



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 2024

PREZENTARE SINTETICĂ

PROGRAME DE CERCETARE

Programul de cercetare 1. Cheminformatică și alte metode de chimie computațională.

Programul de cercetare 2. Compuși multifuncționali organici și polimerici - cu proprietăți dirijate și aplicații în protecția mediului și dezvoltare durabilă.

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

Programul de cercetare 4. Compuși nanostructurați cu relevanță în știința materialelor: biochimie, cataliză sau protecția mediului.

PROIECTE DE CERCETARE

Proiectul 1.1. Utilizarea și dezvoltarea de metode in silico în studiul compușilor cu activitate biologică - o abordare multidisciplinară.

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

Proiectul 2.2. Compuși multifuncționali - cu proprietăți dirijate și aplicații în protecția mediului.

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

Proiectul 4.1 Combinații complexe ale metalelor din blocul d generatoare de sisteme funcționale supramoleculare avansate.

Proiectul 4.2 Compuși multifuncționali organici - anorganici cu aplicații biologice.

Proiectul 4.3. Compuși cu activitate catalitică ridicată pentru reacții de transformare a substanțelor obținute din surse regenerabile în intermediari organici și pentru reacții de distrugere a unor poluanți din mediul înconjurător.



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



PROGRAMUL DE CERCETARE 1

CHEMINFORMATICĂ ȘI ALTE METODE DE CHIMIE COMPUTAȚIONALĂ

***Coordonator:* Dr. Chim. Ramona CURPĂN, CS II**

Programul de cercetare 1 cuprinde un număr de **8** cercetători din care **3** CS II, **4** CS III, **1** CS și personal auxiliar **1** Cdate I.

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

Responsabil: Dr. Ramona Curpăn, CS II

Tema 1.1.1. 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. Scrierea codului de citire a compușilor și standardizare	1.1. Explorarea bibliotecii EPAM-Indigo Java API 1.2. Scrierea codului Java de citire a bibliotecii de compuși 1.3. Scrierea codului pentru standardizarea de rutina a compușilor	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Liliana Halip,CS III Dr. Ana Borota, CS III <u>Colaboratori externi:</u> Prof. Tudor Oprea - University of New Mexico, USA
Faza 2 Trim II	2. Dezvoltarea algoritmului de enumerare a tautomerilor	2.1 Implementarea codului de enumerare a tautomerilor 2.2 Stabilirea de reguli pentru eliminarea duplicatelor 2.3 Verificarea rezultatelor cu date din literatura	
Faza 3 Trim III	3. Dezvoltarea algoritmului de enumerare speciilor ionice	3.1 Scrierea codului Java de ionizare 3.2 Explorarea modelelor de pKa din biblioteca EPAM-Indigo 3.3 Fitarea funcțiilor de probabilitate pentru estimarea speciei majoritare la pH 7.4	
Faza 4 Trim IV	3. Utilizarea programului într-un studiu translațional	4.1. Asamblarea codului și compilarea într-un program 4.2. Optimizare și testare 4.3. Implementarea programului pentru predicția interacțiunilor medicament-țintă terapeutică	
Tema 1.1.2. 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. Dezvoltarea profilului fizico-chimic și de activitate pentru inhibitorii inhibitorii izoformelor 1 și 2 ale kinazelor Janus	1.1. Studiu de literatură pentru a identifica compuși cu activitate cunoscută împotriva izoformei 1 a kinazelor Janus 1.2. Studiu de literatură pentru a identifica compuși cu activitate cunoscută împotriva izoformei 2 a kinazelor Janus 1.3. Generarea descriptorilor fizico-chimici 1.4. Estimarea proprietăților ADMET	<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. Identificarea diferențelor principale în structurile moleculare ale izoformelor 1 si 2 de kinaze Janus	2.1. Obținerea structurilor experimentale disponibile pentru izoformele 1 și 2 ale kinazelor Janus. 2.2. Compararea secvențială între cele două izoforme pentru a identifica similaritățile și diferențele semnificative. 2.3. Determinarea regiunilor cu variații structurale. 2.4. Analiza impactului acestor variații în modelele tridimensionale.	
Faza 3 Trim III	3. Analiza situsurilor de legare active pentru kinazele Janus	3.1. Identificarea situsurilor de legare primare. 3.2. Identificarea aminoacizilor implicați în legarea inhibitorilor. 3.3. Identificarea aminoacizilor specifici care prezintă diferențe între legarea inhibitorilor izoformelor 1 și 2 de kinaze Janus. 3.4. Evaluarea impactului acestor diferențe asupra potențialelor interacțiuni cu noi inhibitori.	
Faza 4 Trim IV	4. Estimarea scorului de probabilitate de inhibitor selectiv al	4.1 Descărcarea medicamentelor aprobate din DrugCentral. 4.2 Calcularea descriptorilor fizico-chimici.	

	izoformelor 1 sau 2 de kinaze Janus pentru un set de medicamente	4.3 Generarea profilului ADMET. 4.4. Estimarea unui scor de probabilitate ca inhibitori ale izoformelor 1 sau 2 de kinaze Janus	
Tema 1.1.3. 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 <i>in silico</i> a medicamentelor aprobate/experimentale/ investigaționale în vederea repoziționării	1.1. Studiul de literatură și descărcarea medicamentelor din diferite baze de date care conțin medicamente aprobate /experimentale / investigaționale conform FDA/EMA/PMDA. 1.2. Stabilirea criteriilor de selecție pentru medicamentele descărcate din bazele de date.	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Luminița Crișan, CS III 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 medicamente antivirale, antidiabetice, antiinflamatoare repoziționate	2.1. Asamblarea unor seturi care conțin medicamente aprobate /repoziționate cu structuri unice, cu accent pe medicamentele antivirale, antidiabetice și antiinflamatoare. 2.2. Identificarea și extragerea din PDB a structurilor receptorilor asociate cu medicamentele identificate. 2.3. Identificarea și analizarea situsului de legare pentru fiecare receptor identificat.	<u>Colaboratori interni:</u> Dr. Manuela Crișan, CS II Dr. Daniela Haidu, CS <u>Colaboratori externi:</u> Dr. Sorin Tunaru, Institutul de Biochimie al Academiei Române
Faza 3 Trim III	3. Identificarea de compuși naturali cu proprietăți fizico-chimice și farmacocinetice superioare pornind de la medicamentele identificate în Fazele 1 și 2	3.1. Dezvoltarea și implementarea unor programe /scripturi în C/C++/ Perl pentru extragerea automată, cuantificarea și clasificarea compușilor naturali în funcție de proprietățile asemănătoare cu cele ale medicamentelor.	

Faza 4 Trim IV	4. Identificarea informațiilor moleculare relevante ale compușilor chimici identificați în Fazele 1-3	4.1. Analiza componentelor principale (PCA) prin proiectarea datelor cu dimensiuni mari într-un spațiu cu dimensiuni reduse, bazată pe descriptori de tip amprenta moleculară, fizico-chimici etc. 4.2. Analiza compușilor selectați prin comparație cu structurile șablon, identificarea informațiilor moleculare relevante și divizarea lor în potențiali adjuvanți antivirali, antidiabetici, și antiinflamatori. 4.3. Diseminarea rezultatelor	
-------------------	---	--	--

Tema 1.1.4. Profilul de selectivitate al inhibitorilor kinazelor din familia TEC

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 ai BTK, BMX, ITK, TXK, TEC, incluși în bazele de date ChEMBL și Drug Central.	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Sorin Avram, CS II Dr. Alina Bora, CS II <u>Colaboratori externi:</u> Dr. Costin Ioan Popescu Institutul de Biochimie al Academiei Romane
Faza 2 Trim II	2. Evaluarea selectivității inhibitorilor BTK, BMX, ITK, TXK, TEC	1.2. Clasificarea lor în funcție de modul de interacțiune (noncovalent/covalent), grupele de atac reactive și de scheletele moleculare (Bemis-Murko frameworks). 2.1. Actualizarea criteriilor de selectivitate 2.2. Identificarea structurilor selective și neselective ale inhibitorilor. 2.3. Calculul descriptorilor cuantito-chimici moleculari și corelarea lor cu afinitatea/selectivitatea.	
Faza 3 Trim III	3. Proiectarea unor schelete moleculare cu potențială afinitate crescută față de proteinele țintă	3.1 Selectarea scheletelor moleculare selective 3.2 Optimizarea structurală cu ajutorul metodelor bazate pe ligand și pe structură.	
Faza 4 Trim IV	4. Optimizarea computațională a afinității inhibitorilor proiectați	4.1. Optimizarea reactivității grupelor funcționale. 4.2. Optimizarea structurală moleculară.	

Faza 1 Trim I	1. Actualizarea bazei de date de inhibitori covalenti	1.1. Investigarea spațiului chimic al inhibitorilor covalenti ai BTK, BMX, ITK, TXK, TEC, incluși în bazele de date ChEMBL si Drug Central. 1.2. Clasificarea lor în funcție de modul de interacțiune (noncovalent/covalent), grupele de atac reactive și de scheletele moleculare (Bemis-Murko frameworks).	
Tema 1.1.5. Explorarea spatiului chimic pentru identificarea de modulatori activi pe diferite clase de receptori Coordonator: Dr. Ramona Curpăn, CS II			
Faza 1 Trim I	1. Identificarea compusilor activi și inactivi pe receptorul ERα si izoformele mutante	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. 1.1. Analizarea și prelucrarea datelor: îndepărtarea structurilor duplicate, standardizarea datelor de activitate biologică.	<i>Colectiv de cercetare:</i> Dr. Liliana Halip, CSIII Dr. Ana Borota, CSIII <i>Personal auxiliar</i> Poenaru Ana, Cdate I <i>Colaboratori externi:</i> - Prof. Dr. Craig Jordan, - Dr. Philipp Maximov University of Texas MD Anderson Cancer Center, USA
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.	
Faza 3 Trim III	3. Dezvoltarea de modele 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 parametrii de evaluare.	
Faza 4	4. Evaluarea și validarea modelelor	4.1. Evaluare într-un experiment de virtual screening.	

Trim IV	de predicție	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 1.1.6. 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. Elucidarea interacțiunilor ligand-enzima AHAS prin andocare moleculară	1.1. Alegerea speciilor de buruieni rezistente pentru studiu. 1.2. Andocarea moleculară cu ajutorul programelor Glide si QSite a erbicidelor în enzima AHAS susceptibilă. 1.3. Andocarea moleculară cu ajutorul programelor Glide si QSite a erbicidelor în enzima AHAS rezistentă. 1.4. Evidențierea diferențială a interacțiunilor din situsul de legare.	<i>Colectiv de cercetare:</i> Dr. Avram Sorin, CSII Dr. Liliana Halip, CSIII
Faza 2 Trim II	2. Studii de dinamică moleculară pentru enzimă AHAS nativă/mutantă	2.1. Alegerea și pregătirea conformației potrivite a complexului ligand-receptor pentru dinamică moleculară. 2.2. Rularea simulărilor de dinamică moleculară. 2.3. Analiza și interpretarea rezultatelor.	
Faza 3 Trim III	3. Analiza traiectoriilor și calculul energiei libere de legare	3.1. Gruparea traiectoriilor similare pentru identificarea conformației preponderente. 3.2. Calculul afinității de legare a erbicidelor în conformațiile anterior obținute.	

Faza 4 Trim IV	4. Generarea modelelor farmacofore pentru virtual screening	4.1. Obținerea unor modele farmacofore pe baza rezultatelor de dinamică moleculară. 4.2. Folosirea modelelor farmacofore în experimente de virtual screening 4.3. Propunerea de noi compuși cu potențial erbicid care să preîntâmpine problema rezistenței.	
Tema 1.1.7. 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	1.1. Identificarea unor baze de date cu protein kinaze 1.2. Prelucrarea bazelor de date	<i>Colectiv de cercetare:</i> Dr. Sorin Avram, CSII Dr. Liliana Halip, CSIII
Faza 2 Trim II	2. Evaluarea indicelui BFIs (B-factor index for the binding site) pe un set de protein kinaze	2.1. Evaluarea unor baze de date cu protein kinaze cu BFIs.. 2.2. Aplicarea unui algoritm de calcul al BFIs la bazele de date.	
Faza 3 Trim III	3. Optimizarea BFIs	3.1. Calculul BFIs pentru diferite dimensiuni ale situsului de legare. 3.2. Corelarea razelor cu performanța andocarii.	
Faza 4 Trim IV	4. Dezvoltarea aplicației “BFI in kinases”	4.1. Evaluare și remediere disfuncționalități aplicație 4.2. Adăugare funcții noi	



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



PROGRAMUL DE CERCETARE 2

COMPUȘI MULTIFUNCȚIONALI ORGANICI ȘI POLIMERICI - CU PROPRIETĂȚI DIRIJATE ȘI APLICAȚII ÎN PROTECȚIA MEDIULUI ȘI DEZVOLTARE DURABILĂ.

Coordonator: Dr. chim. Aurelia VISA, CS I

Programul de cercetare 2 cuprinde un numar de **10** cercetatori din care **2** CS I, **3** CS II, **1** CS III, **3** CS, **1** ACS și personal auxiliar **1** AC I.

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

1. *Rețele Metal Organice: de la Sinteza Verde la Aplicații 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: Dr. Aurelia VISA, CS I

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

Responsabil: Dr. Popa Adriana, CS I

Tema 2.1.1. Polimeri modificați chimic cu grupări pendante active conținând atomi de fosfor și/sau azot și oxigen. Coordonator: Dr. Popa Adriana, CS I			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim I	1. Aplicații și evaluarea polimerilor modificați cu grupări pendante ce conțin heteroatomi (P, N, O).	1.1. Funcționalizarea prin reacția în catalizator cu transfer interfazic a copolimerului stiren-divinilbenzen (St-12%DVB) cu grupări active de tip hidroxifenil-aminoacid. 1.2. Studiu de literatură referitor la procesul de adsorbție a medicamentelor din ape reziduale pe suporturi polimerice (ex.St-DVB) cu grupări ce conțin heteroatomi (P, N). Redactare lucrări.	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Nicoleta Plesu, CSII Dr. Milica Tara-Lunga Mihali, CS <u>Colaboratori interni:</u> Dr. Visa Aurelia, CSI <u>Colaboratori externi:</u> Dr. Mercedes Diaz Somoano, Instituto Nacional del Carbon - CSIC, Oviedo, Spania
Faza 2 Trim II	2. Elaborarea de noi materiale privind modificarea chimică a grupărilor pendante prin metoda mecano-chimică/ultrasonare.	2.1. Reacția de impregnare chimică a chitosanului cu grupări pendante cu conținut de azot. 2.2. Caracterizarea structurală și morfologică a probelor cu chitosan impregnate cu grupări active.	
Faza 3 Trim III	3. Evaluarea materialelor polimerice funcționalizate cu grupări pendante/active conținând heteroatomi.	3.1. Investigarea caracteristicilor fizico-chimice a copolimerilor de tip acrilonitril-divinilbenzen (AN-DVB) modificați chimic cu grupări active de tip aminofosfonat. 3.2. Evidențierea preliminară a efectului antibacterian pentru copolimeri de tip acrilonitril-divinilbenzen (AN-DVB) cu grupări active cu fosfor.	

Faza 4 Trim IV	4. Analiza materialelor polimerice grefate cu grupari pendante/active continand atomi de azot.	4.1.Caracterizarea copolimerilor acrilonitril-10%(15%) divinilbenzen in vederea retinerii poluantilor din ape reziduale. 4.2. Actualizarea referintelor/datelor privind potentialele aplicatii in protectia mediului. 4.3. Redactare lucrari.	
Tema 2.1.2. Compozite polimerice cu posibilități de utilizare ca senzori și electrozi modificați. Metode electrochimice aplicate în caracterizarea interfeței materialelor și a filmelor nanocompozite. Reciclarea deșeurilor. Coordonator: Dr. Plesu Nicoleta, CS II			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1 Trim I	1. Compozite polimerice pe baza de PANI pentru retinere de coloranti. Obținere si caracterizare. Reciclarea deseurilor.	1.1. Prepararea compozitelor polimerice de polianiline (PANI) pentru retinere coloranti. 1.2 Caracterizarea compozitelor pe baza de PANI obtinute, prin voltametrie ciclica (CV) si spectroscopie de impedanta (EIS). 1.3. Studiul de literatura referitor la metodele de indepartare a grasimilor din apele reziduale menajere.	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Milica Tara-Lunga Mihali, CS Dr. Adriana Popa, CSI <u>Colaboratori interni:</u> Dr. Aurelia Visa, CSI Dr. Manuela Crisan, CSII Dr. Luminita Crisan, CSIII Dr. Liliana Halip, CSIII <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Konstaninos Demadis -Universitatea din Creta, Grecia - Dr. Dorin Jurcau - SC. Elkim SRL, Timisoara
Faza 2 Trim II	2. Investigarea proprietatilor de retinere a colorantilor. Reciclarea deseurilor. Obținerea de pelicule protectoare pentru lemn.	2.1. Studiul experimental referitor la capacitatea de retinerea a compozitelor preparate. 2.2.Modelarea datelor experimentale. 2.3. Studiul adsorbției de grasimi pe compozitele PANI/Dye.	
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 calculului computazionale. 3.2. Interpretarea datelor de adsorbției 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.
-------------------	---	---

Proiectul 2.2: Compuși multifuncționali - cu proprietăți dirijate și aplicații în protecția mediului.

Responsabil: Dr. chim. Aurelia Visa, CS I

Tema 2.2.1 Sinteza de rețele metal organice și proprietățile acestora Coordonator: Dr. Aurelia Visa, CS I			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim. I	1. Sinteze de rețele metal organice carboxilice sau fosfono-carboxilice	1.1. Sinteza rețelelor 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 de cercetare:</u> Dr. Simona Muntean, CS II Dr. Andreea Nistor, CS Chim. Marcela Iosivoni, AcS
Faza 2, Trim. II	2. Caracterizarea rețelelor 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. Luminita Crisan, CS III Dr. Adriana Popa, CS I

Faza 3, Trim. III	3. Sinteze de rețele metal organice carboxilice	3.1. Sinteze de rețele metal organice în condiții hidrotermale folosind săruri de metale bivalente. 3.2. Studiul influenței factorilor fizico-chimici. 3.3. Caracterizarea compusilor sintetizați prin TG, FT-IR și difracție de raze X.	<u>Colaboratori externi:</u> -Prof. Fabio Arico Universitatea Ca' Foscari, Venetia, Italia -Prof. dr. Aurelio Cabeza, Universitatea din Malaga - Prof. Dr. Konstantinos Demadis, Universitatea din Creta, Grecia
Faza 4 Trim. IV	4. Studiul aplicațiilor rețelelor metal organice sintetizate	4.1. Analiza corelației dintre parametrii de sinteză și morfologia compusilor. 4.2. Identificarea factorilor ce influențează aplicațiile compusilor sintetizați. 4.3. Investigarea proprietăților catalitice și/sau antimicrobiene ale compusilor sintetizați.	
Tema 2.2.2. Metodologii pentru combaterea poluării cu compuși azo și metale grele. Aplicații în protecția mediului. Coordonator: Dr. Muntean Simona Gabriela, CS II			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1, Trim. I	1. Studiul adsorbției coloranților folosind nanocompozite magnetita/carbon.	1.1. Optimizarea adsorbției de coloranți pe nanocompozite magnetice utilizând modelare asuprafetei de răspuns. 1.2. Optimizarea modelării pentru maximizarea capacității de adsorbție a nanocompozitelor magnetita/carbon. 1.3. Elucidarea mecanismului procesului de adsorbție.	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Andreea Nistor, CS Dr. Aurelia Visa, CS I <u>Colaboratori interni:</u> Dr. Roxana Nicola, CS Dr. Liliana Halip, CS III Dr. Ildiko Buta, CS III
Faza 2, Trim. II	2. Degradarea fotocatalitică a coloranților utilizând combinații complexe ale unor elemente 3d cu liganzi de tip baze Schiff.	2.1. Analiza comparativă a performanțelor combinațiilor complexe în procesul de fotodegradare a coloranților. 2.2. Influența variabilelor procesului de fotodegradare.	<u>Colaboratori externi:</u> Prof. Dr. Robert Ianos, Universitatea Politehnica Timșioara

		2.3. Modelarea cinetica a fotodegradarii colorantilor.	
Faza 3, Trim. III	3. Aplicarea retelelor metal organice fosfonice (MOF) pentru indepartarea colorantilor din solutii apoase	3.1. Analiza comparativa a performantelor MOF aplicate pentru adsorbtia si degradarea colorantilor. 3.2. Influenta variabilelor procesului de adsorbtie a colorantilor din solutii apoase. 3.3. Influenta variabilelor procesului de fotodegradare a colorantilor din solutii apoase.	
Faza 1, Trim. IV	4. Studiul fotodegradarii colorantilor industriali utilizand oxizi de fier si oxizi de fier dopati.	4.1. Analiza comparativa a performantelor oxizilor de fier si a oxizilor de fier dopati, aplicati pentru degradarea colorantilor. 4.2. Studiul influentei pH-ului solutiei asupra randamentului de fotodegradare a colorantilor. 4.3. Studiul influentei concentratiei asupra randamentului de fotodegradare a colorantilor.	
Tema 2.2.3. Compuși cu funcțiune azo și combinații 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 proprietăților electrochimice ale azo-coloranților studiați.	1.1. Studiul stabilitatii fata de procesele de oxidare/reducere, prin intermediul metodei electrochimice de voltametrie ciclica ale a azo colorantilor sintetizati.	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Ing. Maria Elena Rădulescu-Grad, CSIII

Faza 2 Trim. II	2.Studiul proprietăților optice și de culoare ale coloranților și ale azo complecșilor sintetizați	2.1.Studiul proprietatilor optice si de culoare ale colorantilor sintetizati. 2.2. Studiul proprietatilor optice si de culoare ale azo complecsilor sintetizati.	<u>Colaboratori externi:</u> Prof. Günter Faflek, University of Technology, Faculty of Technical Chemistry, Institute of Chemical Technologies and Analytics, Viena, Austria
Faza 3 Trim. III	3.Studii privind sinteza de noi compuși cu funcțiune azo	3.1.Obținerea 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 complecși azo- metalici	4.1.Obținerea 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 moleculare organice si hibride cu proprietati specifice Coordonator: dr. Manuela Crisan, CSII			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim. I	1. Obținerea de noi sisteme organice multicomponent cu diverse arhitecturi supramoleculare si proprietati dirijate	1.1 Determinarea conditiilor optime de reactie in diferite metode utilizate 1.2 Obținerea de monocristale pentru studiul cu raze X 1.3Identificarea posibilelor forme polimorfe	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Daniela Haidu, CS

Faza 2, Trim. II	2. Caracterizarea fizico-chimica si structurala a compusilor sintetizati la O1	2.1 Identificarea si caracterizarea compusilor prin metode spectrometrice si analiza termica (TG, TGA, DTA, DSC). 2.2. Stabilirea structurii atomice qi cristaline cu ajutorul razelor X 2.3 Investigarea interactiunilor generate.	<u>Colaboratori externi:</u> - Prof. dr. Pavlina Bouros, dr. Lilia Croitor, Prof. dr. Yurii Chumakov, Institutul de Fizica Aplicata, Chisinau, Republica Moldova -Dr. Olga Danilescu, Institutul de Chimie, Chisinau, Republica Moldova - Prof. univ. dr. Radu Sumalan, USAMVB - Prof. dr. habil. Roxana Popescu, Universitatea de Medicina si Farmacie “V. Babes” Timisoara, -Conf. dr. Nicoleta Caraba, Universitatea de Vest din Timisoara, - Conf. dr. Ioana Baldea, Universitatea de Medicina si Farmacie “Iuliu Hatieganu” Cluj-Napoca, -Prof. Dr. habil. Corina Danciu, Universitatea de Medicina si Farmacie “V. Babes” Timisoara
Faza 3, Trim. III	3. Obtinerea de noi compusi organo-metalici cu liganzi ce contin atomi donori (N, O)	3.1 Determinarea conditiilor optime de reactie in diferite metode utilizate 3.2 Obtinerea de monocristale pentru studiul cu raze X 3.3 Caracterizarea fizico-chimica si structurala a compusilor obtinuti	
Faza 4, Trim. IV	4. Investigarea proprietatilor compusilor obtinuti	4.1 Studiul proprietatilor fotoluminescente 4.2 Studiul proprietatilor antimicrobiene 4.2 Evaluarea activitatilor anticanceroase /antiinflamatoare 4.4 Studiul relatiei structura-proprietati utilizand tehnicile disponibile si colaborarea nationala/internationala	



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



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

Proiectul 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. 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, A ₂ B ₂ 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/atrăgător 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 clasice sau PLD și LB. Caracterizare SEM/EDAX, TEM.	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Eugenia Făgădar-Cosma, CSI Dr. Anca Lascu, CSIII Dr. Ionela Frîngu, CS Drd. Camelia Epuran, AsC Drd. Ion Frățilescu, AsC Chim. Diana Anghel, AsC <u>Colaborări internaționale:</u> - Dr. Erika Kozma, Istituto per lo Studio delle Macromolecole (ISMAC), Consiglio Nazionale delle Ricerche, Milano, -The Fundació Institut Català d'Investigació Química, Spain
Faza 2 Trim II, III	2. Obținerea complexilor porfirinelor cu metale tranziționale	2.1. Sinteza combinațiilor complexe cu metale (II-III) utilizând liganzii porfirinici nou obținuți. Caracterizare complexă.	
Faza 3 Trim III	3. Obținerea micro și nano-materialelor fotochimic active prin imobilizarea porfirinelor pe matrici anorganice și/sau polimerice	3.1. Caracterizarea prin tehnici microscopice (SEM, TEM, AFM), spectroscopice: UV-viz, FT-IR, și fluorescență si texturale/ morfologice BET 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 Timișoara
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 electrocatalitice ale porfirinelor în reacții de descompunere a apei 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/fluorimetrice pentru metale grele, medicamente sau analiți cu relevanță medicală. 6.1. Studii electrochimice (CV, măsurarea suprafeței active) 6.2. Realizarea de electrozi pentru HER. 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 metalare cu mangan a porfirinelor. Materiale hibride poroase pe bază de porfirine. Complecși coloidali ai porfirinelor cu Ag/Au/PtNPs. Identificarea de aplicații în stocarea de gaze, procese de adsorbție/decolorare și senzorială. Coordonator: Dr. Anca Lascu, CS III			
Faza	Obiective	Activități	Cercetători

Faza 1 Trim I, II, III	1. 1.Reacții de metalare cu mangan a porfirinelor 2.Complecși coloidal ai derivaților porfirinici cu Ag/Au/PtNPs.	1.1 Sinteza și separarea pe coloana cromatografică a Mn-porfirinelor 1.2. Sinteza complexilor coloidal ai derivaților porfirinici cu Ag/Au/PtNPs.	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Anca Lascu, CSIII Dr. Eugenia Făgădar-Cosma, CSI Dr. Ionela Frîngu, CS Drd. Camelia Epuran, AsC Drd. Ion Frățilescu, AsC Chim. Diana Anghel, AsC
Faza 2 Trim II, III	3. Caracterizarea fizico-chimică a derivaților porfirinici obținuți	3.1. Caracterizarea prin spectroscopie UV-viz, fluorimetrie, FT-IR, RMN, HPLC și TLC a compușilor porfirinici obținuți 3.2. Analiza microscopică a morfologiei suprafețelor, după depunere pe diferite substraturi, din solvenți cu polaritate diferită	
Faza 3 Trim III	4. Obținerea micro și nano-materialelor poroase și fotochimic active prin imobilizarea Mn-porfirinelor pe matrici de silice și/sau polimerice	4.1. Imobilizarea Mn-metaloporfirinelor pe matrici anorganice de tip silice și/sau polimerice 4.2. Caracterizarea prin tehnici microscopice (SEM, TEM, AFM, tomografie), analiză termică, UV-viz, FT-IR, BET și fluorescență a materialelor hibride obținute.	<u>Colaborări interne:</u> - Institutul Național de Electrochimie și Materie Condensată Universitatea de Vest Timișoara
Faza 4,5 Trim IV	5. Demonstrarea capacității de detecție sau adsorbție a porfirinelor comparativ cu a nanomaterialelor realizate 6. Acțiuni de diseminare. Redactare lucrări-pagini web, patente	5.1.Testări ale proprietăților de recunoaștere/detecție (analizi farmaceutici) sau adsorbție (medicamente, gaze, coloranți) ale nanomaterialelor pe bază de Mn-metaloporfirine 6.1. Minim 2 lucrări ISI; participare conferințe internaționale și naționale.	<u>Colaborări internaționale:</u> - Dr. Erika Kozma, Istituto per lo Studio delle Macromolecole - CNR, Milano



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



PROGRAMUL DE CERCETARE 4

COMPUȘI NANOSTRUCTURAȚI CU RELEVANȚĂ ÎN ȘTIINȚA MATERIALELOR: BIOCHIMIE, CATALIZĂ SAU PROTECȚIA MEDIULUI

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: 3, Drd. Bogdan Ionut MARA, AsC, *Conducător doctorat:* Dr. Liliana CSEH
Drd. Evelyn POPA, AsC, *Conducător doctorat:* Dr. Elisabeta SZERB
Drd. Alexandru VIȘAN, AsC, *Conducător doctorat:* Dr. Elisabeta SZERB

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

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: Dr. Adelina-Antonia ANDELESCU, CS III

Proiectul 4.1: Combinații complexe ale metalelor din blocul *d* generatoare de sisteme funcționale supramoleculare avansate.

Responsabil: Dr. Otilia Costișor, CS I

Tema 4.1.1. Sisteme supramoleculare cu proprietăți optice pe bază de combinații complexe ale metalelor din blocul d Coordonator: Dr. Carmen Cretu, CS III			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1. Sinteza unor liganzi premesogenici bi/tridentați de tip N donori funcționalizați cu lanțuri alchilice lungi.	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><i>Colectiv de cercetare:</i></u> Dr. Elisabeta I. Szerb, CS I Dr. Sorin Marinescu, CS III Dr. Adelina Andelescu, CSIII Drd. Evelyn Popa, AsC Drd. Alexandru Visan, AsC <u><i>Personal auxiliar:</i></u> Tiberiu Balasz, AC1 Mihaela-Marilena Mudura, AC <u><i>Colaboratori externi:</i></u> - Prof. Alessandra Crispini, Dr. Cesare Oliviero Rossi, Dr. Massimo La Deda: University of Calabria, Department of
Faza 2 Trim.II	2.1. Obținerea de metalomesogeni hetero-bimetalici luminescenți pe bază de metale d^6 - d^{10} cu liganzii de la punctul 1.1.	2.1.1. Sinteza metalomesogenilor bimetalici. 2.1.2. Caracterizarea structurală prin AE și metode spectroscopice (RMN, IR și UV-Vis).	
Faza 3 Trim.III	3.1. Determinarea proprietăților cristalin lichide ale materialelor bimetalice 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 materialelor bimetalice obținute la punctul 2.1.	4.1.1. Determinarea proprietăților fotofizice în solvenți organici sau în stare solidă. 4.1.2. Determinarea proprietăților fotofizice în diferite stări condensate.	

			Chemistry and Chemical Technologies, Italia - Dr. Bertrand Donnio, Dr. Mircea Rastei, 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. - Prof. Anca Silvestru, Prof. CHIȘ Vasile, Universitatea "Babes-Bolyai", Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică, Cluj-Napoca.
Tema 4.1.2. Combinații complexe ale ionilor metalelor din blocul <i>d</i> conținând liganzi de tip baze Schiff cu proprietăți electrooptice și implicații în protecția mediului Coordonator: Dr. Otilia Costisor, CS I			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1. Obținerea unor liganzi polidentati de tip baze Schiff.	1.1 Stabilirea condițiilor optime de sinteză a liganzilor. 1.2 Sinteza liganzilor. 1.3 Caracterizarea prin AE, RMN și IR.	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Ildiko Buta, CS III

Faza 2 Trim.II	2. Obținerea de combinații complexe ale unor elemente din blocul <i>d</i> .	2.1. Sinteza combinațiilor complexe. 2.2 Studiul influenței raportului molar, contraionului și a solventului. 2.3 Stabilirea condițiilor optime pentru obținerea de monocristale.	<u>Colaboratori interni:</u> Dr. Simona Gabriela Muntean, CSII <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.	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 Studiul proprietăților optice ale combinațiilor complexe obținute la punctul 2.	3.2.1 Caracterizarea compușilor prin spectroscopie de luminescență.	
Faza 4 Trim.IV	4. Studiul proprietăților fotocatalitice ale combinațiilor complexe obținute, în procesul degradării coloranților din soluții apoase.	4.1 Investigarea proprietăților fotocatalitice ale combinațiilor complexe prin evaluarea: - timpului de iradiere - cantității de catalizator - concentrației inițiale a soluțiilor de colorant. 4.2. Evaluarea stabilității combinațiilor complexe utilizate ca și catalizatori.	
Tema 4.1.3. Dezvoltarea unor metode de determinare electrochimice a unor produse farmaceutice și compuși biologic activi utilizând materiale de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat cu combinații complexe ale metalelor din blocul <i>d</i> Coordonator: Dr. Sorina Ilieș, CS III			
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 tranziționale.	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Elisabeta Szerb, CS I Dr. Carmen Cretu, CS III Drd. Alexandru Vișan, AsC <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Florica Manea, Prof. Rodica Pode, Dr. Aniela Pop, Dr. Anamaria Baciuc, Universitatea Politehnica Timișoara, Facultatea de Chimie și Ingineria Mediului. - Dr. Sorina Negrea, INCD-ECOIND Timisoara - Dr. Bertrand Donnio, Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (IPCMS), CNRS-Université de Strasbourg, Strasbourg, Franța.
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 fer/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.	
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.	
-------------------	--	---	--

Proiectul 4.2. Compuși multifuncționali organici - anorganici cu aplicații biologice.

Responsabil: Dr. Ana-Maria Lacrămă, CS II

Tema 4.2.1. Materiale anorganice și compozite pe bază de silice, fier și carbon și structuri organometalice. Coordonator: Dr. Ana-Maria Lacrămă, 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 și a unor nanocompozite de oxid de fier-silice funcționalizată.	1.1.1. Sinteza în prezența unor agenți de direcționare: cationici și lichide ionice, surfactanți dimerici, cu varierea metodelor, prin agitare mecanică, ultrasonicare sau sub acțiunea microundelor. 1.1.2. Funcționalizarea cu diferite grupări organice folosind metodele: co-condensării și cea de post grefare. 1.1.3. Caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute prin: IR, UV-VIS, TEM, BET, difracție de raze X, SAXS, SANS și selectarea unor materiale în vederea testării pentru diferite aplicații.	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Cătălin Ianăși, CSIII Dr. Roxana Nicola, CS Chim. Diana-Oana Rusu, AsC Dr. Carmen Crețu, CSIII Drd. Alexandru Vișan, AsC <u>Colaboratori externi:</u> - Dr. László Almásy, Dr. Zoltán Dudás, Dr. Adél Len, Academia Ungară de Științe,

Faza 2 Trim.II	2.1. Sinteza prin metode “verzi” a unor materiale structurate poroase pe bază de carbon din deșeuri vegetale. 2.2. Funcționalizarea materialelor structurate pe bază de carbon cu catene alchilice.	2.1.1 Stabilirea condițiilor optime de obținere a materialelor pe bază de carbon. 2.1.2 Caracterizarea morfo-structurală a materialelor obținute prin IR, BET, TEM, SEM-EDS. 2.2.1. Stabilirea condițiilor optime ale reacției de funcționalizare. 2.2.2. Caracterizarea morfo-structurală a materialelor funcționalizate prin IR, NMR, BET, TEM, SEM-EDS.	Centrul de Neutroni Budapesta, Ungaria; - Dr. Alfonso Policicchio, 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.
	2.3. Determinarea proprietăților optice ale materialelor pe bază de carbon de la pct. 2.1. și 2.2.	2.3.1. Determinarea proprietăților fotofizice în stare solidă și în solvenți organici.	
Faza 3 Trim.III	3.1.Sinteza de structuri organo-metalice, de tip MOF, utilizând precursori de Zr(IV) cu liganzi dicarboxilici și de tip N,N.	3.1.1. Sintetizarea de materiale policristaline de tip Zr-MOF prin metoda hidro/solvotermală. 3.1.2. Sinteza de materiale policristaline de tip Zr-MOFs prin metoda activării în câmp ultrasonor sau a microundelor.	
Faza 4 Trim.IV	4.1.Testarea unor materiale selectate pentru diferite aplicații.	4.1.1. Testarea unor materiale selectate pentru încărcarea și eliberarea controlată de medicamente. 4.1.2. Testarea unor materiale selectate pentru capacitatea de încărcare cu hidrogen. 4.1.3. Testarea unor materiale selectate pentru adsorbția unor ioni metalici din soluții apoase.	
Tema 4.2.2. Cristale lichide pe bază de fluorenonă cu proprietăți optice. Coordonator: Dr. Livia Devesleanu-Corici, CS III			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți

Faza 1 Trim.I	1.1. Obținerea intermediarilor ce stau la baza derivaților fluorenonici	1.1.1. Stabilirea condițiilor optime de reacție în vederea obținerii și purificării intermediarilor. 1.1.2. Caracterizarea structurală a intermediarilor obtinuti prin IR si RMN.	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Liliana Cseh, CS I Drd. Bogdan Mara, AsC <u>Personal auxiliar:</u> Tiberiu Balazs, AC1 <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Goran Ungar, Xi'an Jiaotong University, R.P. China - Dr. Xianbing Zeng, University of Sheffield, Department of Materials Science and Engineering, UK - Dr. Valentin Badea, Universitatea Politehnica Timișoara - Prof. Sergiu Shova, Dr. Alina Nicolescu, Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni”, Iasi
Faza 2 Trim.II	2.1. Obținerea compușilor pe bază de fluorenonă	2.1.1. Sinteza și purificarea compușilor pe bază de fluorenonă. 2.1.2. Caracterizarea structurală a compușilor prin IR, RMN și UV-Vis.	
Faza 3 Trim.III	3.1. Investigarea proprietăților cristalin lichide ale materialelor obținute la punctul 2.1.	3.1.1. Caracterizarea prin microscopie optică cu polarizare (POM), DSC și difracție de raze X.	
Faza 4 Trim.IV	4.1. Studiul proprietăților optice și biologice ale materialelor obținute la punctul 2.1.	4.1.1. Determinarea proprietăților fotofizice în solvenți organici. 4.1.2.Evaluarea potențialului biologic activ al derivaților de fluorenona.	

Proiectul 4.3: Compuși cu activitate catalitică ridicată pentru reacții de transformare a substanțelor obținute din surse regenerabile în intermediari organici și pentru reacții de distrugere a unor poluanți din mediul înconjurător.

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) cu proprietati texturale controlate prin utilizarea diferitilor surfactanti si agenti de expandare a volumului Porilor 1.2. Funcționalizarea suporturilor de silice preparate anterior prin grefare cu ajutorul unor agenti de silanizare prin utilizarea mai multor tipuri de amine	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 Studiul influenței temperaturii, respectiv a timpului asupra formării structurii sitei moleculare MCM-48 funcționalizata cu diverse amine 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. 1.2.2. Impregnarea sitelor mesoporoase cu polimeri de tipul polietilenimina (PEI) sau cu compuși organici cu grupari functionale mixte (-NH₂ si -OH) precum dietanol amina (DEA) și dietiletanolamina (DEAE).	<u>Colectiv de cercetare:</u> Dr. Alexandru Popa, CS II Dr. Orsina Verdeș, CSIII Dr. Silvana Borcănescu, CSIII Dr. Mariana Suba, CS <u>Colaboratori externi:</u> - Conf. Paul Barvinschi - Universitatea de Vest Timișoara - 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, Universitatea din Belgrad, Serbia

	1.3 Sinteza unor heteropolioxometalati cu activitate catalitica ridicata de tipul $\text{Me}_x\text{H}_3\text{-x}[\text{PW}_{12}\text{O}_{40}]$ 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 ($\text{Me} = \text{Ni}, \text{Ce}, \text{Cu}, \text{Au}, \text{Mg}$).	1.3.1 Sinteza heteropolicompusilor de tipul $\text{H}_3\text{-xCs}_x\text{PW}$ ($x=0, 1, 2, 2.25, 2.5$ si 3), urmate de depunerea acestora prin impregnare pe pe site moleculare de tip MCM-48 si KIT-6 . Utilizarea acestor HPA la reactia de conversie a etanolului in scopul obtinerii unor selectivitati ridicate in etena/acetaldehida. 1.3.2 Prepararea de oxizi metalici de tipul Me/SBA-15 respectiv Me/KIT-6 prin impregnare ($\text{Me} = \text{Ni}, \text{Ce}, \text{Cu}, \text{Au}, \text{Mg}$).	-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.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 analiza TG-DTA cuplata cu spectrometria de masa.	

		3.1.2 Studiul cinetic pentru determinarea mecanismului de adsorbție-desorbție de CO ₂ pe baza unor modele cinetice prezentate în literatura de specialitate.	
Faza 4 Trim.IV	4.1 Determinarea 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 Prelucrarea și interpretarea datelor experimentale, redactare comunicări stiintifice, postere pentru simpozioane stiintifice.	