



ACADEMIA ROMÂNĂ
INSTITUTUL DE CHIMIE „CORIOLAN DRĂGULESCU”

Bd. Mihai Viteazu, nr. 24, RO-300223, Timișoara, România
tel: 0256-491818; fax: 0256-491824



Vizat
Director,

Dr. Otilia COSTIȘOR

PLAN DE CERCETARE 2022

PREZENTARE SINTETICĂ

Activitatea Institutului de Chimie „Coriolan Drăgulescu” prevăzută pentru anul 2022 este reflectată în **4 Programe de cercetare** cu denumirea:

Programul 1: Proiectarea moleculară asistată de calculator.

Programul 2: Contribuții la chimia compușilor organici, element-organici și polimerici conținând F, N, P, S. Sinteza, caracterizare, aplicații.

Programul 3: Chimia și aplicațiile compușilor tetrapirolici din clasa porfirinelor.

Programul 4: Compuși anorganici și hibridi cu relevanță în Știința materialelor nanostructurate. Precursori pentru materiale avansate.

Planul de cercetare pe anul 2022 al Institutului de Chimie „Coriolan Drăgulescu” se prezintă în continuare astfel:



ACADEMIA ROMÂNĂ
INSTITUTUL DE CHIMIE „CORIOLAN DRĂGULESCU”

Bd. Mihai Viteazu, nr. 24, RO-300223, Timișoara, România
tel: 0256-491818; fax: 0256-491824



Director,

Dr. Chim. Otilia COSTIȘOR

Programul de cercetare 1 - 2022

PROIECTAREA MOLECULARĂ ASISTATĂ DE CALCULATOR

Coordonator: Dr. Liliana Pacureanu

Denumirea: Proiectul nr.1.1 : **Aplicarea cheminformaticii în studiul pesticidelor, modulatorilor receptorilor estrogenici și altor compuși și explorarea și analiza unor librării chimice.**

Responsabil: Dr. ing. Simona Funar-Timofei, CS I

Tema 1.1.1. Aplicarea cheminformaticii în studiul pesticidelor.

Coordonator: Dr. Ing. Simona Funar-Timofei, CSI

Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1. Metode cheminformaticice pentru evaluarea valorilor acute de referință ale pesticidelor.	1.1. Aplicarea metodelor multivariate și regresionale liniare. 1.2. Validarea modelelor obținute. 1.3. Predicții de pesticide cu riscuri minime pentru sănătatea oamenilor.	<u>Colectiv de cercetare:</u> - Dr. Ana Borota, CSIII - Dr. Luminița Crișan, CSIII - Dr. Alina Bora, CSIII <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. dr. Takahiro Suzuki, Natural Science Laboratory, Toyo University, Tokyo, Japonia
Faza 2 Trim.II	2. Relații cantitative structură-toxicitate-toxicitate la șobolani ale pesticidelor organofosforice	2.1. Modelarea moleculară a structurii pesticidelor. 2.2. Relații interspecii cantitative structură-toxicitate-toxicitate la șobolani și iepuri prin metode liniare chemometrice. 2.3. Validarea modelelor obținute și predicții de pesticide cu toxicitate orală acută pentru care nu se cunoșteau date experimentale.	
Faza 3 Trim.III	3. Relații calitative structură-toxicitate la albine ale pesticidelor organofosforice	3.1. Crearea bazei de date. 3.2. Modelare moleculară. 3.3. Analiză multivariată și relații calitative structură-toxicitate.	
Faza 4 Trim.IV	4. Relații cantitative structură-toxicitate la albine ale pesticidelor organofosforice	4.1. Relații cantitative structură-toxicitate. 4.2. Validarea modelelor obținute și predicții de noi pesticide organofosforice cu toxicitate redusă față de albine.	

Tema 1.1.2. Dezvoltarea de modele de predicție pentru modulatori activi pe isoformele mutante ale receptorului estrogenic alfa, responsabile de rezistența la tratament în cancerul mamar.

Coordonator: Dr. Ramona Curpan, CS II

Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1. Compilarea seturilor de liganzi din diferite surse	1.1. Explorarea bazelor de date cu informații chimice și biologice, e.g. ChEMBL, PubChem, ZINC, AssayCentral, etc. Și a literaturii (PubMed) pentru extragerea liganzilor de interes; 1.2. Analizarea și prelucrarea datelor: îndepărtarea structurilor duplicate, standardizarea datelor de activitate biologică;	<u>Colectiv de cercetare:</u> - Dr. Liliana Halip, CSIII - Dr. Ana Borota, CSIII - Dr. Sorin Avram, CSIII <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Dr. Craig Jordan, Dr. Philipp Maximov, University of Texas MD Anderson Cancer Center, USA
Faza 2 Trim.II	2. Pregătirea seturilor de liganzi și calcularea descriptorilor moleculari	2.1. Standardizarea seturilor de liganzi; 2.2. Generarea diferitelor clase de descriptori moleculari pentru setul de liganzi;	
Faza 3 Trim.III	3. Generarea modelelor de predicție utilizând algoritmi diverși	3.1. Clasificarea liganzilor în set de învățare și set de testare; 3.2. Explorare de diferiți algoritmi de tip machine-learning; 3.3. Generarea de modele utilizând algoritmi de deep learning; 3.4. Analiza predicțiilor cu diferiți parametri de evaluare;	
Faza 4 Trim.IV	4. Evaluarea modelelor de predicție și validarea predicțiilor	4.1. Evaluare într-un experiment de virtual screening; 4.2. Evaluare pe un set de date extern; 4.3. Validarea primilor 10 compuși, cu cele mai bune scoruri de predicție, în simulări de dinamică moleculară;	

Tema 1.1.3. Studii in silico de potență și toxicitate a medicamentelor și compușilor agrochimici pe baza interacțiilor chimico-biologice.

Coordonator: Dr. Ana Borota, CS III

Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1. Analiza speciilor de plante invazive posesoare a mutației dominante Pro197 (AHAS) cu inducere de rezistență erbicidă	1.1. Extragerea și pelucrarea datelor cu privire la speciile invazive, rezistente datorită mutației aminoacidului Pro197 al enzimei acetohidroxi acid sintetază (AHAS). 1.2. Studiul diferențial al implicației mutațiilor singulare sau multiple asupra mecanismului de inhibare al AHAS.	<u>Colectiv de cercetare:</u> - Dr. Ing. Simona Funar-Timofei, CSI - Dr. Luminița Crișan, CSIII - Dr. Ramona Curpan, CSII - Dr. Liliana Halip, CSIII - Dr. Alina Bora, CSIII
Faza 2 Trim.II	2. Construirea modelelor comparative pentru enzimele AHAS – variante sălbatice și mutate	2.1. Obținerea modelelor 3D proteice AHAS: selecție template, alinieri secvențiale. 2.2. Evaluarea, optimizarea și rafinarea modelelor generate.	
Faza 3 Trim.III	3. Modelarea avansată a elementelor structurale ale AHAS, responsabile de inducerea sau pierderea activității erbicide	3.1. Modelarea și evaluarea flexibilității buclei Q, situs al aminoacidului Pro197, respectiv al mutațiilor acestuia. 3.2. Andocare rigidă și flexibilă a unor inhibitori cunoscuți ai AHAS. 3.3. Andocare rigidă și flexibilă a unor erbicide pentru care a fost dobândită rezistența.	
Faza 4 Trim.IV	4. Elucidarea trăsăturilor farmacofore diferențiale pentru enzimele AHAS sălbatice/mutate	4.1. Realizarea de modele farmacofore pe baza de structură pentru enzimele AHAS sălbatice. 4.2. Realizarea de modele farmacofore pe baza de structură pentru enzimele AHAS mutate. 4.3 Compararea, analiza și interpretarea rezultatelor.	

Tema 1.1.4. Dezvoltarea, implementarea și testarea de aplicații pentru explorarea și analiza unor librării chimice.			
Coordonator: Dr. Cristian Neanu, CS III			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1. Pregătire seturi de date din structurile de cristale	1.1. Extragerea și prelucrarea bazei de date cu structuri macromoleculare RCSB PDB 1.2. Identificarea/evaluarea unor baze de date cu subseturi de proteine.	<u>Colectiv de cercetare:</u> - Dr. Sorin Avram, CSIII - Dr. Liliana Halip, CSIII - Dr. Ramona Curpăn, CSII
Faza 2 Trim.II	2. Evaluarea indicatorului BFI-bs pe diferite seturi de proteine.	2.1 Evaluarea unor baze de date proteice cu BFI-bs 2.2 Aplicarea unui algoritm de calcul al BFI-bs la bazele de date.	
Faza 3 Trim.III	3. Evaluare indicatori DPI și QI. Analize comparative.	3.1. Evaluarea bazei de date proteice RCSB PDB cu DPI. 3.2. Evaluarea bazei de date proteice RCSB PDB cu QI 3.3. Compararea calitatii structurilor de raze X depozitate în PDB prin cei 2 indici.	
Faza 4 Trim.IV	4. Identificarea unor criterii pentru alegerea cristalelor pentru chimia computațională	4.1. Analize de similaritate și corelare între indicii analizați.	

Denumirea: Proiectul nr.1.2.: **Aplicații ale metodelor de modelare moleculară la liganzi activi pe proteine membranare și protein-kinaze**

Responsabil: Dr.ing. Liliana Păcureanu, CS II

Tema 1.2.1 Explorarea efectelor adverse ale medicamentelor pentru re poziționarea acestora			
Coordonator: Dr. Liliana Halip, CSIII			
Trim.	Obiective	Activități	Executanti
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Liliana Halip, CS III Dr. Ramona Curpăn,
Faza 1 Trim 1	1. Pregătirea bibliotecii MedDra	1.1. Descărcarea bazei de date MedDra 1.2. Extragerea codurilor MedDra clasificate conform nivelurilor PT și HLT	

		1.3. Prelucrarea clasificării pentru a elimina termenii nesemnificativi 1.4. Generarea clasificării ierarhice a codurilor MedDra relevante pentru nivelul PT și HLT	CS II Dr. Ana Borota, CS III Dr. Alina Bora, CS III Dr. Sorin Avram, CS III
Faza 2 Trim 2	2. Obținerea unei colecții de medicamente și efectele adverse aferente	2.1. Descărcarea bazei de date DrugCentral 2.2. Filtrarea medicamentelor aprobate 2.3. Asocierea efectelor adverse conform FAERS 2.4. Maparea perechilor medicament-efecte adverse conform codurilor MedDra	<u>Colaboratori externi:</u> Universitatea New Mexico School of Medicine, Albuquerque, USA (Prof. Dr. Tudor I. Oprea, Dr. Cristian G. Bologa).
Faza 3 Trim 3	3. Generarea descriptorilor de tip amprentă	3.1 Testarea parametrilor setului de lucru (clasa, nivel de încredere, LLR, etc) pentru optimizare 3.2 Selectarea parametrilor de lucru 3.3 Generarea descriptorilor de tip amprentă	
Tema 1.2.2. Proiectarea de compuși noi eficienți în tratarea infecțiilor virale și/sau inflamatorii Coordonator: Dr. Alina Bora, CSIII			
Faza 1 Trim 1	1. Actualizarea listei țintelor biologice și a medicamentelor antivirale/antiinflamatorii aprobate	1.1. Actualizarea țintelor biologice cu implicare SARS-CoV-2 1.2. Actualizare lista medicamente aprobate cu rol viral și/sau inflamator 1.3. Pregătirea structurilor de start și a țintelor biologice selectate pentru <i>screeningul virtual</i>	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Liliana Păcureanu Dr. Luminița Crișan Dr. Liliana Halip Dr. Ana Borota
Faza 2 Trim 2	2. <i>Screening virtual</i> al medicamentelor antivirale și a analogilor citidină față de proteina SARS-CoV-2 3CLpro	2.1. Generarea librăriei de analogi de citidină și andocarea moleculară în situsul SARS-CoV-2 3CLpro 2.2. Andocarea moleculară a medicamentelor antivirale aprobate 2.4 Evaluarea proprietăților ADME/Tox și analiza rezultatelor andocării și ADME/Tox	<u>Colaboratori externi:</u> University of Mexico School of Medicine, Albuquerque, USA (Prof. Dr. Tudor I. Oprea, Dr. Cristian G. Bologa).
Faza 3 Trim 3	3. <i>Screeningul virtual</i> al bazei de date DrugCentral	3.1. <i>Screeningul virtual</i> al DrugCentral folosind medicamentul antiviral prioritizat	

		3.2 Andocarea moleculară în situsul SARS-CoV-2 3Clpro a candidaților DrugCentral prioritizați 3.3. Analiza rezultatelor	
Faza 4 Trim 4	4. Validarea stabilității interacțiunilor ligand - proteină	4.1. Studii de diamică moleculară a candidaților prioritizați 4.2. Calcule de energie liberă MM-GBSA a candidaților prioritizați 4.3 Evaluarea și diseminarea rezultatelor	
Tema 1.2.3. Profilul de selectivitate al inhibitorilor cistein - kinazelor Coordonator: Dr. Liliana Păcureanu, CS II			
Trim.	Obiective	Activități	Executanti
Faza 1 Trim 1	1. Actualizarea bazei de date de inhibitori covalenti	1.1. Investigarea spațiului chimic al inhibitorilor covalenti, inclusi in bazele de date ChEMBL si Drug Central. 1.2. Clasificarea lor in functie de grupele reactive si de scheletele moleculare (Bemis-Murko frameworks).	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Luminița Crișan CS III Dr. Sorin Avram CS III Dr. Alina Bora CS III <u>Colaboratori externi:</u> Dr. Costin Ioan Popescu Institutul de Biochimie al Acadmiei Romane
Faza 2 Trim 2	2. Evaluarea selectivitatii inhibitorilor covalenti	2.1. Actualizarea criteriilor de selectivitate 2.2. Identificarea structurilor selective și neselective ale inhibitorilor noncovalenti. 2.3. Calculul descriptorilor quanto-chimici moleculari si corelarea lor cu afinitatea/selectivitatea.	
Faza 3 Trim 3	3. Proiectarea unor schelete moleculare cu potentiala afinitate crescuta fata de proteina tinta	3.1 Selectarea scheletelor moleculare selective pentru cistein-kinaze 3.2 Optimizarea structurala prin andocare, calcule cuanto-chimice.	
Faza 4 Trim 4	4. Optimizarea computationala a afinitatii inhibitorilor covalenti proiectati	4.1. Optimizarea reactivitatii grupelor functionale. 4.2. Optimizarea scheletelor moleculare.	
Tema 1.2.4 Studiul translațional al medicamentelor și identificarea compușilor biologic activi Coordonator: Dr. Sorin Avram, CS III			

Trim.	Obiective	Activități	Executanti
Faza 1 Trim 1	1. Actualizarea conexiunilor medicament – boală – țintă biologică	1.1 Extragerea datelor din ultima versiune DrugCentral 1.2 Actualizarea seturilor de date medicament – boală 1.3 Actualizarea seturilor de date medicament – țintă 1.4 Actualizarea seturilor de date țintă biologică – boală	<u>Colectiv de cercetare:</u> - Chim.Toma Cristina, AsC <u>Colaboratori externi:</u> Prof. Tudor Oprea, University of New Mexico, USA
Faza 2 Trim 2	2. Identificarea afecțiunilor în dicționarul MedDRA	2.1 Extragerea indicațiilor și a contraindicațiilor din DrugCentral 2.2. Identificarea termenilor în MedDRA	
Faza 3 Trim 3	3. Separarea datelor specifice bărbaților și femeilor	3.1. Analiza manuală a afecțiunilor specifice bărbaților și femeilor 3.2. Separarea țăntelor biologice pentru cele doua seturi 3.3. Identificarea in PDB și analiza calitativă a țăntelor biologice	
Faza 4 Trim 4	4. Identificarea reacțiilor adverse specifice	4.1. Izolarea medicamentelor ce pot induce reacții specific femeilor 4.2. Izolarea medicamentelor ce pot induce reacții specific bărbaților 4.3 Propunerea unor mecanisme de acțiune pentru cele două categorii	
Tema 1.2.5 Repoziționarea computațională a unor medicamente si identificarea de compuși naturali pentru noi scopuri terapeutice Coordonator: Dr. Luminița Crișan, CS III			
Trim.	Obiective	Activități	Executanti
Faza 1 Trim 1	1. Evaluarea computațională a medicamentelor aprobate și a celor retrase de pe piață, inclusiv a medicamentelor experimentale, investigaționale și a metaboliților.	1.1. Studiul de literatură și identificarea bazelor de date care conțin medicamente aprobate de catre FDA, EMA, PMDA, etc 1.2. Descărcarea medicamentelor din bazele de date identificate 1.3. Calcularea proprietăților fizico-chimice, de Absorbție,	<u>Colectiv de cercetare:</u> - Dr. Liliana Pacureanu, CS II - Dr. Alina Bora, CS III - Dr. Sorin Avram, CS

		Distribuție, Metabolism, Excreție și Toxicitate (ADMETox) și a diversității chimice.	III - Chim. Daniela Istrate, CS
Faza 2 Trim 2	2. Alcătuirea unei baze de date de date de medicamente repoziționate	2.1. Studiul de literatură 2.2. Alcătuirea unei baze de date de medicamente repoziționate cu structuri unice 2.3. Calcularea proprietăților fizico-chimice, ADMETox și a diversității chimice 2.4. Aplicarea metodologiei de lucru în cazul particular al infecției cu virusul SARS-Cov2	
Faza 3 Trim 3	3. Studiul medicamentelor aprobate și a celor retrase de pe piață, inclusiv a medicamentelor experimentale, investigaționale și a metaboliților pe domenii terapeutice	3.1. Studiul de literatură 3.2. Evaluarea proprietăților fizico-chimice, ADMETox și a diversității chimice. 3.3. Analiza medicamentelor pe baza descriptorilor și a parametrilor preziși. 3.4. Divizarea medicamentelor cu indicații pentru Sistemul Nervos Central față de restul medicamentelor	
Faza 4 Trim 4	4. Compararea și analiza statistică a proprietăților medicamentelor aprobate, a celor retrase și a celor repoziționate.	4.1. Studiul de literatură 4.2. Analiza statistică a proprietăților medicamentelor 4.3. Identificarea informațiilor moleculare relevante pentru medicamentele aprobate 4.4. Analizarea rezultatelor privind conceptul de reutilizare a medicamentelor pentru utilizarea viitoare a medicamentelor vechi împotriva altor maladii.	



ACADEMIA ROMÂNĂ
INSTITUTUL DE CHIMIE „CORIOLAN DRĂGULESCU”

Bd. Mihai Viteazu, nr. 24, RO-300223, Timișoara, România
tel: 0256-491818; fax: 0256-491824



Director,

Dr. Chim. Otilia COSTIȘOR

Programul de cercetare 2 - 2022

**CONTRIBUTII LA CHIMIA COMPUSILOR ORGANICI, ELEMENT-ORGANICI SI POLIMERICI
CONTINAND F, N, P, S. SINTEZA, CARACTERIZARE, APLICATII**

Coordonator : Dr. chim. Aurelia VISA

Denumirea Proiectului de cercetare 2.1. Sisteme polimerice, sisteme hibride sau complexe cu proprietati: ignifuge, electroliti, membrane, sorbanti, biocide, catalizatori si de protectie anticoroziva

Responsabil: Dr. Popa Adriana, CSI

Tema 2.1.1. Polimeri modificati chimic cu grupari pendante active continand atomi de fosfor si/sau azot si oxigen.

Coordonator: Dr. Popa Adriana, CSI

Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim I	1. Aplicatii si evaluarea polimerilor modificati cu grupari pendante ce contin atomi de fosfor si/sau azot.	1.1. Studii privind adsorbția antibioticelor din apa utilizand copolimeri functionalizati cu grupari active, eficienta indepartarii prin folosirea de sisteme polimerice. 1.2 Reactia “one-step” de impregnare a chitosanului cu grupari oxidante (ex. bromat de potasiu) prin metoda mecanochimica.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Macarie Lavinia, CS II - Dr. Plesu Nicoleta, CS II <u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Visa Aurelia, CS I
Faza 2, Trim II	2. Analiza si evaluarea materialelor polimerice grefate cu grupari pendante/active continand atomi de azot.	2.1. Investigatii experimentale asupra caracteristicilor fizico-chimice a copolimerilor stiren-divinilbenzen (St-6.7%DVB / 1%DVB) functionalizat cu grupari active de tip amino. 2.2. Studii in vederea obtinerii prin grefare a copolimerilor stiren-divinilbenzen (St-DVB) cu grupari pendante active cu atomi de azot.	-Dr. Maranescu Bianca, CS III <u>Colaboratori externi:</u> - Facultatea de Chimie Industrială si Ingineria Mediului, Universitatea Politehnica Timisoara
Faza 3, Trim III	3. Evaluarea privind modificarea chimica a suporturilor polimere de tip AN-DVB (acrilonitril - divinilbenzen)	3.1. Caracterizarea prin metode fizico-chimice a copolimerilor AN-DVB (acrilonitril-divinilbenzen) functionalizati cu grupari de tip 2-aminoetil-acrilamida. 3.2. Studiu de literatura privind modificarea chimica cu grupari pendante continand atomi de fosfor/azot si oxygen a copolimerilor de tip acrilonitril-divinilbenzen.	- Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni” Iasi - Institutul de Chimie Fizica „I. Murgulescu” Bucuresti

Faza 4, Trim IV	4. Evaluarea impregnării prin metoda cu ultrasunare.	4.1. Impregnarea prin ultrasunare a celulozei (cu grupări de tip acetat) cu compusi cu fosfor/azot și oxigen (ex. sare de fosfoniu / amoniu, difosfite). 4.2. Documentare/ actualizarea referințelor privind modificarea chimică a materialelor polimerice folosind metoda cu ultrasunare.	- Facultatea de Medicină Veterinară Timișoara - Dr. Diaz Somoano Mercedes, Instituto Nacional del Carbon - CSIC, Oviedo, Spania
Tema 2.1.2. Polimeri și copolimeri cu grupări fosfonice obținuți prin polimerizare radicalică Coordonator: Dr. Macarie Lavinia, CSII			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1, Trim I	1. Sinteză polimerilor și copolimerilor cu grupări fosfonice în catena laterală	1.1. Studii privind polimerizarea fotoinițiată pentru a obține polimeri și copolimeri cu grupări fosfonice în catena laterală. 1.2. Studii privind influența naturii și conținutului de comonomeri derivați de acid vinilfosfonic și monomeri acrilici. 1.3. Documentare în domeniul aplicațiilor polimerilor cu grupări fosfonat și fosfat în catena laterală.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Popa Adriana, CS I - Dr. Plesu Nicoleta, CS II - Dr. Tara-Lunga Mihali Milica, CS <u>Colaboratori interni</u> - Dr. Visa Aurelia, CS I - Dr. Maranescu Bianca, CS III
Faza 2, Trim II	2. Evaluarea metodelor și tehnicilor de polimerizare pentru sinteză de polimeri ai acidului vinilfosfonic	2.1. Studiul polimerizării termice, în microunde sau în ultrasunete asupra formulărilor polimerizabile. 2.2. Utilizarea de monomeri /oligomeri, fotoinițiatori/sisteme de fotoinițiere și a comonomerilor reactivi derivați ai acidului vinilfosfonic, vinilalcoxisilani, vinilimidazoli, pentru a obține un sistem fotoreticulabil.	<u>Colaboratori externi:</u> - Universitatea Politehnică Timișoara - Universitatea de Vest Timișoara - Institutul de Chimie Macromoleculară „Petru Poni” Iași
Faza 3, Trim III	3. Caracterizarea morfologică / structurală a polimerilor prin metode fizico-chimice (FTIR, TG).	3.1. Utilizarea spectroscopiei FTIR pentru monitorizarea polimerizării /copolimerizării. 3.2. Investigarea comportării termice (TG). 3.3. Determinarea absorbției de apă în diferite condiții de temperatură și pH.	- Dr. Jurcău Dorin - SC. Elkim SRL, Timișoara

Faza 4, Trim IV	4. Analiza, caracterizarea si aplicatiile materialelor polimerice obtinute pe baza de polimeri si copolimeri sintetizati prin evaluarea proprietatilor ionice/conductoare (EIS), ignifugante (LOI), de suprafata, de absorbtie de apa	4.1. Determinarea proprietatilor ionice/ conductoare (EIS) si ignifugante ale peliculelor (LOI). 4.2. Determinarea proprietatilor anticorozive 4.3. Determinarea proprietatilor de absorbtie.	
Tema 2.1.3. Compozite polimerice cu posibilitati de utilizare ca senzori si electrozi modificati. Metode electrochimice aplicate in caracterizarea interfetei materialelor si a filmelor nanocompozite. Reciclarea deseurilor. Coordonator: Dr. Plesu Nicoleta, CS II			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim I	1. Obtinerea si caracterizarea de compozite polimerice pe baza de grafene. Reciclarea deseurilor.	1.1. Prepararea filmelor de poliuretan (PU) si grafen oxid (GO). Stabilirea conditiilor de obtinere. 1.2. Studiul de literatura referitor la metodele de indepartare a grasimilor din apele reziduale menajere.	<u>Colectiv:</u> -Dr.Tara-Lunga Mihali Milica, CS - Dr. Macarie Lavinia, CS II - Dr. Popa Adriana, CS I
Faza 2, Trim II	2. Investigarea proprietatilor protectoare a filmelor poliuretanice pe baza de GO. Comportarea in solutie salina. Reciclarea deseurilor.	2.1. Caracterizarea filmelor PU cu adaus de GO obtinute, prin voltametrie ciclica (CV) si spectroscopie de impedanta (EIS). 2.2. Modelarea datelor experimentale. 2.3. Studiu de literatura privind metodele de sinteza a rasilor poliesterice. 2.4. Calcularea parametrilor electronici cu ajutorul calculului computationale.	<u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Visa Aurelia, CS I -Dr. Maranescu Bianca, CS III - Dr. Crisan Manuela, CS III - Dr. Crisan Luminita, CS III <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Demadis Konstaninos

Faza 3, Trim III	3. Investigarea proprietatilor speciale (electrice si / sau anticorozive) a unor compusi organici si/sau element organici, hibrizi organici anorganici prin voltametrie ciclica (CV).	3.1. Studiul conductometric al sarurilor organice. 3.2. Interpretarea datelor de conductanta. 3.3. Studiu de literatura privind metodele de sinteza a rasinilor copolimerilor pe baza de PU.	-Universitatea din Creta, Grecia Dr. Murariu Alin –ISIM, Timisoara Dr. Jurcau Dorin - SC. Elkim SRL, Timisoara
Faza 4, Trim IV	4. Investigarea prin spectroscopie de impedanta a proprietatilor speciale (electrice si / sau anticorozive) ale unor compusi organici si/sau element organici, hibrizi organici anorganici.	4.1. Studiul proprietatilor electrice ale unor compusi organici si/sau element organici (MOF), hibrizi organici anorganici prin spectroscopie de impedanta (EIS). 4.2. Modelarea datelor EIS. 4.3. Interpretarea datelor EIS. 4.4. Studiu de literatura privind acoperirile utilizate in marcaje rutiere si /sau anticorozive.	- Facultatea de Chimie Industriala si Ingineria Mediului, Universitatea Politehnica Timisoara

Denumirea Proiectului nr. 2.2: Compusi multifunctionali cu proprietati dirijate si aplicatii in protectia mediului

Responsabil: Dr. chim. Aurelia Visa, CS II

Tema 2.2.1 Sinteza de retele metal organice si proprietatile acestora

Coordonator: Dr. Aurelia Visa, CSII

Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim. I	1. Sinteze de retele metal organice fosfonice si/sau carboxilice	1.1. Sinteza retelelor metal organice in conditii hidrotermale 1.2. Stabilirea conditiilor optime de reactie. 1.3. Influenta conditiilor de reactie asupra cristalinitatii compusilor obtinuti.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Maranescu Bianca -Dr. Petric Mihaela (octombrie-decembrie 2022)
Faza 2, Trim. II	2. Caracterizarea retelelor metal organice sintetizate	2.1. Caracterizarea compusilor sintetizati prin FT-IR si TG. 2.2. Caracterizarea structurala a noilor compusi obtinuti prin difractie RX pe pulberi. 2.3. Investigarea interactiunilor generate in retea.	<u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Crisan Luminita - Dr. Popa Adriana - Dr. Muntean Simona

Faza 3, Trim. III	3. Sinteze de rețele metal organice fosfonice si/sau carboxilice	3.1. Sinteze de rețele metal organice in conditii hidrotermale pe baie de apa/ulei, in autoclava si la ultrasunete. 3.2. Studiul influentei factorilor fizico-chimici. 3.3. Caracterizarea compusilor sintetizati prin TG, FT-IR si difractie de raze X.	- Drd. Nistor Andreea <u>Colaboratori externi:</u> - Universitatea Ca' Foscari, Venetia, Italia, Prof. Tundo Pietro
Faza 4 Trim. IV	4. Studiul aplicatiilor rețelelor metal organice sintetizate	4.1. Analiza corelatiei dintre parametrii de sinteza si morfologia compusilor. 4.2. Identificarea factorilor ce influenteaza aplicatiile compusilor sintetizati. 4.3 Investigarea proprietatilor catalitice ale compusilor sintetizati	- Universitatea din Malaga, Prof. dr. Cabeza Aurelio - Universitatea din Creta, Grecia Prof. Dr. Demadis Konstantinos
Tema 2.2.2. Polimeri de coordinatie continand grupari fosfonice si metale tranzitionale Coordonator: Dr. Bianca Maranescu, CSIII			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective in cadrul fazei	Executanti
Faza1, Trim. I	1. Sinteza de noi polimeri de coordinatie utilizand diverse tehnici de sinteza hidrotermala	1.1. Sinteza de noi serii de polimeri de coordinatie variind ionul metalic tranzitional in reactia cu acelasi acid fosfonic. 1.2. Optimizarea conditiilor de sinteza prin varierea temperaturtii, a pH-ului si a raportului molar intre reactanti.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Visa Aurelia dr. Petric Mihaela (octombrie-decembrie 2022)
Faza 2, Trim. II	2. Sinteza de noi polimeri de coordinatie utilizand tehnici de sinteza hidrotermala	2.1. Sinteza de noi serii de compusi variind acidul fosfonic in reactia cu acelasi ion metalic tranzitional. 2.2 Optimizarea conditiilor de sinteza prin varierea temperaturtii, a pH-ului si a raportului molar intre reactanti.	<u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Popa Adriana - Dr. Luminita Crisan - Dr. Nicoleta Plesu
Faza 3, Trim. III	3. Caracterizarea fizico-chimica a compusilor obtinuti	3.1. Punerea in evidenta a atribuirilor structurale prin tehnici si metode de analiza fizico- chimica (FTIR, TGA, XRD) pentru compusii sintetizati. 3.2. Evidentierea structurii cristaline a compusilor noi sintetizati prin microscopie electronica de baleaj.	<u>Colaboratori externi:</u> - UPT, Facultatea de Electronica si Telecomunicatii - University of Crete Heraklion, Department of Chemistry, Greece Prof. Dr. Demadis Konstantinos
Faza 4, Trim.	4. Prezicerea proprietatilor anticorozive si electrice a	3.1. Determinarea proprietatilor anticorozive a polimerilor de coordinatie.	

IV	polimerilor de coordinație obținuți	3.2. Identificarea experimentală a tipului de conducție.	
Tema 2.2.3. Metodologii pentru combaterea poluării cu compusi azo și metale grele. Aplicații în protecția mediului. Coordonator: Dr. Ing. Simona Gabriela Muntean, CS II			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1, Trim. I	1. Studiul experimental al adsorbției coloranților folosind nanocompozite magnetita/carbon.	1.1. Studiul influenței pH-ului soluției asupra randamentului de îndepărtare a coloranților. 1.2. Testarea performanțelor adsorbantului prototip pentru adsorbția coloranților din sistem binar. 1.3. Determinarea performanțelor nanocompozitelor magnetita/carbon în cicluri multiple de adsorbție/desorbție	<u>Colectiv</u> - Drd. Nistor Andreea <u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Halip Liliana - Dr. Visa Aurelia - Dr. Buta Ildyko - Dr. Nicola Roxana (concediu maternitate) <u>Colaboratori externi:</u> - UPT, Facultatea de Chimie Industrială și Ingineria Mediului - UMF "Victor Babes" Timisoara, Facultatea de Farmacie
Faza 2, Trim. II	2. Aplicarea rețelelor metal organice fosfonice (MOF) în îndepărtarea coloranților din soluții apoase	2.1. Testarea MOF ca adsorbanti în procese de adsorbție a coloranților din soluții apoase. 2.2. Testarea proprietăților fotocatalitice a MOF aplicate în degradarea coloranților. 2.3. Efectul intensității și a lungimii de undă a radiației asupra degradării coloranților.	
Faza 3, Trim. III	3. Degradarea fotocatalitică a coloranților utilizând combinații complexe ale unor elemente 3d cu liganzi de tip baze Schiff.	3.1. Studiu spectrofotometric al degradării coloranților. Influența variabilelor procesului. 3.2. Analiza comparativă a performanțelor combinațiilor complexe în procesul de fotodegradare a coloranților. 3.3. Modelarea cinetică a fotodegradării coloranților.	
Faza 4, Trim. IV	4. Aplicarea oxizilor de fier și a oxizilor de fier dopați pentru îndepărtarea coloranților din soluții apoase prin fotodegradare.	4.1. Determinarea randamentelor de fotodegradare a coloranților din soluții apoase la iradiere cu lumină UV. 4.2. Determinarea randamentelor de fotodegradare a coloranților din soluții apoase la iradiere cu lumină vizibilă. 4.3. Studiul cinetic al procesului de fotodegradare a coloranților.	

Tema 2.2.4. Compusi cu functiune azo si combinatii complexe ale azoliganzilor, cu afinitate pentru diverse materiale.			
Coordonator: Dr. Ing. Maria Elena Radulescu-Grad, CS III			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim. I	1.Studiul proprietatilor optice, si de culoare ale colorantilor si ale azo complexilor sintetizati.	1.1. Studiul proprietatilor optice, si de culoare ale colorantilor sintetizati. 1.2 Studiul proprietatilor optice, si de culoare ale azo complexilor sintetizati.	<u>Colectiv</u> -Dr. Ing.Radulescu-Grad Maria Elena CSIII <u>Colaboratori interni:</u> -Dr. Ing Funar-Timofei Simona, CSI -Dr. Ing Plesu Nicoleta, CSII -Drd. Ing. Andelescu Adeline, CS <u>Colaboratori externi:</u> Prof. Fafilek Günter University of Technology, Faculty of Technical Chemistry, Institute of Chemical Technologies and Analytics, Viena, Austria
Faza 2, Trim. II	2.Studiul proprietatilor electrochimice si de dispersare ale azo-colorantilor studiati.	2.1. Studiul proprietatilor electrochimice ale azo-colorantilor studiati. 2.2. Studiul proprietatilor de dispersare ale azo-colorantilor studiati.	
Faza 3, Trim. III	3. Studii privind sinteza de noi compusi cu functiune azo.	3.1.Obtinerea de noi azo -compusi alternativi, netoxici. 3.2.Utilizarea metodelor specifice de analiza; TLC, HPLC, spectroscopie IR, UV-Vis, MS, ¹³ CRMN, ¹ HRMN MS etc.,in scopul caracterizarii compusilor azo sintetizati.	
Faza 4, Trim. IV	4.Studii privind sinteza de noi complexi azo- metalici	4.1.Obtinerea de noi combinatii complexe ale compusilor cu functiune azo 4.2.Caracterizarea combinatiilor complexe ale compusilor cu functiune azo prin: spectroscopie UV-Vis, IR, Aas, analiza termica, difractia de raze X etc.	
Tema 2.2.5. Noi cristale multicomponente fotoluminescente cu aplicatii specifice in agricultura si medicina			
Coordonator: Dr. Manuela Crisan, CSIII			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti

Faza 1, Trim. I	1. Obținerea de noi sisteme multicomponente organice pe baza de metaboliți secundari sau ingrediente farmacologice active cu molecula mică și toxicitate redusă	1.1 Sintetizarea de săruri / cocristale / solvati / combinații ale acestora 1.2 Identificarea posibilelor forme polimorfe 1.3 Identificarea factorilor care determină modificarea stării de ionizare	<u>Colectiv:</u> Dr. Petric Mihaela (octombrie-decembrie 2022) <u>Colaboratori interni:</u> Dr. Luminita Crisan <u>Colaboratori externi:</u> - Dr. Bouros Pavlina, dr. Croitor Lilia, dr. Chumakov Yurii, dr. Siminel Anatolii, Institutul de Fizică Aplicată-Chisinau, Moldova - Dr. Forni Alessandra, Institutul de Științe și Tehnologii Moleculare – CNR, Milano, Italia - Prof. univ. dr. Radu Sumalan, USAMVB din Timisoara, - Conf. dr. habil. Popescu Roxana, Universitatea de Medicină și Farmacie “V. Babes” Timisoara, Disciplina de Biologie Celulară și Moleculă - Conf. dr. Ioana Baldea, Universitatea de Medicină și Farmacie “Iuliu Hațieganu” Cluj-Napoca, Fiziologie.
Faza 2, Trim. II	2. Caracterizarea fizico-chimică și structurală a sistemelor de tip acid-bază obținute în trim I	2.1 Caracterizarea fizico-chimică și structurală a compusilor obținuți 2.2 Studiul stabilității termice și a transformărilor de fază 2.3 Studiul interacțiunilor inter/intramoleculare	
Faza 3, Trim. III	3. Investigarea proprietăților fotoluminescente	3.1 Studiul relației structură moleculară - structură supramoleculară - proprietăți fotoluminescente pentru compusii obținuți	
Faza 4, Trim. IV	4. Testarea compusilor obținuți pentru aplicații în agricultură (reglatori de creștere ai plantelor) / medicină (efect anticancer, anti-inflamator)	4.1 Studiul efectului de reglare a creșterii plantelor de tomate (<i>Solanum lycopersicum</i>) în laborator și seră în prezența noilor compusi 4.2 Studiul interacțiunii noilor compusi cu diferite tipuri de celule în vederea demonstrării posibilelor efecte anticancer/antiinflamatorii 4.3 Studii de modelare moleculară a noilor compusi obținuți în receptori responsabili de inflamație/cancer	



ACADEMIA ROMÂNĂ
INSTITUTUL DE CHIMIE „CORIOLAN DRĂGULESCU”

Bd. Mihai Viteazu, nr. 24, RO-300223, Timișoara, România
tel: 0256-491818; fax: 0256-491824



Director,

Dr. Chim. Otilia COSTIȘOR

Programul de cercetare 3 - 2022

**CHIMIA ȘI APLICAȚIILE COMPUȘILOR TETRAPIROLICI DIN CLASA
PORFIRINELOR**

Coordonator : CS I. Dr. Ing. Eugenia FĂGĂDAR-COSMA

Denumirea: Proiectul nr.3.1.: **Materiale multifunctionale avansate cu proprietăți speciale opto-electrice pe baza de porfirine și combinațiile lor complexe. Aplicații biologice și tehnice**

Responsabil: Dr. Făgădar-Cosma Eugenia-Lenuța, CS I

Tema 3.1.1. Cromofori de tip porfirinic simetric și nesimetric funcționalizați. Sisteme fluorescente heterodimere. Complecși coloidali ai porfirinelor cu Cu/Ag/Au/PtNPs. Identificarea de aplicații tehnice în senzorială și inhibarea coroziunii.

Coordonator: Dr. Făgădar-Cosma Eugenia, CSI

Faza	Obiective	Activități	Cercetători
Faza 1 Trim I	1. Obținerea de noi porfirine simetric și A ₃ B asimetric mixt-substituite, aplicând variante ale metodelor multicomponente (A=COOH, B=C ₆ H ₄ -CH ₂ -CH ₃);	1.1. Obținerea, separarea și purificarea de noi structuri asimetrice, mixt substituite la nucleul fenilic cu grupe cu efect donator de electroni și carboxilice 1.2. Caracterizarea prin spectroscopie UV-vis, fluorimetrie, FT-IR, RMN, MS, HPLC și TLC, analiza elementară, electrochimică, AFM și RX a compusilor porfirinici obținuți. 1.3. Depunerea de straturi subțiri de porfirine simple și compozite cu calcogenide prin tehnici PLD și MAPLE sau LB Caracterizare SEM/EDAX, TEM.	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Eugenia Fagadar-Cosma, CSI Chim. drd. Camelia Epuran, AsC Chim. drd. Ion Fratilescu, ASsC Dr. Anca Lascu, CSIII <u>Colaboratori externi:</u> - Institutul National C&D pentru Fizica Materialelor Bucuresti-Magurele -Universitatea Bucuresti-Centrul 3-NANO-SAE -Institutul National de Cercetare-Dezvoltare pentru Stiinte Biologice Bucuresti Institutul National de Electrochimie și Materie Condensata <u>Colaboratori internaționali:</u>
Faza 2 Trim II	2. Obținerea complexelor porfirinelor cu metale din grupa metalelor platinice.	2.1. Sinteza combinațiilor complexe cu metale (II-III) utilizând liganzii porfirinici nou obținuți. Caracterizare complexă. 2.2. Studiul capacității de complexare/recuperare a metalelor nobile de către liganzii porfirinici obținuți.	
Faza 3 Trim. III	3. Obținerea de complecși coloidali porfirine-nano-Cu/Ag/Au /Pt /Pd cu domeniu larg de absorbție UV-vis (prin controlul dimensiunii și formei	3.1. Caracterizarea prin tehnici microscopice (SEM, TEM, AFM, tomografie), UV-vis, FT-IR, BET și fluorescența a materialelor hibride obținute. 3.2. Studii privind topografia suprafețelor și capacitatea de detecție comparativ cu porfirinele	

	nanoparticulelor).	corespunzatoare libere	-Istituto per lo Studio delle Macromolecole (ISMAC), Consiglio Nazionale delle Ricerche, Milano, Dr. Erika Kozma -The Fundació Institut Català d'Investigació Química, Spain
Faza 4 Trim IV	4. Sisteme fluorescente heterodimere obtinute intre o porfirina si o metaloporfirina, sau intre un derivat porfirinic si un derivat care potenteaza Fluorescenta 5. Identificarea posibilităților de aplicare a derivatilor porfirinici in formularea de senzori; 6. Investigarea proprietatilor electrochimice ale porfirinelor substituie cu grupari carboxilice. Straturi subtiri cu aplicatii in inhibarea coroziunii. 7. Actiuni de diseminare. Redactare lucrari-pagini web, patente	4.1 Alegerea structurilor, realizarea sintezelor, caracterizare fizico-chimica completa a sistemelor porfirinice heterodimere. 5.1 Teste asupra porfirinelor bază/metaloporfirinelor sintetizate dar si a structurilor dimere pentru evaluarea capacitatii de actiune ca senzori electrochimici sau optici/fluorimetrice pentru metale grele, medicamente sau analiti cu relevanta medicala. 6.1 Studii de inhibare a coroziunii, prin metode electrochimice si clasice, și realizarea de demonstratori 7.1 Minimum 3 lucrari ISI, lucrari in reviste cu sistem peer-review, participare Key-note speaker la Conferinte/video-conferinte. 1 Solicitare brevetare.	
Tema 3.1.2. Reactii de functionalizare a porfirinelor la grupele substituente OH cu zaharide/glicozide. Materiale hibride pe baza de porfirine destinate aplicarii in stocarea de gaze, senzoristica si cataliza. Coordonator: Dr. Ing. Anca Lascu, CSIII			
Faza	Obiective	Activitati	Cercetători
Faza 1 Trim I	1. Obținerea de structuri porfirinice cu grupe functionale	1.1 Sinteza si separarea pe coloana cromatografica a porfirinelor A ₂ B ₂	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Ing. Anca Lascu, CSIII

	hidroxilice. Functionalizarea cu zaharide sau glicozide.	substituite cu grupari hidroxilice 1.2. Functionalizarea la gruparea OH cu zaharide/glicozide.	Dr.Ing. Eugenia Fagadar-Cosma, CSI Chim.drd. Camelia Epuran, AsC - Chim. drd. Ion Fratilesco, AsC <u>Colaborări interne:</u> - Institutul National de Electrochimie și Materie Condensata <u>Colaborări internaționale:</u> - Instituto per lo Studie delle Macromolecole - CNR, Milano, Dr. Erika Kozma
Faza 2 Trim II	2. Caracterizarea fizico-chimica a porfirinelor obtinute inainte si dupa functionalizare.	2.3. Analiza prin microscopica a morfologiei suprafetelor, dupa depunere pe diferite substraturi.	
Faza 3 Trim III	3. Obținerea micro si nano-materialelor fotochimic active obtinute prin imobilizarea porfirinelor pe matrici anorganice si/sau polimerice prin tehnici de sinteza organica, coloidala si sol-gel	3.1. Imobilizarea porfirinelor divers functionalizate pe matrici anorganice de tip silice si/sau polimerice si pe nanotuburi de carbon/grafene. 3.2. Caracterizarea prin tehnici microscopice (SEM, TEM, AFM, tomografie), analiza termica, UV-vis, FT-IR, BET si fluorescenta a materialelor hibride obtinute.	
Faza 4 Trim IV	4. Demonstrarea capacitatii catalitice/de detectie a porfirinelor A ₂ B ₂ substituite cu grupari hidroxilice si a materialelor functionalizate cu zaharide/glicozide	4.1. Testari preliminare ale proprietăților catalitice ale porfirinelor A ₂ B ₂ cu grupari OH 4.2. Aplicatii in reactii organice catalizate. Studii de cinetica chimica. 4.3. Diseminare. Redactare minim 2 lucrari ISI; participare conferinte internationale si nationale.	



ACADEMIA ROMÂNĂ
INSTITUTUL DE CHIMIE „CORIOLAN DRĂGULESCU”

Bd. Mihai Viteazu, nr. 24, RO-300223, Timișoara, România
tel: 0256-491818; fax: 0256-491824



Director

Dr. Otilia COSTISOR

PROGRAMUL DE CERCETARE 4 - 2022

**COMPUȘI ANORGANICI ȘI HIBRIZI CU RELEVANȚĂ ÎN ȘTIINȚA MATERIALELOR
NANOSTRUCTURATE.
PRECURSORI PENTRU MATERIALE AVANSATE.**

Coordonator : Dr. Szerb Elisabeta I., CS II

Denumirea Proiectului nr. 4.1: Liganzi și combinații complexe homo- și heteropolinucleare ale unor elemente 3d, precursori pentru: (1) materiale avansate; (2) sisteme supramoleculare cu implicații în: sistemele biologice și știința materialelor
Responsabil: Dr. Costișor Otilia, CS I

Tema 4.1.1. Cristale lichide pe bază de fluorenonă cu proprietăți optice			
Coordonator: Dr. Devesleanu-Corici Livia, CS III			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1. Obținerea intermediarilor ce stau la baza derivatilor fluorenonici	1.1. Sinteza, purificarea si caracterizarea structurala a copusilor	- Dr. Cseh Liliana, CS I - Vișan Alexandru, AsC - Balazs Tiberiu, AC 1
Faza 2 Trim.II	2. Obținerea compusilor pe baza de fluorenona	2.1. Sinteza, purificarea si caracterizarea structurala a compusilor	<u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Ungar G. și Dr. Xianbing Zeng, Universitatea din Sheffield, UK - Dr. Badea Valentin, Universitatea Politehnica Timisoara - Dr. Nicolescu Alina, Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni”, Iasi
Faza 3 Trim.III	3. Investigarea proprietatilor cristalin lichide	3.1. Studiu prin metodele: DSC, POM si difracție de raze X	
Faza 4 Trim.IV	4. Studiul organizarii supramoleculare si al proprietatilor optice	4.1.Stabilirea unor modele a modului de organizare al copusilor in mezofaze. 4.2. Studiul proprietatilor optice pe mezofaza prin POM, dicroism circular si Uv-Vis, pentru mezofazele cubice.	
Tema 4.1.2. Sisteme supramoleculare cu proprietăți optice pe bază de combinații complexe ale metalelor din blocul d.			
Coordonator: Dr. Crețu Carmen, CS III			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1. Obținerea de metalomesogeni luminescenți pe bază de metale d ⁶ , d ⁸ și d ¹⁰ cu liganzi tip N [^] N și N [^] N [^] N funcționalizați cu catene alchilice.	1 1.1. Obținerea liganzilor 1.1.2. Caracterizarea liganzilor obținuți prin AE, spectroscopie RMN, IR și UV. 1.1.3. Sinteza combinațiilor complexe. 1.1.4. Caracterizarea structurală prin AE, spectroscopie RMN, IR și UV-Vis, conductivitate electrică molară.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Szerb Elisabeta I., CS I - Dr. Marinescu Sorin, CS III - Dr. Andelesculescu Adelina A., CS - Popa Evelyn, AsC - Badescu Bianca, AsC - Poenaru Mihaela-Marilena, AC

Faza 2 Trim.II	2.1. Determinarea proprietăților mezomorfe și optice ale combinațiilor complexe obținute la punctul 1.1.	2.1.1 Caracterizare prin microscopie optică cu polarizare (POM). 2.1.2 Determinarea stabilității termice (DSC, TGA) 2.1.3. Caracterizarea structurală prin metode difractometrice (PXRD). 2.1.4. Determinarea proprietăților fotofizice în solvenți organici. 2.1.5. Determinarea proprietăților fotofizice în diferite stări condensate	- Nicolae Radu, Laborant chimist <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Crispini Alessandra, Dr. Oliviero Rossi Cesare, Dr. la Deda Massimo: University of Calabria, Department of Chemistry and Chemical Technologies, Italia - Dr. Calandra Pietro: National Council of Research (CNR), Institute of nanostructured materials (ISMN), Roma, Italia.
Faza 3 Trim.III	3.1. Sinteza unor liganzi N donori funcționalizați cu grupări hidrofile/hidrofobe. 3.2. Obținerea de combinații complexe cu proprietăți cristaline lichide ale metalelor d ¹⁰ cu liganzii obținuți la punctul 3.1.	3.1.1 Stabilirea condițiilor optime de reacție în vederea obținerii liganzilor. 3.1.2 Caracterizarea structurală prin AE, spectroscopie RMN și IR. 3.2.1. Sinteza combinațiilor complexe. 3.2.2. Caracterizarea compușilor obținuți prin AE, spectroscopie RMN și IR, UV-Vis, conductivitate electrică molară.	- Dr. Donnio Bertrand, Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (IPCMS), CNRS-Université de Strasbourg, Strasbourg, Franța. - Dr. Len Adél, Wigner Research Centre for Physics, Neutron Spectroscopy Department, Budapest Neutron Centre, Ungaria.
Faza 4 Trim.IV	4.1. Caracterizarea proprietăților mezomorfe ale combinațiilor complexe obținute la punctul 3.2.	4.1.1. Caracterizare prin microscopie optică cu polarizare (POM). 4.1.2. Determinarea stabilității termice (DSC) 4.1.3. Caracterizarea structurală prin metode difractometrice (PXRD).	- Prof. Silvestru Anca, Prof. Chiș Vasile, Universitatea “Babes-Bolyai”, Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică, Cluj-Napoca. - Dr. Amati Mario, Dipartimento di Scienze, Università degli Studi della Basilicata, Campus di Macchia Romana, 85100 Potenza, Italia

Tema 4.1.3. Combinații complexe ale elementelor tranziționale conținând liganzi de tip baze Schiff cu potențiale proprietăți optice și electrochimice Coordonator: Dr. Costișor Otilia, CS I			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1 Obținerea unor liganzi polidentati de tip bază Schiff. 1.2 Obținerea de combinații complexe ale unor ioni d^7 și d^9 .	1.1.1 Stabilirea condițiilor optime de sinteză a liganzilor 1.1.2 Caracterizarea prin AE, RMN și IR. 1.2.1 Sinteza combinațiilor complexe. 1.2.2 Studiul influenței factorilor experimentali (raportul molar, concentrația și solventul).	<u>Colectiv:</u> - Drd. Buta Ildiko Mariana, CS - Dr. Cretu Carmen, CS III - Dr. Iliesu Sorina, CS – studiul proprietăților electrochimice <u>Colaboratori externi:</u>
Faza 2 Trim.II	2.1 Caracterizarea combinațiilor complexe obținute la punctul 1.2. 2.2. Obținerea de combinații complexe ale ale unor ioni d^{10} .	2.1.1 Caracterizarea prin AE, IR, UV-Vis și conductivitate electrică molară. 2.1.2 Caracterizarea structurală prin difracție de raze X pe monocristal. 2.2.1 Sinteza combinațiilor complexe. 2.2.2 Studiul influenței factorilor experimentali.	- Dr. Sergiu Shova, Institutul de Chimie Macromoleculară “Petru Poni”, Iasi - Prof. Marius Andruh, Universitatea din București, Facultatea de Chimie - Prof. Florica Manea,

Faza 3 Trim.III	3.1 Caracterizarea combinațiilor complexe obținute la punctul 2.2. 3.2 Studiul proprietăților optice ale combinațiilor complexe obținute la punctul 2.2.	3.1.1 Caracterizarea prin AE, IR, UV-Vis și conductivitate electrică molară. 3.1.2 Caracterizarea structurală prin difracție de raze X pe monocristal. 3.2.1 Caracterizarea compușilor prin spectroscopie de luminescență. 3.2.2 Caracterizarea prin microscopie optică cu polarizare (POM) 3.2.3 Determinarea stabilității termice prin analiză DSC	Universitatea Politehnica, Facultatea de Chimie Industrială și Ingineria Mediului, Timișoara
Faza 4 Trim.IV	4. Studiul proprietăților electrochimice ale combinațiilor complexe obținute.	4.1. Studii de voltametrie ciclică. 4.2. Influența parametrilor electrochimici.	
Tema 4.1.4. Dezvoltarea unor metode de determinare electrochimice a unor poluanți emergenti și compuși biologic activi utilizând materiale de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat. Coordonator: Dr. Ilieș Sorina, CS			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1. Obținerea unor materiale de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat.	1.1. Obținerea materialelor de electrod de tip pastă pe bază de carbon nanostructurat (CNT, CNF, fullerenă, graphenă) 1.2. Studiul influenței compoziției raportului masic al compușilor pe bază de carbon asupra stabilității materialului de electrod. 1.3. Modificarea materialelor de electrod pe bază de carbon nanostructurat cu cristale lichide/ metalomesogeni pe bază de metale tranzitionale.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Szerb Elisabeta Ildyko, CS I - Dr. Cretu Carmen, CS III - Dr. Andelescu Adelina, CS - Badescu Bianca (b. Schinteie), AsC <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Manea Florica, Prof.

Faza 2 Trim.II	2. Caracterizarea morfostructurală și electrochimică a materialelor de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat.	2.1. Caracterizarea morfostructurală a materialelor de electrod prin SEM/ EDAX, FTIR, RX. 2.2. Caracterizarea electrochimică a materialelor de electrod: -determinarea ariei suprafeței electroactive prin metoda clasică feri/ferocianură; -determinarea caracteristicilor electrochimice specifice aplicațiilor electroanalitice (fereastra de potențial, curent de fond, caracteristici de rețele de micro/ nanoelectrozi). 2.3. Teste preliminare de detecție voltametrică a unor analiți țintă din clasa produșilor farmaceutici și a compușilor biologic activi.	Pode Rodica, Ș.L. Pop Aniela, C.S. Baci Anamaria, Universitatea “Politehnica”- Timișoara, Facultatea de Chimie și Ingineria Mediului. - Prof. Alessandra Crispini, Dr. Cesare Oliviero Rossi, Dr. Massimo la Deda: University of Calabria, Department of Chemistry and Chemical Technologies, Italia - Dr. Pietro Calandra: National Council of Research (CNR), Institute of nanostructured materials (ISMN), Roma, Italia. - Dr. Bertrand Donnio, Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (IPCMS), CNRS-Université de Strasbourg, Strasbourg, Franța. - Dr. Adél Len, Wigner Research Centre for Physics, Neutron Spectroscopy Department, Budapest Neutron Centre, Ungaria.
Faza 3 Trim.III	3. Dezvoltarea metodelor de detecție electrochimică individuală a analiților țintă (ex. ibuprofen, citostatice, glucoză, acid uric, acid ascorbic)	3.1. Detecția voltametrică a analiților țintă prin CV, DPV, SWV. Determinarea parametrilor electroanalitici (sensibilitate, limită de detecție). 3.2. Detecția amperometrică a analiților țintă prin CA și MPA. Determinarea parametrilor electroanalitici (sensibilitate, limită de detecție). 3.3. Stabilirea interferențelor; Determinarea reproductibilității și a acurateții metodei; Aplicarea metodelor propuse pentru probe reale (produse farmaceutice, ser fiziologic, urină).	
Faza 4 Trim.IV	4. Dezvoltarea metodelor de detecție electrochimică simultană/ selectivă a analiților țintă (ex. ibuprofen, citostatice, glucoză, acid uric, acid ascorbic)	4.1. Detecția electrochimică simultană/ selectivă a produselor farmaceutice. Stabilirea condițiilor (tehnică, condiții de operare) pentru detecția simultană sau selectivă. 4.2. Detecția electrochimică simultană/ selectivă a compușilor biologic activi. Stabilirea condițiilor (tehnică, condiții de operare) pentru detecția simultană sau selectivă.	

Denumirea Proiectului nr. 4.2 Sisteme multicomponente cu proprietăți optice, magnetice și farmaceutice speciale.

Responsabil: Dr. Putz Ana-Maria, CS III

Tema 4.2.1. Materiale oxidice nanostructurate pe bază de silice și hibride și structuri organometalice. Sinteze prin metoda sol-gel, cu agenți de direcționare clasici și lichide ionice, caracterizare și testări preliminare în aplicații biomedicale și în protecția mediului.

Coordonator: Putz Ana-Maria, CS III

Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1. Sinteza, caracterizarea și aplicarea de materiale oxidice nanostructurate	1.1.1. Sinteza sol-gel în prezența unor agenți de direcționare, funcționalizarea cu diferite grupări organice folosind metodele: co-condensării și cea de post grefare cât și caracterizarea fizico-chimică a acestor materiale mezoporoase. 1.1.2. Testarea unor materiale selectate pentru eliberarea controlată de medicamente. 1.1.3. Testarea unor materiale selectate pentru capacitatea de încărcare cu hidrogen. 1.1.4. Testarea unor materiale selectate pe probe sintetice de apă contaminată pentru adsorbția unor ioni ai metalelor grele din soluții apoase și a unor coloranți cât și testarea acestora ca și fotocatalizatori.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Szerb Elisabeta Ildyko, CS I - Dr. Cretu Carmen, CS III - Dr. Ianas Cătălin, CS III - Piciorus Elena-Mirela, AsC <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Dr. Negrea Adina Universitatea “Politehnica”- Timișoara, Facultatea de Chimie și Ingineria Mediului; - Dr. Săcărescu Liviu, CSI, Institutul de Chimie Macromoleculară Petru Poni, Iași; - Conf. Dr. Ercuța Aurel, Universitatea de Vest, Timișoara; - Dr. Almásy László, Dr. Len Adel, Academia Ungară de Științe, Centrul de Neutroni Budapesta, Ungaria; - Dr. Kuklin Alexander, Dr.
Faza 2 Trim.II	2.1. Sinteza de structuri organo-metalice, de tip MOF, dopate cu Fe	2.1.1. Sinteza cu varierea metodelor de sinteză a materialelor, prin agitare mecanică, ultrasonicare, încălzire la reflux, metoda solvo/hidrotermală. 2.1.2. Caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute prin: IR, UV-VIS, SEM, TEM, BET, difracție de raze X, SANS, SAXS.	

Faza 3 Trim.III	3.1. Sinteza de structuri organo-metalice, de tip MOF, utilizând precursori de Zr(IV) și Zn(II) cu liganzi dicarboxilici și liganzi de tip N,N. Sintetizarea de materiale policristaline de tip Zr-MOF	3.1.1. Sinteza de materiale policristaline de tip ZrMOFs, prin metoda hidro/solvothermală. 3.1.2. Sinteza de materiale de tip ZnMOFs prin metoda activării în câmp ultrasonor. 3.1.3. Sinteza de materiale hibride de tip Zn/ZrMOF.	Murugova Tatiana, Dr. Ivankov Olexandr, IUCN-Institutul Unificat de Cercetări Nucleare, Dubna, regiunea Moscovei, Federația Rusă. - Dr. Policicchio Alfonso, Departamentul de Fizică, Universitatea din Calabria, Italia; - Dr. Oliviero Rossi Cesare, Universitatea din Calabria, Department of Chemistry and Chemical Technologies, Italia.
Faza 4 Trim.IV	4.1. Selectarea de noi agenți de întinerire a bitumului și evaluarea proprietăților reologice	4.1.1. Obținerea și utilizarea celulozei esterificate și a cauciucului reciclat, ca agenți de întinerire a bitumului. 4.1.2. Determinarea proprietăților reologice și mecanice pentru agregatele de asfalt astfel obținute.	

Denumirea Proiectului nr. 4.3: Proiectarea și sinteza de compuși cu activitate catalitică pentru reacții de transformare a substanțelor obținute din surse regenerabile în intermediari organici și pentru reacții de distrugere a unor poluanți

Responsabil: Dr. Popa Alexandru, CS II

Tema nr. 4.3.1. Proiectarea și sinteza de compuși solizi depuși pe suport cu activitate catalitică pentru reacțiile de conversie a alcoolilor alifatici inferiori și pentru distrugerea sau conversia de poluanți în substanțe utile.

Coordonator: Dr. Popa Alexandru, CS II

Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
------	------------------	----------------------------	------------

Faza 1 Trim.I	1.1 Prepararea unor suporturi de tip sita moleculara (MCM-48, KIT 6, MCM-41, SBA-15 modificata) cu proprietati texturale controlate prin utilizarea diferitilor surfactanti si agenti de expandare a volumului porilor 1.2. Functionalizarea suporturilor de silice preparate anterior prin grefare cu ajutorul unor agenti de silanizare prin utilizarea mai multor tipuri de amine 1.3 Prepararea unor heteropolioxometalati cu activitate catalitica ridicata de tipul $\text{Me}_x\text{H}_{3-x}[\text{PW}_{12}\text{O}_{40}]$ unde $\text{Me} = \text{Ag}, \text{Cs}, \text{Ni}, \text{Co}$, iar $x = 0.25 - 1.5$, și a unor oxizi metalici de tipul Me/SBA-15 respectiv Me/KIT-6 prin impregnare ($\text{Me} = \text{Cu}, \text{Ni}, \text{Ce}$).	1.1.1. Sinteza sitelor moleculare (MCM-48, KIT 6, MCM-41, SBA-15 modificata) prin metoda sol-gel cu utilizarea diferitilor surfactanti si agenti de expandare a volumului porilor 1.1.2 Analiza fizico-chimica a compusilor preparati pentru determinarea continutului de apa, aciditatii Bronsted si continutului de Me prin: analiza termogravimetrica, termodesorbție programata TPD a amoniacului, spectroscopie de absorbție atomică în flacăra. 1.2.1. Funcționalizarea suporturilor de silice de tip sita moleculara prin grefarea unor amine (primare, secundare, terțiare, etc) cu ajutorul unor agenti de silanizare sau grefarea directa folosind amino-silani (ex: APTES). Aceste compozite sunt utilizate la adsorbția dioxidului de carbon la temperaturi sub 100°C. 1.3.1 Prepararea unor heteropolioxometalati cu activitate catalitica ridicata de tipul $\text{Me}_x\text{H}_{3-x}[\text{PW}_{12}\text{O}_{40}]$ unde $\text{Me} = \text{Ag}$, iar $x = 0.5 - 3$, și depunerea lor în grade diferite de acoperire pe carbune activ si respectiv zeoliti (ex: BEA, ZSM-5). Utilizarea acestor HPA la reactia de conversie a etanolului în scopul obtinerii unor selectivitati ridicate în etena/acetaldehida. 1.3.2 Sinteza heteropolicompusilor de tipul $\text{H}_{3-x}\text{Cs}_x\text{PW}$ ($x=0, 1, 2, 2.25, 2.5$ si 3), urmate de depunerea acestora prin impregnare pe pe site moleculare de tip MCM-48 si KIT-6. 1.3.3 Prepararea de oxizi metalici de tipul Me/SBA-15 respectiv Me/KIT-6 prin impregnare ($\text{Me} = \text{Cu}, \text{Ni}, \text{Ce}$).	<u>Colectiv:</u> - Dr. Verdes Orsina, CS III; - Dr. Borcanescu Silvana, CS - Dr. Suba Mariana, CS <u>Colaboratori externi:</u> - Conf. Paul Barvinschi - Facultatea de Fizica, Universitatea de Vest Timisoara - Dr.ing. Radu Banica, Dr. Daniel Ursu - Institutul National de Cercetare Dezvoltare pentru Electrochimie si Materie Condensata-INCENMC-Timisoara - Conf. Dr. Snezana Marković-Marković - Facultatea de Farmacie, Universitatea din Belgrad, Serbia - Prof. Ivanka Holclajner-Antunovic - Universitatea din Belgrad- Serbia - Prof. Dr. Zoltan Konya, Universitatea din Szeged, Ungaria: Reaction Kinetics and Surface Chemistry.
--------------------------	--	---	--

Faza 2 Trim.II	2. Caracterizarea fizico-chimică a compozitelor de silice grefate cu amine și a HPAs puri și depuși pe suport prin diferite metode de analiza texturală și structurală.	2.1. Determinarea proprietăților texturale a compozitelor de silice grefate cu amine și a heteropolioxometalatilor preparați prin masuratori de suprafață specifică și porozitate prin metoda BET-BJH. 2.2. Caracterizarea structurală a compozitelor de silice grefate cu amine și a heteropolioxometalatilor depuși pe site moleculare prin: spectroscopie IR și Raman, analiza termică cuplata cu MS, analiza difractometrică la unghiuri mici, microscopie electronică SEM-EDS și TEM.	
Faza 3 Trim.III	3.1. Evaluarea proprietăților de adsorbție/desorbție ale CO ₂ pe compozitele de silice grefate cu amine la temperaturi sub 100 °C. 3.2. Stabilirea condițiilor optime de reacție prin teste de activitate catalitică.	3.1.1 Masuratori de cicluri de adsorbție-desorbție programată termic-TPD a CO ₂ pe compuși sintetizați cu metoda adaptată pentru analiza TG-DTA cuplata cu spectrometria de masă. 3.2.1. Teste de activitate catalitică cu modificarea condițiilor de lucru pentru stabilirea temperaturii optime în vederea obținerii unei conversii ridicate. 3.2.2 Prelucrarea și interpretarea datelor experimentale, redactare comunicări științifice, postere pentru simpozioane științifice.	

Faza 4 Trim.IV	4.1. Evaluarea proprietatilor catalitice a HPAs depuși pe suport in reactia de conversie a alcoolilor inferiori. Corelarea activitatii catalitice cu proprietatile texturale și structurale.	4.1.1 Studiul dezactivării și regenerării catalizatorilor prin teste de activitate catalitică de lunga durată la diferite temperaturi pentru cei mai performanți catalizatori. 4.1.2 Calcularea vitezelor de formare a produsilor de reactie importanti si a bilanturilor de materiale. 4.1.3 Formularea mecanismului de reactie si stabilirea relatiilor de corelare activitate catalitica-compozitie-structura-textura.	
-------------------	---	---	--