

Ionuț-Tudor Moraru

LISTA DE LUCRĂRI

a. Lista celor maximum 10 lucrări considerate de candidat a fi cele mai relevante pentru realizările profesionale proprii, care sunt incluse în format electronic în dosar și care se pot regăsi și în celelalte categorii de lucrări prevăzute de prezentul articol;

- 1. Bridging a Knowledge Gap from Siloxanes to Germoxanes and Stannoxanes. A Theoretical Natural Bond Orbital Study.** I.-T. Moraru, P. M. Petrar, G. Nemes, *J. Phys. Chem. A* **2017**, *121*, 2515-2522.
DOI: 10.1021/acs.jpca.7b01208
- 2. Mo Thio and Oxo-Thio Molecular Complexes Film as Self-Healing Catalyst for Photocatalytic Hydrogen Evolution on 2D Materials.** J. Barros Barbosa, P. L. Taberna, V. Bourdon, I. C. Gerber, R. Poteau, A. Balocchi, X. Marie, J. Esvan, P. Puech, A. Barnabé, L. Da Gama Fernandes Vieira, I.-T. Moraru, J. Y. Chane-Ching, *Appl. Catal. B: Environ.* **2020**.
DOI: 10.1016/j.apcatb.2020.119288
- 3. Computational and Experimental Investigation of Phosphaalkenyl Germylenes from Donor-Acceptor Perspective.** R. Septelean¹, I.-T. Moraru¹, T.-G. Kocsor, N. Deak, N. Saffon-Merceron, A. Castel, G. Nemes, *Inorg. Chim. Acta* **2018**, *475*, 112-119.
DOI: 10.1016/j.ica.2017.08.057
¹ *Autori cu contribuții egale în realizarea lucrării.*
- 4. A Non-symmetric Sulfur-Based O,C,O-Chelating Pincer Ligand Leading to Chiral Germylene and Stannylene.** N. Deak, O. T. du Boullay, I.-T. Moraru, S. Mallet-Ladeira, D. Madec, G. Nemes, *Dalton Trans.* **2019**, *48*, 2399-2406.
DOI: 10.1039/c8dt05116j
- 5. Reactivity of Bis(sulfonyl)O,C,O - Chelated Metallylenes in Cycloaddition with ortho - Benzoquinone: An Experimental and Computational Study.** N. Deak, I.-T. Moraru, N. Saffon-Merceron, D. Madec, G. Nemes, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2017**, *2017*, 4214-4220.
DOI: 10.1002/ejic.201700756
- 6. A DFT Investigation of a Polycyclic Stannylene Model; Structural Characterization and Stability Assessment.** I.-T. Moraru, G. Nemes, *Studia UBB Chemia* **2019**, *64*, 435-446.
DOI: 10.24193/subbchem.2019.2.37

7. **New Stable 3,1-Germaphosphapropenes. Synthesis and Structural Characterization.** L. Buta, R. Septelean, I.-T. Moraru, A. Soran, L. Silaghi-Dumitrescu, G. Nemes, *Inorg. Chim. Acta* **2019**, *486*, 648-653.
DOI: 10.1016/j.ica.2018.11.041
8. **Palladium and Ruthenium Derivatives Stabilised by Bis-sulfone Ligand.** N. Deak, R. Septelean, I.-T. Moraru, S. Mallet-Ladeira, D. Madec, G. Nemes, *Studia UBB Chemia* **2018**, *63*, 105-115.
DOI: 10.24193/subbchem.2018.2.10
9. **Oxidation of sp² versus sp³ Phosphorus Atom in 1,3-Diphosphapropenes. A DFT Study.** I.-T. Moraru, R. Septelean, G. Nemes, *Rev. Roum. Chim.* **2020**, *acceptat spre publicare*.
10. **New Stable 2,3-Dichloro,1,3-Diphosphapropenes; Synthesis and Characterization.** R. Septelean, A. Muresan, A. Soran, I.-T. Moraru, G. Nemes, *Rev. Roum. Chim.* **2020**, *acceptat spre publicare*.

b) teza sau tezele de doctorat;

Doctorand anul III - Școala Doctorală de Chimie, Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică, Universitatea Babeș-Bolyai.

c) Brevete de invenție și alte titluri de proprietate industrială;

Nu este cazul.

d) Cărți și capitole în cărți;

Nu este cazul.

e) Articole/studii, publicate în reviste din fluxul științific internațional principal;

1. **Residential, Soil and Water Radon Surveys in North-Western Part of Romania.** A. Cucos (Dinu), B. Papp, T. Dicu, M. Moldovan, D. B. Burghel, I.-T. Moraru, A. Tențer, C. Cosma, *J. Environ. Radioact.* **2017**, *166*, 412-416.
DOI: 10.1016/j.jenvrad.2016.10.003
2. **Bridging a Knowledge Gap from Siloxanes to Germoxanes and Stannoxanes. A Theoretical Natural Bond Orbital Study.** I.-T. Moraru, P. M. Petrar, G. Nemes, *J. Phys. Chem. A* **2017**, *121*, 2515-2522.
DOI: 10.1021/acs.jpca.7b01208

3. **Reactivity of Bis(sulfonyl)O,C,O - Chelated Metallylenes in Cycloaddition with ortho - Benzoquinone: An Experimental and Computational Study.** N. Deak, I.-T. Moraru, N. Saffon-Merceron, D. Madec, G. Nemes, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2017**, *2017*, 4214–4220.
DOI: 10.1002/ejic.201700756
4. **Computational and Experimental Investigation of Phosphaalkenyl Germlyenes from Donor-Acceptor Perspective.** R. Septelean¹, I.-T. Moraru¹, T.-G. Kocsor, N. Deak, N. Saffon-Merceron, A. Castel, G. Nemes, *Inorg. Chim. Acta* **2018**, *475*, 112-119.
DOI: 10.1016/j.ica.2017.08.057
¹ *Autori cu contribuții egale în realizarea lucrării.*
5. **Palladium and Ruthenium Derivatives Stabilised by Bis-sulfone Ligand.** N. Deak, R. Septelean, I.-T. Moraru, S. Mallet-Ladeira, D. Madec, G. Nemes, *Studia UBB Chemia* **2018**, *63*, 105-115.
DOI: 10.24193/subbchem.2018.2.10
6. **New stable 3,1-Germaphosphapropenes. Synthesis and Structural Characterization.** L. Buta, R. Septelean, I.-T. Moraru, A. Soran, L. Silaghi-Dumitrescu, G. Nemes, *Inorg. Chim. Acta* **2019**, *486*, 648-653.
DOI: 10.1016/j.ica.2018.11.041
7. **A Non-Symmetric Sulfur-Based O,C,O-Chelating Pincer Ligand Leading to Chiral Germylene and Stannylene.** N. Deak, O. T. du Boullay, I.-T. Moraru, S. Mallet-Ladeira, D. Madec, G. Nemes, *Dalton Trans.* **2019**, *48*, 2399-2406.
DOI: 10.1039/c8dt05116j
8. **A DFT Investigation of a Polycyclic Stannylene Model; Structural Characterization and Stability Assessment.** I.-T. Moraru, G. Nemes, *Studia UBB Chemia* **2019**, *64*, 435-446.
DOI: 10.24193/subbchem.2019.2.37
9. **Mo Thio and Oxo-Thio Molecular Complexes Film as Self-Healing Catalyst for Photocatalytic Hydrogen Evolution on 2D Materials.** J. Barros Barbosa, P. L. Taberna, V. Bourdon, I. C. Gerber, R. Poteau, A. Balocchi, X. Marie, J. Esvan, P. Puech, A. Barnabé, L. Da Gama Fernandes Vieira, I.-T. Moraru, J. Y. Chane-Ching, *Appl. Catal. B: Environ.* **2020**.
DOI: 10.1016/j.apcatb.2020.119288
10. **Oxidation of sp² versus sp³ Phosphorus Atom in 1,3-Diphosphapropenes. A DFT Study.** I.-T. Moraru, R. Septelean, G. Nemes, *Rev. Roum. Chim.* **2020**, *acceptat spre publicare*.
11. **New Stable 2,3-Dichloro,1,3-Diphosphapropenes; Synthesis and Characterization.** R. Septelean, A. Muresan, A. Soran, I.-T. Moraru, G. Nemes, *Rev. Roum. Chim.* **2020**, *acceptat spre publicare*.

f) *Publicații in extenso, apărute în lucrări ale principalelor conferințe internaționale de specialitate;*

Nu este cazul.

g) *Alte lucrări și contribuții științifice sau, după caz:*

Participări la conferințe naționale și internaționale

Prezentări Orale

1. **Rationalizing the Structural Behaviour of Some Oxanes Containing Group 14 Elements Using Theoretical Calculations.** I.-T. Moraru, P. M. Petrar, *MatCatNet Conference “From Molecules to Functionalised Materials”*, **17-21 septembrie, 2015**, Ohrid, Macedonia.
2. **Hyperconjugative Interactions within Trisiloxanic, Trigerloxanic and Tristannoxanic Derivatives.** I.-T. Moraru, P. M. Petrar, G. Nemes, *XIIIth International Conference Students for Students*, **13-17 aprilie 2016**, Cluj-Napoca, România.
3. **Assessing Chemical Bonding in Disiloxanic, Digermoxanic and Distannoxanic Species.** I.-T. Moraru, P. M. Petrar, G. Nemes, *Young Researchers’ International Conference on Chemistry and Chemical Engineering*, **12-14 mai 2016**, Cluj-Napoca, România.
4. **Understanding the Structure of Siloxanic, Germoxanic and Stannoxanic Species.** I.-T. Moraru, G. Nemes, *MatCatNet Conference “From Molecules to Functionalised Materials”*, **3-5 septembrie 2016**, Ohrid, Macedonia.
5. **Investigating the Structure of Siloxanic, Germoxanic and Stannoxanic Species. A NBO Approach.** I.-T. Moraru, P. M. Petrar, G. Nemes, *Molecular Modeling in Chemistry and Biochemistry - MOLMOD*, **13-15 noiembrie 2016**, Cluj-Napoca, România.
6. **Theoretical Modeling of the Fischer-Tropsch Synthesis Catalyzed by Small Ruthenium Nanoparticles: First Steps.** L. Cusinato, I.-T. Moraru, L. M. Martínez-Prieto, B. Chaudret, I. del Rosal, R. Poteau, *Molecular Modeling in Chemistry and Biochemistry - MOLMOD*, **13-15 noiembrie 2016**, Cluj-Napoca, România.
7. **A DFT Study Concerning the Structural Features of Amines’ and Ethers’ Heavier Analogues with Silicon, Germanium and Tin.** F. Teleanu, I.-T. Moraru, G. Nemes, *XV International Conference Students for Students*, **18-22 aprilie 2018**, Cluj-Napoca, România.

8. **A Theoretical Investigation of Electronic Interactions in Inorganic Amines and Isoelectronic Compounds with Silicon, Germanium and Tin.** F. Teleanu, I.-T. Moraru, G. Nemes, *Sesiunea de Comunicări Științifice Studențești*, **25-26 mai 2018**, București, România.
9. **Relația dintre Hiperconjugare și Planaritate – Un Studiu DFT al Aminelor Anorganice și Compușilor Izoelectronici.** F. Teleanu, I.-T. Moraru, G. Nemes, *Sesiunea de Comunicări Științifice a Studenților, Masteranzilor și Doctoranzilor*, **29-30 iunie 2018**, Iași, România.
10. **Towards a Comprehensive Overview of E-O and E-N Chemical Bondings (E = Si, Ge, Sn) in Neutral and Cationic Species; a DFT Case Study.** I.-T. Moraru, F. Teleanu, G. Nemes, *A XXXV-a Conferință Națională de Chimie*, **2-5 octombrie 2018**, Călimănești-Căciulata, România.
11. **On the Possible Presence of Carbides in the Fischer-Tropsch Process Catalyzed by Ruthenium Nanoparticles: a DFT Study.** I.-T. Moraru, L. M. Martínez-Prieto, B. Chaudret, I. del Rosal, R. Poteau, *Molecular Modeling in Chemistry and Biochemistry - MOLMOD*, **28-30 octombrie 2018**, Cluj-Napoca, România.
12. **Oligomers of Inorganic Ethers. A DFT Study.** F. Teleanu, I.-T. Moraru, G. Nemes, *XVI International Conference Students for Students*, **2-6 aprilie 2019**, Cluj-Napoca, România.

Postere

1. **Assessment of Structural Features of Acyclic Stannasiloxaic Compounds through DFT Calculations.** I.-T. Moraru, P. M. Petrar, *Molecular Modeling in Chemistry and Biochemistry - MOLMOD*, **13-15 noiembrie 2014**, Cluj-Napoca, România.
2. **Discussing the Nature of the Chemical Bonding in Group 14 Acyclic Oxanes through DFT Calculations.** I.-T. Moraru, P. M. Petrar, *XIIth International Conference Students for Students*, **22-26 aprilie 2015**, Cluj-Napoca, România.
3. **A Comprehensive NBO Study Regarding the Bond Formation in Siloxanes, Germoxanes and Stannoxanes.** I.-T. Moraru, G. Nemeș, *A XXXIV-a Conferința Națională de Chimie*, **4-7 octombrie 2016**, Călimănești-Căciulata, România.
4. **Towards New Germaphosphaalkenyl Derivatives.** L. Buta, I.-T. Moraru, G. Nemes, L. Silaghi-Dumitrescu, *European Workshop on Phosphorus Chemistry - EWPC 14/2017*, **20-22 martie 2017**, Cluj-Napoca, România.

- 5. New Insights Regarding Chemical Bonding within Heavier Analogues of Ethers: Siloxanes, Germoxanes and Stannoxanes.** I.-T. Moraru, G. Nemes, *11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)*, **27 august–1 septembrie 2017**, München, Germania.
- 6. Assessment of the E-O, E-N and E-B Chemical Bondings (E = Si, Ge, Sn) in Neutral and Cationic Derivatives.** I.-T. Moraru, F. Teleanu, R. Septelean, G. Nemes, *Young Researchers' International Conference on Chemistry and Chemical Engineering*, **3–5 mai 2018**, Budapesta, Ungaria.
- 7. Correlations between Number of Electrons and Structural Features of Neutral and Ionic (ER₃)₃Z Species (E = B, C; E = Si, Ge, Sn; R = H, Me).** F. Teleanu, I.-T. Moraru, G. Nemes, *A XXXV-a Conferință Națională de Chimie*, **2-5 octombrie 2018**, Călimănești-Căciulata, România.
- 8. Towards a Unitary Description of E-O and E-N Bonds (E = Si, Ge, Sn); from Inorganic Ethers to Amines and Isoelectronic Species.** I.-T. Moraru, F. Teleanu, G. Nemes, *Molecular Modeling in Chemistry and Biochemistry - MOLMOD*, **28-30 octombrie 2018**, Cluj-Napoca, România.