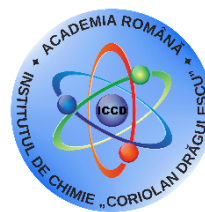




ACADEMIA ROMÂNĂ
INSTITUTUL DE CHIMIE „CORIOLAN DRĂGULESCU”

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



Nr. ICCD: S012911 / 29.01.2025

PLAN DE CERCETARE

2025

Director,
Dr. Liliana CSEH

Secretar științific,
Dr. Alina BORA

CUPRINS

INFORMAȚII GENERALE.....	1
PROGRAMUL DE CERCETARE 1: CHEMINFORMATICĂ ȘI ALTE METODE DE CHIMIE COMPUTAȚIONALĂ.....	5
SUBPROGRAMUL 1.1. Utilizarea și dezvoltarea de metode in silico în studiul compușilor cu activitate biologică - o abordare multidisciplinară.....	6
PROGRAMUL DE CERCETARE 2: COMPUȘI MULTIFUNCȚIONALI ORGANICI ȘI POLIMERICI - CU PROPRIETĂȚI DIRIJATE ȘI APLICAȚII ÎN PROTECȚIA MEDIULUI ȘI DEZVOLTARE DURABILĂ.....	11
SUBPROGRAMUL 2.1. Sisteme polimerice, sisteme hibride sau complexe cu proprietăți: ignifuge, electroliți, membrane, sorbanți, biocide, catalizatori și de protecție anticorozivă.....	13
SUBPROGRAMUL 2.2. Compuși multifuncționali - cu proprietăți dirijate și aplicații în protecția mediului.....	15
PROGRAMUL DE CERCETARE 3: CHIMIA ȘI APLICAȚIILE COMPUȘILOR TETRAPIROLICI DIN CLASA PORFIRINELOR.....	18
SUBPROGRAMUL 3.1. Materiale multifuncționale avansate cu proprietăți speciale opto-electrice pe bază de porfirine și combinațiile lor complexe. Aplicații biologice și tehnice.....	19
PROGRAMUL DE CERCETARE 4: OBȚINEREA DE COMPUȘI MULTIFUNCȚIONALI CU RELEVANȚĂ ÎN ȘTIINȚA MATERIALELOR NANOSTRUCTURATE, BIOCHIMIE SAU PROTECȚIA MEDIULUI.....	18
SUBPROGRAMUL 4.1. Combinații complexe ale metalelor din blocul d generatoare de sisteme funcționale supramoleculare avansate cu aplicații în știința materialelor.....	21
SUBPROGRAMUL 4.2. Compuși multifuncționali organici - anorganici cu aplicații biologice.....	23
SUBPROGRAMUL 4.3. Proiectarea și sinteza de 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.....	26

INFORMAȚII GENERALE

Planul de cercetare al Institutului de Chimie "Coriolan Drăgulescu" (ICCD) este structurat în **patru Programe de cercetare** constituite din **7 Subprograme** și fiecare subprogram din **Teme** complementare care contribuie la realizarea unitară a scopului și obiectivelor fiecărui program de cercetare.

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: Obținerea de compuși multifuncționali cu relevanță în știința materialelor nanostructurate, biochimie sau protecția mediului.

SUBPROGRAME DE CERCETARE

Subprogramul 1.1. 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 proprietăți: ignifuge, electroliți, membrane, sorbanți, biocide, catalizatori și de protecție anticorozivă.

Subprogramul 2.2. Compuși multifuncționali - cu proprietăți dirijate și aplicații 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 Combinații complexe ale metalelor din blocul d generatoare de sisteme funcționale supramoleculare avansate cu aplicații în știința materialelor.

Subprogramul 4.2 Compuși multifuncționali cu aplicații biologice.

Subprogramul 4.3 Proiectarea și sinteza de 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 inconjurător.

PERSONAL DE CERCETARE

- număr cercetători: CS - CS I: 31 și ACS: 13
- număr studenți doctorat: 8 (2 fără bursă, 3 cu bursă, 3 locuri cu bursă solicitate pentru 2025)
- număr studenți postdoctorali: 0
- număr conducători doctorat: 3

FINANȚARE

Finanțarea resursei umane este asigurată de la bugetul de stat prin Academia Română, care este ordonatorul principal de credite, în condițiile legii.

Suma estimată pentru plata salariilor personalului de cercetare inclus în Programele 1-4 este de aproximativ **5.126.600 lei**.

Cuantumul estimat al burselor pentru studenții doctoranzi înmatriculați la studii universitare organizate cu finanțare de la bugetul de stat pentru anul 2025 este de **166.500 lei** (din care **133.200 lei** pentru cei 3 studenți doctoranzi aflați în anul universitar 2024-2025 și **33.300 lei** pentru cele 3 locuri la doctorat, cu bursă, solicitate pentru anul universitar 2025-2026).

Coform legii 183/2024, Art. 32, alin. (3), suma estimată pentru susținerea activităților de cercetare ale cercetătorilor ICCD este în valoare de **2.000.000 lei**.

COLABORĂRI EXTERNE / INTERNE

<i>Nr. crt.</i>	<i>Instituția</i>	<i>Reprezentant colaborator</i>
<i>EXTERNE</i>		
1	Expert Systems Inc., USA	Prof. Tudor I. OPREA
2	University of New Mexico, USA	Dr. Cristian BOLOGA
3	University of Crete, Department of Chemistry Voutes, Heraklion GR-71003, Crete, Greece	Prof. Dr. Konstantinos D. DEMADIS
4	Universitatea Ca' Foscari, Venetia, Italia	Prof. dr. Fabio ARICO
5	Universitatea din Malaga, Spania	Prof. dr. Aurelio CABEZA
6	University of Technology, Faculty of Technical Chemistry, Institute of Chemical Technologies and Analytics, Viena, Austria	Prof. dr. Günter FAFILEK
7	Universitatea de Stat din Moldova, Institutul de Fizică Aplicată, Chișinău, Republica Moldova	dr. Pavlina BOUROS, dr. Yurii CHUMAKOV
8	Universitatea de Stat din Moldova, Institutul de Chimie, Chișinău, Republica Moldova	dr. Olga DANILESCU
9	University of Calabria, Department of Chemistry and Chemical Technologies, Italia	Prof. Alessandra CRISPINI, Dr. Cesare OLIVIERO ROSSI, Dr. Massimo LA DEDA
10	Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (IPCMS), CNRS-Université de Strasbourg, Strasbourg, Franța	Dr. Bertrand DONNIO, Dr. Mircea RASTEI
11	Academia Ungară de Științe, Centrul de Neutroni Budapesta, Centrul de Cercetare pentru Fizică Wigner, Ungaria	Dr. László ALMÁSY Dr. Zoltán DUDÁS Dr. Adél LEN

12	Universitatea din Calabria, Departamentul de Fizică, Italia	Dr. Alfonso POLICICCHIO,
13	Universitatea din Belgrad, Serbia	Dr. Snezana USKOKOVIĆ –MARKOVIĆ
<i>INTERNE</i>		
1	Universitatea Politehnica Timișoara, Departamente CAICON, CAICAM, Facultatea de mecanică, etc.	Conf. Dr. Ciprian CHIRILĂ, Dr. Andrea Kellembberger Prof.dr. Robert IANOȘ, Prof.dr. Florica MANEA, dr. ing. Anamaria BACIU, S.I. dr. ing. Aniela POP, Prof.dr. Adina NEGREA, Dr. Valentin BADEA, Conf. dr. ing. Giannin MOȘOARCĂ, Conf. dr.ing. Simona POPA,
2	Universitatea Politehnica Timișoara, Facultatea de Hidrotehnică, Timișoara	Dr. Vasile Gherman
3	Universitatea de Medicină și Farmacie "Iuliu Hațieganu", Cluj-Napoca	Conf. Dr. Ioana BĂLDEA
4	Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Tehnologii Criogenice și Izotopice Râmnicu Vâlcea	Dr. Diana POPESCU
5	Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni" Iași	Dr. Ana-Maria MACSIM, Dr. Sergiu SHOVA, Dr. Alina NICOLESCU
6	Universitatea de Științele Vieții "Regele Mihai I" din Timișoara	Prof. Dr. Ileana NICHITA, Prof. Dr. Radu ȘUMĂLAN, Prof. Dr. Ersilia ALEXA
7	SC. Elkim SRL, Timișoara	Dr. Ing. Dorin JURCAU
8	Universitatea de Medicină și Farmacie "Victor Babeș" Timișoara	Prof. dr. habil. Roxana POPESCU, Conf. dr. Nicoleta CARABA, Prof. Dr. Corina Danciu, Prof. Dr. Codruța Șoica
9	Institutul Național de Electrochimie și Materie Condensată, Timișoara	Dr. Radu BANICĂ
10	Facultatea de Chimie, Biologie, Geografie, UVT Timișoara	Dr. Bianca MARANESCU, Conf. Dr. ing. Dana VLASCICI, Conf. Dr. ing. Vlad CHIRIAC, Conf. Paul BARVINSCHI

PROGRAMUL DE CERCETARE 1

CHEMINFORMATICĂ ȘI ALTE METODE DE CHIMIE COMPUTAȚIONALĂ

Coordonator program: Dr. Sorin AVRAM

Obiectiv general

Programul de cercetare 1 (P1) este direcționat spre dezvoltarea de noi metode specifice chimiei computaționale și cheminformaticii, investigarea și utilizarea metodelor deja cunoscute, cu aplicații în procesul de descoperire a medicamentelor, repoziționarea medicamentelor aprobate și dezvoltarea pesticidelor. Sunt vizati compuși chimici cu activitate biologică investigați prin studii de analiză a datelor și managementul informației legate de chimie (metode de învățare, explorarea spațiului chimic și design-ul bazelor de date), cât și prin modelare teoretică și simulări ale sistemelor bio-chimice (mecanică cuantică și clasică). Proiectul își propune să avanseze stadiul cunoașterii prin abordări multidisciplinare ce pornesc de la structura și proprietățile compușilor chimici.

Obiective specifice

- dezvoltarea și optimizarea unei metode noi capabilă să genereze formea ionică și tautomerul dominant la pH fiziologic pentru compuși chimici organici cu activitate biologică;
- generarea unor modele de conversie a valurilor de activitate provenite din determinări experimentale diverse și reducerea incertitudinii în evaluarea eficienței compușilor;
- realizarea unui *screening virtual* pentru a identifica molecule active specifice fiecărei izoforme Janus, pe baza rezultatelor obținute din analiza și caracterizarea situsurilor de legare ale acestor izoforme;
- dezvoltarea și aplicarea unor metode computaționale (pe bază de algoritmi de învățare automată și modelare moleculare) pentru repoziționarea medicamentelor și identificarea compușilor naturali cu potențial terapeutic;
- studiu molecular pentru înțelegerea modului de acțiune al erbicidelor asupra AHAS din buruieni și prevenirea problemei rezistenței;
- dezvoltarea și evaluarea unor indici derivați din factorul B cristalografic ca indicatori pentru selecția de macromolecule cristalizate (complexi proteină-ligand) în studii de andocare.

Echipa programului de cercetare 1

Nr. crt.	Prenume NUME	Funcția	Categoria profesională	Norma
Dr. Sorin AVRAM Coordonator programul de cercetare 1 Responsabil subprogramul 1.1				
1.	Dr. Sorin AVRAM	Membru subprogramul 1.1	CSII	1
2	Dr. Liliana HALIP	Membru subprogramul 1.1	CSIII	1
3	Dr. Luminița CRIȘAN	Membru subprogramul 1.1	CSIII	1

4	Dr. Ana BOROTA	Membru subprogramul 1.1	CSIII	1
5	Dr. Cristian NEANU	Membru subprogramul 1.1	CSIII	1
6	Dr. Sorin MARINESCU	Membru subprogramul 1.1	CSIII	1
7	Chim. Daniela ISTRATE	Membru subprogramul 1.1	CS	1
8	Chim. Nicoleta STOIAN	Membru subprogramul 1.1	ACS	1
9	Poziție vacantă bugetată 2025	Membru subprogramul 1.1	ACS	1

Total norme ACS-CSI: CS I: 0; CS II: 1; CSIII: 5; CS: 1; ACS: 2 = **9,0**

Colaborare/realizare activități cu alte Subprograme din institut: *i)* dr. L. HALIP colaborează cu dr. N. Pleșu și dr. S. Muntean (proiectul 2, tema 2.1.2 și 2.2.2); *ii)* dr. L. CRIȘAN colaborează cu dr. N. Pleșu, dr. A. Vișa și dr. M. Crișan (proiectul 2, tema 2.1.2, 2.2.1, și 2.2.4); *iii)* dr. A. BORA face parte din colectivul de cercetare al temei 1.1.3 (programul 1); *iv)* dr. R. CURPĂN face parte din colectivul de cercetare al temei 1.1.2 (programul 1) și colaborează cu dr. B. Mara (proiectul 4, tema 4.2.2);

Finanțare

Finanțarea resursei umane este asigurată de la bugetul de stat prin Academia Română, care este ordonatorul principal de credite, în condițiile legii.

Cuantumul estimat al salariilor personalului de cercetare inclus în Programul 1 este de aproximativ **1.000.600 lei**.

Programul de cercetare 1 este constituit din **1 Subprogram** cu **5 Teme** complementare care contribuie la realizarea unitară a scopului și obiectivelor programului.

SUBPROGRAMUL 1.1.

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

Responsabil: Dr. Sorin AVRAM

TEMA 1.1.1. Studiul translațional a medicamentelor și identificarea compușilor biologic activi
Coordonator temă: Dr. Sorin AVRAM

Obiectivul general al temei 1.1.1.: *Aplicarea metodelor specifice chimiei computaționale în faza preclinică timpurie a procesului de descoperire și dezvoltare a medicamentelor se bazează pe date deja cunoscute. Esențiale sunt structura corectă a compușilor chimici și activitățile biologice determinate experimental (interacțiunea dintre medicament și o proteină receptor). Această temă are două obiective: i) optimizarea metodei de generare a formei ionice și tautomere dominante la pH fiziologic pentru compuși chimici organici biologic activi, și ii) generarea unor modele de conversie*

a valurilor de activitate pentru omogenizarea datelor experimentale și reducerea incertitudinii în evaluarea eficienței compușilor.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Compararea speciilor chimice generate prin diverse metode	1.1. Identificarea unui set de neurotransmițători cu tautomerie cunoscută 1.2. Generarea speciilor dominante cu programele disponibile 1.3. Analiza comparativă a rezultatelor	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Sorin Avram Dr. Sorin Marinescu Chim. Daniela Istrate
Faza II – Trim. II 2. Optimizarea metodei noi de identificare a formei chimice dominante	2.1. Revizuirea codului pentru enumerare a tautomerilor 2.2. Re-fitarea funcțiilor de probabilitate 2.3. Optimizarea regulilor de penalizare a formelor improbabile	<u>Colaboratori externi</u> Prof. Dr. Tudor Oprea, Expert Systems Inc, USA
Faza III – Trim. III 3. Asamblarea setului cu activități biologice	3.1. Identificarea de perechi proteină-ligand în testări multiple 3.2. Extragerea condițiilor experimentale	
Faza IV – Trim. IV 4. Generarea modelelor de conversie	4.1. Standardizarea datelor de intrare 4.2. Generarea modelelor de conversie 4.3 Evaluarea performanțelor	

TEMA 1.1.2. Explorarea efectelor adverse ale medicamentelor pentru repositionarea acestora Coordonator temă: Dr. Liliana HALIP

Obiectivul general al temei 1.1.2.: Realizarea unui screening virtual pentru a identifica molecule active specifice fiecărei izoforme Janus, pe baza rezultatelor obținute din analiza și caracterizarea situsurilor de legare ale acestor izoforme. Aceasta va contribui la dezvoltarea de inhibitori selectivi, reducând astfel efectele secundare ale tratamentelor actuale pentru boli autoimune și inflamatorii. Screening-ul va utiliza un set de aproximativ 3000 de medicamente pentru a identifica cele mai promițătoare molecule terapeutice.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Actualizarea și pregătirea seturilor de compuși	1.1. Actualizarea seturilor de compuși activi Jak1/2 identificate în anul anterior 1.2. Studiu de literatură pentru a identifica compuși inactivi pe Jak1/2 1.3. Pregătirea seturilor de control pentru andocare	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Liliana Halip Dr. Ana Borota Dr. Ramona Curpan Chim. Nicoleta Stoian
Faza II – Trim. II 2. Dezvoltarea și validarea protocolului de screening virtual	2.1. Dezvoltarea unui protocol de screening virtual bazat pe rezultatele analizei situsurilor de legare 2.2. Implementarea protocolului de screening molecular bazat pe metode de andocare moleculară	<u>Colaboratori externi</u> Dr. Cristian Bologa, Universitatea New Mexico, Albuquerque, USA

	2.3. Optimizarea algoritmilor de scoring pentru a favoriza identificarea compușilor cu afinitate ridicată 2.4. Validarea protocolului de screening folosind seturile de control	Prof. Dr. Tudor Oprea, Expert Systems Inc, USA
Faza III – Trim. III 3. Realizarea screeningului virtual	3.1. Pregătirea bibliotecii LNCB pentru andocare 3.2. Integrarea bibliotecii LNCB în platforma de screening. 3.3. Realizarea screeningului virtual folosind biblioteca integrată	
Faza IV – Trim. IV 4. Analiza și clasificarea rezultatelor	4.1. Identificarea moleculelor cu afinitate ridicată pentru izoformele Janus 1 și 2 folosind protocolul optimizat 4.2. Clasificarea compușilor identificați în funcție de selectivitatea pentru Janus 1 sau Janus 2 4.3. Identificarea compușilor care prezintă caracteristici favorabile pentru optimizarea ulterioară (e.g., ADMET)	

TEMA 1.1.3. Repoziționarea computațională a unor medicamente și identificarea de compuși naturali pentru noi scopuri terapeutice

Coordonator temă: Dr. Luminița CRIȘAN

Obiectivul general al temei 1.1.3.: Dezvoltarea și aplicarea unor metode computaționale pentru repoziționarea medicamentelor existente și identificarea compușilor naturali cu potențial terapeutic, prin utilizarea algoritmilor de învățare automată și a modelării moleculare, pentru a contribui la identificarea unor opțiuni terapeutice suplimentare eficiente și sigure pentru diferite patologii.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Evaluarea <i>in silico</i> a inhibitorilor cunoscuți și a medicamentelor din bazele de date	1.1. Colectarea unui set extins de date despre inhibitori antivirali / antiinflamatori / antidiabetici din baze de date publice (PubChem, ChEMBL, etc) 1.2. Extracția descriptorilor moleculari și a datelor relevante pentru fiecare inhibitor selectat 1.3. Aplicarea algoritmilor de clustering pentru identificarea grupurilor de compuși cu proprietăți similare	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Alina Bora Dr. Sorin Avram <u>Colaboratori interni</u> Dr. Manuela Crișan Dr. Daniela Haidu <u>Colaboratori externi</u> Dr. Bogdan-Ciprian Chirilă, Universitatea Politehnică Timișoara
Faza II – Trim. II 2. Construirea și antrenarea modelelor de învățare automată	2.1. Construirea unui set de date de antrenament folosind descriptorii moleculari și datele extrase din baza de date 2.2. Implementarea și antrenarea modelelor de învățare automată (SVC, MLP, RFC, CNN, etc.) pentru a clasifica	

	medicamentele în funcție de potențialul lor de repoziționare	
Faza III – Trim. III 3. Validarea și îmbunătățirea performanței modelelor de învățare automată	3.1. Aplicarea tehnicilor de validare încrucișată pe seturile de date de testare pentru a evalua acuratețea și robustețea modelelor antrenate 3.2. Compararea performanței modelelor (SVC, MLP, RFC, CNN, etc.) folosind metrici de performanță (acuratețe, scorul F1, etc) 3.3. Îmbunătățirea modelelor prin ajustarea parametrilor și utilizarea tehnicilor de selecție adecvate	
Faza IV – Trim. IV 4. Identificarea și selecția de medicamente și compuși naturali pentru potențiale terapii utilizând modelele de învățare automată	4.1. Aplicarea modelelor de învățare automată antrenate pentru a analiza baze de date de medicamente și de compuși naturali 4.2. Crearea unui set de medicamente și de compuși naturali care prezintă caracteristici fizico-chimice și farmacocinetice favorabile pentru scopuri terapeutice, pe baza rezultatelor obținute din modelele de clasificare 4.3. Validarea predicțiilor obținute prin simulări <i>in silico</i> și compararea cu datele experimentale pentru a confirma eficiența potențială a compușilor selectați	

TEMA 1.1.4. Studii *in silico* de potență și toxicitate a medicamentelor și compușilor agrochimici pe baza interacțiilor chimico-biologice

Coordonator temă: Dr. Ana BOROTA

Obiectivul general al temei 1.1.4.: Conform datelor din literatură, au fost raportați compuși care inhibă enzima AHAS și care au un dublu rol: acela de erbicid, precum și de potențial medicament antimicotic. În acest context, tema își propune extinderea studiului anterior (realizat pentru înțelegerea modului de acțiune al erbicidelor asupra AHAS din buruieni și prevenirea problemei rezistenței) la o abordare care să cuprindă evaluarea erbicidelor studiate și din perspectivă antifungică.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Întocmirea unui set de erbicide cu potențial antifungic	1.1. Extragerea din literatura de specialitate a erbicidelor cu acțiune pe enzima AHAS care prezintă și activitate antifungică 1.2. Extinderea setului prin includerea compușilor propuși ca potențiale erbicide care previn rezistența	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Ana Borota Dr. Sorin Avram Dr. Liliana Halip <u>Colaboratori externi</u>

	1.3. Realizarea unui studiu de similaritate între cele două categorii de compuși	Dr. Diana Popescu, Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Tehnologii Criogenice și Izotopice Râmnicu Vâlcea
Faza II – Trim. II 2. Studiul liganzilor pentru evidențierea trăsăturilor farmacofore esențiale	2.1. Pregătirea liganzilor din setul de date 2.2. Realizarea unui model farmacofor 2.3. Evidențierea trăsăturilor esențiale pentru activitatea antifungică	
Faza III – Trim. III 3. Studiu comparativ între structurile 3D ale enzimelor AHAS din buruieni/fungi	3.1. Andocare moleculară a setului de erbicide în stuctura 3D a AHAS din fungi 3.2. Compararea rezultatelor cu cele obținute anterior prin andocarea erbicidelor în AHAS din buruieni 3.3. Evidențierea similarităților și a diferențelor prin suprapuneri structurale	
Faza IV – Trim. IV 4. Propunerea de noi compuși cu potențial erbicid/antifungic	4.1. Propunerea de noi compuși cu potențial erbicid/antifungic prin screening virtual 4.2. Evaluarea noilor compuși prin studii de dinamică moleculară (DM) 4.3. Testarea și diseminarea rezultatelor	

TEMA 1.1.5. Dezvoltarea, implementarea și testarea de aplicații pentru explorarea și analiza unor librării chimice

Coordonator temă: Dr. Cristian NEANU

***Obiectivul general al temei 1.1.5.** Evaluarea indicilor BFI-P (B-factor index pentru proteină) și BFI-L (B-factor index pentru ligand) ca indicatori ai selecției de macromolecule cristalizate (complexi proteină-ligand) folosind setul CASF2016. Elaborarea de algoritmi și platforme digitale pentru analiza datelor structurale, cu aplicații în procesul decizional din chimia structurală.*

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Identificarea și analiza unor seturi de date	1.1. Identificarea bazelor de date relevante 1.2. Analiza și interpretarea informațiilor din bazele de date	Colectiv de cercetare Dr. Sorin Avram Dr. Liliana Halip Dr. Cristian Neanu
Faza II – Trim. II 2. Evaluarea unor indici BFI pe seturi de date	2.1. Extragerea datelor 2.1. Calculul valorilor indicilor BFI pentru seturi de proteine din bazele de date analizate 2.3. Eșantionare date	
Faza III – Trim. III 3. Evaluarea unor indicilor BFI pe seturi de date	3.1. Eșantionare date 3.2. Calcule statistice 3.3. Măsurare performanțe indici (coeficient de corelare Spearman, coeficient de corelare Mathews, screening virtual)	
Faza IV – Trim. IV 4. Dezvoltare platformă digitală	4.1. Elaborare algoritmi 4.2. Dezvoltare platformă digitală	

PROGRAMUL DE CERCETARE 2

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

Coordonator program: Dr. Aurelia VIȘA

Obiectiv general

Obiectivul general al programului de cercetare 2 (P2) constă în realizarea unor cercetări avansate în domeniul chimiei organice și a polimerilor care conțin heteroelemente, orientate spre sinteza de noi compuși care își găsesc aplicații în domenii de vârf precum senzori, protecția mediului, cataliză, coroziune, agricultură, medicină.

Obiective specifice

- Sinteza de noi compuși multifuncționali organici și polimerici cu proprietăți dirijate (magnetice, electrice, catalitice, adsorbante) și caracterizarea acestora prin metode fizico-chimice;
- Elaborarea de noi materiale privind modificarea chimică a grupărilor pendante ce conțin heteroatomi (N, O) prin metoda mecanochimică;
- Evaluarea materialelor polimerice funcționalizate cu grupări pendante/active conținând heteroatomi;
- Obținerea unor conductori organici intrinseci și investigarea direcțiilor de extindere a utilizării acestora în formularea de (nano)compozite cu potențiale aplicații în electrocataliză, biochimie, stocarea informației, electrotehnică și protecție anticorozivă;
- Optimizarea metodelor de sinteză și caracterizare a rețelelor metal-organice (MOFs), MOF funcționalizate cu chitosan, obținute prin metode hidrotermale utilizând săruri de metale cu acizi carboxilici și/sau fosfonici;
- Aplicarea unor materiale noi (MOF, complecși metalici, oxizi de fier, nanocompozite magnetice), pentru îndepărtarea prin diferite tehnici (adsorbție, fotodegradare) a poluanților colorați, din soluții apoase;
- Elaborarea unei metode eficiente de îndepărtare a poluanților colorați din sisteme multiple;
- Sinteza și caracterizarea de noi compuși cu funcțiune azo alternativă, prezentând risc cu potențial scăzut asupra mediului înconjurător;
- Studiul proprietăților optice, colorimetrice, electrochimice și biologice ale azo compușilor obținuți;
- Dezvoltarea de noi sisteme organice multicomponent și compuși multifuncționali organici-anorganici cu proprietăți specifice, cu aplicabilitate în materiale funcționale și aplicații biomoleculare.

Echipa programului de cercetare 2

Nr. crt.	Prenume NUME	Funcția	Categoria profesională	Norma
Dr. Aurelia VISA Coordonator programele de cercetare 2 și 3 Responsabil subprogramul 2.2				
1	Dr. Aurelia VISA	Membru subprogramul 2.2.	CS I	1
2	Dr. Simona MUNTEAN	Membru subprogramul 2.2.	CS II	0.5
3	Dr. Maria Elena RĂDULESCU-GRAD	Membru subprogramul 2.2.	CS III	1
4	Dr. Manuela CRIȘAN	Membru subprogramul 2.2.	CS II	1
5	Dr. Daniela HAIDU	Membru subprogramul 2.2.	CS	1
6	Dr. Andreea NISTOR	Membru subprogramul 2.2.	CS	1
7	Chim. Marcela IOSIVONI	Membru subprogramul 2.2.	ACS	1
8	Chim. Alexandru BUHAI	Membru subprogramul 2.2.	ACS	1
Dr. Adriana POPA Responsabil subprogramul 2.1				
9	Dr. Adriana POPA	Membru subprogramul 2.1.	CS I	1
10	Dr. Nicoleta PLEȘU	Membru subprogram 2.1.	CS II	1
11	Dr. Milica TARĂ-LUNGĂ-MIHALI	Membru subprogramul 2.1.	CS	1
12	Ing.chim. Anemona CORNEA	Membru subprogramul 2.1.	ACS	1
13	Poziție vacantă bugetată 2025	Membru subprogramul 2.1.	ACS	1
Personal auxiliar				
14	Ing.chim. Cristina AVRAM	Membru programul de cercetare 2	As 1	1
15	Paulina PINTER	Membru programul de cercetare 2	As 1	1

Total norme: ACS-CSI: CS I: 2; CS II: 2.5; CSIII: 1; CS: 3; ACS: 4 = 12,5

Alte categorii: As I: 2 = 2,0

Conducători de doctorat: 1

Colaborare/realizare activități alte Subprograme din institut: i) dr. S. MUNTEAN colaborează cu dr. I. Bută (proiectul 2, tema 4.1.2); (ii) dr. M. CRIȘAN colaborează cu dr. L. Crișan (proiectul 1, tema 1.1.3); (iii) dr. D. HAIDU colaborează cu dr. L. Crișan (proiectul 1, tema 1.1.3); (iv) dr. A. NISTOR colaborează cu dr. I. Bută (proiectul 4, tema 4.1.2); (v) dr. N. PLEȘU colaborează cu dr. A. LASCU (proiectul 3, tema 3.1.1).

Conducători de doctorat: în cadrul programului de cercetare 2 activează în prezent un conducător de doctorat abilitat 2024: Dr. Nicoleta Pleșu.

Finanțare

Finanțarea resursei umane este asigurată de la bugetul de stat prin Academia Română, care este ordonatorul principal de credite, în condițiile legii.

Cuantumul estimat al salariilor personalului de cercetare inclus în Programul 2 este de aproximativ **1.620.000 lei**.

Programul de cercetare 2 este constituit din **2 Subprograme** și **6 Teme** complementare care contribuie la realizarea unitară a scopului și obiectivelor programului.

SUBPROGRAMUL 2.1.

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

Responsabil: Dr. Adriana POPA

TEMA 2.1.1. Polimeri modificați chimic cu grupări pendante active conținând atomi de fosfor și/sau azot și oxigen

Coordonator temă: Dr. Adriana POPA

Obiectivul general al temei 2.1.1.: Introducerea unor metode de sinteză prietenoase cu mediul înconjurător în domeniul chimiei heteroatomilor (P, N, S, O) în sinteze polimer-analoge „one-pot” multicomponent („one-pot”-MCR) de modificare chimică cu diferite grupări pendante active. Tema propusă îmbină metode de sinteză și proprietăți deosebite ale polimerilor modificați chimic cu noi grupări funcționale (ex. amino-acid/amino-fosfonat) și aplicația lor ca materiale cu proprietăți catalitice și adsorbanți, etc.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Aplicații și evaluarea polimerilor modificați cu grupări pendante ce conțin heteroatomi (P, N, O)	1.1. Evaluarea reacției polimer-analoge de funcționalizare a copolimerului St-DVB prin reacția "one-pot" cu grupări pendante de tip amino-acid 1.2. Studiu de literatură referitor la utilizarea ca fotocatalizatori a polimerilor cu grupări ce conțin heteroatomi (P, N) 1.3. Redactare lucrare	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Nicoleta Pleșu Dr. Milica Țară-Lungă Mihali <u>Colaboratori interni</u> Dr. Aurelia Vișa
Faza II – Trim. II 2. Elaborarea de noi materiale privind modificarea chimică a grupărilor pendante ce conțin heteroatomi (N, O) prin metoda mecano-chimică	2.1. Impregnarea chitosanului cu grupări pendante ce conțin heteroatomi prin metoda mecano-chimică 2.2. Reacția chitosanului cu ionii metalici (ex. Zn(II)). 2.3. Caracterizarea chitosanului impregnat cu grupări active (N, O)	<u>Colaboratori externi</u> Dr. Lavinia Lupa, Universitatea Politehnică Timișoara, Dr. Laura Cocheci, Universitatea Politehnică Timișoara,

Faza III – Trim. III 3. Evaluarea materialelor polimerice funcționalizate cu grupări pendante/active conținând heteroatomi	3.1. Caracteristicile fizico-chimice a copolimerului St-6.7%DVB modificat chimic cu grupări de tip aminobenzoic acid 3.2. Reacția de impregnare prin ultrasonare a copolimerilor cu grupări pendante amino-acid cu ioni metalici (ex.Zn(II))	Dr. Ecaterina-Stela Drăgan, Dr. Maria Valentina Dinu, Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni", Iași
Faza IV – Trim. IV 4. Analiza materialelor polimerice grefate cu grupări pendante/active conținând atomi de azot și fosfor	4.1. Caracteristicile fizico-chimice a copolimerilor acrilonitril-divinilbenzen în vederea reținerii poluanților din ape reziduale 4.2. Actualizarea referințelor/datelor privind potențialele aplicații în protecția mediului utilizând copolimeri conținând heteroatomi (P, N) 4.3. Redactare lucrare	

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 temă: Dr. Nicoleta Pleșu

Obiectivul general al temei 2.1.2.: Obținerea unor conductori organici intrinseci și investigarea direcțiilor de extindere a utilizării acestora în formularea de (nano)compozite cu potențiale aplicații în electrocataliză, biochimie, stocarea informației, electrotehnică și protecție anticorozivă. Caracterizarea substanțelor, suprafeței materialelor, a filmelor nanocompozite prin metode electrochimice. Modalități practice de reciclare a deșeurilor.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Compozite polimerice cu proprietăți semiconductoare. Obținere și caracterizare. Reciclarea deșeurilor	1.1. Prepararea compozitelor polimerice de polianiline (PANI) și rețele metal organice (MOF) 1.2. Caracterizarea compozitelor pe obținute, prin voltametrie ciclică (CV) și spectroscopie de impedanță (EIS) 1.3. Studii privind îndepărtarea grăsimilor din apele reziduale menajere de la Aquatim S.A.	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Țără-Lungă Mihali Milica Dr. Popa Adriana <i>Ing.chim. Anemona Cornea</i> <u>Colaboratori interni</u> Dr. Vișa Aurelia Dr. Manuela Crișan Dr. Crișan Luminița Dr. Halip Liliana
Faza II – Trim. II 2. Investigarea proprietăților de reținere a coloranților. Reciclarea deșeurilor. Obținerea de pelicule semiconductoare	2.1. Modelarea CV a datelor experimentale 2.2. Modelarea EIS a datelor experimentale 2.3. Studiul adsorbției de grăsimi pe compozitele PANI/Dye	<u>Colaboratori externi</u> Prof. Demadis Konstaninos, Universitatea din Creta, Grecia
Faza III – Trim. III 3. Investigarea proprietăților speciale a unor compuși organici și/sau element	3.1. Calcularea parametrilor electronici cu ajutorul calculelor computaționale 3.2. Interpretarea datelor de adsorbției de grăsimi pe compozitele PANI/Dye	Dr. Andrea Kelleberger, Universitatea Politehnica Timișoara

organici, hibrizi organici-anorganici prin măsurători conductometrice, voltametrie ciclică (CV)	3.3. Studiu de literatură privind metodele de sinteză a rășinilor pe bază de grăsimi reciclate	Dr. Bianca Maranescu, Universitatea de Vest Timișoara
Faza IV – Trim. IV 4. Investigarea prin spectroscopie de impedanță a proprietăților speciale (electrice și/sau anticorozive) ale unor compuși organici și/sau element-organici, hibrizi organici-anorganici	4.1. Studiul proprietăților electrice ale unor compuși organici și/sau element organici (MOF), hibrizi organici anorganici prin spectroscopie de impedanță (EIS) 4.2. Modelarea datelor EIS 4.3. Interpretarea datelor EIS 4.4. Studiu de literatură privind acoperirile preparate	Dr. Jurcau Dorin, S.C. Elkim SRL, Timișoara

SUBPROGRAMUL 2.2.

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

Responsabil: Dr. Aurelia VIȘA

TEMA 2.2.1. Sinteza de rețele metal organice și proprietățile acestora

Coordonator temă: Dr. Aurelia VIȘA

Obiectivul general al temei 2.2.1.: Optimizarea metodelor de sinteză și caracterizare a rețelilor metal-organice (MOFs), MOF funcționalizate cu chitosan, obținute prin metode hidrotermale utilizând săruri de metale cu acizi carboxilici și/sau fosfonici în scopul de a analiza influența condițiilor de reacție asupra proprietăților structurale, a cristalinității și a explora proprietățile acestora pentru aplicații în domenii precum adsorbția și cataliza.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Sinteze de rețele metal organice carboxilice	1.1. Sinteza rețelilor metal organice în condiții hidrotermale folosind săruri de metale monovalente, divalente, trivalente sau tetravalente. 1.2. Stabilirea condițiilor optime de reacție. 1.3. Influența condițiilor de reacție asupra cristalinității compușilor obținuți.	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Simona Muntean Dr. Andreea Nistor Chim. Marcela Iosivoni <i>Chim. Alexandru Buhai</i>
Faza II – Trim. II 2. Sinteze de rețele metal organice fosfonice	2.1. Sinteza rețelilor metal organice fosfonice în condiții hidrotermale folosind săruri de metale monovalente, divalente, trivalente sau tetravalente. 2.2. Stabilirea condițiilor optime de reacție.	<u>Colaboratori interni</u> Dr. Adriana Popa Dr. Nicoleta Plesu Dr. Luminița Crișan
Faza III – Trim. III 3. Caracterizarea rețelilor metal organice sintetizate	3.1. Caracterizarea compușilor sintetizați prin FT-IR și TG.	<u>Colaboratori externi</u> Prof. Dr. Fabio Arico Universitatea Ca' Foscari, Venetia, Italia

	3.2. Caracterizarea structurală a noilor compuși obținuți prin difracție de raze X. 3.3. Investigarea interacțiunilor generate în rețea.	Prof. dr. Cabeza Aurelio, Dr. Rosario Colodrero, Universitatea din Malaga, Spania
Faza IV – Trim. IV 4. Materiale compozite pe bază de rețele metal organice și chitosan	4.1. Optimizarea condițiilor de sinteză pentru obținerea materialelor compozite pe bază de rețele metal-organice cu chitosan 4.2. Studiarea efectului temperaturii, a pH-ului și a raportului între reactanți asupra structurii materialelor obținute 4.3. Testarea proprietăților adsorbante a compozitelor obținute	Prof. Dr. Demadis Konstantinos, Universitatea din Creta, Grecia

TEMA 2.2.2. Metodologii pentru combaterea poluării cu compuși azo și metale grele. Aplicații în protecția mediului.

Coordonator temă: Dr. Simona Gabriela MUNTEAN

***Obiectivul general al temei 2.2.2.:** Îndepărtarea poluanților din apele reziduale, cu aplicații în protecția mediului. Aplicarea unor materiale noi (MOF, complecși metalici, oxizi de fier, nanocompozite magnetice), pentru îndepărtarea prin diferite tehnici (adsorbție, fotodegradare) a poluanților colorați, din soluții apoase. Elaborarea unei metode eficiente de îndepărtare a poluanților colorați din sisteme multiple.*

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Degradarea fotocatalitică a coloranților utilizând combinații complexe ale cuprului(II) cu liganzi de tip baze Schiff	1.1. Determinarea eficienței combinațiilor complexe ale cuprului(II) cu liganzi de tip baze Schiff în cicluri multiple de degradare a coloranților 1.2. Studiul cinetic al fotodegradării coloranților din sisteme binare, utilizând combinații complexe ale cuprului(II) cu liganzi de tip baze Schiff 1.3. Elucidarea mecanismului procesului de fotodegradare	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Andreea Nistor Dr. Aurelia Vișa <u>Colaboratori interni</u> Dr. Liliana Halip Dr. Roxana Nicola Dr. Ildiko Buta <u>Colaboratori externi</u>
Faza II – Trim. II 2. Aplicarea rețelelor metal organice fosfonice (MOF) pentru îndepărtarea coloranților din soluții apoase prin adsorbție	2.1. Studiul termodinamic al adsorbției coloranților utilizând MOF 2.2. Studiul îndepărtării coloranților din sisteme binare utilizând MOF 2.3. Aplicarea MOF în cicluri multiple de adsorbție a coloranților 2.4. Elucidarea mecanismului procesului de adsorbție a coloranților utilizând MOF	Prof.Dr. Robert Ianoș, Universitatea Politehnica Timișoara Prof.Dr. Florica Manea, Universitatea Politehnica Timișoara
Faza III – Trim. III 3. Aplicarea rețelelor metal organice fosfonice (MOF) pentru îndepărtarea	3.1. Studiul cinetic al fotodegradării coloranților utilizând MOF 3.2. Influența variabilelor procesului de fotodegradare: concentrație, pH-ul soluției, cantitatea de catalizator	

coloranților din soluții apoase prin fotodegradare	3.3. Fotodegradarea coloranților din sisteme binare utilizând MOF	
Faza IV – Trim. IV 4. Aplicarea oxizilor de fier și a oxizilor de fier dopați pentru îndepărtarea poluanților colorați prin adsorbție și fotodegradare	4.1. Studiul influenței naturii materialului (oxizi de fier și oxizi de fier dopați) asupra randamentului de îndepărtare a coloranților prin adsorbție 4.2. Studiul influenței naturii materialului (oxizi de fier și oxizi de fier dopați) asupra randamentului de fotodegradare a coloranților 4.3. Investigarea efectului intensității radiației luminoase asupra degradării coloranților utilizând oxizi de fier și oxizi de fier dopați	

TEMA 2.2.3. Compuși cu funcțiune azo cu afinitate pentru materiale neconvenționale
Coordonator temă: Dr. Maria Elena RĂDULESCU GRAD

Obiectivul general al temei 2.2.3.: Sinteza și caracterizarea de noi compuși cu funcțiune azo alternativi, prezentând risc cu potențial scăzut asupra mediului înconjurător. Studiul proprietăților optice, colorimetrice, electrochimice și biologice ale azo compușilor obținuți.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Studiul privind sinteza și caracterizarea de noi compuși cu funcțiune azo, alternativi cu toxicitate redusă.	1.1. Obținerea de noi compuși cu funcțiune azo, alternativi, cu toxicitate redusă 1.2. Utilizarea metodelor specifice de analiză: cromatografice (TLC, HPLC) și spectroscopice (FT/IR, UV-Vis, ¹³ CRMN, ¹ HRMN, MS) în scopul caracterizării compușilor cu funcțiune azo sintetizați	Colectiv de cercetare Dr. Maria Elena Rădulescu Grad <u>Colaboratori externi</u> Dr. Giannin Moșoarcă, Dr. Simona Popa, Dr. Costea Liviu,
Faza II – Trim. II 2. Studiul proprietăților optice și colorimetrice ale compușilor cu funcțiune azo sintetizați	2.1. Studiul proprietăților optice ale compușilor cu funcțiune azo sintetizați 2.2. Studiul proprietăților colorimetrice ale compușilor cu funcțiune azo sintetizați	Universitatea Politehnica Timișoara, Facultatea de Inginerie Chimică Biotehnologii și Protecția Mediului, Timișoara
Faza III – Trim. III 3. Studiul privind sinteza și caracterizarea de noi compuși cu funcțiune azo, alternativi cu toxicitate redusă.	3.1. Obținerea de noi compuși cu funcțiune azo alternativi, cu toxicitate redusă 3.2. Utilizarea metodelor specifice de analiză: cromatografice (TLC, HPLC) și spectroscopice (FT/IR, UV-Vis, ¹³ CRMN, ¹ HRMN, MS) în scopul caracterizării compușilor cu funcțiune azo sintetizați	Dr. Vasile Gherman, Universitatea Politehnica Timișoara, Facultatea de Hidrotehnică, Timișoara Dr. Günter Faflek, University of Technology, Faculty of Technical Chemistry, Institute of Chemical Technologies and Analytics, Viena, Austria
Faza IV – Trim. IV 4. Studiul proprietăților electrochimice și	4.1. Studiul proprietăților electrochimice ale compușilor cu funcțiune azo sintetizați 4.2. Studiul proprietăților biologice ale compușilor cu funcțiune azo sintetizați	

biologice ale compușilor cu funcțiune azo sintetizați		
--	--	--

TEMA 2.2.4. Sisteme moleculare organice și hibride cu proprietăți specifice**Coordonator temă: Dr. Manuela CRIȘAN**

***Obiectivul general al temei 2.2.4.:** Dezvoltarea de noi sisteme organice multicomponent și compuși multifuncționali organici-anorganici cu proprietăți specifice, cu aplicabilitate în materiale funcționale și aplicații biomoleculare. Cercetările vor include studii interdisciplinare relevante, publicarea rezultatelor în reviste cu factor de impact și consolidarea rețelei de colaboratori internaționali și naționali.*

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Dezvoltarea de sisteme organice multicomponent cu arhitecturi supramoleculare variate	1.1. Optimizarea condițiilor de reacție utilizând diverse metode experimentale 1.2. Obținerea monocristalelor pentru analiza structurală prin difracție de raze X 1.3. Identificarea și caracterizarea formelor polimorfe ale compușilor sintetizați	Colectiv de cercetare Dr. Manuela Crișan Dr. Daniela Haidu <u>Colaboratori interni</u> Dr. Luminița Crișan Dr. Nicoleta Pleșu
Faza II – Trim. II 2. Caracterizarea fizico-chimică și structurală a compușilor sintetizați	2.1. Identificarea și caracterizarea compușilor sintetizați prin tehnici spectrometrice avansate și analiză termică 2.2. Determinarea structurii atomice și cristaline a compușilor prin difracția de raze X 2.3. Investigarea interacțiunilor chimice și fizice între componentele sistemului	<u>Colaboratori externi</u> Conf. Dr. Ioana Bâldea, Universitatea de Medicina si Farmacie "Iuliu Hațieganu", Cluj-Napoca
Faza III – Trim. III 3. Sinteza compușilor de coordonare cu diferiți liganzi polidentati	3.1. Stabilirea condițiilor experimentale optime pentru reacțiile de sinteză 3.2. Obținerea și selectarea monocristalelor adecvate pentru analiza structurală cu raze X 3.3. Investigarea proprietăților fizico-chimice și a structurii compușilor obținuți	Prof. Dr. Corina Danciu, Universitatea de Medicina si Farmacie "Victor Babeș", Timișoara Prof. Dr. Radu Șumălan, Universitatea de Științele Vieții "Regele Mihai I" din Timișoara
Faza IV – Trim. IV 4. Studiul proprietăților compușilor obținuți	4.1. Evaluarea proprietăților fotoluminescente ale compușilor sintetizați 4.2. Investigarea proprietăților antimicrobiene/antiinflamatoare/anticancer oase ale compușilor obținuți 4.3. Studiul relației structură-proprietăți în vederea optimizării și dezvoltării de noi compuși cu proprietăți dorite	Dr. Pavlina Bourosh și Dr. Yurii Chumakov, Universitatea de Stat din Moldova, Institutul de Fizică Aplicată, Chișinău Dr. Olga Danilescu, Universitatea de Stat din Moldova, Institutul de Chimie, Chișinău

PROGRAMUL DE CERCETARE 3

CHIMIA ȘI APLICAȚIILE COMPUȘILOR TETRAPIROLICI DIN CLASA PORFIRINELOR

Coordonator program: Dr. Aurelia VIȘA

Obiectiv general

Obținerea de noi structuri organice tetrapirolice cu proprietăți dirijate și elaborarea de noi materiale avansate multifuncționale destinate aplicațiilor în domeniile opticii, electrochimiei, biologiei sau catalizei.

Obiective specifice

- Obținerea de *meso*-tetra-fenilporfirine simetric și nesimetric substituie de tip A_3B și A_2B_2 cu grupe funcționale cu reactivitate diferită, grefate în diferite poziții ale structurii, din precursori neporfirinici sau prin reacții de funcționalizare a porfirinelor.
- Obținerea complexilor porfirinelor cu metale tranzitionale
- Obținerea de micro și nano-materiale poroase fotochimic active prin imobilizarea porfirinelor obținute pe matrici de silice și/sau polimerice
- Testări ale proprietăților de recunoaștere/detecție (analizi farmaceutici) sau adsorbție (medicamente, gaze, coloranți) ale nanomaterialelor pe bază de porfirine

Echipa programului de cercetare 3

Nr. crt.	Prenume NUME	Funcția	Categoria profesională	Norma
3	Dr. Anca LASCU	Responsabil subprogramul 3.1. Membru subprogramul 3.1.	CS III	1
4	Dr. Ionela FRÎNGU	Membru subprogramul 3.1.	CS	1
5	Drd. Ion FRĂȚILESCU	Membru subprogramul 3.1.	ACS	1
6	Drd. Camelia EPURAN	Membru subprogramul 3.1.	ACS	1

Total norme: ACS-CSI: CS I: 0; CS II: 0; CSIII: 1; CS: 1; ACS: 2 = 4,0

Finanțare

Finanțarea resursei umane este asigurată de la bugetul de stat prin Academia Română, care este ordonatorul principal de credite, în condițiile legii.

Cuantumul estimat al salariilor personalului de cercetare inclus în Programul 2 este de aproximativ **456.000 lei**.

Programul de cercetare 3 este constituit din **1 Subprogram și 1 Temă** care contribuie la realizarea unitară a scopului și obiectivelor programului.

SUBPROGRAMUL 3.1.

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

Responsabil: Dr. Anca LASCU

TEMA 3.1.1. Noi structuri porfirinice simetric și asimetric substituie la nucleul fenilic cu grupe cu efect donor/atrăgător de electroni. Complecși ale acestora cu metale tranzitionale. Explorarea capacităților senzoristice ale noilor compuși.

Coordonator temă: Dr. Anca LASCU

Obiectivul general al temei 3.1.1.: Obținerea, caracterizarea și aplicațiile unor noi structuri porfirinice cu proprietăți dirijate. Elaborarea de noi materiale multifuncționale pe bază de porfirine, cu proprietăți optice și senzoristice îmbunătățite.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Obținerea de noi porfirine simetric și A_3B , A_2B_2 asimetric mixt-substituie, aplicând variante ale metodelor multicomponente	1.1. Obținerea, separarea și purificarea de noi structuri porfirinice simetric și asimetric substituie la nucleul fenilic cu grupe cu efect donor/atrăgător de electroni 1.2. Caracterizarea prin spectroscopie UV-viz, fluorimetrie, FT-IR, RMN și TLC, analiză elementară, electrochimică a compușilor porfirinici obținuți	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Anca Lascu Dr. Ionela Frîngu Drd. Camelia Epuran Drd. Ion Frățilescu <u>Colaboratori interni</u> Dr. Nicoleta Pleșu Dr. Aurelia Vișa
Faza II – Trim. II 2. Obținerea complecșilor porfirinelor cu metale tranzitionale	2.1 Sinteza și separarea pe coloana cromatografică a metalo-porfirinelor 2.2. Caracterizarea prin spectroscopie UV-viz, fluorimetrie, FT-IR, RMN și TLC a compușilor porfirinici obținuți	<u>Colaboratori externi</u> Dr. Dana Vlascici, Dr. Vlad Chiriac, Universitatea de Vest Timișoara
Faza III – Trim. III 3. Obținerea de micro și nano-materiale poroase fotochimic active prin imobilizarea porfirinelor obținute pe matrici de silice și/sau polimerice	3.1. Caracterizarea prin tehnici microscopice, analiză termică, UV-viz, FT-IR, BET și fluorescență a materialelor hibride obținute	Dr. Ana-Maria Macsim, Institutul de Chimie Macromoleculară „Petru Poni”, Iași
Faza IV – Trim. IV 4. Demonstrarea capacității de detecție sau adsorbție a porfirinelor comparativ cu cea a nanomaterialelor realizate	4.1. Testări ale proprietăților de recunoaștere/detecție (analizi farmaceutici) sau adsorbție (medicamente, gaze, coloranți) ale nanomaterialelor pe bază de porfirine 4.2. Diseminare. Redactare lucrări, participare conferințe	

PROGRAMUL DE CERCETARE 4

OBȚINEREA DE COMPUȘI MULTIFUNCȚIONALI CU RELEVANȚĂ ÎN ȘTIINȚA MATERIALELOR NANOSTRUCTURATE, BIOCHIMIE SAU PROTECȚIA MEDIULUI

Coordonator program: Dr. Elisabeta-Ildyko SZERB

Obiectiv general

Sinteza și caracterizarea de noi materiale moleculare, compozite și hibride nanostructurate cu proprietăți țintite pentru aplicații în știința materialelor, electrooptică, biomedicină, cataliză și protecția mediului; determinarea relației structură moleculară-structură supramoleculară-proprietate; optimizarea structurilor moleculare și/sau supramoleculare.

Obiective specifice

- Sinteza și caracterizarea de noi combinații complexe / materiale funcționale mono- sau polimetalice ale unor elemente din blocul *d* cu proprietăți optice țintite; determinarea relației structură moleculară-structură supramoleculară-proprietate, optimizarea structurilor moleculare și/sau supramoleculare pentru aplicații în știința materialelor;
- Sinteza și caracterizarea de noi combinații complexe cu proprietăți fotocatalitice pentru procesul de degradare a poluanților din apele uzate; investigarea relației structură-proprietate în procesul de fotodegradare în domeniul UV și vizibil; determinarea stabilității materialelor în urma fotodegradării poluanților;
- Dezvoltarea și caracterizarea materialelor de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat cu combinații complexe ale elementelor din blocul *d*, în vederea aplicării acestora în metode avansate de detecție electrochimică individuală și simultană/selectivă a analiților țintă;
- Sinteza și caracterizarea unor materiale anorganice și compozite cu scopul de a obține proprietăți morfo-structurale țintite în vederea utilizării lor pentru diferite aplicații atât biologice (sinteme de eliberare controlată de medicamente) cât și în protecția mediului, folosind alături de metodele clasice de sinteză, pe cele prin metode "verzi", precum cea asistată de microunde;
- Obținerea și caracterizarea structurală a unor compuși noi ce conțin concomitent minim două ingrediente active de tip antipirină, tiofen sau salicilaldehidă. Ingredientele active dintr-o moleculă vor fi legate atât prin legături covalente cât și coordinative. Se vor obține compuși organici sau anorganici cu elemente din seria *3d* a metalelor, iar evaluarea activității lor potențial biologice se va testa pe diferite culturi celulare sau fungice;
- Sinteza unor site moleculare mesoporoase cu structură și textură controlată utilizate pentru adsorbția unor substanțe poluante în special CO₂ și dezvoltarea de noi catalizatori din clasa heteropolioxometalaților (HPOMs) utilizați în reacția de conversie a bioetanolului;

Echipa programului de cercetare 4

Nr. crt.	Prenume NUME	Funcția	Categoria profesională	Norma
Dr. Elisabeta-Ildyko SZERB Coordonator programul de cercetare 4 Responsabil subprogramul 4.1				
1	Dr. Elisabeta-Ildyko SZERB	Membru subprogramul 4.1	CS I	1
2	Dr. Sorina ILIEȘ	Membru subprogramul 4.1	CS II	1
3	Dr. Carmen CREȚU	Membru subprogramul 4.1	CS III	1
4	Dr. Adelina-Antonia ANDELESCU	Membru subprogramul 4.1	CS III	1
5	Dr. Ildiko Mariana BUTĂ	Membru subprogramul 4.1	CS III	1
6	<i>Drd.</i> Evelyn POPA	Membru subprogramul 4.1	ACS/DRD	1/1
7	<i>Drd.</i> Alexandru VIȘAN	Membru subprogramul 4.1	ACS/DRD	1/1
8	<i>Drd.</i> Diana-Oana RUSU	Membru subprogramul 4.1	ACS/DRD	1/1
9	<i>Ing.</i> Raluca DANCAR	Membru subprogramul 4.1	ACS	1
Dr. Ana-Maria LACRĂMĂ Responsabil subprogramul 4.2				
10	Dr. Ana-Maria LACRĂMĂ	Membru subprogramul 4.2	CS II	1
11	Dr. Livia DEVESELEANU-CORÎCI	Membru subprogramul 4.2	CS III	1
12	Dr. Catalin IANĂȘI	Membru subprogramul 4.2	CS III	1
13	Dr. Roxana NICOLA	Membru subprogramul 4.2	CS	1
14	<i>Drd.</i> Bogdan-Ionuț MARA	Membru subprogramul 4.2	ACS/DRD	1/1
15	Poziție vacantă bugetată 2025	Membru subprogramul 4.2.	ACS	1
Dr. Orsina VERDEȘ Responsabil subprogramul 4.3				
16	Dr. Orsina VERDEȘ	Membru subprogramul 4.3	CS III	1
17	Dr. Silvana BORGĂNESCU	Membru subprogramul 4.3	CS III	1
18	Dr. Mariana SUBA	Membru subprogramul 4.3	CS	1
		Personal auxiliar P4		
19	Sing. Tiberiu BALAZS	Membru programul de cercetare 4	AsI	1
20	Mihaela-Marilena MUDURA	Membru programul de cercetare 4	AsI	1

Total norme: ACS-CSI: CS I: 1; CS II: 2; CSIII: 7; CS: 2; ACS: 6 = 18

Alte categorii: total norme: AsI: 2 = 2

Doctoranzi: 5 (3 cu bursă, 2 fără bursă) din care 4 sunt membri ai programului de cercetare 4;

Conducători de doctorat: 2

Colaborare/realizare activități cu alte Subprograme din institut: (i) dr. B. MARA colaborează cu dr. R. Curpan (proiectul 1); (ii) dr. L. CSEH face parte din colectivul de cercetare al temei 4.2.2 (programul 4); (iii) dr. I. BUTĂ colaborează cu Dr. S. Muntean (proiectul 2, tema 2.2.2).

Conducători de doctorat și doctoranzi: în cadrul programului de cercetare 4 activează în prezent 2 (doi) conducători de doctorat: Dr. Elisabeta-Ildyko Szerb și dr. Liliana Cseh care au în îndrumare, în anul universitar 2024-2025, un număr de 5 (cinci) doctoranzi din care 4 (patru) sunt membri ai programului 4. Cei doi conducători de doctorat au solicitat pentru anul universitar 2025-2026 un număr de 3 (trei) locuri la doctorat, cu bursă.

Finanțare

Finanțarea resursei umane este asigurată de la bugetul de stat prin Academia Română, care este ordonatorul principal de credite, în condițiile legii.

Cuantumul estimat al salariilor personalului de cercetare inclus în Programul 4 este de aproximativ 2.050.000 lei.

Programul de cercetare 4 este constituit din 3 *Subprograme* și 6 *Teme* complementare care contribuie la realizarea unitară a scopului și obiectivelor programului.

SUBPROGRAMUL 4.1.

Combinatii complexe ale metalelor din blocul d generatoare de sisteme funcționale supramoleculare avansate cu aplicații în știința materialelor

Responsabil: Dr. Elisabeta-Ildyko SZERB

TEMA 4.1.1. Sisteme supramoleculare cu proprietăți optice pe bază de combinații complexe ale metalelor din blocul d

Coordonator temă: Dr. Carmen CREȚU

Obiectivul general al temei 4.1.1.: Sinteza și caracterizarea de noi combinații complexe / materiale funcționale mono- sau polimetalice ale unor elemente din blocul d cu proprietăți optice țintite; determinarea relației structură moleculară-structură supramoleculară-proprietate, optimizarea structurilor moleculare și/sau supramoleculare pentru aplicații în știința materialelor.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Sinteza unor liganzi premesogenici pe bază de atomi N / O donori funcționalizați cu catene alchilice hidrofobe/hidrofile de diferite lungimi	1.1. Stabilirea condițiilor optime de reacție în vederea obținerii liganzilor 1.2. Caracterizarea structurală a liganzilor obținuți prin AE, spectroscopie RMN, IR și UV.	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Adelina Andelescu Drd. Evelyn Popa Drd. Diana-Oana Rusu <i>Ing. Raluca Danciar</i> <u>Personal auxiliar</u>

Faza II – Trim. II 2. Obținerea de combinații complexe / materiale hetero-bimetalice pe bază de metale d^6-d^{10} cu liganzii sintetizați	2.1. Sinteza combinațiilor complexe / materialelor hetero-bimetalice 2.2. Caracterizarea structurală prin AE și spectroscopie RMN, IR și UV-Vis	Tiberiu Balasz Mihaela-Marilena Mudura <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
Faza III – Trim. III 3. Determinarea proprietăților cristalin lichide termotrope / liotrope ale combinațiilor complexe / materialelor bimetalice obținute	3.1. Caracterizare prin microscopie optică cu polarizare (POM) 3.2. Determinarea stabilității termice prin calorimetrie de scanare diferențială (DSC) și termogravimetrie (TGA) 3.3. Caracterizarea structurală prin metode difractometrice (PXRD)	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
Faza IV – Trim. IV 4. Determinarea proprietăților optice ale combinațiilor complexe / materialelor bimetalice sintetizate anterior	4.1. Determinarea proprietăților fotofizice în solvenți organici sau în stare solidă 4.2. Determinarea proprietăților fotofizice în diferite stări condensate	

TEMA 4.1.2. Combinații complexe ale ionilor metalelor din blocul d conținând liganzi de tip baze Schiff cu implicații în protecția mediului

Coordonator temă: Dr. Ildiko Mariana BUTĂ

Obiectivul general al temei 4.1.2.: Sinteza și caracterizarea de noi combinații complexe cu proprietăți fotocatalitice pentru procesul de degradare a poluanților din apele uzate; investigarea relației structură-proprietate în procesul de fotodegradare în domeniul UV și vizibil; determinarea stabilității materialelor în urma fotodegradării poluanților.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Obținerea unui ligand polidentat de tip bază Schiff	1.1 Stabilirea condițiilor optime de sinteză 1.2 Sinteza ligandului 1.3 Caracterizarea prin AE, RMN și IR a ligandului sintetizat	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Ildiko Mariana Bută <u>Colaboratori interni</u>
Faza II – Trim. II 2. Obținerea de combinații complexe ale unor elemente din blocul d	2.1. Sinteza combinațiilor complexe. 2.2 Studiul influenței raportului molar, contraionului și a solventului 2.3 Stabilirea condițiilor optime pentru obținerea de monocristal	Dr. Simona Gabriela Muntean Dr. Andreea Maria Nistor <u>Colaboratori externi</u>

Faza III – Trim. III 3. Caracterizarea combinațiilor complexe obținute	3.1. Caracterizarea prin AE, IR, UV-Vis și conductivitate electrică molară 3.2 Caracterizarea structurală prin difracție de raze X pe monocristal 3.3 Caracterizarea compușilor prin spectroscopie de luminescență	Dr. Sergiu Shova, Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni", Iași
Faza IV – Trim. IV 4. Studiul proprietăților fotocatalitice ale combinațiilor complexe obținute, în procesul degradării coloranților din soluții apoase prin spectroscopie UV-Vis și spectrometrie de masă	4.1. Studiul proprietăților fotocatalitice ale combinațiilor complexe în procesul de degradare a coloranților cu evaluarea: - timpului de iradiere - cantității de catalizator - concentrației inițiale a soluțiilor de colorant. 4.2. Studiul 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 *d*.

Coordonator temă: Dr. ing. Sorina Ilieș

*Obiectivul general al temei 4.1.3.: Dezvoltarea și caracterizarea materialelor de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat cu combinații complexe ale unor elemente din blocul *d*, în vederea aplicării acestora în metode avansate de detecție electrochimică individuală și simultană/selectivă a analiților țintă.*

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – 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 (CQD, GQD, 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 combinații complexe ale unor elemente din blocul <i>d</i>	Colectiv de cercetare Drd. Alexandru Vișan <u>Colaboratori interni</u> Dr. Elisabeta-Ildyko Szerb Dr. Carmen Cretu Dr. Adelina Andelesc <u>Colaboratori externi</u> Prof. Florica Manea, , Dr. Aniela Pop, Dr. Anamaria Baci, Universitatea Politehnica Timișoara, Facultatea de Chimie si Ingineria Mediului.
Faza II – Trim. II 2. Caracterizarea morfostructurală și electrochimică a materialelor de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat	2.1. Caracterizarea morfostructurală a materialelor de electrod prin SEM/ EDAX, FTIR, RX 2.2. Caracterizarea electrochimică a materialelor de electrod: - determinarea ariei suprafeței electroactive prin metoda clasică feri/ferocianură	Dr. Sorina Negrea, INCD-ECOIND Timisoara

	- 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	Dr. Bertrand Donnio, Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (IPCMS), CNRS-Université de Strasbourg, Strasbourg, Franța.
Faza III – 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 IV – 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	

SUBPROGRAMUL 4.2.

Compuși multifuncționali organici - anorganici cu aplicații biologice

Responsabil: Dr. Ana-Maria LACRĂMĂ

TEMA 4.2.1. Materiale anorganice și compozite pe bază de silice, fier și carbon și structuri organometalice.

Coordonator temă: Dr. Ana-Maria LACRĂMĂ

Obiectivul general al temei 4.2.1.: Sinteza și caracterizarea unor materiale anorganice și compozite cu scopul de a obține proprietăți morfo-structurale țintite în vederea utilizării lor pentru diferite aplicații atât biologice (sinteme de eliberare controlată de medicamente) cât și în protecția mediului,

folosind alături de metodele clasice de sinteză, pe cele prin metode "verzi", precum cea asistată de microunde.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Sinteza sol-gel și caracterizarea unor materiale de silice funcționalizată și a unor nanocompozite de oxid de fier-silice funcționalizată	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 1.2. Funcționalizarea cu diferite grupări organice folosind metodele: co-condensării și cea de post grefare 1.3. Caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute prin: IR, UV-VIS, TEM, BET, difracție de raze X, SAXS și selectarea unor materiale în vederea testării pentru diferite aplicații	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Cătălin Ianăși Dr. Roxana Nicola <u>Colaboratori interni</u> Dr. Carmen Crețu Drd. Alexandru Vișan Drd. Diana-Oana Rusu <u>Colaboratori externi</u> Dr. László Almásy, Dr. Zoltán Dudás, Dr. Adél Len, Centrul de Cercetare a Energiei, Budapesta, Ungaria Dr. Alfonso Policicchio, Departamentul de Fizică, Universitatea din Calabria, Italia Prof. Dr. Adina Negrea, Facultatea de Inginerie Chimică, Biotehnologii și Protecția Mediului, Universitatea Politehnica Timișoara
Faza II – Trim. II 2. Sinteza prin metode "verzi" a unor materiale structurate poroase pe bază de carbon din deșeuri vegetale și determinarea proprietăților optice sau a altor proprietăți	2.1. Stabilirea condițiilor optime de obținere a materialelor pe bază de carbon 2.2. Stabilirea condițiilor optime ale reacției de funcționalizare și funcționalizarea materialelor structurate pe bază de carbon cu catene alchilice 2.3. Sinteza de materiale cu matrice carbonică cu structură mezo și microporoasă și doparea cu oxizi de metal pentru îmbunătățirea proprietăților morfo-structurale 2.4. Caracterizarea morfo-structurală a materialelor funcționalizate prin IR, NMR, BET, TEM, SEM-EDS 2.5. Determinarea proprietăților fotofizice în stare solidă și în solvenți organici pentru materialele obținute la punctul 2.2 2.6. Testarea ca materiale adsorbante, catalizatori, sau ca materiale cu activitate microbiologică pentru matricile simple și dopate obținute la punctul 2.3	
Faza III – Trim. III 3. Sinteza și caracterizarea de structuri organo-metalice, de tip MOF, utilizând precursori de Zr(IV) cu liganzi dicarboxilici și de tip N,N	3.1. Sintetizarea de materiale policristaline de tip Zr-MOF prin metoda hidro/solvotermală 3.2. Sinteza de materiale policristaline de tip Zr-MOFs prin metoda activării în câmp ultrasonor sau a microundelor 3.3. Caracterizarea morfo-structurală a materialelor prin IR, TG, BET, XRD, SEM-EDS.	

Faza IV – Trim. IV 4. Testarea unor materiale selectate pentru diferite aplicații	4.1. Testarea unor materiale selectate pentru încărcarea și eliberarea controlată de medicamente 4.2. Testarea unor materiale selectate pentru capacitatea de încărcare cu hidrogen 4.3. Testarea unor materiale selectate pentru adsorbția unor ioni metalici din soluții apoase	
---	---	--

TEMA 4.2.2. Obținerea și investigarea proprietăților potențial biologice ale compușilor cu ingrediente active mixte

Coordonator temă: Dr. Livia Nicoleta DEVESELEANU-CORÎCI

***Obiectivul general al temei 4.2.2.:** Obținerea și caracterizarea structurală a unor compuși noi ce conțin concomitent minim două ingrediente active de tip antipirină, tiofen sau salicilaldehidă. Ingredientele active dintr-o moleculă vor fi legate atât prin legături covalente cât și coordinative. Se vor obține compuși organici sau anorganici cu elemente din seria 3d a metalelor, iar evaluarea activității lor potențial biologice se va testa pe diferite culturi celulare sau fungice.*

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Structuri organice cu ingrediente active	1.1. Obținere de structuri pe bază de antipirină și tiofen 1.2. Caracterizare structurală prin 1D și 2D RMN, IR, HR-MS 1.3. Caracterizare prin difracție de raze X pe monocristale pentru compuși cu o cristalizare corespunzătoare	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Liliana Cseh Dr. Livia Deveseleanu-Corici Dr. Ildiko Bută Drd. Bogdan-Ionuț Mara
Faza II – Trim. II 2. Structuri anorganice cu ingrediente active	2.1. Obținere de combinații complexe cu elemente de tip 3d conținând farmacofori de tip tiofen și piperidină 2.2. Studiul influenței raportului molar, contraionului, solventului și stabilirea condițiilor optime pentru obținerea de monocristal 2.3. Caracterizare prin AE, IR, UV-Vis și difracție de raze X pe monocristal pentru compuși cu o cristalizare corespunzătoare	<u>Colaboratori interni</u> Dr. Ramona Curpăn <u>Colaboratori externi</u> Prof. Dr. Codruța Șoica, Universitatea de Medicină și Farmacie „Victor Babeș”, Timișoara Dr. Valentin Badea, Universitatea Politehnica Timișoara
Faza III – Trim. III 3. Evaluarea proprietăților potențial biologice	3.1. Efectuarea testului de viabilitate și morfologie celulară 3.2. Analiza potențialului apoptotic 3.3. Evaluarea potențialului de membrană mitocondrială 3.4. Evaluarea producției de specii reactive de oxigen	Dr. Alina Nicolescu, Institutul de Chimie Macromoleculară „Petru Poni”, Iași

Faza IV – Trim. IV 4. Studiul relației structură - proprietăți	4.1. Colectarea și prelucrarea datelor generate experimental 4.2. Analiza datelor pentru identificarea de fragmente responsabile pentru activitatea biologică 4.3 Analiza statistică a datelor pentru a identifica corelări între structură și proprietățile urmărite 4.4 Propunere de structuri noi pentru sinteză și evaluare experimentală	Prof. Sergiu Shova, Institutul de Chimie Macromoleculară „Petru Poni”, Iași Prof. Dr. Ersilia Alexa, Universitatea de Științe Agricole și Medicină Veterinară a Banatului „Regele Mihai I al României” din Timișoara, Facultatea de Inginerie Alimentară
--	--	---

SUBPROGRAMUL 4.3.

Proiectarea și sinteza de 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. Orsina VERDEȘ

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 temă: Dr. Orsina VERDEȘ

Obiectivul general al temei 4.3.1.: Sinteza unor site moleculare mesoporoase cu structură și textură controlată utilizate pentru adsorbția unor substanțe poluante în special CO₂ și dezvoltarea de noi catalizatori din clasa heteropolioxometalaților (HPOMs) utilizați în reacția de conversie a bioetanolului.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2025

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Prepararea unor suporturi de tip sită moleculară cu proprietăți texturale controlate prin utilizarea diferiților surfactanți și agenți de expandare a volumului porilor. Prepararea unor heteropolioxometalați (HPOMs) cu	1.1. Sinteza de site moleculare (MCM-48, KIT-6, SBA-15, MCM-41) prin metoda sol-gel 1.2. Funcționalizarea suporturilor de silice de tip sită moleculară prin grefarea unor amine (primare, secundare, terțiare) cu ajutorul unor agenți de silanizare sau grefarea directă folosind amino-silani (ex: APTES). Aceste compozite sunt utilizate la adsorbția dioxidului de carbon la temperaturi sub 100°C	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Orsina Verdeș Dr. Silvana Borcănescu Dr. Mariana Suba <u>Colaboratori externi</u> Conf. Dr. Paul Barvinschi Universitatea de Vest Timișoara

activitate catalitică ridicată	1.3. Sinteza de oxizi metalici de tipul Me/SBA-15 respectiv Me/KIT-6 prin impregnare (Me = Ni, Ce, Cu, Au, Mg) 1.4. Studiul influenței temperaturii, respectiv a timpului asupra formării structurii sitei moleculare MCM-48 functionalizată cu diverse amine 1.5. Sinteza heteropolicompușilor de tipul $H_{3-x}Cs_xPW$ ($x=0, 1, 2, 2.25, 2.5$ și 3) urmată de depunerea acestora prin impregnare pe site moleculare de tip MCM-48 și KIT-6. Utilizarea acestor HPOMs la reacția de conversie a etanolului în scopul obținerii unor selectivități ridicate în etenă /acetaldehidă	Dr. Radu Bănică, Institutul Național de Cercetare Dezvoltare pentru Electrochimie și Materie Condensată (INCEMC) Timișoara Conf. Dr. Snezana Uskoković –Marković, Facultatea de Farmacie, Universitatea din Belgrad, Serbia
Faza II – Trim. II 2. Caracterizarea fizico-chimică a compozitelor de silice grefate cu amine și a HPOMs puri și depuși pe suporturi prin diferite metode de analiză texturală și structurală	2.1. Determinarea proprietăților texturale a compozitelor de silice grefate cu amine și a heteropoli oxometalaților sintetizați prin măsurători de suprafață specifică și porozitate prin metoda BET-BJH 2.2. Caracterizarea structurală a compozitelor de silice grefate cu amine și a heteropolioxometalaților depuși pe site moleculare prin: spectroscopie FT-IR-Raman, analiza termică cuplată cu MS (TGA-MS), analiza difractometrică la unghiuri mici, microscopie electronică SEM-EDS și TEM	
Faza III – Trim. III 3. Evaluarea proprietăților de adsorbție/desorbție ale CO_2 pe compozitele de silice grefate cu amine la temperaturi sub $100^\circ C$	3.1. Măsuratori de cicluri de adsorbție-desorbție programată termic-TPD a CO_2 pe compuși sintetizați cu metoda adaptată pentru analiza TG-DTA cuplată cu FT-IR	
Faza IV – Trim. IV 4. Determinarea proprietăților catalitice a HPOMs depuși pe suport în reacția de conversie a alcoolilor inferiori. Corelarea capacității de adsorbție a CO_2 cu proprietățile texturale și structurale ale sitelor moleculare sintetizate.	4.1. Studiul cinetic pentru determinarea mecanismului de adsorbție-desorbție de CO_2 pe baza unor modele cinetice prezentate în literatura de specialitate 4.2. Studiul dezactivării și regenerării catalizatorilor prin teste de activitate catalitică de lungă durată la diferite temperaturi pentru cei mai performanți catalizatori 4.3. Calcularea vitezelor de formare a produșilor de reacție importanți și a bilanșurilor de materiale 4.4. Prelucrarea și interpretarea datelor experimentale, redactare comunicări științifice, postere pentru simpozioane științifice	