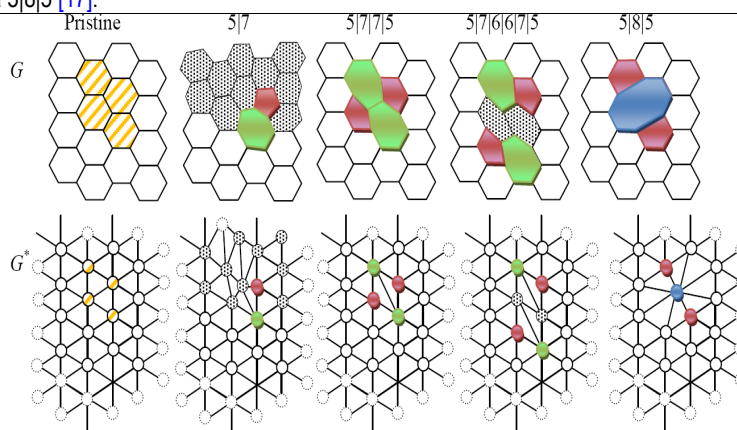
Performanțele recunoscute ale topologiei moleculare pentru sistemele chimice extinse sunt în continuare sporite prin considerarea "colorării" acestora cu indicii de reactivitate, de tipul electronegativității și tăriei chimice, calculați cu rezoluție spectrală, și ordonați pe baza corelărilor externe cu proprietăți structurale de tipul energiei de formare, Hueckel, etc.. Colorarea în sine se realizează printr-o metodă originală, dezvoltată în cadrul prezentului grant, și care are la bază așa numitele "reguli Timișoara-Parma": ele se referă la considerarea unei simetrii centrale a moleculei sau super-celulei de bază a sistemului extins învedereat, urmată de distribuția valorilor succesive pentru un indice dat, în seria spectrală calculată, pe măsura depărtării de simetria centrală, dar invariant pentru atomii/nodurile aparținând fiecărei linii de simetrie; astfel se crează o matrice topologică a nodurilor colorată cu reactivitatea chimică; matricea legăturilor (chimice) este realizată prin considerarea mediilor geometrice cu rădăcina egală cu numărul de noduri luate în considerare pe drumul legăturii chimice ce unește adiacent nodurile considerate (Figura 5); rezultă astfel indicii topologici (în studiile de față de tipul Wiener) reactivi ai electronegativității și tăriei chimice, la rândul lor combinați într-o energie parabolică topo-reactivă, ce poate fi ulterior considerată în predicții de corelare structură activitate pe serii cu impact bio-eco- și farmacologic. Aplicațiile curente pe hidrocarburi aromatice policiclice cu impact toxicologic au confirmat utilitatea modelului și urmează a fi extinse și unificate cu abordarea bondonice în cercetări ulterioare pentru orice legătură chimică cu delocalizare electronică.

**Figura 5.** Sus: exemplificarea colorării topo-reactive a moleculei de pentacenă, cu ilustrarea modului de calcul a legăturii dintre diverse noduri ale grafului asociat pe baza mediei geometrice a electronegativității nodurilor intermediare, cu rădăcina egală cu numărul acestora; Jos: ilustrarea performanței statistice în corelarea energiei topo-reactive parabolice bazată pe topo-indicii electronegativității și tăriei chimice, în raport cu indicele Wiener original, pentru o serie relevantă de hidrocarburi aromatice policiclice cu impact bio, eco și farmacologic [15].



Pentru nanosistemele suport la moleculele active biologic, și în special în industria farmaceutică, modelarea și designul de rețele isomere non-defective se constituie a fi în prima linie a cercetărilor chimice aplicate actuale. La nivel fundamental, pentru legătura chimică implicată, dezvoltarea mecanismului de generare a acestor isomeri doar prin rotații cu simetrie quasi-cristalină a dus la formalismul generării topologice de tipul 5|8|5, complementare celor de tip Stone-Wales clasice (5/7|7|5) din secțiunea anterioară (Figura 6). Primele rezultate sunt promițătoare și se referă la sistemele 2D de tipul grafenelor, pentru care ulterior se pot aplica modelele bondonice de caracterizare și predicție a lungimii de acțiune a legării chimice, precum mai sus expus (Obiectivul 2).

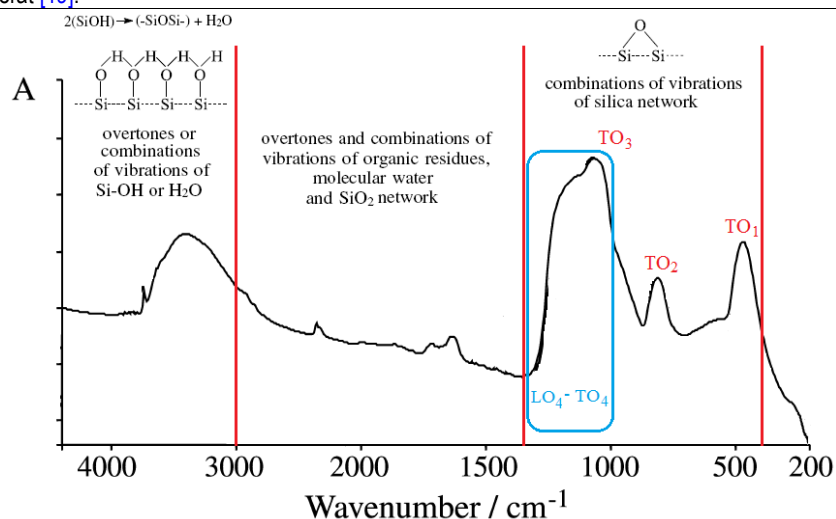
**Figura 6.** Vizualizarea structurii directe (sus) și duale (jos) pentru fragmente grafenice supuse diferitelor transformări topologice față de structura genuină ("pristine" în figură): rotații Stone-Wales 5|7|7|5, dislocații dipolare 5|7|6|6|7|5, până la construcția divacantă 5|8|5 [17].



În fine, pentru mesosistemele suport la moleculele active biologic s-a avansat un criteriu original pentru ordonarea și caracterizarea porozității acestora, așa numita metodă " invers cuantică spectrală (spectral-IQ)"; aceasta se bazează pe prelucrarea informațiilor din spectrele FTIR moleculare în

conjunție cu raportul particulă/undă cuantică, precum abstras din recentul formalism al incertitudinii Heisenberg extinse, și folosește date spectrale precum lungimea de undă/numărul de undă pentru înălțimea maximă pentru o bandă dată, limitele de bandă considerată, lărgimea de bandă la jumătatea înălțimii maxime (FWHM). Algoritmul furnizează clasificarea sistemelor mesoporoase, precum cele obținute prin metoda sol-gel, aici aplicate la bromura N-dodecil trimetil de amoniu (DTAB) și bromura cetiltrimetil de amoniu (CTAB) și a combinațiilor acestora în calitate de cosolvenți, în materiale preponderent poroase (cu accentuat caracter de particulă cuantică, prin legare strânsă, ionică) și în cele mai netede (preponderent ondulatoriu al legăturii chimice manifestate, de tip covalent). Rezultatele sunt interpretate prin noul indice “informație cuantică reziduală”, iar validarea lor se face prin compararea acestui indice cu informația furnizată de alte tehnici de analiză fizico-chimică, în cazul de față prin tehnica descompunerii termice la temperaturi medii (60°C) și înalte (700°C). Astfel se pot identifica și elucida noi mecanisme de legare cuanto-chimică cu corespondent spectral (Figura 7).

**Figura 7.** Reprezentarea generală a unui spectru FTIR pentru un mesosistem obținut prin metoda sol-gel; se remarcă modurile optice transversale (TO în figură) cu specificarea celor de îndoire (rocking) TO1, de vibrație simetrică TO2 și antisimetrică TO3 a atomilor de oxigen din legătura Si-O-Si (modurile longitudinale LO fiind implicite); modul LO4-TO4 apare ca fiind unul distinct și nedefinitiv alocat în literatură, dar presupus datorat vibrațiilor induse de dezordinea structurală de la frontiera structurii de siliciu, remarcându-se așadar ca “teritoriul” ideal pentru studiul cuantic (prin extragerea informației invers cuantice particulă/undă din spectrul asociat) al gradului de porozitate și al legării chimice la suprafața mesosistemului de siliciu considerat [19].



## Concluzii și Perspective

Etapa 2012 a proiectului de față a realizat avansarea unui “mănunchi” unitar de modele și algoritmi pentru înțelegerea și controlul legăturii chimice în interacție cu mediul bio-/eco-/farmacologic, și anume: fundamentarea legăturii chimice pe bazele cuantice ale condensării Bose-Einstein cu aplicații la sistemele saturate cu hidrogen; extinderea corelațiilor structură chimică-activitate biologică la mecanisme de interacție explicate cu principiile de reactivitate (ale electronegativității, tăriei chimice, puterii chimice, electrofilicității) cu aplicații la toxicitatea inter-specii a hidrocarburilor aromatice policiclice clorinate; fundamentarea atomică a reactivității chimice pe baza potențialului cuantic bohmian și al raportului de aur al numărului atomic relativ la numărul de electroni atomici (și de valență); clarificarea relației dintre starea fundamentală și cea de valență în atomul reactiv chimic, cu aplicație la elementele chimice active ecotoxicologic; extinderea mecanismului de formare și propagare bondonică în sisteme moleculare extinse, de tipul nanosistemelor și grafene; introducerea conceptului de colorare reactiv-topologică prin indicatorii de electronegativitate și tăria chimică cu rezoluție spectrală, cu aplicație la toxicanții policiclici aromatici; formularea izomeriilor topologice non-defective în sisteme extinse, cu aplicație la grafene ca suport nanosistemic pentru compuși cosmetici; formularea algoritmului spectral invers cuantic pentru extragerea informației de tip particulă/undă în mesosisteme obținute prin tehnica sol-gel, analizate spectral. Aceste modele vor fi mai departe unificate și integrat aplicate legăturii chimice în spații ortogonale de reactivitate-activitate în ultima etapă a proiectului, din anul 2013.

**Lucrări realizate și comunicate (membrii grantului sunt evidențiați)**

1. **Putz M.V.** Density Functional Theory of Bose-Einstein Condensation: Road to Chemical Bonding Quantum Condensate. *Struct. Bond.*, 149 (2013) 1-48; DOI: 10.1007/978-3-642-32753-7\_1; (ISI Impact Factor ~3.6) URL: <http://www.springer.com/chemistry/inorganic+chemistry/book/978-3-642-32752-0>
2. **Putz M.V., Putz A.M.** DFT Chemical Reactivity Driven by Biological Activity: Applications for the Toxicological Fate of Chlorinated PAHs. *Struct. Bond.* 150 (2013) 181–232; DOI: 10.1007/978-3-642-32750-6\_6; (ISI Impact Factor ~3.6) URL: <http://www.springer.com/chemistry/inorganic+chemistry/book/978-3-642-32749-0>
3. **Putz M.V., Tudoran M.A., Putz A.M.** Modeling Chlorinated Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (Cl-PAH) Eco- and Toxicology by QSAR-OECD ToolBox Facility, *Int. J. Chem. Model.*, 4(4) (2012) accepted.
4. **Putz M.V.** *Chemical Reactivity Driven by Biological Activity*" (Oral presentation) Advances in Structure-Property Correlations, the Gate for Special Properties at Molecular and Nano-Scale Levels (ADSPECPRO- 2012), Bucuresti, Romania 20-21 September 2012; URL: [http://stoner.phys.uaic.ro/projects/PCCE\\_239\\_2010/Events\\_IC.html](http://stoner.phys.uaic.ro/projects/PCCE_239_2010/Events_IC.html)
5. Tudoran M.A., **Putz M.V.** Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: from *in cerebro* to *in silico* Eco-Toxicity Fate (Oral Presentation). AI XIV-lea Simpozion Internațional „TINERII ȘI CERCETAREA MULTIDISCIPLINARĂ”, 15-16 Noiembrie 2012; URL: <http://www.acmv.ro/lang-ro/simpozion-2012/142-programul-general-al-simpozionului.html>
6. Tudoran M.A., **Putz M.V.** Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: from *in cerebro* to *in silico* Eco-Toxicity Fate. Chem Bull of "Politehnica" University of Timișoara, Romania, Series of Chem. and Environ. Eng., Tom 57 (71), Fascicula 1 (2012) 50-53; URL: [http://www.chemicalbulletin.ro/Chemical-Bulletin-Issue\\_aD8.html](http://www.chemicalbulletin.ro/Chemical-Bulletin-Issue_aD8.html)
7. **Putz M.V.,** Mingos D.M.P. (Editors) APPLICATIONS OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY TO CHEMICAL REACTIVITY Springer Structure and Bonding, Vol. 149, VIII + 224 p., 77 illus., 32 in color (2013) ISBN (Hardcover): 978-3-642-32752-0; URL: <http://www.springer.com/chemistry/inorganic+chemistry/book/978-3-642-32752-0>
8. **Putz M.V.,** Mingos D.M.P. (Editors) APPLICATIONS OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY TO BIOLOGICAL AND BIOINORGANIC CHEMISTRY. Springer Structure and Bonding, Vol. 150 VIII + 236 p., 70 illus., 48 in color (2013) ISBN (Hardcover): 978-3-642-32749-0; URL: <http://www.springer.com/chemistry/inorganic+chemistry/book/978-3-642-32749-0>
9. **Putz M.V.** CHEMICAL ORTHOGONAL SPACES, Mathematical Chemistry Monographs, Vol. , Kragujevac, Serbia (2012) X + 240 pp. Hardcover, 12 color illus. ISBN: 978-86-6009-019-7; URL: <http://www.pmf.kg.ac.rs/match/mcm14.html>
10. **Putz M.V.** Valence Atom with Bohmian Quantum Potential: The Golden Ratio Approach. *Chem. Central J.* 6 (2012) 135 (16 pages); DOI: 10.1186/1752-153X-6-135; (ISI Impact Factor ~3.3) URL: <http://journal.chemistrycentral.com/content/6/1/135/abstract>
11. **Putz M.V., Ori O.** Bondonic Characterization of Extended Nanosystems: Application to Graphene's Nanoribbons. *Chemical Physics Letters* 548 (2012) 95-100; DOI: 10.1016/j.cplett.2012.08.019; (ISI Impact Factor ~2.4) URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261412009359?v=s5>
12. de Corato M., Bernasconi M., d'Alessio L., Ori O., **Putz M.V.,** Benedek G. Topological versus Physical and Chemical Properties of Negatively Curved Carbon Surfaces, in *TOPOLOGICAL MODELING OF NANOSTRUCTURES AND EXTENDED SYSTEMS*, Ali Reza Ashrafi, Franco Cataldo, Ali Iranmanesh, Ottorino Ori (Eds.), Carbon Materials: Chemistry & Physics, vol. 6, Springer Verlag, London, 2013, Chapter 4, accepted;
13. de Corato M., Sedlar J., Graovac A., **Putz M.V.,** Benedek G., Ori O. Topological stability of Moebius-like graphenic nanostructures, in *TOPOLOGICAL MODELING OF NANOSTRUCTURES AND EXTENDED SYSTEMS*, Ali Reza Ashrafi, Franco Cataldo, Ali Iranmanesh, Ottorino Ori (Eds.), Carbon Materials: Chemistry & Physics, vol. 6, Springer Verlag, London, 2013, Chapter 7, accepted;
14. **Putz M.V.** (Editor) *ADVANCES IN CHEMICAL MODELING – VOL. III*, NOVA Science Publishers Inc., New York, 2012, pp 400 (cca.), ISBN: 978-1-62257-110-9; URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=34573](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=34573)
15. **Putz M.V., Ori O., Cataldo F., Putz A.M.** Parabolic reactivity "coloring" molecular topology. Application on carcinogenic PAHs. *Curr Org. Chem.* (2013) accepted (ISI Impact Factor ~3.); on Hot Topic Special Issue Ref: HT-SBJ-COC-0050, Topic: Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: From Structure to Chemical Reactivity to Biological Activity, Guest Editors: Mihai V. Putz, Publication Date: July 2013; URL: [http://www.benthamscience.com/coc/HT/Mihai\\_V\\_Putz.pdf](http://www.benthamscience.com/coc/HT/Mihai_V_Putz.pdf)
16. **Putz M.V., Ori O., De Corato M., Putz A.M., Benedek G., Cataldo F., Graovac A.** Introducing „Colored“ Molecular Topology by Reactivity Indices of Electronegativity and Chemical Hardness, in *TOPOLOGICAL MODELING OF NANOSTRUCTURES AND EXTENDED SYSTEMS*, Ali Reza Ashrafi, Franco Cataldo, Ali Iranmanesh, Ottorino Ori (Eds.), Carbon Materials: Chemistry & Physics, vol. 6, Springer Verlag, London, 2013, Chapter 9, accepted;
17. Ori O., **Putz M.V.** Isomeric Formation of 5/8/5 Defects in Graphenic Systems. Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, MS ID FN CN12101.R1/06.11.2012 accepted. (ISI Impact Factor ~0.8)
18. De Corato M., Benedek G., Ori O., **Putz M.V.** Topological Study of Schwarzitic Junctions in 1D Lattices, *Int. J. Chem. Model.*, 4(2/3) (2012) in press. URL: [https://www.novapublishers.com/catalog/product\\_info.php?products\\_id=33851](https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=33851)
19. **Putz A.M., Putz M.V.** Spectral Inverse Quantum (Spectral-IQ) Method for Modeling Mesoporous Systems. Application on Silica Films by FTIR. *Int. J. Mol. Sci.*, 13(12) (2012) 15925-15941; DOI:10.3390/ijms131215925; (ISI Impact Factor ~2.6) URL: <http://www.mdpi.com/1422-0067/13/12/15925>
20. **Putz A.M., Putz M.V.** Assessment Of Drug Carriers' Potential For Ionic Liquids Based Mesoporous Materials Through Observed FTIR Spectroscopic Quantum Fluctuation (oral presentation) "31<sup>st</sup> EUROPEAN CONGRESS ON MOLECULAR SPECTROSCOPY (EUCMOS-2012)" la Cluj-Napoca, Romania, 26-31 August 2012; URL: <http://www.phys.ubbcluj.ro/eucmos2012/>
21. **Putz A.M., Putz M.V.** Spectral-Structure Activity Relationship (Spectral-SAR) Assessment of Ionic Liquids' *in silico* Ecotoxicity, In: *IONIC LIQUIDS - NEW ASPECTS FOR THE FUTURE*, Jun-ichi Kadokawa (Ed.), INTECH Open Access Company, Rijeka, Croatia (2012), In Press; ISBN: 980-953-307-626-8; URL: <http://www.intechopen.com/welcome/2ef68ccc1945a4fc50c6c212bc2f0bd3/mvputz@cbg.uvt.ro>