



ACADEMIA ROMÂNĂ
INSTITUTUL DE CHIMIE „CORIOLAN DRĂGULESCU”

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



Director,

Dr. Otilia COSTISOR

PLAN STRATEGIC DE CERCETARE PENTRU 5 ANI AL
INSTITUTULUI DE CHIMIE “CORIOLAN DRĂGULESCU”
2023 - 2028

Secretar stiintific,
Dr. Alina BORA

CONSIDERAȚII GENERALE

Scop

PLANUL STRATEGIC DE CERCETARE PENTRU 5 ANI AL INSTITUTULUI DE CHIMIE “CORIOLAN DRĂGULESCU”, 2023 - 2028, își propune conservarea și consolidarea performanței Institutului de Chimie “Coriolan Drăgulescu” (ICT), cu posibilități de dezvoltare în arii de interes pentru România și Uniunea Europeană, prin susținerea, dezvoltarea și orientarea spre impact a competențelor și performanțelor de cercetare existente la ICT.

Obiective specifice

Dezvoltarea capacității proprii de cercetare prin:

- alinierea activității științifice la standarde, principii, coduri de conduită și valori recunoscute internațional;
- valorificarea, difuzarea și diseminarea cunoștințelor și rezultatelor cercetării;
- extinderea colaborărilor de cercetare cu centre academice din țară și străinătate în vederea creșterii competitivității și adresării provocărilor societale;
- creșterea gradului de implicare, performanțelor calitative și vizibilității pe plan național/internațional;
- dezvoltarea, consolidarea și susținerea resursei umane și a competitivității acesteia pe plan național/internațional;
- sprijinirea tinerilor doctoranzi pentru finalizarea cu succes a tezei de doctorat;
- deschiderea de noi direcții de cercetare în vederea explorării unor domenii emergente, cu potențial impact asupra noilor tendințe de dezvoltare în știință;
- valorificarea infrastructurii de cercetare existentă prin creșterea gradului de utilizare și deschiderea accesului către cei interesați.

Rezultatele preconizate

Planul strategic de cercetare pentru 5 ani al ICT, 2023-2028, va asigura conservarea și consolidarea competențelor științifice în domenii de importanță strategică pentru dezvoltarea ICT, prin corelarea și coordonarea activităților și resurselor institutului precum și valorificarea acestor competențe/expertize/experiențe prin rezultate ale cercetării livrate mediului științific.

Indicatori de rezultat

- articole publicate în reviste cotate ISI (web of science);
- cărți și capitole de carte în edituri consacrate național și internațional;

- participări la manifestări științifice naționale și internaționale, stagii de pregătire, cursuri de perfecționare;
- organizarea de manifestări științifice;
- cereri brevete/brevete depuse la nivel național și internațional;
- cercetători (tineri) nou angajați în institut;
- doctoranzi, post-doctoranzi, voluntari instruiți în institut;
- contracte de cercetare extraplan, finanțate din fonduri naționale sau internaționale.

Structura Planului de cercetare

Planul de cercetare al Institutului de Chimie "Coriolan Drăgulescu" (ICT) este structurat în **patru Programe de cercetare** după cum urmează:

Programul 1: Cheminformatică și alte metode de chimie computațională.

Programul 2: Compusi multifuncționali organici și polimerici - cu proprietăți dirijate și aplicații în protecția mediului și dezvoltare durabilă.

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

Programul 4: Obținerea de compuși multifuncționali cu relevanță în știința materialelor nanostructurate, biochimie sau protecția mediului.

Programele de cercetare sunt constituite din **7 Subprograme** și fiecare subprogram din **Teme** complementare care contribuie la realizarea unitară a scopului și obiectivelor fiecărui program de cercetare.

Subprogram 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, electroliti, membrane, sorbanti, biocide, catalizatori și de protecție anticorozivă.

Subprogramul 2.2. Compusi multifuncționali - cu proprietăți dirijate și aplicații în protecția mediului.

Subprogram 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.

Etica

Responsabilii de Programe/Subprograme/Teme au obligația de a se asigura că se respectă normele prevăzute de (i) Legea nr. 206/2004 privind buna conduită în cercetarea științifică, dezvoltarea tehnologică și inovare, cu modificările și completările ulterioare, (ii) Legea nr. 319/2003 privind Codul de etică și deontologie profesională al personalului de cercetare-dezvoltare, (iii) Regulamentul intern al ICT, precum și (iii) alte reglementari legislative de etică specifice domeniului de cercetare.

Egalitatea de șanse

Pe perioada de implementare a planului de cercetare se va asigura egalitatea de șanse între toți cercetătorii institutului și absența discriminărilor de orice fel, în conformitate cu prevederile legale naționale și practicile europene. Responsabilii de Programe/Subprograme/Teme vor lua toate măsurile necesare pentru promovarea egalității de șanse în perioada de implementare a Programului/Subprogramului/Temei coordonate.

PROGRAMUL DE CERCETARE 1

CHEMINFORMATICĂ ȘI ALTE METODE DE CHIMIE COMPUTAȚIONALĂ

Scopul programului

Identificarea de compuși agrochimici, compuși cu activitate biologică, și înțelegerea, la nivel molecular, a interacțiilor ligand-țintă, dar și repoziționarea medicamentelor aprobate în scopuri terapeutice noi.

Obiectiv general

Explorarea *in silico* (aplicând metode de cheminformatică și chimie computațională) a spațiului chimic a compușilor cu activitate biologică și/sau cu potențial agrochimic, precum și explorarea relațiilor medicament - țintă biologică și medicament - efect farmacologic, repoziționarea medicamentelor aprobate.

Obiective specifice

- Obținerea de noi compuși cu potențială activitate pesticidă și toxicitate redusă față de insecte, mamifere, păsări, organisme acvatice și oameni prin metode cheminformatic;
- Modelarea interacțiilor erbicid-proteină țintă (nativă/mutantă) pentru erbicide potente/inducătoare de rezistență;
- Dezvoltarea de algoritmi pentru selectarea structurilor 3D relevante pentru andocarea moleculară;
- Predicția profilului efectelor adverse ale medicamentelor prin generarea de modele de predicție, cu ajutorul cărora pot fi identificate structuri candidat pentru repoziționare în indicații terapeutice noi;
- Dezvoltarea de modele cu valoare predictivă ridicată pentru liganzi cu activitate biologică folosind diferiți algoritmi.

Rezultate preconizate

- Compuși cu potențială activitate pesticidă, erbicidă și activitate biologică pentru diverse ținte de interes;
- Modele cu valoare predictivă ridicată pentru diverse clase de liganzi;
- Parametrii pentru selectarea structurilor 3D relevante din baze de date specifice (e.g., Protein Data Bank, PDB) pentru andocarea moleculară;
- Actualizarea conexiunilor medicament – boală – țintă biologică;
- Evaluarea computațională a medicamentelor aprobate și a celor retrase de pe piață, inclusiv a medicamentelor experimentale, investigaționale și a metabolitelor;
- Modele de predicție pentru structuri candidat pentru repoziționare în indicații terapeutice noi;
- Asamblarea unei baze de date de medicamente antivirale, antidiabetice, antiinflamatoare repoziționate

Echipa programului

Nr. crt.	Prenume NUME	Funcția	Categorie personal
Dr. Ramona CURPĂN - Coordonator Program de cercetare 1			
1.	Dr. Ramona CURPĂN	Responsabil subprogram 1.1	CS II
2.	Dr. ing. Simona FUNAR-TIMOFEI	Membru proiect 1.1.	CS I
3.	Dr. Sorin AVRAM	Membru proiect 1.1.	CS II
4.	Dr. Alina BORA	Membru proiect 1.1.	CS II
5.	Dr. Liliana PĂCUREANU	Membru proiect 1.1.	CS II
6.	Dr. Ana Borota	Membru proiect 1.1.	CS III
7.	Dr. Luminița Crișan	Membru proiect 1.1.	CS III
8.	Dr. Liliana Halip	Membru proiect 1.1.	CS III
9.	Dr. Cristian Neanu	Membru proiect 1.1.	CS III
10.	Chim. Daniela Istrate	Membru proiect 1.1.	CS
11.	Chim. Cristina Toma	Membru proiect 1.1.	AsC
PERSONAL AUXILIAR			
1	Ana Poenaru	Membru proiect 1.1.	Cdate I

Infrastructura de cercetare

Infrastructura ICT - cuprinde și infrastructura centrului interdisciplinar RO-OPENSREEN – precum și infrastructura de cercetare a colaboratorilor din țară și străinătate vor asigura realizarea obiectivelor programului de cercetare **1** după cum urmează:

Nr. crt.	Utilizare echipament	Echipament
1	Procesarea și analiza volumelor mari de date, calcule avansate - DFT, <i>ab-initio</i> , virtual screening.	Sistem multiprocesor IBM – 6 servere * 16 CPU Intel Xeon X5570, 16 GB memorie Stații de lucru individuale

2	Managementul bazelor de date, prelucrare volume mari de date, simulări de dinamică moleculară.	Sistem multiprocesor: 2 procesoare grafice Tesla, 80 procesoare Intel Xeon Gold 5218R, 132 GB memorie
3	Dinamică moleculară, optimizare geometrică la diverse nivele de teorie, procesarea de volum mare de date, andocare moleculară, dezvoltarea de modele de predicție.	Programe specializate pentru chiminformatica și chimie computațională: Platforma Schrodinger, Suita Openeye, NAMD, Gromacs, Gaussian G09, Gamess, platforma KNIME, etc

Sursa de finanțare

Finanțarea resursei umane din cadrul departamentului este asigurată de la bugetul de stat și din proiecte de cercetare. Echipa proiectului are o politică de atragere continuă de noi surse de finanțare. Cheltuielile pentru diseminarea rezultatelor cercetării, stagii/cursuri de pregătire și alte activități specifice vor fi asigurate din proiectele de cercetare câștigate prin competiție națională/internațională și, în limita fondurilor disponibile, din buget.

Expertiza resursei umane implicate

Echipa programului de cercetare **1** este alcătuită din cercetători cu expertize diferite: chimiști, ingineri chimiști și farmaciști, dintre care **8** au indicele Hirsch peste 8. O parte din membrii echipei colaborează cu colectivele de cercetare ale mai multor teme de cercetare din institut pentru a asigura și totodată completa expertiza necesară îndeplinirii obiectivelor fiecărui proiect. Experiența și expertiza membrilor echipei de proiect este riguros susținută prin articole științifice publicate în reviste de prestigiu cotate ISI, stagiile internaționale efectuate și colaborările dezvoltate cu universități și institute de cercetare prestigioase din țară și străinătate, implicarea în proiecte de cercetare ca directori/responsabili sau membri în echipă, etc.

Activități de formare a tinerilor cercetători: doctoranzi, post-doctoranzi, etc

Implementarea direcțiilor de cercetare abordate și dezvoltarea de direcții noi, vizează extinderea echipei actuale de cercetare prin infuzia de personal tânăr aflat în stadiul de licență sau studii de master care să preia din experiența și expertiza grupului, să se formeze și să se dezvolte.

Subprograme componente ale Programului de cercetare 1

Denumire proiect	Descriere succintă
Subprogram 1.1. Utilizarea și dezvoltarea de metode <i>in silico</i> în studiul compușilor cu activitate biologică - o abordare multidisciplinară	Explorarea spațiului chimic și biologic pentru identificarea de compuși cu activitate biologică, repoziționarea medicamentelor și dezvoltarea de modele de predicție pentru clase de compuși relevanți în agrochimie și chimia biologică.

PROGRAMUL DE CERCETARE 2

COMPUSI MULTIFUNCTIONALI ORGANICI SI POLIMERICI - CU PROPRIETATI DIRIJATE SI APLICATII IN PROTECTIA MEDIULUI SI DEZVOLTARE DURABILA

Scopul programului

Programul își propune dezvoltarea și aprofundarea unui domeniu de mare interes și actualitate al compușilor organici și polimerici conținând în moleculă heteroelemente care imprimă acestor compuși proprietăți speciale.

Obiectiv general

Obiectivul general al acestui program 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;
- Studiul experimental al comportării polimerilor modificați chimic și compozitelor cu grupări pendante ce conțin fosfor și/sau azot, sulf ca și polimeri reactivi, catalizatori, sorbanți, agenți antimicrobieni;
- Obținerea de polimeri conductori și/sau compozite ale acestora;
- Testarea proprietăților electrice ale compușilor organici multifuncționali;
- Investigarea prin metode electrochimice (conductometrie, voltametrie ciclică, spectroscopie de impedanță) a unor compuși organici și/sau element organici, hibridi organici-anorganici;
- Elaborarea unei metode eficiente de tratare a apelor reziduale colorate;
- Îndepărtarea poluanților (coloranți, ioni metalici) din soluții apoase prin adsorbție, utilizând ca sorbanți specifici: nanocompozite magnetice, MOF, complecși metalici, oxizi de fier. Elucidarea mecanismului de adsorbție;
- Degradarea fotocatalitică a coloranților utilizând rețele metal organice fosfonice, combinații complexe și oxizi de fier, cu aplicații în protecția mediului;
- Obținerea de noi compuși cu funcțiune azo cu afinitate pentru materiale neconvenționale și suporturi de sinteza selective; Studiul proprietăților de culoare ale azocompușilor sintetizați;
- Dezvoltarea unor noi modalități practice de reciclare a deșeurilor;
- Dezvoltarea de cercetări de frontieră care vizează Obținerea de noi sisteme multicomponente bio-inspirate pentru aplicații în medicină și agricultură.

Rezultate preconizate

- Stabilirea unor căi sistematice pentru design-ul de noi produși și utilizarea de tehnici moderne în această arie de cercetare;
- Integrarea cu alte grupuri de cercetare internaționale, în special din Uniunea Europeană, în vederea identificării de noi direcții de cercetare cu scopul elaborării de noi propuneri de proiecte;
- Serii de compuși cu proprietăți speciale conținând heteroelemente obținuți prin tehnici moderne: metoda „one-pot” Kabachnik-Field, Michaelis-Becker, utilizând metode alternative de sinteză precum: ultrasunete și/sau microunde, mecano-chimice, condensarea intramoleculară sau intermoleculară, metode electrochimice, fotochimice și hidrotermale;
- Studiul comportării polimerilor modificați chimic și a compozitelor cu grupări pendante ce conțin fosfor și/sau azot ca polimeri reactivi, catalizatori, sorbanți, agenți antimicrobieni;
- Studiul rețelilor metal organice fosfonice și/sau carboxilice și aplicațiilor acestora;
- Elaborarea unui sistem eficient pentru îndepărtarea poluanților (coloranți, ioni metalici) din ape reziduale, model (de laborator), cu potențial de aplicare în procesul de epurare selectivă a apelor reziduale industriale colorate;
- Perfecționarea tinerilor cercetători prin câștigarea de noi cunoștințe privind tehnicile de vârf în domeniul chimiei, pentru a dobândi experiența pe subiecte inovative care să le securizeze locul de muncă.

Echipa programului

Nr. crt.	Prenume NUME	Functia	Categorie personal
Dr. Aurelia VISA - Coordonator Program de cercetare 2			
1.	Dr. Adriana POPA	Responsabil subprogram 2.1	CS I
2.	Dr. Lavinia MACARIE	Membru subprogram 2.1.	CS II
3.	Dr. Nicoleta PLESU	Membru subprogram 2.1.	CS II
4.	Dr. Milica TARA-LUNGA-MIHALI	Membru subprogram 2.1.	CS
5.	Dr. Aurelia VISA	Responsabil subprogram 2.2	CS I
6	Dr. Șimona MUNTEAN	Membru subprogram 2.2.	CS II
7	Dr. Maria Elena RADULESCU-GRAD	Membru subprogram 2.2.	CS III
8	Dr. Manuela CRISAN	Membru subprogram 2.2.	CS III

9	Dr. Daniela HAIDU	Membru subprogram 2.2.	CS
10	Drd. Andreea NISTOR	Membru subprogram 2.2.	CS
PERSONAL AUXILIAR			
1	Cristina AVRAM	Membru subprogram 2.1. Membru subprogram 2.2.	AC 1

Infrastructura de cercetare

Infrastructura ICT - cuprinde și infrastructura centrului interdisciplinar RO-OPENSREEN – precum și infrastructura de cercetare a colaboratorilor din țară și străinătate care vor asigura realizarea obiectivelor programului de cercetare 2 după cum urmează:

Nr. crt.	Utilizare echipament	Echipament
1	Inregistrare spectre	Spectrofotometru FT/IR-4200 JASCO, 2007, ATR (MIRacle) Spectrofotometru UV-VIS dublu fascicol, model V-650 Difractometru de raze X (prin colaborare cu UPT) RMN Benchtop Sistem de analiză termică TG/DTA/DSC METTLER, 2005 Spectrometru de luminescenta Perkin Elmer LS 55 Fluorimetru (prin colaborare cu IFA-Chișinău) LOI (Limiting Oxygen Index Chamber 340AJH0038) Spectrofotometru de absorbție atomică (prin colaborare cu UPT) Total Organic Compounds Analyzer (de achiziționat)
2	Instalații sinteză	Sticlărie, Echipamente încălzire, Agitatoare Baie cu ultrasunete, Baie de apă Etuva, Moara cu bile MM200, Rotavapor pH-METRU, Lampa UV
3	Determinari proprietăți (electrice, anticorozive, compozitie)	Potentiostat-galvanostat Autolab 302N Celula coroziune DCorrCell. EQ-VGB-2Y GLOVE BOX Gw Instek GDM-8145 digital multimeter Oakton CON 510 Benchtop Conductivity Meter Oxygen flask combustion unit EAI-UK.ltd Colorimetru Carry-Varian 300 Bio UV-VIS, cu sfera integratoare (<i>prin colaborare cu UPT</i>)

4	Analize suprafețe/textură	SEM- EDX (prin colaborare cu UPT) TEM (prin colaborare cu UPT) BET Porozitate (prin colaborare cu UPT) Microscop optic Elcometer 456 Coating Thickness Gauge with incorporated probe
---	---------------------------	--

Sursa de finanțare

Finanțarea resursei umane din cadrul departamentului este asigurată de la bugetul de stat și din proiecte de cercetare. Echipa programului are o politică de atragere continuă de noi surse de finanțare. Cheltuielile pentru diseminarea rezultatelor cercetării, stagii/cursuri de pregătire și alte activități specifice vor fi asigurate din proiectele de cercetare câștigate prin competiție națională/internațională și, în limita fondurilor disponibile, din buget.

Expertiza resursei umane implicate

Echipa programului de cercetare 2 este alcătuită din cercetători cu expertize diferite: chimiști și ingineri chimiști, dintre care 6 au indicele Hirsch peste 8. O parte din membrii echipei colaborează cu colectivele de cercetare ale mai multor teme pentru a asigura expertiza necesară îndeplinirii obiectivelor fiecărui proiect. Experiența și expertiza membrilor echipei de program este riguros susținută prin stagiile internaționale efectuate și colaborările dezvoltate cu universități și institute de cercetare prestigioase, schimburile interacademice, etc.

Necesar angajare minim 4 AcS: 2 AcS la Subprogramul 2.1 și 2 AcS la Subprogramul 2.2

Activități de formare a tinerilor cercetători: doctoranzi, post-doctoranzi, etc

În cadrul programului de cercetare 2 își desfășoară activitatea un doctorand fără stipendiu de la Academia Română, un masterand și un doctorand din proiectele extrabugetare de cercetare. Se are în vedere creșterea numărului de tineri cercetători în cadrul programului, prin: angajarea studenților masteranzi sau a tinerilor absolvenți, pe perioadă limitată de timp, pe proiecte de cercetare, și prin stagii de practică a unor studenți masteranzi din Universitățile din Timișoara, care să contribuie la pregătirea practică a proiectului de licență și dizertație.

Subprograme componente ale Programului de cercetare 2

Denumire subprogram	Descriere succintă
Subprogramul 2.1. Sisteme polimerice, sisteme hibride sau complexe cu proprietăți: ignifuge, electroliți, membrane, sorbanți, biocide, catalizatori și de protecție anticorozivă	Obținerea de noi sisteme polimerice modificate chimic cu grupări pendante active care conțin heteroatomi și găsirea direcțiilor de extindere a utilizării acestor produși în domenii interdisciplinare ca polimeri reactivi,

	sorbanți/biosorbanți, membrane polimerice cu proprietăți speciale, catalizatori, biocide, ignifuganți. Caracterizare prin metode electrochimice a compușilor organici, hibridi organici-anorganici, a filmelor nano-compozite. Dezvoltarea unor noi modalități practice de reciclare a deșeurilor.
Subprogramul 2.2. Compuși multifuncționali - cu proprietăți dirijate și aplicații în protecția mediului	Obținerea de noi compuși multifuncționali și sisteme multicomponente bio-inspirate cu grupări fosfonice, carboxilice, sau azo, cu proprietăți dirijate (magnetice, electrice, catalitice, adsorbante, fluorescente) pentru aplicații în industrie, medicină și agricultură. Elaborarea unui sistem eficient pentru îndepărtarea poluanților din apele reziduale colorate.

PROGRAM DE CERCETARE 3

CHIMIA ȘI APLICAȚIILE COMPUȘILOR TETRAPIROLICI DIN CLASA PORFIRINELOR

Scopul programului

Programul abordează problemele actuale și perspectivele de dezvoltare ale chimiei organice într-un context de cercetare multidisciplinară cu deschidere spre fizică, biologie, medicină, electrochimie, chimia sustenabilă a mediului.

În acest context, intenționăm obținerea de noi structuri organice tetrapirolice cu proprietăți optice, electrochimice, biologice sau catalitice care să permită formularea de: senzori chimici și electrochimici performanți pentru detecția de substanțe toxice, gaze sau compuși cu relevanță medicală; mediatori și catalizatori în procesele electrochimice de generare de hidrogen; materiale adsorbante pentru purificarea apelor; materiale cu proprietăți de inhibare a coroziunii metalelor.

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 neșimetric substituie de tip A₃B și A₂B₂ 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 tranziționale 3d.
- Funcționalizarea substituenților periferici ai porfirinelor (OH, COOH, NH₂) cu zaharide, polizaharide, glicozide, sau cu compuși purtători de grupe cromofore;
- Dimeri, trimeri cu porfirine, pentru potențarea proprietăților optice și aplicarea lor în realizarea de senzori chimici, fluorescenți și electrochimici.
- Dezvoltarea de noi nanomateriale fotosensibile hibride pe bază de porfirine și polimeri, matrici de silice, coloizi de metale nobile și nanotuburi de carbon. Importanța și studiul morfologic al structurilor supramoleculare obținute.
- Obținerea filmelor subțiri pe bază de porfirine depuse pe diferite suporturi, prin metodele: drop-casting, PLD, MAPLE, LB, electrodepunere, destinate formulării de senzori analitici

Rezultate preconizate

- Obținerea de noi structuri (inclusiv hetero-dimeri și -trimeri) cu proprietăți fotosensibile sau cromofori din clasa porfirinelor cu bandă largă de absorbție în UV-vis și randament cuantic de fluorescență mare.
- Compuși noi obținuți prin funcționalizarea de porfirine cu glicozide, direct sau prin punți atent selectate, cu aplicație în detecția de neurotransmițători.
- Micro- și nano- materiale (geluri, filme subțiri, coloizi, membrane) cu proprietăți optoelectronice amplificate.
- Senzori, fotosensibilizatori, catalizatori, inhibitori de coroziune, agenți antimicrobieni; investigarea experimentală a aplicării acestora în tehnică, medicină și protecția mediului.
- Creșterea vizibilității și a prestigiului echipei. Publicarea de lucrări științifice în reviste ISI cotate Q1 (cel puțin 5/an). Brevetarea rezultatelor ce pot conduce spre implementare industrială (senzori). Participarea ca Speaker la Conferințe Internaționale.

Echipa programului

Nr. crt.	Prenume NUME	Funcția	Categorie personal
Dr. Eugenia FĂGĂDAR-COSMA - Coordonator Program de cercetare 3			
1.	Dr. Eugenia FĂGĂDAR-COSMA	Responsabil subprogram 3.1	CSI

2.	Dr. Anca LASCU	Membru proiect 3.1.	CS III
3.	Drd. Camelia EPURAN	Membru proiect 3.1.	AsC
4.	Drd. Ion FRĂȚILESCU	Membru proiect 3.1.	AsC
5.	Dr. Ionela FRÎNGU	Membru proiect 3.1.	CS
6.	Diana ANGHEL	Membru proiect 3.1.	AsC
PERSONAL AUXILIAR			
1	Carmen CODIȚĂ	Membru proiect 3.1.	AS 1

Infrastructura de cercetare

Infrastructura ICT - cuprinde și infrastructura centrului interdisciplinar RO-OPENSREEN – precum și infrastructura de cercetare a colaboratorilor din țară și străinătate care vor asigura realizarea obiectivelor programului de cercetare 3 după cum urmează:

Nr. crt.	Utilizare echipament	Echipamente <i>disponibile în ICT sau prin colaborări</i>
1	Spectroscopie RMN, UV-Vis, Fluorimetrie, FT-IR	- RMN Benchtop de 80 MHz, model Fourier 80 (Wissembourg, France) - Spectrofotometru JASCO, model V-650 (Pfungstadt, Germany) - Fluorimetru Perkin–Elmer, model LS 55 (Waltham, MA, USA) - Spectrometru Jasco, model FT/IR-4200 Type A, (Hachoji, Tokyo, Japan) <i>Aparate din dotarea Institutului de Chimie Macromoleculară “Petru Poni” – Iași (Colaboratori)</i> - RMN de 400 MHz, Bruker Avance NEO Spectrometer (Rheinstetten, Germany)
2	Analiză structurală și morfologică	- Sistem de adsorbție fizică, de înaltă performanță, pentru măsurători analitice BET, model NOVA 1200 Quantachrome, (Boynton Beach, Florida, SUA) <i>Aparate din dotarea INFM-NIMP</i> - Difractometru raze X, D8 ADVANCE type (BRUKER-AXS)

3	Instalații sinteză	Sticlărie Schlenk pentru sinteză; Agitator magnetic cu încălzire și mantale de încălzire IKA RH digital; Agitatoare mecanice; Cuiburi de încălzire. Baie cu ultrasunete, Etuvă uscare BIOBASE BOV-T25F Balanță analitică SARTORIUS, Model CP225D (Pfungstadt, Germany)
4	Separare cromatografică	- HPLC Jasco, model LC Net II / ADC (Detector: Jasco MD-1510; Pompa: Jasco PU-1580), (Pfungstadt, Germany)
5	Investigații electrochimice	<i>Aparate din dotarea INCEMC (Parteneri în proiecte)</i> - Potențiosat Universal Voltalab, Model PGZ 402 (Radiometer Analytical, Copenhagen, Denmark) - Voltampermetru
6	Microscopie	<i>Aparate din dotarea INCEMC – Timișoara (Colaboratori)</i> - Microscop SEM Tescan Vega 3 LMH cu detector Energy Dispersive X-ray (EDX), (Brno, Czech Republic) - Microscop AFM Nanosurf®, model EasyScan 2 Advanced dotat cu cantilever piezoelectric ceramic (Liestal, Switzerland) <i>Aparate din dotarea Universității Politehnica București (Colaboratori)</i> - Microscop HR-TEM TECNAI, model F30 G2 S-TWIN, operat la 300 kV și modul de analiză EDAX <i>Aparate din dotarea INFM-NIMP (parteneri proiecte)</i> - Microscop SEM, Evo 50 XVP cu modul EDAX (Carl Zeiss NTS)
7	Depuneri Filme subțiri Langmuir-Blodgett Filme subțiri Laser PLD, MAPLE	<i>Aparate ISIM - Timișoara (parteneri)</i> - PLD Echipament laser HL 124P LCU Trumpf în combinație cu o cameră de vid <i>Aparate din dotarea INFM-NIMP (colaboratori)</i> - MAPLE (Matrix Assisted Pulsed Laser Evaporation): (Neocera) - Aparat depunere mono- și multi-straturi Langmuir-Blodgett

Sursa de finanțare

Finanțarea resursei umane din cadrul departamentului este asigurată de la bugetul de stat și din proiecte de cercetare extrabugetare. Echipa proiectului are o strategie de atragere continuă de noi surse de finanțare și participă la competițiile naționale și internaționale. Cheltuielile pentru diseminarea open-access a rezultatelor cercetării, stagii/cursuri de pregătire, taxe participare

conferințe și alte activități specifice vor fi asigurate din proiectele de cercetare câștigate prin competiție directă națională/internațională.

Expertiza resursei umane implicate

Colectivul implicat în realizarea obiectivelor Programului de cercetare **3** oferă o structură piramidală ideală fiind alcătuită din: un cercetător expert în tematică-CSI, un cercetător doctor (CSIII) cu experiență validă în abordarea noilor tematici de cercetare, doi asistenți de cercetare, doctoranzi, orientați spre cunoașterea în profunzime a domeniilor. Cercetătorii au expertize diferite: chimiști și ingineri chimiști dintre care **1** cu indicele Hirsch peste 8. Echipei se vor alătura doi membri (aflați pe moment în concediu creștere copii). Echipa beneficiază de asistența unui tehnician cu nivel maxim de pregătire.

O parte din membrii echipei colaborează cu colectivele de cercetare ale mai multor teme din cadrul institutului pentru a asigura expertiza necesară îndeplinirii obiectivelor fiecărui proiect sau fac parte dintre experții Programelor NUCLEU din alte institute din țară. Experiența și expertiza membrilor echipei de proiect este riguros susținută prin studii doctorale și colaborările dezvoltate cu universități și institute de cercetare prestigioase din țară și din străinătate.

Activități de formare a tinerilor cercetători:

În cadrul programului de cercetare **3** își desfășoară activitatea doi doctoranzi fără stipendiu de la Academia Română care au fost deja implicați în echipele proiectelor de cercetare extrabugetare (PCCDI: Ecotech-GMP și PED: CeraPor-COR).

Subprograme componente ale Programului de cercetare 3

Denumire proiect	Descriere succintă
Subprogram 3.1. Materiale multifuncționale avansate cu proprietăți speciale opto-electrice pe bază de porfirine și combinațiile lor complexe. Aplicații biologice și tehnice.	- Obținerea și caracterizarea <i>meso</i>-tetrafenilporfirinelor șimetrice și neșimetrice substituie cu grupe funcționale atent selectate, având o balanță hidrofil/hidrofobă favorabilă în vederea studiilor de auto-agregare și -organizare din solvenți cu polaritate diferită, precum și la interfața apă/aer. - Identificarea posibilităților de aplicare ca ionofori (detecția de metale grele, neurotransmițători, substanțe toxice, gaze), mediatori electrochimici, catalizatori sau inhibitori de coroziune. - Nanomateriale hibride microporoase organic-anorganice și organic polimerice pe bază de porfirine. - Creșterea vizibilității și a prestigiului.

PROGRAM DE CERCETARE 4

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

Scopul proiectului: Sinteza și caracterizarea de noi combinații complexe ale unor elemente din blocul *d* cu proprietăți optice, biologice și magnetice țintite, compuși organici ce reacționează sub acțiunea stimulilor externi, materiale hibride anorganice-organice pentru încărcare și eliberare controlată de medicamente, materiale cu activitate catalitică potențială ridicată în reacții de deshidratare și oxidehidrogenare și materiale mezoporoase cu potențial ridicat de adsorbție a unor substanțe poluante sau gaze; determinarea relației structură moleculară-structură supramoleculară-proprietate, optimizarea structurilor moleculare și/sau supramoleculare pentru aplicații în domeniul biologic, știința materialelor și/sau protecția mediului.

Obiectiv general: Promovarea cercetării științifice fundamentale în domeniul chimiei pentru Obținerea de materiale multifuncționale avansate cu aplicații țintite în domeniul biologic, știința materialelor și/sau protecția mediului; formarea și permanenta dezvoltare a resursei umane în domeniul programului prin doctorantură și stagii de dezvoltare profesională; extinderea cunoștințelor complementare pentru o carieră de excelență în cercetarea științifică; creșterea calității și vizibilității cercetării științifice în ICT prin creșterea numărului de publicații cu un factor de impact ridicat și dotarea laboratoarelor cu echipamente performante de sinteză și analiză; participarea cercetătorilor de excelență la competiții în cadrul programelor naționale sau finanțate de Uniunea Europeană.

Obiective specifice

- Sinteza și caracterizarea de noi combinații complexe pe bază de liganzi funcționalizați cu grupări funcționale hidrofile/hidrofobe, donoare/acceptoare sau generatoare de interacțiuni intermoleculare (legături de hidrogen, van der Waals, π - π stacking, etc.);
- Determinarea structurii moleculare a compușilor sintetizați, a capacității de auto-asamblare în structuri supramoleculare cristaline sau “soft” și a proprietăților funcționale: optice, electrochimice, fotocatalitice magnetice ale moleculei izolate și a suprastructurilor pe care le formează;
- Dezvoltarea unor metode de determinare electrochimice a unor produse farmaceutice și compuși biologic activi utilizând materiale de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat.
- Proiectarea, sinteza și caracterizarea unor noi materiale hibride: structuri organo-metalice (MOF), compuși cristalini, matrici amorfe și mezoporoase și materiale nanocompozite cu proprietăți magnetice speciale; utilizarea pentru sinteză a unor surse de energie neconvenționale (câmp ultrasonor, microunde) și implementarea agenților de direcționare

pentru optimizarea rutelor de sinteză: coprecipitare și sol-gel cât și a proprietăților structurale, magnetice și morfologice.

- Testări de încărcare cu hidrogen și testarea potențialului ca sorbenți pentru aplicații în protecția mediului pentru materialele hibride sintetizate.
- Teste de încărcare și eliberare controlată a unor medicamente folosind materialele hibride sintetizate cu dozarea spectrofotometrică a medicamentelor utilizând platforma multimodală (cititorul de plăci).
- Sinteza și testarea de noi compuși cu proprietăți potențiale în îmbunătățirea caracteristicilor reologice și regenerarea asfaltului îmbătrânit.
- Sinteza, caracterizarea și stabilirea relației structură-proprietăți a compușilor sensibili la aplicarea unui stimul extern (pH, lumina, temperatura)
- Sinteza și caracterizarea unor materiale mezoporoase cu potențial ridicat de adsorbție a unor substanțe poluante
- Elaborarea de modele ale mecanismului reacțiilor de adsorbție-desorbție a CO₂ și stabilirea unor relații de corelare între capacitatea de adsorbție și proprietățile fizico-chimice ale adsorbantilor solizi.
- Sinteza de compuși solizi cu activitate catalitică potențială ridicată în reacțiile de transformare a unor substanțe sau materii prime regenerabile în intermediari pentru industria organică de sinteză.
- Furnizarea de parametri descriptori în vederea modelării activității și selectivității catalitice în reacțiile de transformare a unor substanțe poluante sau materii prime regenerabile.
- Determinarea relației structură moleculară - structură supramoleculară - proprietăți funcționale; optimizarea structurii moleculare și supramoleculare pentru aplicații țintă.

Rezultate preconizate

- Noi combinații complexe și sisteme supramoleculare cu proprietăți emise și capacitate de autoasamblare în structuri ordonate cristalin lichide în stări condensate și/sau soluții;
- Noi combinații complexe cu proprietăți magnetice și fotocatalitice;
- Dezvoltarea unor noi protocoale de detecție electrochimică simultană și/sau selectivă a unor poluanți țintă utilizând ca și materiale de electrod combinații de cristale lichide cu carbon nanostructurat;
- Obținerea de noi compuși organici, materiale precursorare pentru știința materialelor și aria medicală;
- Obținerea de combinații complexe de tip structuri organo-metalice (MOF) ale ionilor metalici cu liganzi dicarboxilici și liganzi de tip N,N;
- Obținerea de materiale oxidice nanostructurate funcționalizate și de ionogeluri ce au fie proprietatea de încărcare de hidrogen prin adsorbție;
- Obținerea unor materiale hibride funcționalizate capabile pentru încărcarea și eliberarea controlată a unor medicamente;
- Proiectarea și sinteza unor compuși cu proprietăți adsorbante pentru substanțe poluante;

- Proiectarea și sinteza unor catalizatori performanți, determinarea mecanismului reacțiilor catalitice, stabilirea unor relații între caracteristicile fizico-chimice ale catalizatorilor și activitatea catalitică.

Echipa proiectului

Nr. crt.	Prenume NUME	Funcția	Categorie personal
Dr. Elisabeta-Ildyko SZERB - Coordonator Program de cercetare 4			
1.	Dr. Otilia COSTIȘOR	Responsabil Subprogram 4.1	CS I
2.	Dr. Carmen CREȚU	Membru Subprogram 4.1	CS III
3.	Dr. Sorina ILIEȘ	Membru Subprogram 4.1	CS III
4.	Dr. Adelina-Antonia ANDELESCU	Membru Subprogram 4.1	CS III
5.	Dr. Ildiko Mariana BUTĂ	Membru Subprogram 4.1	CS III
6.	Dr. Sorin Alin MARINESCU	Membru Subprogram 4.1	CS III
7.	Drd. Evelyn POPA	Membru Subprogram 4.1	AsC
8.	Ing. Alexandru VIȘAN	Membru Subprogram 4.1	AsC
9.	Farm. Bogdan-Ionuț MARA	Membru Subprogram 4.1	AsC
10.	Dr. Ana-Maria PUTZ	Responsabil Subprogram 4.2	CS II
11.	Dr. Liliana CSEH	Membru Subprogram 4.2	CS I
12.	Dr. Livia DEVESELEANU-CORÎCI	Membru Subprogram 4.2	CS III
13.	Dr. Cătălin IANĂȘI	Membru Subprogram 4.2	CS III
14.	Dr. Roxana NICOLA	Membru Subprogram 4.2	AsC
15.	Dr. Alexandru POPA	Responsabil Subprogram 4.3	CS II
16.	Dr. Orșina VERDEȘ	Membru Subprogram 4.3	CS III
17.	Dr. Șilvana BORCĂNESCU	Membru Subprogram 4.3	CS
18.	Dr. Mariana SUBA	Membru Subprogram 4.3	CS
PERSONAL AUXILIAR			

1.	Tiberiu BALAZS	Membru Subprogram 4.1	AC1
2.	Mihaela-Marilena POENARU	Membru Subprogram 4.1	AC

Infrastructura de cercetare

Infrastructura ICT - cuprinde și infrastructura centrului interdisciplinar RO-OPENSREEN – precum și infrastructura de cercetare a colaboratorilor din țară și străinătate care vor asigura realizarea obiectivelor programului de cercetare **4** după cum urmează:

Nr. crt.	Utilizare echipament	Echipament
1	Sinteză chimică	Laboratoarele de sinteză chimică sunt dotate cu instalații de sinteză chimică și purificare compuși: nișe chimice, agitatatoare magnetice cu încălzire controlată, sistem de semisinteză cu microunde, sistem de sinteză în câmp ultrasonor (VCX 750 series - 750 Watt Ultrasonic Processor), sisteme Schlenk pentru sinteză în atmosferă inertă, rotoevaporatoare, pompe de vid, etuve de vid, cuptoare calcinare, sistem de sinteză solvothermală, conductometre, pH-metre, lămpi UV, balanțe analitice, baie ultrasunete, distilator, centrifugă.
2	Caracterizare structurală	- Aparat Digesdahl pentru digestia acidă a substanțelor în scopul aducerii în soluție a ionilor metalici pentru dozare; - Spectrofotometru de absorbție atomică GBC – Sens AA; - Spectrofotometru Cary 60 cu sistem dublu-fascicol, monochromator Czerny-Turner, domeniu de măsură 190–1100 nm, cu suport de celule Peltier termostatare separat și sondă din fibră optică din cuarț cu lungime fixă de lungime 10 mm (recomandată pentru probe foarte corozive); - Spectrometru SXZ3-1198 Agilent FTIR Cary 630 - domeniu spectral (optica KBr): 7000-350 cm⁻¹, pentru analiza solidelor și lichidelor; - Spectrometru RMN benchtop Fourier 80; - Aparatul QUANTACHROME Nova 1200 apparatus- B.E.T. pentru determinarea caracteristicilor texturale (suprafață specifică, diametrul și volumul total de pori); Difractometru de Raze X pe monocristal - <i>colaborare Prof. Alessandra Crispini, Universitatea din Calabria, Departamentul de Chimie și Inginerie Chimică</i>

3	Caracterizare termică și catalitică	- Calorimetru diferențial TA Instruments DSC-25; - Termogravimetru TGA/SDTA 851-LF Mettler-Toledo cuplat cu spectrometru de masa Pfeiffer–Vacuum – Thermo Star adaptat pentru metoda programată termic TPD privind masuratori de cicluri de adsorbție-desorbție a CO₂; - Echipament pentru testarea activității catalitice și cineticii reacțiilor eterogene in sistemul gaz-solid format din diferite componente: reactoare, cuptoare, reglatoare de debit și de temperatură, gaz-cromatografe.
4	Caracterizare proprietăți optice și cristalin lichide	- Microscop optic polarizat OLYMPUS BX53M cu cameră color CCD UC90 dotată cu stație de încălzire și congelare Linkam cu controler digital și baie de recirculare a apei. - Sistem de iradiere monocromat Oriel Seria TLS 260 dotat cu două lămpi: Xe 300W și Hg - Spectrofotometru - <i>colaborare cu Prof. Massimo La Deda Universitatea din Calabria, Departamentul de Chimie și Inginerie Chimică</i>
5	Caracterizare structură supramoleculară	- Difractometru de raze X pe pulbere la unghiuri mici și mari (SAXS/WAXS) - <i>colaborare Dr. Bertrand Donnio, Institutul de Fizică și Chimia Materialelor Strasbourg, Franța; Prof. Alessandra Crispini - Universitatea din Calabria, Departamentul de Chimie și Inginerie Chimică; Conf. Paul Barvinschi - Facultatea de Fizica, Universitatea de Vest Timisoara.</i> - Microscop Raman DXR Thermo Scientific echipat cu laser DXR 532nm și microscop SEM JSM 6460 LV cu EDS Oxford Instruments - <i>colaborare Prof. Snezana Uskoković–Marković - Facultatea de Farmacie, Universitatea din Belgrad, Serbia</i> - Scatering de neutroni SANS – <i>Colaborare cu Dr. Almasy Laszlo, Len Adél și Dudas Zoltán-Imre, Centrul de Neutroni, Budapesta</i>
6	Caracterizare electrochimică	Potențostat/ galvanostat 302 – <i>colaborare Prof. Florica Manea, Facultatea de Chimie Industrială și Chimia Mediului, Timișoara</i>
7	Testarea materialelor obținute pentru diferite aplicații biologice și de mediu	-Cititor de plăci multimodal pentru dozarea spectrofotometrică a medicamentelor în cadrul experimentelor de eliberare controlată -Instrumentul Micromeritics ASAP 2460 – <i>Colaborare Dr. Policcio Alfonso, pentru Departamentul de Fizică,</i>

		Universitatea din Calabria, Italia, pentru determinarea capacității de încărcare cu hidrogen.
--	--	---

Sursa de finanțare

Finanțarea resursei umane din cadrul departamentului este asigurată de la bugetul de stat și din proiecte de cercetare. Echipa proiectului are o politică de atragere continuă de noi surse de finanțare. Cheltuielile pentru diseminarea rezultatelor cercetării, stagii/cursuri de pregătire și alte activități specifice vor fi asigurate din proiectele de cercetare câștigate prin competiție națională/internațională și, în limita fondurilor disponibile, din buget.

Expertiza resursei umane implicate

Echipa programului de cercetare **4** este alcătuită din **13** cercetători atestați, dintre care **7** au indicele Hirsch peste 8. Din echipă fac parte cercetători cu expertiză în domeniul chimiei coordinative și chimiei supramoleculare: Dr. Otilia Costișor; sinteza, caracterizarea, stabilirea relației structură-proprietăți pentru molecule sau structuri supramoleculare sensibile la stimuli externi (ex. cristale lichide, compuși fotocromici): Dr. Liliana Cseh; chimia combinațiilor complexe și chimia supramoleculară „soft”: Dr. Elisabeta-Ildyko Szerb; chimia materialelor oxidice nanostructurate: Dr. Ana-Maria Putz; cataliza eterogenă și chimia și caracterizarea materialelor oxidice: Dr. Alexandru Popa. Experiența și expertiza membrilor echipei de program este riguros susținută de articolele publicate în domeniu.

O parte din membrii echipei colaborează cu colective de cercetare din alte Universități și Institute de cercetare prin stagii naționale și internaționale, schimburi interacademice, pentru a asigura expertiza necesară îndeplinirii obiectivelor fiecărui proiect: Prof. Anca Silvestru - Universitatea Babes-Bolyai, Cluj: chimia compușilor calcogen-organici; Prof. Florica Manea – Universitatea Politehnica Timișoara: electrochimie, Dr. Pietro Calandra – CNR Roma, Italia: sisteme supramoleculare „soft”, Prof. Massimo La Deda – Universitatea din Calabria, Italia: fotofizică.

Activități de formare a tinerilor cercetători: doctoranzi, post-doctoranzi, etc.

În cadrul programului de cercetare **4** își desfășoară activitatea 3 coordonatori de doctorat abilitați care coordonează activitatea unor tineri cercetători: doctoranzi fără stipendiu în cadrul SCOSAAR (1) și/sau cu burse doctorale din proiecte de cercetare (1); asistenți de cercetare (2). De asemenea, în cadrul programului de cercetare **4** există o colaborare activă cu profesori și cercetători de la Universitatea din Calabria, Italia și Institutul de Fizică și Chimia Materialelor Strasbourg, Franța prin care se efectuează stagii și cursuri doctorale. Până în prezent, 3 studenți italieni ai Universității din Calabria, Departamentul de Chimie și Inginerie Chimică au efectuat stagii de 6 luni la ICT.

Subprograme componente ale Programului de cercetare 4

Denumire subprogram	Descriere succintă
Subprogramul 4.1 Combinații complexe ale metalelor din blocul <i>d</i> generatoare de sisteme funcționale supramoleculare avansate cu aplicații în știința materialelor	Sinteza și caracterizarea unor noi combinații complexe ale metalelor din blocul <i>d</i> cu liganzi funcționalizați cu grupări hidrofile/hidrofobe, donoare/acceptoare sau generatoare de interacțiuni intermoleculare (legături de hidrogen, van der Waals, π - π stacking, etc.) în vederea obținerii de sisteme supramoleculare cristaline sau “soft” cu proprietăți optice, electrochimice, fotocatalitice magnetice țintite.
Subprogramul 4.2 Compuși multifuncționali cu aplicații biologice	Sinteza, caracterizarea și aplicarea (în farmacie, încărcarea de hidrogen și adsorbția de poluanți) de materiale oxidice nanostructurate pe bază de silice (hibride anorganice-organice, hibride oxizi de fier-silice funcționalizată, ionogeluri-silice-lichid ionic), structuri organo-metalice, compuși organici și materiale poroase pe bază de carbon.
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	- Sinteza, caracterizarea și testarea unor materiale cu activitate catalitică potențială ridicată în reacții de deshidratare și oxidehidrogenare a unor alcooli alifatici inferiori. - Sinteza, caracterizarea și testarea prin cicluri de adsorbție-desorbție a unor materiale mezoporoase cu potențial ridicat de adsorbție a unor substanțe poluante.