



ACADEMIA ROMANA
INSTITUTUL DE CHIMIE “CORIOLAN DRĂGULESCU”
Bd. Mihai Viteazu, nr. 24, RO-300223 Timișoara, ROMÂNIA
tel: +40 256-491818; fax: +40 256-491824



Director,

Dr. Otilia COSTISOR

PLAN DE CERCETARE 2023

PREZENTARE SINTETICĂ

PROGRAME DE CERCETARE

Programul de cercetare 1. Proiectarea moleculară asistată de calculator.

Programul de cercetare 2. Contributii la chimia compusilor organici, element-organici si polimerici continand F, N, P, S. Sinteza, caracterizare, aplicatii.

Programul de cercetare 3. Chimia și aplicațiile compușilor tetrapirolici din clasa porfirinelor.

Programul de cercetare 4. Compuși anorganici și hibrizi cu relevanță în știința materialelor nanostructurate. Precursori pentru materiale avansate.

SUBPROGRAME

Subprogramul 1.1. Aplicarea cheminformaticii în studiul compușilor agrochimici, medicamentelor și explorarea și analiza unor librării chimice.

Subprogramul 1.2. Utilizarea și dezvoltarea de metode in silico în studiul compușilor cu activitate biologică - o abordare multidisciplinară.

Subprogramul 2.1. Sisteme polimerice, sisteme hibride sau complexe cu proprietati: ignifuge, electroliți, membrane, sorbanți, biocide, catalizatori și de protecție anticorozivă.

Subprogramul 2.2: Compuși multifuncționali cu proprietăți dirijate și aplicatii în protecția mediului.

Subprogramul 3.1. Materiale multifuncționale avansate cu proprietăți speciale opto-electrice pe bază de porfirine și combinațiile lor complexe. Aplicații biologice și tehnice.

Subprogramul 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.

Subprogramul 4.2. Sisteme multicomponente cu proprietăți optice, magnetice și farmaceutice speciale.

Subprogramul 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.



ACADEMIA ROMANA
INSTITUTUL DE CHIMIE "CORIOLAN DRĂGULESCU"
Bd. Mihai Viteazu, nr. 24, RO-300223 Timișoara, ROMÂNIA
tel: +40 256-491818; fax: +40 256-491824



Director,

Dr. Otilia COSTISOR

PROGRAMUL DE CERCETARE 1 - 2023

PROIECTAREA MOLECULARĂ ASISTATĂ DE CALCULATOR

Coordonator: Dr. Chim. Ramona CURPĂN, CS II

Programul de cercetare 1 cuprinde un număr de **11** cercetători din care **1** CS I, **3** CS II, **4** CS III, **1** CS, **1** AsC și personal auxiliar **1** Cdate I.

Activități extra-plan: Proiecte finanțate din alte resurse: 2

1. *Knowledge management center for illuminating the druggable genome*, Cod proiect NIH: 5U24CA224370-02/Cod proiect ICT: 3RDZ5, finanțat de National Institute of Health (NIH), SUA, 2019-2023 (60 luni), *Responsabil proiect ICT:* Dr. Sorin AVRAM, CS II
2. *Ensuring long-term sustainability of excellence in chemical biology within Europe and beyond* - EU-OPENSREEN-DRIVE, H2020 - INFRADEV- 03 2018-2019: Grant agreement nr. 823893, finanțat de Uniunea Europeană, 2018-2023, *Responsabil proiect ICT:* Dr. Liliana PACUREANU, CS II

Subprogramul 1.1. Aplicarea chiminformaticii în studiul compușilor agrochimici, medicamentelor și explorarea și analiza unor librării chimice

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

Tema 1.1.1. Aplicarea chiminformaticii în studiul pesticidelor.			
Coordonator: Dr. Ing. Simona Funar-Timofei, CSI			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim I	1. Relații cantitative structură-toxicitate ale pesticidelor organofosforice	1.1. Crearea bazei de date. 1.2. Modelare moleculară. 1.3. Analiză multivariată și relații calitative structură-toxicitate.	<u>Colectiv de cercetare:</u> - Dr. Ana Borota, CSIII - Dr. Luminița Crișan, CSIII
Faza 2 Trim II	2. Relații cantitative structură-toxicitate ale pesticidelor organofosforice	2.1. Relații cantitative structură-toxicitate prin metode liniare chemometrice. 2.2. Validarea modelelor obținute și predicții de pesticide organofosforice cu toxicitate redusă pentru care nu se cunoșteau date experimentale.	
Faza 3 Trim III	3. Metode cantitative bazate pe structura liganzilor pentru studiul rezistenței la pesticide a plantelor	3.1. Crearea bazei de date. 3.2. Modelare moleculară a pesticidelor care pot crea mutații în plante. 3.3. Analiză multivariată și relații calitative structură-activitate inhibitorie a pesticidelor față de anumite enzime din plante.	
Faza 4 Trim IV	4. Metode cantitative bazate pe structura liganzilor pentru studiul rezistenței la pesticide a plantelor	4.1. Relații cantitative structură-activitate inhibitorie a pesticidelor care pot crea mutații în plante. 4.2. Validarea modelelor obținute și predicții	

		de noi pesticide cu proprietăți anti-rezistente față de plante.	
Tema 1.1.2. 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. Evaluarea și îmbunătățirea calității modelelor de omologie	1.1. Evaluarea calității modelelor de omologie cu ajutorul serverelor Procheck si MolProbity. 1.2. Optimizarea calității structurilor 3D cu ajutorul modulului Protein Preparation Wizard. 1.3. Rafinarea și îmbunătățirea elementelor structurale problematice cu ajutorul programului Prime.	<u>Colectiv de cercetare:</u> - Dr. Ing. Simona Funar-Timofei, CSI - Dr. Liliana Halip, CSIII
Faza 2 Trim II	2. Modelarea interacțiilor erbicid-enzimă AHAS (salbatică/mutantă)	2.1. Andocarea unor erbicide inducătoare de rezistență în variantele sălbatică/mutante ale enzimei AHAS. 2.2. Andocarea unor erbicide potente în variantele sălbatică/mutante ale enzimei AHAS. 2.3. Compararea tiparelor de interacții pentru variantele anterior menționate.	
Faza 3 Trim III	3. Simulari de dinamică moleculară pentru enzima AHAS salbatică/mutantă	3.1. Generarea sistemului solvatat pentru simulări de dinamică moleculară cu Desmond. 3.2. Rularea simulării de dinamică moleculară pentru compeșii obținuți din andocare	

		moleculară.	
Faza 4 Trim IV	4. Studii de dinamică moleculară clasică pentru enzimă AHAS salbatică/mutantă	4.1. Analiza rezultatelor dinamicii moleculare prin prisma graficelor: RMSD proteină-ligand; structura secundară a proteinei; fluctuațiile proteinei/ligandului(RMSF), contactele ligand - proteinta, etc. 4.1.2. Evaluarea stabilității proteice. 4.1.3 Compararea, analiza și interpretarea rezultatelor.	
Tema 1.1.3. 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, CSII - Dr. Liliana Halip, CSIII
Faza 2 Trim II	2.1. 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. Optimizarea BFI	3.1. Calculul BFI pentru diferite dimensiuni ale situsului de legare. 3.2. Corelarea razelor cu performanța andocarii.	

Faza 4 Trim IV	4. Identificarea unor criterii pentru alegerea cristalelor pentru chimia computațională	4.1. Identificarea unor criterii pentru alegerea cristalelor pentru chimia computațională.	
-------------------	---	--	--

Subprogramul 1.2. Utilizarea și dezvoltarea de metode in silico în studiul compușilor cu activitate biologică - o abordare multidisciplinară

Responsabil: Dr. Ramona Curpăan, CS II

Tema 1.2.1. Studiul translațional a medicamentelor și identificarea compușilor biologic activi Coordonator: Dr. Sorin Avram, CS II			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim I	1. Identificarea noilor indicații medicamentoase FDA	1.1. Descărcarea datelor FDA. Extragerea automatizată a indicațiilor. 1.2. Verificarea manuală a noilor date. 1.3. Identificarea indicațiilor necuprinse în DrugCentral.	<u>Colectiv de cercetare:</u> - Chim. Toma Cristina, AsC <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Tudor Oprea University of New Mexico, USA
Faza 2 Trim II	2. Optimizarea metodei de detecție a semnalelor din datele de farmacovigilantă	2.1 Descărcarea datelor OpenFDA. 2.2 Izolarea pacienților în monoterapie. 2.3. Calculul semnalului de detecție.	
Faza 3 Trim III	3. Actualizarea conexiunilor medicament – boală – țintă biologică	3.1. Actualizarea seturilor de date medicament – boală. 3.2. Actualizarea seturilor de date medicament – țintă. 3.3. Actualizarea seturilor de date țintă biologică – boală.	

Faza 4 Trim IV	3. Construirea unei noi interfețe web	4.1. Construirea de grafurilor de conexiune. 4.2. Implementarea web prin pachetul shiny.	
Tema 1.2.2. Explorarea efectelor adverse ale medicamentelor pentru repositionarea acestora Coordonator: Dr. Liliana Halip, CSIII			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim I	1. Obținerea unui set de date de farmacovigilență (<i>data mining</i>)	1.1. Identificarea și selectarea surselor de date de farmacovigilență. 1.2. Extragerea și centralizarea datelor.	<u>Colectiv de cercetare:</u> - Dr. Liliana Halip, CS III - Dr. Ana Borota, CS III - Dr. Alina Bora, CS II <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Dr. Cristian G. Bologa Universitatea New Mexico School of Medicine, Albuquerque, USA
Faza 2 Trim II	2. Prelucrarea și structurarea datelor (<i>data wrangling</i>)	2.1. Stabilirea compușilor chimici (medicamente) unici. 2.2. Maparea efectelor adverse cu termenii din dicționare controlate. 2.3. Identificarea efectelor adverse provenite din raportări singulare sau multiple. 2.4. Agregarea datelor în funcție de gen, vârstă, tip, raportor, etc. 2.5. Eliminarea asocierilor de tip duplicat.	
Faza 3 Trim III	3. Detectarea semnalului relevant	3.1. Identificarea intervalului de variație pentru efectele adverse ale unui compus chimic (medicament). 3.2. Calcularea pragului de relevanță pentru fiecare efect advers per compus chimic (medicament). 3.3. Stabilirea pragului semnificativ pentru semnal.	

Faza 4 Trim IV	4. Estimări de performanță predictivă	4.1. Generare de descriptori. 4.2. Calculul similarităților. 4.3. Dezvoltarea modelului. 4.4. Validarea și optimizarea modelului. 4.5. Identificarea compușilor chimic (medicamente) cu profil relevant.	
Tema 1.2.3. Repoziționarea computațională a unor medicamente și identificarea de compuși naturali pentru noi scopuri terapeutice. Coordonator: Dr. Luminița Crișan, CS III			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim I	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 medicamentelor introduse în ultimii ani în bazele de date care conțin medicamente aprobate conform Agenției Europene a Medicamentului, a Administrației Americane pentru Alimente și Medicamente, etc. 1.2. Actualizarea informațiilor pentru medicamentele descarcate din bazele de date identificate. 1.3. Calcularea proprietăților fizico-chimice, de Absorbție, Distribuție, Metabolism, Excreție și Toxicitate (ADMETox) și a diversității chimice.	<u>Colectiv de cercetare:</u> - Dr. Liliana Pacureanu, CS II - Dr. Alina Bora, CS II - Dr. Sorin Avram, CS II - Chim. Daniela Istrate, CS
Faza 2 Trim II	2. Alcătuirea unei baze de date de date de medicamente antivirale, antidiabetice, antiinflamatoare repoziționate	2.1. Alcătuirea unei baze de date de date de medicamente antivirale, antidiabetice, antiinflamatoare repoziționate cu structuri unice. 2.2. Identificarea în PDB a structurilor receptorilor cu medicametele identificate.	

		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 III	3. Studiul medicamentelor aprobate și a celor retrase de pe piață, inclusiv a medicamentelor experimentale, investigaționale și a metaboliților pe domenii terapeutice	3.1. Identificarea și analizarea situsului de legare ale fiecărui receptor identificat. 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 antivirale, antidiabetice, antiinflamatoare față de cele cu indicații pentru Sistemul Nervos Central.	
Faza 4 Trim IV	4. Analiza reacțiilor adverse și a proprietăților medicamentelor aprobate, a celor retrase și a celor repoziționate.	4.1. Studiul de literatură. 4.2. Analiza statistică a proprietăților medicamentelor antivirale, antidiabetice, antiinflamatoare. 4.3. Identificarea informațiilor moleculare relevante pentru medicamentele aprobate. 4.4. Analizarea rezultatelor privind conceptul de reutilizare a medicamentelor antivirale, antidiabetice, antiinflamatoare pentru utilizarea viitoare a medicamentelor vechi împotriva altor maladii.	

Tema 1.2.4. Profilul de selectivitate al inhibitorilor cistein - kinazelor

Coordonator: Dr. Liliana Păcureanu, CS II

Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim I	1. Actualizarea bazei de date de inhibitori covalenti	1.1. Investigarea spațiului chimic al inhibitorilor covalenti, inclusi in bazele de date	<u>Colectiv de cercetare:</u> - Dr. Luminița Crișan, CS III

		ChEMBL si Drug Central. 1.2. Clasificarea lor in functie de grupele reactive si de scheletele moleculare (Bemis-Murko frameworks).	- Dr. Sorin Avram, CS II - Dr. Alina Bora, CS II <u>Colaboratori externi:</u> - Dr. Costin Ioan Popescu Institutul de Biochimie al Acadmiei Romane
Faza 2 Trim II	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 III	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 IV	4. Optimizarea computationala a afinitatii inhibitorilor covalenti proiectati	4.1. Optimizarea reactivitatii grupelor functionale. 4.2. Optimizarea scheletelor moleculare.	
Tema 1.2.5. 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 Curpăn, CS II			
Faza 1 Trim I	1. Asamblarea seturilor de liganzi din diferite surse	1.1. Explorarea bazelor de date cu informații chimice și biologice, e.g. ChEMBL, PubChem, 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 <u>Personal auxiliar</u> - Poenaru Ana, Cdate I

Faza 2 Trim II	2. Standardizarea structurilor, calcularea descriptorilor moleculari	2.1. Standardizarea seturilor de liganzi. 2.2. Generarea diferitelor clase de descriptori moleculari pentru setul de liganzi.	<u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Dr. Craig Jordan, - Dr. Philipp Maximov University of Texas MD Anderson Cancer Center, USA
Faza 3 Trim III	3. Generarea modelelor de predicție	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.	



ACADEMIA ROMANA
INSTITUTUL DE CHIMIE "CORIOLAN DRĂGULESCU"
Bd. Mihai Viteazu, nr. 24, RO-300223 Timișoara, ROMÂNIA
tel: +40 256-491818; fax: +40 256-491824



Director,

Dr. Otilia COSTIȘOR

PROGRAMUL DE CERCETARE 2 - 2023

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

Coordonator : Dr. chim. Aurelia VISA, CS I

Programul de cercetare 2 cuprinde un număr de **10** cercetători din care **2 CS I, 3 CS II, 2 CS III, 3 CS** și personal auxiliar **2 AC I**.

Nr. studenți doctorat: 1, Drd. Maria Andreea NISTOR, CS, *Conducător doctorat:* Dr. Otilia COSTISOR

Activități extra-plan: Proiecte finanțate din alte resurse: 1

1. *Retele Metal Organice: de la Sinteza Verde la Aplicatii Prietenoase cu Mediul Inconjurator*, PN-III-P4-PCE-2021-0089, nr. contract PCE 24/2022, finanțat de UEFISCDI, 25.05.2022-31.12.2024 (32 luni), *Responsabil proiect ICT:* Dr. Aurelia VISA

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

Responsabil: Dr. Popa Adriana, CS I

Tema 2.1.1. Polimeri modificati chimic cu grupari pendante active continand atomi de fosfor si/sau azot si oxygen. Coordonator: Dr. Popa Adriana, CS I			
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. Analiza sistemelor polimerice cu grupari de tip aminoacid/ aminofosfonat pentru procesul de adsorbtie a aminelor aromatice din solutii apoase. 1.2. Studii in vederea modificarii chimice a copolimerilor stiren-divinilbenzen (St-DVB) cu grupari active de tip aminoacid.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Macarie Lavinia, CS II - Dr. Plesu Nicoleta, CS II <u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Visa Aurelia, CS I <u>Colaboratori externi:</u> - Dr. Diaz Somoano Mercedes - Instituto Nacional del Carbon - CSIC, Oviedo, Spania
Faza 2 Trim II	2. Analiza si evaluarea materialelor polimerice grefate cu grupari pendante/active continand atomi de azot.	2.1. Investigarea caracteristicilor fizico-chimice a copolimerilor stiren-divinilbenzen (St-DVB) functionalizati cu grupari active de tip aminoacid. 2.2. Studiul adsorbtiei colorantilor si antibioticelor pe materiale de tip St-DVB functionalizate la catena laterala cu grupari active continand atomi de azot.	
Faza 3 Trim III	3. Evaluarea privind modificarea chimica a suporturilor polimere de tip AN-DVB (acrilonitril -divinilbenzen)	3.1. Reactia polimer-analoga de grefare in catena laterala cu grupari pendante active a copolimerilor de tip acrilonitril-divinilbenzen (AN-DVB).	

		3.2. Caracterizarea prin metode fizico-chimice a copolimerilor AN-DVB (acrilonitril - 10% divinil-benzen) functionalizati cu grupari de tip aminofosfonat.	
Faza 4 Trim IV	4. Evaluarea impregnarii prin metoda mecano-chimica/ultrasonare.	4.1. Reactia mecano-chimica a chitosanului cu cisteina folosind catalizator bromatul de potasiu. 4.2. Actualizarea datelor/referintelor privind impregnarea biopolimerilor (celuloza, chitosan) si potentialele lor aplicatii in domenii ale biomedicinei.	
Tema 2.1.2. Polimeri si copolimeri cu grupari fosfonice obtinuti prin polimerizare radicalica Coordonator: Dr. Macarie Lavinia, CS II			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1 Trim I	1. Sinteza polimerilor si copolimerilor cu grupari fosfonice in catena laterala	1.1. Documentare in domeniul sintezei si aplicatiilor polimerilor cu grupari fosfonat si fosfat in catena laterala. 1.2. Studii privind polimerizarea fotoinitiata pentru a obtine polimeri si copolimeri cu grupari fosfonice in catena laterala. 1.3. Studii privind influenta naturii si continutului de comonomeri derivati de acid vinilfosfonic si monomeri acrilici.	<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 <u>Colaboratori externi:</u>
Faza 2 Trim II	2. Utilizarea si evaluarea metodelor si tehnicilor de polimerizare pentru sinteza de copolimeri ai acidului vinilfosfonic	2.1. Studiul polimerizarii termice, in microunde sau in ultrasunete asupra formularilor polimerizabile. 2.2. Utilizarea de monomeri /oligomeri, fotoinitiatori/sisteme de fotoinitiere si a	- Dr. Jurcau Dorin - SC. Elkim SRL, Timisoara

		comonomerilor reactivi derivati ai acidului vinilfosfonic, vinilalcoxisilani, pentru a obtine un sistem polimerizabil.	
Faza 3 Trim III	3. Caracterizarea morfologica/structurata a polimerilor prin metode fizico-chimice (FTIR, TG).	3.1. Utilizarea spectroscopiei FTIR pentru monitorizarea polimerizarii /copolimerizarii. 3.2. Investigarea comportarii termice (TG). 3.3. Determinarea absorbtiei de apa in diferite conditii de temperatura si pH.	
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 prin controlul si monitorizarea proceselor de coroziune. Interpretarea rezultatelor.	
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 polianiline pentru retinere de -coloranti Reciclarea deseurilor.	1.1. Prepararea filmelor de polianiline (PANI) pentru retinere coloranti (Dye). 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 de retinere a colorantilor. Reutilizarea compozitului PANI/dye pentru adsorbtia de grasimi. Reciclarea deseurilor.	2.1. Caracterizarea filmelor PANI obtinute, prin voltametrie ciclica (CV) si spectroscopie de impedanta (EIS). 2.2. Modelarea datelor experimentale. 2.3. Studiul adsorbtiei de grasimi pe compozitele PANI/Dye.	<u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Visa Aurelia, CS I - Dr. Crisan Luminita, CS III - Dr. Crisan Manuela, CSIII <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Demadis Konstaninos - Universitatea din Creta, Grecia - Dr. Jurcau Dorin - SC. Elkim SRL, Timisoara
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. Calcularea parametrilor electronici cu ajutorul calculelor computationale. 3.2. Interpretarea datelor de adsorbtiei de grasimi pe compozitele PANI/Dye. 3.3. Studiu de literatura privind metodele de sinteza a rasinilor copolimerilor pe baza de PU.	
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.	

Subprogramul 2.2: Compusi multifunctionali cu proprietati dirijate si aplicatii in protectia mediului

Responsabil: Dr. chim. Aurelia Visa, CS I

Tema 2.2.1 Sinteza de retele metal organice si proprietatile acestora Coordonator: Dr. Aurelia Visa, CS II			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim. I	1. Sinteze de retele metal organice carboxilice sau fosfono-carboxilice	1.1. Sinteza retelelor metal organice in conditii hidrotermale folosind saruri de metale monovalente. 1.2. Stabilirea conditiilor optime de reactie. 1.3. Influenta conditiilor de reactie asupra cristalinitatii compusilor obtinuti.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Muntean Simona, CS II - Drd. Nistor Andreea, CS <u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Crisan Luminita, CS III - Dr. Popa Adriana, CS I <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Tundo Pietro - Universitatea Ca`Foscari, Venetia, Italia, - Prof. dr. Cabeza Aurelio - Universitatea din Malaga, -Prof. Dr. Demadis Konstantinos - Universitatea din Creta, Grecia
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.	
Faza 3, Trim. III	3. Sinteze de retele metal organice carboxilice	3.1. Sinteze de retele metal organice in conditii hidrotermale folosind saruri de metale bivalente. 3.2. Studiul influentei factorilor fizico-chimici. 3.3. Caracterizarea compusilor sintetizati prin TG, FT-IR si difractie de raze X.	
Faza 4 Trim. IV	4. Studiul aplicatiilor retelelor 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 si/sau antimicrobiene ale compusilor sintetizati.	
Tema 2.2.2. Metodologii pentru combaterea poluarii cu compusi azo si metale grele. Aplicatii in protectia mediului. Coordonator: Dr.Muntean Simona Gabriela, CS II			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim. I	1. Studiul fotodegradarii colorantilor industriali utilizand oxizi de fier si oxizi de fier dopati.	1.1. Efectul intensitatii și a lungimii de unda a radiatiei asupra degradarii colorantilor. 1.2. Studiul influentei naturii materialului asupra randamentului de fotodegradare a colorantilor. 1.3. Studiul cinetic al procesului de fotodegradare a colorantilor.	<u>Colectiv</u> - Drd. Nistor Maria Andreea, CS - Dr. Visa Aurelia, CS I <u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Nicola Roxana, CS - Dr. Halip Liliana, CS III - Dr. Buta Ildiko, CS III - Dr. Andelescu Adelina, CS <u>Colaboratori externi:</u> - Dr. Raisa Nastas, - Dr. Oleg Petuhov, Institutul de Chimie, Chisinau, Republica Moldova
Faza 2, Trim. II	2. Aplicarea retelelor metal organice fosfonice (MOF) pentru indepartarea colorantilor din solutii apoase	2.1. Testarea proprietatilor fotocatalitice a MOF aplicate in degradarea colorantilor. 2.2. Testarea MOF ca adsorbanti in procese de adsorbtie a colorantilor din soluții apoase. 2.3. Efectul intensitatii si a lungimii de unda a radiatiei asupra degradarii colorantilor.	
Faza 3, Trim. III	3. Degradarea fotocatalitica a colorantilor utilizand combinatii complexe ale unor elemente 3d cu liganzi de tip baze Schiff.	3.1. Determinarea randamentelor de fotodegradare a colorantilor din solutii apoase la iradiere cu lumina UV. 3.2. Determinarea randamentelor de fotodegradare a colorantilor din solutii apoase la iradiere cu lumina vizibila. 3.3. Influenta variabilelor procesului.	
Faza 1, Trim. IV	4. Studiul adsorbtiei colorantilor si ionilor metalici folosind	4.1. Testarea performantelor nanocompozitelor magnetita/carbon pentru adsorbtia colorantilor din sistem binar si ternar.	

	nanocompozite magnetita/carbon si compusi minerali.	4.2. Determinarea performantelor nanocompozitelor magnetita/carbon in cicluri multiple de adsorbtie/desorbtie. 4.3. Adsorbtia colorantilor si ionilor metalici (Cu, Cd, Zn) din solutii apoase, folosind compusi pe baza de diatomit Influenta parametrilor procesului.	
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 electrochimice ale azo-colorantilor studiati.	1.1.Studiul stabilitatii fata de procesele de oxidare/reducere, prin intermediul metodei electrochimice de voltametrie ciclica ale a azo colorantilor sintetizati.	<u>Colectiv</u> -Dr. Radulescu-Grad Maria Elena, CSIII <u>Colaboratori interni:</u> -Dr. Funar-Timofei Simona, CSI -Dr. Plesu Nicoleta, CSII -Drd. Andelescu Adelina, 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 optice si de culoare ale colorantilor si ale azo complexilor sintetizati	2.1.Studiul proprietatilor optice si de culoare ale colorantilor sintetizati. 2.2. Studiul proprietatilor optice si de culoare ale azo complexilor sintetizati.	
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 complecsi 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 2.2.4 Sisteme multicomponente fotoluminescente ce includ compuși de sinteza/natrurali cu aplicații specifice in medicina și agricultura Coordonator: Dr. Manuela Crișan, CS III			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim. I	1.Cristale multicomponente organice pe baza de metaboliți secundari sau ingrediente farmacologic active	1.1 Sinteza de saruri / cocristale / solvati / combinatii ale acestora 1.2 Identificarea posibilelor forme polimorfe 1.3 Caracterizarea fizico-chimica si structurala a sistemelor de tip acid-baza obtinute	<u>Colectiv:</u> - Dr. Daniela Haidu, CS <u>Colaboratori interni:</u> -Dr. Luminita Crisan CSIII <u>Colaboratori externi:</u> - Dr. Pavlina Bouros, - Dr. Lilia Croitor, - Dr. Yurii Chumakov Institutul de Fizica Aplicata-Chisinau, Moldova - Conf. dr. Ioana Baldea, Universitatea de Medicina si Farmacie “Iuliu Hatieganu” Cluj-Napoca, Fiziologie
Faza 2, Trim. II	2. Extracte de origine vegetala/uleiuri esentiale	2.1 Elaborarea de metode pentru screeningul fitochimic al principiilor bioactive 2.2 Studiu fitochimic al extractelor vegetale/uleiurilor esentiale in vederea determinarii principiilor active.	
Faza 3, Trim. III	3. Investigarea proprietatilor fotoluminescente	3.1 Studiul relatiei structura moleculara - structura supramoleculara – proprietati fotoluminescente pentru compusii sintetici obtinuti 3.2 Studiul proprietatilor fotoluminescente ale probelor vegetale obtinute.	
Faza 4, Trim. IV	4. Testarea sistemelor multicomponente pentru diverse aplicatii biologice	4.1 Studiul proprietatilor antimicrobiene 4.2 Testarea activitatii citotoxice / anticancer / antiinflamatoare 4.3 Studii de modelare moleculara a noilor compusi obtinuti in receptori responsabili de inflamatie/cancer	



ACADEMIA ROMANA
INSTITUTUL DE CHIMIE "CORIOLAN DRĂGULESCU"
Bd. Mihai Viteazu, nr. 24, RO-300223 Timișoara, ROMÂNIA
tel: +40 256-491818; fax: +40 256-491824



Director,

Dr. Otilia COSTIȘOR

PROGRAMUL DE CERCETARE 3

CHIMIA ȘI APLICAȚIILE COMPUȘILOR TETRAPIROLICI DIN CLASA PORFIRINELOR

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

Programul de cercetare 3 cuprinde un număr de **6** cercetători din care **1 CS I, 1 CS III, 1 CS și 3 AsC** și personal auxiliar **1 AC I**.

Nr. studenți doctorat: 2, Drd. Camelia EPURAN, AsC, *Conducător doctorat:* Dr. Eugenia FAGADAR-COSMA

Drd. Ion FRATILESCU, AsC, *Conducător doctorat:* Dr. Eugenia FAGADAR-COSMA

Subprogram 3.1. Materiale multifuncționale avansate cu proprietăți speciale opto-electrice pe bază de porfirine și combinațiile lor complexe. Aplicații biologice și tehnice.

Coordonator: Dr. Ing. Eugenia Făgădar-Cosma, CS I

Tema 3.1.1. Cromofori de tip porfirinic simetric și nesimetric funcționalizați. Sisteme fluorescente heterodimere. Complecși coloidal ai porfirinelor cu Cu/Ag/Au/PtNPs. Identificarea de aplicații tehnice în senzorială și inhibarea coroziunii.
Coordonator: Dr. Ing. Făgădar-Cosma Eugenia, CS I

Faza	Obiective	Activități	Cercetători
Faza 1 Trim I, II, III	1. Obținerea de noi porfirine simetric și A ₃ B asimetric mixt-substituite, aplicând variante ale metodelor multicomponente;	1.1. Obținerea, separarea și purificarea de noi structuri asimetrice, mixt substituite la nucleul fenilic cu grupe cu efect donor/atragator de electroni 1.2. Caracterizarea prin spectroscopie UV-viz, fluorimetrie, FT-IR, RMN, MS, HPLC și TLC, analiză elementară, electrochimică, AFM și RX a compușilor 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:</u> - Dr. Ing. Eugenia Făgădar-Cosma, CS I - Chim. drd. Camelia Epuran, AsC - Chim. drd. Ion Frățilescu, AsC - Dr. Anca Lascu, CSIII <u>Colaborări internaționale:</u> -Istituto per lo Studio delle Macromolecole (ISMAC), Consiglio Nazionale delle Ricerche, Milano, Dr. Erika Kozma -The Fundació Institut Català d'Investigació Química, Spain
Faza 2 Trim II, III	2. Obținerea complexelor porfirinelor cu metale tranzitionale	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 micro și nano-materialelor fotochimic active obținute prin imobilizarea porfirinelor pe matrici anorganice și/sau polimerice prin tehnici de sinteză organică, coloidală și sol-gel	3.1. Caracterizarea prin tehnici microscopice (SEM, TEM, AFM, tomografie), UV-viz, FT-IR, BET și fluorescență a materialelor hibride obținute. 3.2. Studii privind topografia suprafețelor și capacitatea de detecție comparativ cu porfirinele corespunzătoare libere.	<u>Colaboratori externi:</u> - Institutul Național C&D pentru Fizica Materialelor București-Măgurele - Universitatea București-Centrul 3-NANO-SAE -Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Științe Biologice București - Universitatea de Vest Timisoara
Faza 4 și 5 Trim IV	4. Sisteme fluorescente heterodimere obținute între o porfirină și o metaloporfirină, sau între un derivat porfirinic și un derivat care potențează fluorescența 5. Identificarea posibilităților de aplicare a derivaților porfirinici în formularea de senzori 6. Investigarea proprietăților electrochimice ale porfirinelor. Straturi subțiri mixte cu oxizi binari cu aplicații în inhibarea coroziunii. 7. Acțiuni de diseminare. Redactare lucrări-pagini web, patente	4.1 Alegerea structurilor, realizarea sintezelor, caracterizare fizico-chimică completă a sistemelor porfirinice heterodimere. Aplicații 5.1. Teste asupra porfirinelor bază / metaloporfirinelor sintetizate dar și a structurilor dimere pentru evaluarea capacității de acțiune ca senzori electrochimici sau optici/fluorimetrici pentru metale grele, medicamente sau analiți cu relevanță medicală. 6.1. Studii de inhibare a coroziunii, prin metode electrochimice și clasice. 6.2. Realizarea de demonstratori. 7. 1. Minimum 3 lucrări ISI , lucrări în reviste cu sistem <i>peer-review</i> , participare Key-note speaker la Conferințe/video-conferințe.	

Tema 3.1.2. Reacții de funcționalizare a porfirinelor la grupele substituente OH cu zaharide/glicozide. Materiale hibride pe bază de porfirine destinate aplicării în stocarea de gaze, senzorială și cataliză.

Coordonator: Dr. Ing. Anca Lascu, CS III

Faza	Obiective	Activități	Cercetători
Faza 1 Trim I, II, III	1. Obținerea de structuri porfirinice cu grupe functionale hidroxilice. Funcționalizarea cu zaharide sau glicozide.	1.1 Sinteza și separarea pe coloana cromatografică a porfirinelor A3B și A2B2 substituie cu grupări hidroxilice. 1.2. Funcționalizarea la gruparea OH cu zaharide / glicozide.	<u>Colectiv:</u> -Dr. Anca Lascu, CSIII -Dr. 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 Universitatea de Vest Timisoara <u>Colaborări internaționale:</u> - Istituto per lo Studio delle Macromolecole - CNR, Milano, Dr. Erika Kozma
Faza 2 Trim II, III	2. Caracterizarea fizico-chimică porfirinelor obținute, înainte și după funcționalizare.	2.1. Studiul influenței fazei staționare și a naturii /compoziției fazei mobile asupra separării derivaților porfirinici -OH substituiți prin cromatografie pe coloană și/sau HPLC la scară analitică. 2.2. Caracterizarea prin spectroscopie UV-viz, fluorimetrie, FT-IR, RMN, HPLC și TLC a compușilor porfirinici obținuți înainte și după funcționalizare. 2.3. Analiza microscopică a morfologiei suprafețelor, după depunere pe diferite substraturi, din solvenți cu polaritate diferită.	
Faza 3 Trim III	Obținerea micro și nano-materialelor fotochimic active obținute prin imobilizarea porfirinelor pe matrici anorganice și/sau polimerice prin tehnici de sinteză organică, coloidală și sol-gel	3.1. Imobilizarea porfirinelor divers funcționalizate pe matrici anorganice de tip silice și/sau polimerice și pe nanotuburi de carbon/grafene. 3.2. Caracterizarea prin tehnici microscopice (SEM, TEM, AFM, tomografie), analiză	

		termică, UV-viz, FT-IR, BET și fluorescență a materialelor hibride obținute.	
Faza 4,5 Trim IV	4. Demonstrarea capacității catalitice/de detecție a porfirinelor A₂B₂ substituite cu grupări hidroxilice și a materialelor funcționalizate cu zaharide / glicozide 5. Diseminare. Redactare lucrări, participare conferințe 6. Acțiuni de diseminare. Redactare lucrări-pagini web, patente	4.1. Testări preliminare ale proprietăților catalitice ale porfirinelor A₂B₂ cu grupări OH. 4.2. Aplicații în reacții organice catalizate. Studii de cinetică chimică. 5.1. Minim 2 lucrări ISI; participare conferințe internaționale și naționale. 6. 1. Minimum 3 lucrări ISI, lucrări în reviste cu sistem <i>peer-review</i>, participare Key-note speaker la Conferințe/video-conferințe.	



ACADEMIA ROMANA
INSTITUTUL DE CHIMIE "CORIOLAN DRĂGULESCU"
Bd. Mihai Viteazu, nr. 24, RO-300223 Timișoara, ROMÂNIA
tel: +40 256-491818; fax: +40 256-491824



Director,

Dr. Otilia COSTIȘOR

PROGRAMUL DE CERCETARE 4 - 2023

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

Coordonator : Dr. Elisabeta-Ildyko Szerb, CS I

Programul de cercetare 4 cuprinde un număr de **20 cercetători** din care **3 CS I, 2 CS II, 9 CS III, 2 CS, 4 AsC și personal auxiliar 1 AC și 1 AC I.**

Nr. studenți doctorat: 2, Drd. Bogdan Ionut MARA, AsC, *Conducător doctorat:* Dr. Liliana CSEH

Drd. Evelyn POPA, AsC, *Conducător doctorat:* Dr. Elisabeta SZERB

Activități extra-plan: Proiecte finanțate din alte resurse: 2

1. *Nanoplatforme luminescente hibride organice-anorganice cu arhitectură supramoleculară, solubile în apă, ca agenți de tip theranostic*, PN-III-P1-1.1-PD-2021-0427: nr. contract PD 21/11.04.2022, finanțat de UEFISCDI, 01.01.2021- 31.12.2023 (36 luni), *Responsabil proiect ICT:* Dr. Elisabeta Ildyko SZERB, CS I
2. *Detectia de inalta sensibilitate a calitatii apei contaminate "in urme" cu medicamente cu ajutorul electrozilor de carbon nanostructurati si cristale lichide (DRUWATSENS)*, PN-III-P1-1.1-PD-2019-0676: nr. contract PD 88/13.08.2020, finanțat de UEFISCDI, 01.04.2022 – 31.03.2024 (24 luni), *Responsabil proiect ICT:* Dr. Adelina-Antonia ANDELESCU, CS III

Subprogramul 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. chim. Otilia Costișor, CS I

Tema 4.1.1. Compuși organici precursori pentru sisteme moleculare și/sau supramoleculare Coordonator: Dr. Livia Deveseleanu-Corici, CS III			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	2.1. Obținerea unor noi compuși fotocromici derivați de 3-metil-ciclohexanonă și butanonă, cu proprietăți optice.	1.1.1. Sinteza, purificarea și caracterizarea structurală a compușilor: NMR, FTIR, XRD pe monocristale.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Liliana Cseh, CS I - Drd. Bogdan Mara, AsC <u>Personal auxiliar:</u> - Tiberiu Balazs, AC1 <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Jorge Parola, Universitatea Nova din Lisabona, Portugalia - Dr. Valentin Badea, Universitatea Politehnica Timisoara - Dr. Alina Nicolescu, Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni”, Iasi - Prof. Sergiu Shova, Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni”, Iasi
Faza 2 Trim.II	2.1. Optimizarea metodei de sinteză a derivaților de 3-metil-ciclohexanonă și butanonă.	2.1.1. Studiul influenței raportului molar și temperaturii asupra randamentului reacției.	
Faza 3 Trim.III	3.1. Studiul transformărilor chimice ale compușilor obținuți pe întreg domeniul de pH și prin iradierea la diferite lungimi de undă.	3.1.1. Caracterizarea compușilor obținuți prin spectroscopie UV-Vis convențională și RMN. 3.1.2. Caracterizarea completă a speciilor la diferite valori ale pH-ului.	
Faza 4 Trim.IV	4.1. Studiul proprietăților optice ale compușilor obținuți.	4.1.1. Caracterizarea compușilor prin spectroscopie de fluorescență.	

Tema 4.1.2. Sisteme supramoleculare cu proprietăți optice pe bază de combinații complexe ale metalelor din blocul d.**Coordonator: Dr. Carmen Crețu, CS III**

Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1. Sinteza unor liganzi premesogenici pe bază de N sau O funcționalizați cu lanțuri hidrofobe.	1.1.1. Stabilirea condițiilor optime de reacție în vederea obținerii liganzilor. 1.1.2. Caracterizarea liganzilor obținuți prin AE, spectroscopie RMN, IR și UV.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Adelina A. Andelescu, CS III - Dr. Sorin Marinescu, CS III - Drd. Evelyn Popa, AsC <u>Personal auxiliar:</u> - Mihaela Poenaru, AC <u>Colaboratori externi:</u> - 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, Dr. Benoît Heinrich, Dr. Mircea Raștei, Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg
Faza 2 Trim.II	2.1. Obținerea de metalomesogeni luminescenți pe bază de metale d ⁶ , d ⁸ și d ¹⁰ cu liganzii de la punctul 1.1.	2.1.1. Sinteza combinațiilor complexe. 2.1.2 Caracterizarea structurală prin AE, spectroscopie RMN, IR și UV-Vis, conductivitate electrică molară.	
Faza 3 Trim.III	3.1. Determinarea proprietăților cristalin lichide ale combinațiilor complexe obținute la punctul 2.1.	3.1.1. Caracterizare prin microscopie optică cu polarizare (POM). 3.1.2. Determinarea stabilității termice (DSC și TGA). 3.1.3. Caracterizarea structurală prin metode difractometrice (PXRD).	
Faza 4 Trim.IV	4.1. Determinarea proprietăților optice ale combinațiilor complexe obținute la punctul 2.1. 4.2 Caracterizarea structurală și fotofizică a unor sisteme „soft” obținute prin solubilizarea unor combinații complexe ale metalelor din blocul d în fluide pe bază de surfactant.	4.1.1. Determinarea proprietăților fotofizice în solvenți organici. 4.1.2. Determinarea proprietăților fotofizice în diferite stări condensate	

			(IPCMS), CNRS-Université de Strasbourg, Strasbourg, Franța. - Dr. Zoltán Dudás, Dr. Adél Len, Wigner Research Centre for Physics, Neutron Spectroscopy Department, Budapest Neutron Centre, Ungaria. - Prof. Anca Silvestru, Prof. Vasile Chiș, Universitatea “Babes-Bolyai”, Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică, Cluj-Napoca.
Tema 4.1.3. Combinații complexe ale elementelor tranziționale conținând liganzi de tip baze Schiff cu potențiale proprietăți optice și electrochimice Coordonator: Dr. Otilia Costișor, 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 d⁹.	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, contraionul și solventul).	<u>Colectiv:</u> - Dr. Ildiko Buta, CS III <u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Simona Muntean, CSII – studiul proprietăților fotocatalitice - Dr. Sorina Ilieș, CS – studiul proprietăților electrochimice
Faza 2 Trim.II	2.1. Caracterizarea combinațiilor complexe obținute la punctul 1.2.	2.1.1. Caracterizarea prin AE, IR, UV-Vis și conductivitate electrică molară.	

	2.2. Obținerea de combinații complexe heteronucleare 3d-4f.	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.	<u>Colaboratori externi:</u> - Dr. Sergiu Shova, Institutul de Chimie Macromoleculară “Petru Poni”, Iasi
Faza 3 Trim.III	3.1. Caracterizarea 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.	- Prof. Marius Andruh, Universitatea din București, Facultatea de Chimie - Prof. Florica Manea, Universitatea Politehnica, Facultatea de Chimie Industrială și Ingineria Mediului, Timișoara
	3.2. Studiul proprietăților fotocatalitice ale combinațiilor complexe obținute la punctele 1.2. și 2.2. în procesul degradării coloranților din soluții apoase.	3.2.1. Evaluarea parametrilor: - timpului de iradiere - cantității de catalizator - concentrației inițiale a soluțiilor de colorant.	
Faza 4 Trim.IV	4.1. Studiul proprietăților electrochimice ale combinațiilor complexe obținute.	4.1.1. Studii de voltametrie ciclică. 4.1.2. Influența parametrilor electrochimici.	
Tema 4.1.4. Dezvoltarea unor metode de determinare electrochimice a unor produse farmaceutice și compuși biologic activi utilizând materiale de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat. Coordonator: Dr. Sorina Ilieș, CS III			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1. Obținerea unor materiale de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat.	1.1.1. Obținerea materialelor de electrod de tip pastă pe bază de carbon nanostructurat (CNT, CNF, fullerenă, graphenă) 1.1.2. Studiul influenței compoziției raportului masic al compușilor pe bază de carbon asupra	<u>Colectiv:</u> - Ing. Alexandru Vișan, AsC

		stabilității materialului de electrod. 1.1.3. Modificarea materialelor de electrod pe bază de carbon nanostructurat cu cristale lichide/ metalomesogeni pe bază de metale tranziționale.	<u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Carmen Crețu, CS III – obținerea materialelor de electrod - Dr. Adelina Andelesc, CS III - sinteza de metalomesogeni
Faza 2 Trim.II	2.1. Caracterizarea morfostructurală și electrochimică a materialelor de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat.	2.1.1. Caracterizarea morfostructurală a materialelor de electrod prin SEM/ EDAX, FTIR, RX. 2.1.2. Caracterizarea electrochimică a materialelor de electrod: -determinarea ariei suprafeței electroactive prin metoda clasică ferri/ferrocianură;determinarea caracteristicilor electrochimice specifice aplicațiilor electroanalitice (fereastra de potențial, curent de fond, caracteristici de rețele de micro/ nanoelectrozi). 2.1.3. Teste preliminare de detecție voltametrică a unor analiți țintă din clasa produșilor farmaceutici și a compușilor biologic activi.	<u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Florica Manea, Prof. Rodica Pode, ȘL Aniela Pop, CS III Anamaria Baci, Universitatea “Politehnica”- Timișoara, Facultatea de Chimie și Ingineria Mediului.
Faza 3 Trim.III	3.1 Dezvoltarea metodelor de detecție electrochimică individuală a analiților țintă (ex. ibuprofen, citostatice, glucoză, acid uric, acid ascorbic).	3.1.1. Detecția voltametrică a analiților țintă prin CV, DPV, SWV. Determinarea parametrilor electroanalitici (sensibilitate, limită de detecție). 3.1.2. Detecția amperometrică a analiților țintă prin CA și MPA. Determinarea parametrilor electroanalitici (sensibilitate, limită de detecție). 3.1.3. Stabilirea interferențelor; Determinarea reproductibilității și a acurateții metodei; Aplicarea metodelor propuse pentru probe reale (produse farmaceutice, ser fiziologic, urină).	

Faza 4 Trim.IV	4.1. Dezvoltarea metodelor de detecție electrochimică simultană/ selectivă a analiților	4.1.1. Detecția electrochimică simultană/ selectivă a produselor farmaceutice. Stabilirea condițiilor (tehnică, condiții de operare) pentru detecția simultană sau selectivă.	
	țintă (ex. ibuprofen, citostatice, glucoză, acid uric, acid ascorbic).	4.1.2. Detecția electrochimică simultană/ selectivă a compușilor biologic activi. Stabilirea condițiilor (tehnică, condiții de operare) pentru detecția simultană sau selectivă.	

Subprogramul 4.2. Sisteme multicomponente cu proprietăți optice, magnetice și farmaceutice speciale.

Responsabil: Dr. Ana-Maria Putz, CS II

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: Dr. Ana-Maria Putz, CS II

Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1. Sinteza sol-gel și caracterizarea unor materiale de silice funcționalizată 1.2. Obținerea materialelor poroase pe bază de carbon din deșeuri vegetale	1.1.1. Sinteza în prezența unor agenți de direcționare: cationici și lichide ionice. 1.1.2. Funcționalizarea cu diferite grupări organice folosind metodele: co-condensării și cea de post grefare. 1.1.3. Caracterizarea fizico-chimică și selectarea unor materiale în vederea testării pentru diferite aplicații.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Cătălin Ianăși, CS III - Dr. Roxana Nicola, AsC <u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Carmen Crețu, CS III – sinteza de combinații complexe de tip MOF
Faza 2 Trim.II	2.1. Sinteza și caracterizarea unor nanocompozite de oxid de fier-silice	2.1.1. Sinteza materialelor cu varierea metodelor, prin agitare mecanică sau	

	funcționalizată	ultrasonicare. 2.1.2. Caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute prin: IR, UV-VIS, TEM,	<u>Colaboratori externi:</u> - Dr. László Almásy, Dr. Zoltán Dudás și Dr. Adél Len, Academia Ungară de Științe, Centrul de Neutroni Budapesta, Ungaria; - Dr. Alfonso Policicchio și Giuseppe Conte, Departamentul de Fizică, Universitatea din Calabria, Italia; - Prof. József Kalmár și Conf. Petra Herman, Facultatea de Științe și Tehnologie, Departamentul de Chimie Anorganică și Analitică, Universitatea din Debrecen, Ungaria.
		BET, difracție de raze X, SANS, SAXS și selectarea unor materiale în vederea testării pentru diferite aplicații.	
Faza 3 Trim.III	3.1. Testarea unor materiale selectate pentru diferite aplicații	3.1.1. Testarea unor materiale selectate pentru încărcarea și eliberarea controlată de medicamente. 3.1.2. Testarea unor materiale selectate pentru capacitatea de încărcare cu hidrogen. 3.1.3. Testarea unor materiale selectate pentru adsorbția unor ioni ai metalelor grele din soluții apoase. 3.1.4 Testarea unor materiale reciclabile pentru îmbunătățirea proprietăților reologice a bitumului îmbătrânit.	
Faza 4 Trim.IV	4.1.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. Sinteza de materiale policristaline de tip ZrMOFs, prin metoda hidro/ solvotermală.	4.1.1. Sintetizarea de materiale policristaline de tip Zr-MOF. 4.1.2. Sinteza de materiale de tip ZnMOFs prin metoda activării în câmp ultrasonor. 4.1.3. Sinteza de materiale hibride de tip Zn/ZrMOF.	- Dr. Cesare Oliviero Rossi: University of Calabria, Department of Chemistry and Chemical Technologies, Italia

Subprogramul 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 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) 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	1.1.1. Sinteza sitelor moleculare (MCM-48, KIT 6, MCM-41) 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 atomica in flacara. 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 Me_xH_3-	<u>Colectiv:</u> - Dr. Orsina Verdeș, CS III - Dr. Silvana Borcănescu, CS - Dr. Mariana Suba, CS <u>Colaboratori externi:</u> - Conf. Paul Barvinschi - Facultatea de Fizica, Universitatea de Vest Timisoara - Dr. Radu Banica, Dr. Daniel Ursu - Institutul National de Cercetare Dezvoltare pentru Electrochimie si Materie Condensata-INCEMC-Timisoara - Conf. Dr. Snezana Uskoković–Marković - Facultatea de Farmacie,

	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 $\text{Me}/\text{SBA-15}$ respectiv $\text{Me}/\text{KIT-6}$ prin impregnare ($\text{Me} = \text{Ni}, \text{Ce}, \text{Cu}, \text{Au}, \text{Mg}$).	$x[\text{PW}_{12}\text{O}_{40}]$ unde $\text{Me} = \text{Ag}$, iar $x = 0.5 - 3$, și depunerea lor in grade diferite de acoperire pe carbune activ si respectiv zeoliti (ex: BEA, ZSM-5). Utilizarea acestor HPA la reactia de conversie a etanolului in scopul obtinerii unor selectivitati ridicate in etena/acetaldehida. 1.3.2. Sinteza heteropolicompusilor de tipul $\text{H}_3\text{-}_x\text{Cs}_x\text{PW}$ ($x=0, 1, 2, 2.25, 2.5$ 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 $\text{Me}/\text{SBA-15}$ respectiv $\text{Me}/\text{KIT-6}$ prin impregnare ($\text{Me} = \text{Ni}, \text{Ce}, \text{Cu}, \text{Au}, \text{Mg}$).	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	2.1. Caracterizarea fizico-chimică a compozitelor de silice grefate cu amine si a HPAs puri si depuși pe suport prin diferite metode de analiza texturala si structurala	2.1.1. Determinarea proprietatilor texturale a compozitelor de silice grefate cu amine si a heteropolioxometalatilor preparati prin masuratori de suprafata specifica si porozitate prin metoda BET-BJH. 2.2.2 Caracterizarea structurala a compozitelor de silice grefate cu amine si a heteropolioxometalatilor depuși pe site moleculare prin: spectroscopie IR si Raman, analiza termica cuplata cu MS, analiza difractometrica la unghiuri mici, microscopie electronica SEM-EDS si 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.	3.1.1. Masuratori de cicluri de adsorbție-desorbție programată termic-TPD a CO_2 pe compușii sintetizați cu metoda adaptată pentru	

	3.2. Stabilirea condițiilor optime de reacție prin teste de activitate catalitică.	analiza TG-DTA cuplata cu spectrometria de masa. 3.2.1. Teste de activitate catalitica cu modificarea conditiilor de lucru pentru stabilirea temperaturii optime in vederea obtinerii 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.	