



ACADEMIA ROMÂNĂ
INSTITUTUL DE CHIMIE „CORIOLAN DRĂGULESCU”

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



Nr. ICCD: S021806 / 18.02.2025

PLAN DE CERCETARE

2026

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.....	13
SUBPROGRAMUL 2.1. Sisteme polimerice, sisteme hibride sau complexe cu proprietăți: ignifuge, electroliți, membrane, sorbanți, biocide, catalizatori și de protecție anticorozivă.....	15
SUBPROGRAMUL 2.2. Compuși multifuncționali - cu proprietăți dirijate și aplicații în protecția mediului.....	16
PROGRAMUL DE CERCETARE 3: CHIMIA ȘI APLICAȚIILE COMPUȘILOR TETRAPIROLICI DIN CLASA PORFIRINELOR.....	22
SUBPROGRAMUL 3.1. Materiale multifuncționale avansate cu proprietăți speciale opto-electrice pe bază de porfirine și combinațiile lor complexe. Aplicații biologice și tehnice.....	23
PROGRAMUL DE CERCETARE 4: OBȚINEREA DE COMPUȘI MULTIFUNCȚIONALI CU RELEVANȚĂ ÎN ȘTIINȚA MATERIALELOR NANOSTRUCTURATE, BIOCHIMIE SAU PROTECȚIA MEDIULUI.....	25
SUBPROGRAMUL 4.1. Combinații complexe ale metalelor din blocul d generatoare de sisteme funcționale supramoleculare avansate cu aplicații în știința materialelor.....	28
SUBPROGRAMUL 4.2. Compuși multifuncționali organici - anorganici cu aplicații biologice.....	32
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.....	36

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. Planul de cercetare se afișează pe site ICCD: https://acad-icht.tm.edu.ro/wp/?page_id=162.

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: **31,5** și ACS: **12**
- număr studenți doctorat: **13** (2 fără bursă, 7 cu bursă, 4 locuri cu bursă solicitate pentru 2026)
- număr conducători doctorat: 4

FINANȚARE

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

Fonduri pentru salarii: Suma estimată pentru plata salariilor personalului de cercetare și asistenți I incluși în Programele 1-4 este de aproximativ **4.900.000 lei**.

Burse studenți doctoranzi: Cuantumul estimat al bursei pentru studenții doctoranzi înmatriculați la studii universitare organizate cu finanțare de la bugetul de stat în anul 2026 este de **355.200 lei** (din care **310.800 lei** pentru cei 7 studenți doctoranzi aflați în anul universitar 2025-2026 și **44.400 lei** pentru cele 4 locuri la doctorat, cu bursă, solicitate pentru anul universitar 2026-2027).

Fonduri pentru susținerea activității de cercetare: Conform legii 183/2024, Art. 32, alin. (3), suma estimată și solicitată pentru susținerea activităților de cercetare ale cercetătorilor ICCD este în valoare de aproximativ **2.600.000 lei**.

COLABORĂRI EXTERNE / INTERNE

<i>Nr. crt.</i>	<i>Instituția</i>	<i>Reprezentant colaborator</i>
EXTERNE		
1	Expert Systems Inc., USA	Prof. Tudor I. OPREA
2	Universitatea New Mexico, Albuquerque, USA	Dr. Cristian BOLOGA
3	Universitatea din Creta, Grecia	Prof. Dr. Konstantinos D. DEMADIS
4	Universitatea Ca' Foscari, Venetia, Italia	Prof. dr. Fabio ARICO
5	Universitatea din Malaga, Spania	Prof. dr. Aurelio CABEZA Dr. Rosario COLODRERO
6	Universitatea Tehnică din Viena, Facultatea de Chimie Tehnică, Institutul de Tehnologii Chimice și Analitică, Viena, Austria	Prof. dr. Günter FAFILEK
7	Universitatea de Stat din Moldova, Institutul de Fizică Aplicată, Chișinău	dr. Pavlina BOUROS, dr. Yurii CHUMAKOV
8	Universitatea de Stat din Moldova, Institutul de Chimie, Chișinău	dr. Olga DANILESCU
9	Universitatea din Calabria, Departamentul de Chimie și Tehnologie, Italia	Prof. Alessandra CRISPINI Dr. Massimo LA DEDA Dr. Cesare OLIVIERO ROSSI
10	Universitatea din Calabria, Departamentul de Fizică, Italia	Dr. Alfonso POLICICCHIO Prof. Maria de SANTO
11	CNRS-Universitatea din Strasbourg Institutul de Fizică și Chimie a Materialelor (IPCMS), Strasbourg, Franța	Dr. Bertrand DONNIO Dr. Mircea RASTEI
12	Academia Ungară de Științe, Centrul de Cercetare pentru Fizică Wigner, Departamentul de Spectroscopie cu Neutroni, Budapesta, Ungaria	Dr. László ALMÁSY Dr. Zoltán DUDÁS Dr. Adél LEN
13	Universitatea din Calabria, Institutul pentru Tehnologia Membranelor, Italia	Dr. Francesco GALIANO

14	Universitatea din Belgrad, Facultatea de Farmacie, Serbia	Dr. Snezana USKOKOVIĆ -MARKOVIĆ
<i>INTERNE</i>		
1	Universitatea Politehnica Timișoara, Departamente CAICON, CAICAM, Facultatea de Mecanică, Facultatea de Hidrotehnică etc.	Dr. ing. Anamaria BACIU Dr. Simona BORAN Dr. Valentin BADEA Conf. Dr. Ciprian CHIRILĂ, Dr. Laura COCHECI Dr. Liviu COSTEA Dr. Vasile GHERMAN Prof.dr. Robert IANOȘ Dr. Andrea KELLEMBERGER Dr. Lavinia LUPA Prof.dr. Florica MANEA Conf. dr. ing Giannin MOȘOARCĂ Prof.dr. Adina NEGREA Conf. dr. ing. Aniela POP Conf. dr.ing. Simona POPA Dr. Cosmin VANCEA
2	Universitatea de Medicina si Farmacie "Iuliu Hațieganu", Cluj-Napoca	Conf. Dr. Ioana BĂLDEA
3	Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Tehnologii Criogenice și Izotopice, Râmnicu Vâlcea	Dr. Diana POPESCU
4	SC. Elkim SRL, Timișoara	Dr. Ing. Dorin JURCAU
5	Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni", Iași	Dr. Ecaterina-Stela DRĂGAN Dr. Maria Valentina DINU Dr. Anca FILIMON Dr. Alina NICOLESCU Dr. Ana-Maria MACSIM Dr. Sergiu SHOVA
6	Universitatea de Științele Vieții "Regele Mihai I" din Timișoara	Prof. Dr. Ersilia ALEXA Prof. Dr. Ileana NICHITA Prof. Dr. Radu ȘUMĂLAN
7	Institutul Național de Electrochimie și Materie Condensată, Timișoara	Dr. Mihaela GHERBAN
8	Universitatea de Medicină și Farmacie "Victor Babeș", Timișoara	Conf. dr. Nicoleta CARABA, Prof. Dr. Corina DANCIU Prof. dr. habil. Roxana POPESCU Prof. Dr. Codruța ȘOICA
9	Institutul Național de Cercetare Dezvoltare pentru Electrochimie și Materie Condensată (INCEMC), Timișoara	Dr. Radu BANICĂ Dr. Daniela URȘU
10	Universitatea de Vest, Facultatea de Chimie, Biologie, Geografie, Timișoara	Conf.Dr. Paul BARVINSCHI Conf.Dr. Bianca MARANESCU

PROGRAMUL DE CERCETARE 1

CHEMINFORMATICĂ ȘI ALTE METODE DE CHIMIE COMPUTAȚIONALĂ

Coordonator program: Dr. Sorin AVRAM

Obiectiv general

Programul de cercetare 1 (P1) are ca obiectiv general îmbunătățirea transpunerii informației chimice în informație electronică cu care operează metodele de chimie computațională și cheminformatică. Temele de cercetare cuprinse în acest program sunt direcționate spre dezvoltarea de noi metode specifice chimiei computaționale și cheminformaticii, investigarea și utilizarea metodelor deja cunoscute, cu aplicații în procesul de descoperire a medicamentelor, re poziționarea medicamentelor aprobate și dezvoltarea pesticidelor, precum și construirea unei platforme integrate în procesul de standardizare a librăriilor chimice. Sunt vizați 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 (prin mecanică cuantică și clasică).

Programul 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 strategii computaționale avansate pentru re poziționarea medicamentelor existente și identificarea compușilor naturali cu potențial terapeutic, prin integrarea modelării moleculare și a algoritmilor de învățare automată;
- analiza mecanismelor moleculare de interacțiune și a potențialului toxicologic al unor pesticide și antimicotice ce acționează ca inhibitori ai enzimei AHAS, prin utilizarea tehnicilor de chimie computațională și modelare moleculară;
- evaluarea indicilor BFI-P și BFI-L ca instrumente de selecție pentru complexii proteină-ligand cristalizați în studii de andocare;
- dezvoltarea de algoritmi și platforme digitale pentru analiza datelor structurale.

Echipa programului de cercetare 1

Nr. crt.	Cercetător Prenume NUME	Rolul	Gradul științific	Norma în P1
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	Chim. Lucia GRĂDINARU	Membru subprogramul 1.1	ACS	1
10	Chim. Radu SĂVULESCU	Membru subprogramul 1.1	ACS	1

Total norme ACS-CSI: CS I: 0; CS II: 1; CSIII: 5; CS: 1; ACS: 3 = 10,0

Colaborare/realizare activități cu alte Programe din institut: i) dr. L. HALIP colaborează cu dr. S. Muntean și dr. N. Pleșu (programul 2, tema 2.2.2 și programul 3, tema 3.1.2); (ii) dr. L. CRIȘAN colaborează cu dr. A. Vișa, dr. M. Crișan, dr. Haidu D. și dr. N. Pleșu, (programul 2, temele 2.2.1, 2.2.4, și programul 3, tema 3.1.2); (iii) dr. A. BOROTA colaborează cu dr. A. Lacrămă, (programul 4, tema 4.2.1); (iv) dr. A. BORA face parte din colectivul de cercetare al temei 1.1.2 și 1.1.3 (programul 1); (v) dr. R. CURPĂN face parte din colectivul de cercetare al temei 1.1.4 (programul 1) și colaborează cu dr. B. Mara (programul 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 P1 este de aprox. **1.895.160 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.: Succesul identificării de noi compuși activ biologic cu potențial terapeutic cu ajutorul metodelor specifice chimiei computaționale se bazează pe transpunerea corectă și completa a informației chimice în informație electronică. În primul rând compușii chimici trebuie reprezentați corect în formele tautomere și ionice majoritare (în mediul fiziologic, pH 7.4) în care interacționează cu proteinele. Acest aspect este adesea neglijat ceea ce conduce creșterea erorilor în proiectele de "screening" virtual și QSAR. Obiectivul acestei teme este îmbunătățirea transpunerii informației chimice în informație electronică cu care operează metodele de chimie computațională și construirea unei platforme integrate în procesul de standardizare a librăriilor chimice.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Tautomerism - organizarea datelor experimentale	1.1. Analiza și corectarea setului Tautobase 1.2. Implementarea regulilor CACTVS 1.3. Dezvoltarea de funcțiilor scor pentru tautomeri	Colectiv de cercetare Dr. Sorin Avram Dr. Sorin Marinescu Dr. Cristian Neanu Chim. Daniela Istrate
Faza II – Trim. II 2. Predicția speciilor ionice	2.1. Construirea unui set de reguli teoretice 2.2. Implementarea algoritmului MOLGpka	<u>Colaboratori externi</u> Prof. Dr. Tudor Oprea, Expert Systems Inc, USA
Faza III – Trim. III 3. Enumerarea izomerilor optici	3.1. Enumerarea izomeri generati din tautomerism 3.2. Enumerarea izomerilor din centrii optici nedefiniti	
Faza IV – Trim. IV 4. Testare si validare	4.1. Testarea algoritmilor pentru tautomeri 4.2. Testarea algoritmilor pentru speciile ionice 4.3. Testarea algoritmilor pentru izomerii optici	

Proiecte de cercetare coordonate sau implementate cu participarea membrilor temei Finanțare: UEFISCDI

Proiectul Știința în Școli - CHIMPACT: *CHimia cu IMPACT în educație pentru un stil de viață sănătos (CHIMPACT)*, Responsabil proiect: **Crișan Luminița**, Membri echipă: **Avram S.**, Bora A., Crisan M., Epuran C., Fratilescu I., Haidu D., **Neanu C.**, Plesu N., Visa A., Contract nr: 4SSSC/2025, Cod proiect: PN-IV-P10-SS-SC-2024-0066, UEFISCDI, 12 luni, Valoare totală proiect: 250.000 lei, Valoare 2026: 82.500 lei;

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

Obiectivul general al temei 1.1.2.: Dezvoltarea unui cadru computațional integrat pentru analiza relației complexe dintre structura chimică a unui medicament, profilul său farmacologic și răspunsul clinic de tip advers. Prin combinarea datelor de similaritate structurală cu reprezentările vectoriale ale proteinelor țintă, se urmărește identificarea unor tipare de clasificare care să permită prezicerea efectelor secundare și descoperirea unor noi valențe terapeutice.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Construirea și curățarea setului de date integrat	1.1. Selectarea compușilor din setul de lucru din DrugCentral și extragerea profilurilor de activitate 1.2. Extragerea profilului de activitate (ținte, activități, MoA) 1.3. Extragerea efectelor adverse (EA) semnificative 1.4. Curățarea și organizarea datelor	<u>Colectiv de cercetare</u> ACS Nicoleta Stoian Dr. Ana Borota Dr. Sorin Avram Dr. Alina Bora <u>Colaboratori externi</u> Dr. Cristian Bologa, Universitatea New Mexico, Albuquerque, USA Prof. Dr. Tudor Oprea, Expert Systems Inc, USA
Faza II – Trim. II 2. Generarea reprezentărilor moleculare, proteice și clinice	2.1. Calcularea distanțelor chimice 2.2. Obținerea embeddingurilor ProtBERT și calcularea distanțelor proteice 2.3. Construirea vectorilor fenotipici pe baza EA 2.4. Calcularea distanțelor clinice între compuși	
Faza III – Trim. III 3. Dezvoltarea și evaluarea modelelor de clasificare multimodale	3.1. Integrarea matricilor de distanță în modele de clasificare 3.2. Testarea performanței și identificarea clusterelor naturale 3.3. Evaluarea contribuției fiecărei surse de informație 3.4. Optimizarea modelelor și validarea rezultatelor	
Faza IV – Trim. IV 4. Interpretarea rezultatelor și generarea de insight-uri pentru compuși noi	4.1. Analiza clusterelor în raport cu MoA și fenotipurile clinice 4.2. Identificarea compușilor cu comportament atipic 4.3. Derivarea pattern-urilor utile pentru compuși noi 4.4. Propunerea direcțiilor de extindere a metodologiei	

PROIECTE DE CERCETARE coordonate sau implementate cu participarea membrilor temei.
Finanțare: UEFISCDI

Proiectul CoEx 2024 - CERSUS: Centru de excelență în managementul apei, valorificarea materialelor, subproduselor și deșeurilor pentru implementarea bioeconomiei circulare (CERSUS),

Director proiect: Teodosiu Carmen, Responsabil ICCD ca partener proiect, **P6:** Szerb Elisabeta, Membri echipă **P6:** Lacrămă A., Muntean S., Ilies S., Cretu C., **Halip L.**, Andelescu A., Nistor A., Popa E., Vișan A., Nicola R., Balasz T., PN-IV-P6-6.1-CoEx-2024-0056, 2025-2030, UEFISCDI, valoare totală partener P6: 4.295.000lei, valoare anul 2026: 730.400lei.

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 strategii computaționale avansate pentru repoziționarea medicamentelor existente și identificarea compușilor naturali cu potențial terapeutic, prin integrarea modelării moleculare și a algoritmilor de învățare automată. Scopul este generarea de ipoteze solide pentru noi aplicații terapeutice eficiente și sigure în diverse patologii, inclusiv afecțiuni inflamatorii, cancer, diabet, boli neurodegenerative și infecții virale.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Evaluarea computațională a inhibitorilor cunoscuți și a medicamentelor disponibile în bazele de date, precum și a celor raportate în literatura de specialitate	1.1. Colectarea și preprocesarea datelor din baze publice și literatură de specialitate, convertirea structurilor moleculare în formate compatibile pentru analiză computațională. 1.2. Calcularea descriptorilor moleculari și a proprietăților fizico-chimice relevante pentru activitatea biologică. 1.3. Screening computațional preliminar prin andocare moleculară, predicții ADMET și alte metode in silico.	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Alina Bora Dr. Sorin Avram ACS. Lucia Grădinaru <u>Colaboratori interni</u> Dr. Manuela Crișan Dr. Daniela Haidu <u>Colaboratori externi</u> Dr. Ciprian-Bogdan Chirilă, Universitatea Politehnică Timișoara
Faza II – Trim. II 2. Dezvoltarea și antrenarea de modele de machine learning (ML) și deep learning (DL) pentru evaluarea activității biologice a compușilor	2.1. Pregătirea seturilor de date și preprocesarea caracteristicilor moleculare pentru modelele ML și DL. 2.2. Construirea și antrenarea modelelor de ML (ABC, QDA, RFC, SVM, GNB, etc) și DL (MLP, CNN). 2.3. Evaluarea inițială a performanței și ajustarea hiperparametrilor pentru optimizarea modelelor.	
Faza III – Trim. III 3. Validarea și optimizarea performanței modelelor de învățare automată, asigurând acuratețea și robustețea predicțiilor.	3.1. Validarea modelelor prin cross-validare și seturi externe de testare. 3.2. Calcularea metricilor de performanță (acuratețe, F1-score, AUC-ROC, etc) și identificarea limitărilor modelelor.	

	3.3. Optimizarea hiperparametrilor și rafinarea modelelor pentru creșterea robusteții și generalizabilității.	
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	

PROIECTE DE CERCETARE coordonate sau implementate cu participarea membrilor temei.
Finanțare: UEFISCDI

Proiectul Știința în Școli - CHIMPACT: *CHimia cu IMPACT în educație pentru un stil de viață sănătos (CHIMPACT)*, Responsabil proiect: **Crișan Luminița**, Membri echipă: **Avram S.**, Bora A., Crisan M., Epuran C., Fratilescu I., Haidu D., **Neanu C.**, Plesu N., Visa A., Contract nr: 4SSSC/2025, Cod proiect: PN-IV-P10-SS-SC-2024-0066, UEFISCDI, 12 luni, Valoare totală proiect: 250.000 lei, Valoare 2026: 82.500 lei;

Proiectul CoEx 2024 - ARES: *Centru Național Multidisciplinar de Excelență pentru Combaterea Rezistenței la Tratamentele Antiinfecțioase (ARES)*, Director proiect: Carmen Chifiriuc, Responsabil ICCD ca partener proiect, **P7:** Cseh Liliana, Membri echipă: Vișa A., **Bora A.**, Crișan M., **Crisan L.**, Deveseleanu-Corici L., Buta I., Haidu D., Mara B., Andrei I., PN-IV-P6-6.1-CoEx-2024-0196, 2025-2030, UEFISCDI, valoare totală partener **P7:** 5.583.500lei, valoare anul 2026: 1.046.000lei.

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.: Analiza mecanismelor moleculare de interacțiune și a potențialului toxicologic al unor pesticide și antimicotice ce acționează ca inhibitori ai enzimei AHAS, prin utilizarea tehnicilor de chimie computațională și modelare moleculară. Elaborarea unui cadru computațional integrat pentru estimarea toxicității acestor inhibitori, folositor pentru dezvoltarea unor pesticide și antimicotice mai sigure și cu o selectivitate îmbunătățită.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
-------------------------	------------	------------

<p>Faza I – Trim. I 1. Extragerea informațiilor cu relevanța toxicologică</p>	<p>1.1. Identificarea descriptorilor moleculari relevanți toxicologic pe baza setului de inhibitori AHAS. 1.2. Predicția proprietăților ADMETox cu ajutorul unor programe dedicate: ProTox, QikProp, etc. 1.3. Generarea unor modele de farmacofori ligand-based.</p>	<p><u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Ana Borota Dr. Ramona Curpăn Dr. Liliana Halip Dr. Cristian Neanu ACS. Radu Săvulescu</p>
<p>Faza II – Trim. II 2. Screening-ul virtual al non-țintelor relevante</p>	<p>2.1. Aplicarea screening-ului invers pe seturi extinse de proteine. 2.2. Sortarea țintelor în funcție de relevanță și scorurile obținute.</p>	<p><u>Colaboratori interni</u> Dr. Ana-Maria Lacrămă</p>
<p>Faza III – Trim. III 3. Caracterizarea complexului ligand-non-țintă</p>	<p>3.1. Analiza profilului interacțiilor ligand-non-țintă. 3.2. Simulări de dinamică moleculară (MD) pentru evaluarea stabilității complexilor analizați.</p>	<p><u>Colaboratori externi</u> Dr. Diana Popescu, Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Tehnologii Criogenice și Izotopice Râmnicu Vâlcea</p>
<p>Faza IV – Trim. IV 4. Dezvoltarea unui scor de risc toxicologic</p>	<p>4.1. Evaluarea afinității de legare (MM/GBSA) non-țintă și a stabilității (MD). 4.2. Evaluarea parametrilor ADMETox. 4.3. Dezvoltarea unui scor consensus care să integreze parametrii evaluați.</p>	

PROIECTE DE CERCETARE coordonate sau implementate cu participarea membrilor temei.
Finanțare: UEFISCDI

Proiectul Știința în Școli - CHIMPACT: *CHimia cu IMPACT în educație pentru un stil de viață sănătos (CHIMPACT)*, Responsabil proiect: **Crișan Luminița**, Membri echipă: **Avram S.**, Bora A., Crisan M., Epuran C., Fratilescu I., Haidu D., **Neanu C.**, Plesu N., Visa A., Contract nr: 4SSSC/2025, Cod proiect: PN-IV-P10-SS-SC-2024-0066, UEFISCDI, 12 luni, Valoare totală proiect: 250.000 lei, Valoare 2026: 82.500 lei;

Proiectul CoEx 2024 - CERSUS: *Centru de excelență în managementul apei, valorificarea materialelor, subproduselor și deșeurilor pentru implementarea bioeconomiei circulare (CERSUS)*, Director proiect: Teodosiu Carmen, Responsabil ICCD ca partener proiect, **P6:** Szerb Elisabeta, Membri echipă **P6:** Lacrămă A., Muntean S., Ilies S., Cretu C., **Halip L.**, Andelescu A., Nistor A., Popa E., Vișan A., Nicola R., Balasz T., PN-IV-P6-6.1-CoEx-2024-0056, 2025-2030, UEFISCDI, valoare totală partener P6: 4.295.000lei, valoare anul 2026: 730.400lei.

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 și BFI-L ca instrumente de selecție pentru complecșii proteina-ligand cristalizați și dezvoltarea de algoritmi și platforme digitale pentru analiza datelor structurale. Rezultatele vor optimiza procesele decizionale în chimia structurală.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Selectarea și evaluarea seturilor de date pentru utilizare în studiu	1.1. Selectarea și inventarierea bazelor de date structurale relevante 1.2. Procesarea și evaluarea critică a informațiilor din bazele de date identificate	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Sorin Avram Dr. Liliana Halip Dr. Ana Borota Dr. Cristan Neanu
Faza II – Trim. II 2. Analiza performanței indicilor BFI în cadrul seturilor de date disponibile	2.1. Prelucrarea și extragerea datelor structurale din bazele de date 2.2. Determinarea valorilor indicilor BFI pentru seturile de proteine selectate 2.3. Eșantionare și validare a subseturilor de date	
Faza III – Trim. III 3. Analiza performanței indicilor BFI în cadrul seturilor de date disponibile	3.1. Eșantionare și validare a subseturilor de date 3.2. Analiza distribuțiilor și corelațiilor în seturile de date 3.3. Evaluarea performanțelor indicilor BFI prin coeficienți de corelație Spearman și Matthews, și aplicații în screening virtual	
Faza IV – Trim. IV 4. Dezvoltare platforma digitală	4.1. Proiectare și implementare de algoritmi pentru analiza indicilor BFI 4.2. Dezvoltare și integrare a unei platforme digitale pentru procesarea datelor	

PROIECTE DE CERCETARE coordonate sau implementate cu participarea membrilor temei. **Finanțare UEFISCDI:**

Proiectul Știința în Școli - CHIMPACT: *CHimia cu IMPACT în educație pentru un stil de viață sănătos (CHIMPACT)*, Responsabil proiect: Crișan Luminița, Membri echipă: **Avram S.**, Bora A., Crisan M., Epuran C., Fratilescu I., Haidu D., **Neanu C.**, Plesu N., Visa A., Contract nr: 4SSSC/2025, Cod proiect: PN-IV-P10-SS-SC-2024-0066, UEFISCDI, 12 luni, Valoare totală proiect: 250.000 lei, Valoare 2026: 82.500 lei;

Proiectul CoEx 2024 - CERSUS: *Centru de excelență în managementul apei, valorificarea materialelor, subproduselor și deșeurilor pentru implementarea bioeconomiei circulare (CERSUS)*, Director proiect: Teodosiu Carmen, Responsabil ICCD ca partener proiect, **P6:** Szerb Elisabeta, Membri echipă **P6:** Lacrămă A., Muntean S., Ilies S., Cretu C., **Halip L.**, Andelescu A., Nistor A.,

Popa E., Vișan A., Nicola R., Balasz T., PN-IV-P6-6.1-CoEx-2024-0056, 2025-2030, UEFISCDI, valoare totală partener P6: 4.295.000lei, valoare anul 2026: 730.400lei.

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;
- Utilizarea rețelelor metal organice sintetizate drept catalizatori heterogeni pentru conversia glucozei, fructozei și a altor zaharide în 5-(hidroximetil)furfural (HMF) și derivații săi;
- Dezvoltarea și optimizarea membranelor polimerice care încorporează MOF-uri, cu dispersie omogenă a nanoparticulelor și stabilitate ridicată, precum și investigarea performanței catalitice;
- 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 alternativi, 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.	Cercetător Prenume NUME	Rolul	Gradul profesional	Norma în P2
Dr. Aurelia VISA Coordonator programul de cercetare 2 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	Drd.chim. Marcela IOSIVONI	Membru subprogramul 2.2.	ACS	1
Dr. Adriana POPA Responsabil subprogramul 2.1				
8	Dr. Adriana POPA	Membru subprogramul 2.1.	CS I	1
9	Chim. Alexandru BUHAI	Membru subprogramul 2.1.	ACS	1
Personal auxiliar				
14	Ing.chim. Cristina AVRAM	Membru programul de cercetare 2	As I	1
15	Paulina PINTER	Membru programul de cercetare 2	As I	1
16	Iosif COMAN	Membru programul de cercetare 2	As I	1

Total norme: ACS-CSI: CS I: 2; CS II: 1.5; CSIII: 1; CS: 2; ACS: 2 = 8,5

Alte categorii: As I: 3 = 3,0

Conducători de doctorat: 1

Doctoranzi în stagi: 1

Colaborare/realizare activități alte Programe din institut: i) dr. S. MUNTEAN colaborează cu dr. L. Halip și dr. I. Bută, dr. R. Nicola, dr. A. Lacrămă, drd. E. Popa (programul 1, tema 1.1.2 și programul 4, tema 4.1.2, 4.1.3, și 4.2.1,); (ii) dr. M. CRIȘAN și dr. D. HAIDU colaborează cu dr. L. Crișan (programul 1, tema 1.1.3); (iii) dr. A. POPA colaborează cu dr. N. Pleșu, I. Frîngu, M. Tara-Lunga-Mihali (programul 3, tema 3.1.2); (iv) dr. A. VIȘA colaborează cu dr. N. Pleșu și dr. L. Crișan (programul 3, tema 3.1.2 și programul 1, tema 1.1.3)

Conducători de doctorat: în cadrul programului de cercetare 2 activează, în prezent, un conducător de doctorat abilitat 2025, conform OME nr. 6297/18.09.2025: **Dr. Aurelia VIȘA.**

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 P2 este de aprox. **1.290.288 lei**.

Programul de cercetare 2 este constituit din **2 Subprograme** și **5 Teme** complementare care contribuie la realizarea unitară a scopului și obiectivelor programului.

SUBPROGRAMUL 2.1.

Sisteme polimerice, sisteme hibride sau complexe cu proprietăți: ignifuge, electroliti, 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.: Tema propune introducerea unor metode de sinteză ecologice în chimia heteroatomilor (P, N, S, O) pentru realizarea de polimeri modificați prin sinteze „one-pot” multicomponent („one-pot”-MCR). Grupările funcționale, precum amino-acizi sau amino-fosfonați, oferă materialelor proprietăți catalitice și capacitate de adsorbție. Aceste materiale prezintă potențial ridicat pentru aplicații în procese catalitice și de purificare a mediului.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Evaluarea unor materiale noi prin modificarea mecanochimică a grupărilor pendante ce conțin heteroatomi (N, O)	1.1. Aplicarea metodei mecano-chimice pentru obținerea grupărilor aldehidice pe chitosan 1.2. Caracterizarea chitosanului funcționalizat cu grupări active 1.3. Studiu de literatură referitor la utilizarea chitosanului cu grupari active ca inhibitori de coroziune	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Aurelia Vișa ACS. Alexandru Buhai <u>Colaboratori interni</u> Dr. Ionela Frîngu Dr. Nicoleta Pleșu Dr. Milica Țară-Lungă Mihali
Faza II – Trim. II 2. Elaborarea și analiza unor polimeri cu grupări pendante ce conțin heteroatomi (P, N, O)	2.1. Studiul comportarii copoli-merului St-6.7%DVB funcționalizat cu grupe ce conțin azot, în procese fotocatalitice 2.2. Caracterizarea fizico-chimica a copolimerului St-6.7%DVB grefat cu aminoacizi 2.3. Redactare lucrare	<u>Colaboratori externi</u> Dr. Lavinia Lupa, Universitatea Politehnică Timișoara,
Faza III – Trim. III 3. Evaluarea și aplicarea polimerilor funcționalizați cu grupări pendante	3.1. Impregnarea copolimerilor Stiren-6.7%divinilbenzen cu amino-acizi folosind metoda de ultrasonare. 3.2. Caracteristicile fizico-chimice a copolimerilor St-DVB grefați cu grupările aminobenzoic acid	Dr. Laura Cocheci, Universitatea Politehnică Timișoara, Dr. Ecaterina-Stela Drăgan,

conținând heteroatomi (P, N, O)		Dr. Maria Valentina Dinu, Dr. Anca Filimon, Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni", Iași
Faza IV – Trim. IV 4. Analiza materialelor polimerice funcționalizate cu grupări pendante ce conțin atomi de azot	4.1. Evaluarea eficienței ca sorbenți ai copolimerilor St-12%DVB grefați cu aminoacid pentru a îndepărtarea poluanți din ape reziduale. 4.2. Actualizarea datelor și referințelor privind aplicațiile de mediu ale copolimerilor care conțin heteroatomi (P, N).	

PROIECTE DE CERCETARE coordonate sau implementate cu participarea membrilor temei.
Finanțare: Academia Română

Proiectul bilateral AR-CNR: *Tunable MOF-Based Catalytic Membranes for Bio-Based Aromatic Platform Chemicals*, Responsabil ICCD: **Vișa Aurelia**, Membri echipă ICCD: Nistor A., Iosivoni M., **Buhai A.**, Cornea A., Responsabil NCR Italia: Galiano Francesco, 2026-2028, Academia Română -CNR Italia, valoare totală ICCD: 12000 euro (4000 euro/an);

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 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Sinteze de rețele metal organice fosfono-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.	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Simona Muntean Dr. Andreea Nistor Dr. Adriana Popa ASC. Marcela Iosivoni

	<p>1.3. Influența condițiilor de reacție asupra cristalinității compușilor obținuți.</p> <p>1.4. Încorporarea materialelor obținute în matrici de membrane polimerice și utilizarea drept catalizatori în valorificarea biomasei</p>	<p><u>Colaboratori interni</u> Dr. Nicoleta Plesu Dr. Luminița Crișan</p> <p><u>Colaboratori externi</u> Prof. Dr. Fabio Arico Universitatea Ca`Foscari, Venetia, Italia</p>
<p>Faza II – Trim. II 2. Sinteze de rețele metal organice fosfonice</p>	<p>2.1. Sinteza rețelelor metal organice fosfonice în condiții hidrotermale folosind săruri de metale monovalente, divalente, trivalente sau tetravalente.</p> <p>2.2. Stabilirea condițiilor optime de reacție.</p> <p>2.3. Aplicarea materialelor în protecția mediului și dezvoltarea durabilă</p>	<p>Dr. Francesco Galiano, Institutul pentru Tehnologia Membranelor, Universitatea din Calabria, Italia</p>
<p>Faza III – Trim. III 3. Caracterizarea rețelelor metal organice sintetizate</p>	<p>3.1. Caracterizarea compușilor sintetizați prin FT-IR și TG.</p> <p>3.2. Caracterizarea structurală a noilor compuși obținuți prin difracție de raze X.</p> <p>3.3. Investigarea interacțiunilor generate în rețea.</p>	<p>Prof. dr. Aurelio Cabeza, Dr. Rosario Colodrero, Universitatea din Malaga, Spania</p> <p>Prof. Dr. Konstantinos Demadis, Universitatea din Creta, Grecia</p>
<p>Faza IV – Trim. IV 4. Materiale compozite pe bază de rețele metal organice și/sau săruri cuaternare și chitosan</p>	<p>4.1. Optimizarea condițiilor de sinteză pentru obținerea materialelor compozite</p> <p>4.2. Studiarea efectului temperaturii, a pH-ului și a raportului între reactanți asupra sturcturii materialelor obținute</p> <p>4.3. Testarea proprietăților adsorbante a compozitelor obținute</p>	

PROIECTE DE CERCETARE coordonate sau implementate cu participarea membrilor temei.
Finanțare: Academia Română și UEFISCDI

Proiectul bilateral AR-CNR: *Tunable MOF-Based Catalytic Membranes for Bio-Based Aromatic Platform Chemicals*, Responsabil ICCD: **Vișa Aurelia**, Membri echipă ICCD: **Nistor A., Iosivoni M., Buhai A., Cornea A.**, Responsabil NCR Italia: GALIANO Francesco, 2026-2028, Academia Română -CNR Italia, valoare totală ICCD: 12000 euro (4000 euro/an);

Proiectul Știința în Școli - CHIMPACT: *CHimia cu IMPACT în educație pentru un stil de viață sănătos (CHIMPACT)*, Responsabil proiect: Crișan Luminița, Membri echipă: Avram S., Bora A., Crisan M., Epuran C., Fratilescu I., Haidu D., Neanu C., Plesu N., **Vișa A.**, Contract nr: 4SSSC/2025, Cod proiect: PN-IV-P10-SS-SC-2024-0066, UEFISCDI, 12 luni, Valoare totală proiect: 250.000 lei, Valoare 2026: 82.500 lei;

Proiectul CoEx 2024 - ARES: *Centru Național Multidisciplinar de Excelență pentru Combaterea Rezistenței la Tratamentele Antiinfecțioase (ARES)*, Director proiect: Carmen Chifiriuc, Responsabil ICCD ca partener proiect, **P7:** Cseh Liliana, Membri echipă: **Vișa A., Bora A., Crișan M., Crisan L.,**

Deveseleanu-Corici L., Buta I., Haidu D., Mara B., Andrei I., PN-IV-P6-6.1-CoEx-2024-0196, 2025-2030, UEFISCDI, valoare totală partener **P7**: 5.583.500lei, valoare anul 2026: 1.046.000lei.

Proiectul CoEx 2024 - CERSUS: Centru de excelență în managementul apei, valorificarea materialelor, subproduselor și deșeurilor pentru implementarea bioeconomiei circulare (CERSUS), Director proiect: Teodosiu Carmen, Responsabil ICCD ca partener proiect, **P6**: Szerb Elisabeta, Membri echipă **P6**: Lacrămă A., **Muntean S.**, Ilies S., Cretu C., Halip L., Andelescu A., **Nistor A.**, Popa E., Vișan A., Nicola R., Balasz T., PN-IV-P6-6.1-CoEx-2024-0056, 2025-2030, UEFISCDI, valoare totală partener **P6**: 4.295.000lei, valoare anul 2026: 730.400lei.

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 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Îndepărtarea poluanților colorați din sisteme multiple, utilizând materiale pe baza de cărbune activ.	1.1. Testarea performanțelor nanocompozitelor magnetită/carbon pentru adsorbția coloranților din sisteme binare și ternare. 1.2. Determinarea performanțelor nanocompozitelor magnetită/carbon în cicluri multiple de adsorbție/desorbție. 1.3. Testarea cărbunelui activ obținut din resturi vegetale ca material adsorbant pentru îndepărtarea coloranților din sisteme multiple.	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Andreea Nistor Dr. Aurelia Vișa <u>Colaboratori interni</u> Dr. Liliana Halip Dr. Roxana Nicola Dr. Ildiko Buta Dr. Ana-Maria Lacrămă Drd. Evelyn Popa
Faza II – Trim. II 2. Aplicarea rețelelor metal organice fosfonice (MOF) pentru îndepărtarea coloranților din soluții apoase prin adsorbție	2.1. Studiul îndepărtării coloranților din sisteme binare prin adsorbție, utilizând MOF. 2.2. Determinarea performanțelor MOF de îndepărtare a coloranților, în cicluri multiple de adsorbție/desorbție. 2.3. Studiul îndepărtării coloranților din sisteme binare prin fotodegradare, utilizând MOF.	<u>Colaboratori externi</u> Prof.Dr. Robert Ianoș, Universitatea Politehnica Timișoara Prof.Dr. Florica Manea, Universitatea Politehnica Timișoara
Faza III – Trim. III 3. Aplicarea oxizilor de fier și a oxizilor de fier dopați pentru îndepărtarea poluanților	3.1. Influența variabilelor procesului de adsorbție: concentrație, pH-ul soluției, temperatură asupra randamentului de îndepărtare a coloranților.	

colorați din soluții apoase	<p>3.2. Influența variabilelor procesului de fotodegradare: concentrație, pH-ul soluției, cantitatea de catalizator asupra randamentului de îndepărtare a coloranților.</p> <p>3.3. Studiul cinetic al fotodegradării coloranților utilizând oxizi de fier și oxizi de fier dopați.</p> <p>3.4. Studiul cinetic al fotodegradării coloranților utilizând oxizi de fier și oxizi de fier dopați.</p>	
<p>Faza IV – Trim. IV</p> <p>4. Degradarea fotocatalitică a poluanților din soluții apoase utilizând oxizi ai metalelor 3d</p>	<p>4.1. Testarea performanțelor oxizilor de zinc(II) pentru îndepărtarea coloranților prin adsorbție</p> <p>4.2. Testarea performanțelor fotocatalitice ale oxizilor de zinc(II) pentru îndepărtarea coloranților</p> <p>4.3. Testarea performanțelor oxizilor de zinc(II) pentru degradarea compușilor biologic activi</p>	

PROIECTE DE CERCETARE coordonate sau implementate cu participarea membrilor temei.
Finanțare: Academia Română și UEFISCDI

Proiectul bilateral AR-CNR: *Tunable MOF-Based Catalytic Membranes for Bio-Based Aromatic Platform Chemicals*, Responsabil ICCD: Vișa Aurelia, Membri echipă ICCD: **Nistor A.**, Iosivoni M., **Buhai A.**, Cornea A., Responsabil NCR Italia: GALIANO Francesco, 2026-2028, Academia Română -CNR Italia, valoare totală ICCD: 12000 euro (4000 euro/an);

Proiectul CoEx 2024 - CERSUS: *Centru de excelență în managementul apei, valorificarea materialelor, subproduselor și deșeurilor pentru implementarea bioeconomiei circulare (CERSUS)*, Director proiect: Teodosiu Carmen, Responsabil ICCD ca partener proiect, **P6:** Szerb Elisabeta, Membri echipă **P6:** Lacrămă A., Muntean S., **Ilies S.**, Cretu C., Halip L., Andelescu A., **Nistor A.**, Popa E., Vișan A., Nicola R., Balasz T., PN-IV-P6-6.1-CoEx-2024-0056, 2025-2030, UEFISCDI, valoare totală partener P6: 4.295.000lei, valoare anul 2026: 730.400lei.

TEMA 2.2.3. Compuși cu funcțiune azo cu afinitate pentru diverse materiale

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 colorimetrice, electrochimice și bio-chimice ale azo compușilor obținuți. Aplicarea sustenabilă a acestora pe diverse materiale.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
-------------------------	------------	------------

<p>Faza I – Trim. I 1. Studiul privind sinteza și caracterizarea de noi compuși cu funcțiune azo, alternativi cu toxicitate redusă.</p>	<p>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, ¹³CRMN, ¹HRMN, MS) în scopul caracterizării compușilor cu funcțiune azo sintetizați</p>	<p>Colectiv de cercetare Dr. Maria Elena Rădulescu Grad</p> <p><u>Colaboratori externi</u> Dr. Giannin Moșoarcă, Dr. Simona Popa, Dr. Costea Liviu, Dr. Boran Simona</p>
<p>Faza II – Trim. II 2. Studiul proprietăților optice și colorimetrice ale compușilor cu funcțiune azo sintetizați</p>	<p>2.1. Studiul proprietăților optice ale compușilor cu funcțiune azo sintetizați</p>	<p>Dr. Vancea Cosmin Universitatea Politehnica Timișoara, Facultatea de Inginerie Chimică Biotehnologii și Protecția Mediului, Timișoara</p>
<p>Faza III – Trim. III 3. Studiul privind sinteza și caracterizarea de noi compuși cu funcțiune azo, alternativi cu toxicitate redusă.</p>	<p>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, ¹³CRMN, ¹HRMN, MS) în scopul caracterizării compușilor cu funcțiune azo sintetizați</p>	<p>Dr. Vasile Gherman, Universitatea Politehnica Timișoara, Facultatea de Hidrotehnică, Timișoara</p> <p>Dr. Günter Faflek, Universitatea Tehnică din Viena, Facultatea de Chimie Tehnică, Institutul de Tehnologii Chimice și Analitică, Viena, Austria</p>
<p>Faza IV – Trim. IV 4. Studiul proprietăților electrochimice și biologice ale compușilor cu funcțiune azo sintetizați</p>	<p>4.1. Studiul proprietăților electrochimice ale compușilor cu funcțiune azo sintetizați 4.2. Studiul proprietăților bio-chimice ale compușilor cu funcțiune azo sintetizați</p>	<p>Dr. Günter Faflek, Universitatea Tehnică din Viena, Facultatea de Chimie Tehnică, Institutul de Tehnologii Chimice și Analitică, Viena, Austria</p>

TEMA 2.2.4. Sisteme organice multicomponente și compuși coordinativi cu proprietăți specifice

Coordonator temă: Dr. Manuela CRIȘAN

Obiectivul general al temei 2.2.4.: Dezvoltarea unor sisteme organice multicomponent și compuși coordinativi cu proprietăți specifice, destinate aplicațiilor în materiale funcționale sau domenii biomoleculare. Tema de cercetare vizează analiza structurală și fizico-chimică a compușilor obținuți, identificarea formelor polimorfe, evaluarea interacțiunilor intra- și intermoleculare, investigarea proprietăților lor funcționale și studiul relațiilor structură–proprietăți.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
<p>Faza I – Trim. I</p>	<p>1.1. Sinteza de noi compuși organici multicomponent pe bază de acizi carboxilici aromatici</p>	<p>Colectiv de cercetare Dr. Manuela Crișan Dr. Daniela Haidu</p>

1. Sinteza de sisteme organice multicomponent	1.2 Stabilirea condițiilor experimentale (solvenți, temperaturi, timpi de reacție) pentru obținerea compușilor în formă pură 1.3 Identificarea formelor polimorfe ale compușilor sintetizați	<u>Colaboratori interni</u> Dr. Luminița Crișan <u>Colaboratori externi</u> Conf. Dr. Ioana Bâldea, Universitatea de Medicina si Farmacie "Iuliu Hațieganu", Cluj-Napoca
Faza II – Trim. II 2. Sinteza de compuși coordinativi	2.1. Sinteza de noi compuși coordinativi cu diferite metale și liganzi carboxilici/baze Schiff 2.2 Stabilirea condițiilor experimentale (solvenți, temperaturi, timpi de reacție) pentru obținerea compușilor în formă pură	Prof. Dr. Corina Danciu, Universitatea de Medicina si Farmacie "Victor Babeș", Timișoara
Faza III – Trim. III 3. Caracterizarea fizico-chimică și structurală a compușilor obținuți	3.1 Investigații spectroscopice și microscopice (IR, UV-Vis, hot-stage microscopy) pentru stabilirea proprietăților fizico-chimice 3.2 Determinarea structurilor cristaline prin difracție de raze X pe monocristal și analiză structurală 3.3 Caracterizarea formelor polimorfe și evaluarea stabilității acestora	Prof. Dr. Radu Șumălan, Universitatea de Științele Vieții "Regele Mihai I" din Timișoara Dr. Pavlina Bourosh, Dr. Yurii Chumakov, Universitatea de Stat din Moldova, Institutul de Fizică Aplicată, Chișinău
Faza IV – Trim. IV 4. Investigarea interacțiunilor moleculare și a proprietăților funcționale	4.1. Analiza interacțiunilor intra- și intermoleculare prin difracție de raze X pe monocristal și modelare structurală, cu evidențierea modului de împachetare supramoleculară în stare solidă 4.2 Studiul proprietăților funcționale: comportament optic, stabilitate termică 4.3 Evaluarea activităților biologice (antimicrobiene/anticancer/antiinflamatoare) sau ca reglatori de creștere pentru plante	Dr. Olga Danilescu, Universitatea de Stat din Moldova, Institutul de Chimie, Chișinău

PROIECTE DE CERCETARE coordonate sau implementate cu participarea membrilor temei.
Finanțare: UEFISCDI

Proiectul Știința în Școli - CHIMPACT: *CHimia cu IMPACT în educație pentru un stil de viață sănătos (CHIMPACT)*, Responsabil proiect: **Crișan Luminița**, Membri echipă: Avram S., Bora A., **Crisan M.**, Epuran C., Fratilescu I., **Haidu D.**, Neanu C., Plesu N., Visa A., Contract nr: 4SSSC/2025, Cod proiect: PN-IV-P10-SS-SC-2024-0066, UEFISCDI, 12 luni, Valoare totală proiect: 250.000 lei, Valoare 2026: 82.500 lei;

Proiectul CoEx 2024 - ARES: *Centru Național Multidisciplinar de Excelență pentru Combaterea Rezistenței la Tratamentele Antiinfecțioase (ARES)*, Director proiect: Carmen Chifiriuc, Responsabil ICCD ca partener proiect, **P7:** Cseh Liliana, Membri echipă: Vișa A., Bora A., Crișan M., Crisan L.,

Deveseleanu-Corici L., Buta I., **Haidu D.**, Mara B., Andrei I., PN-IV-P6-6.1-CoEx-2024-0196, 2025-2030, UEFISCDI, valoare totală partener **P7**: 5.583.500lei, valoare anul 2026: 1.046.000lei.

PROGRAMUL DE CERCETARE 3

CHIMIA ȘI APLICAȚIILE COMPUȘILOR TETRAPIROLICI DIN CLASA PORFIRINELOR

Coordonator program: Dr. Nicoleta PLEȘU

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;
- Dezvoltarea compozitelor polimerice și a filmelor nanocompozite cu potențial de utilizare ca senzori și electrozi modificați.
- Caracterizarea electrochimică a substanțelor, suprafețelor materialelor, interfețelor și filmelor nanocompozite pentru evaluarea proprietăților și performanței funcționale.

Echipa programului de cercetare 3

Nr. crt.	Cercetător Prenume NUME	Rolul	Gradul profesional	Norma în P3
Dr. Nicoleta PLEȘU Coordonator programul de cercetare 3 Responsabil subprogramul 3.1				
1	Dr. Nicoleta PLEȘU	Membru subprogramul 3.1.	CS II	1
2	Dr. Anca LASCU	Membru subprogramul 3.1.	CS III	1
3	Dr. Ionela FRÎNGU	Membru subprogramul 3.1.	CS	1
4	Dr. Ion FRĂȚILESCU	Membru subprogramul 3.1.	CS	1
5	Dr. Camelia EPURAN	Membru subprogramul 3.1.	CS	1
6	Dr. Milica ȚARĂ-LUNGĂ MIHALI	Membru subprogramul 3.1.	CS	1

7	Ing.chim. Anemona CORNEA	Membru subprogramul 3.1.	ASC	1
---	--------------------------	--------------------------	-----	---

Total norme: ACS-CSI: CS I: 0; CS II: 1; CSIII: 1; CS: 4; ACS: 1 = 7

Conducători de doctorat: 1

Colaborare/realizare activități alte Programe din institut: i) dr. A. LASCU colaborează cu dr. A. Popa (programul 2, tema 2.1.1); (ii) dr. N. PLEȘU colaborează cu dr. L. Crișan și dr. L. Halip (programul 1, temele 1.1.2 și 1.1.3), cu dr. A Popa, A . Vișa, dr. M. Crișan și drd. M. Iosivoni (programul 2, tema 2.1.1, 2.2.1, și 2.2.4);

Conducători de doctorat: în cadrul programului de cercetare 3 activează, în prezent, un conducător de doctorat, abilitat 2024, conform OME nr. 7678/05.12.2024: **Dr. Nicoleta PLEȘU**. În anul universitar 2025–2026, aceasta coordonează **1** (unu) doctorand și a solicitat alocarea unui loc la doctorat cu bursă pentru anul universitar 2026–2027.

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 3 este de aproximativ **664.896 lei**.

Programul de cercetare 3 este constituit din **1 Subprogram și 2 Teme** 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. Nicoleta PLEȘU

TEMA 3.1.1. Complecși ale structurilor porfirinice simetric și asimetric substituite la nucleul fenilic cu grupe cu efect donator/atrăgător de electroni cu metale tranzitionale. Materiale hibride porfirine-polimeri naturali. Explorarea capacităților senzorialiste ale noilor materiale.

Coordonator temă: Dr. Anca LASCU

Obiectivul general al temei 3.1.1.: Încercări de formare de materiale hibride între filme de polimeri naturali și porfirine. Testarea proprietăților optice, electrochimice și/sau de adsorbție ale noilor materiale.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I	1.1. Stabilirea condițiilor optime de formare de filme	Colectiv de cercetare Dr. Anca Lascu

1. Încercări preliminare de formare de filme de chitosan.	1.2. Caracterizarea filmelor de chitosan obținute din punct de vedere morfologic 1.3. Teste privind stabilitatea filmelor în medii apoase	Dr. Ionela Frîngu Dr. Nicoleta Pleșu Dr. Milica Țară-Lungă-Mihali
Faza II – Trim. II 2. Formarea de materiale hibride polimer chitosanic-porfirine	2.1. Incorporarea de porfirine în filme de chitosan 2.2. Caracterizarea morfologică a noilor materiale	<u>Colaboratori interni</u> Dr. Adriana Popa
Faza III – Trim. III 3. Stabilirea proprietăților optice ale noilor materiale	3.1. Caracterizarea prin spectroscopie UV-viz, fluorimetrie, FT-IR, a materialelor obținute	<u>Colaboratori externi</u> Dr. Mihaela Gherban, Institutul Național de Electrochimie și Materie Condensată, Timișoara
Faza IV – Trim. IV 4. Demonstrarea capacității de detecție sau adsorbție a materialelor realizate și diseminarea rezultatelor cercetărilor temei	4.1. Testări ale proprietăților de recunoaștere/detecție (analiți farmaceutici) sau adsorbție (medicamente, gaze, coloranți) ale materialelor pe bază de porfirine 4.2. Minim 2 lucrări ISI; participare conferințe internaționale și naționale.	

TEMA 3.1.2. 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 3.1.2.: 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 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Compozite polimerice cu proprietăți speciale. Obținere și caracterizarea compozitelor prin voltametrie ciclică și liniară (CV și CP). Reciclarea deșeurilor.	1.1. Prepararea compozitelor polimerice cu adaus de polimeri conductori-PANI, polimeri de coordinare -CP, rețele metal organice-MOF, porfirine. 1.2. Caracterizarea compozitelor pe obținute, prin voltametrie ciclică (CV) și spectroscopie de impedanță (EIS). 1.3. Teste preliminare de separare a grasimilor din deseuri menajere.	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Milica Țară-Lungă Mihali ACS. Anemona Cornea <u>Colaboratori interni</u> Dr. Vișa Aurelia Dr. Crișan Manuela Dr. Crișan Luminița Dr. Halip Liliana
Faza II – Trim. II	2.1. Modelarea CV datelor experimentale.	Dr. Popa Adriana Drd. Iosivoni Marcela

2. Caracterizarea compozitelor sintetizate prin EIS. Modelarea datelor experimentale CV si EIS	2.2. Caracterizarea compozitelor pe obtinute, prin voltametrie ciclică (EIS) 2.3. Modelarea EIS datelor experimentale.	<u>Colaboratori externi</u> Prof. Konstaninos Demadis,
Faza III – Trim. III 3. Investigarea proprietăților compușilor organici și/sau element organici, hibridi organici-anorganici prin măsurători electrochimice (conductometrice, voltametrie ciclică, EIS, CP).	3.1. Calcularea parametrilor electronici cu ajutorul calculelor computaționale. 3.2. Interpretarea datelor experimentale 3.3. Redactare lucrare 3.4. Participare conferințe internaționale și naționale	Universitatea din Creta, Grecia Dr. Andrea Kelleberger, Universitatea Politehnica Timișoara 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 compusi organici și/sau element-organici, hibridi organici-anorganici.	4.1. Studiul proprietăților electrice ale unor compuși organici și/sau element organici, hibridi organici anorganici prin spectroscopie de impedanță (EIS). 4.2. Modelarea datelor EIS. 4.3. Interpretarea datelor EIS. 4.4. Redactare lucrare	Dr. Jurcau Dorin, S.C. Elkim SRL, Timișoara

PROIECTE DE CERCETARE coordonate sau implementate cu participarea membrilor temei.
Finanțare: UEFISCDI

Proiectul Știința în Școli - CHIMPACT: *CHimia cu IMPACT în educație pentru un stil de viață sănătos (CHIMPACT)*, Responsabil proiect: Crișan Luminița, Membri echipă: Avram S., Bora A., Crisan M., Epuran C., Fratilescu I., Haidu D., Neanu C., **Plesu N.**, Visa A., Contract nr: 4SSSC/2025, Cod proiect: PN-IV-P10-SS-SC-2024-0066, UEFISCDI, 12 luni, Valoare totală proiect: 250.000 lei, Valoare 2026: 82.500 lei;

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 combinații complexe/materiale funcționale mono-/polimetalice ale unor elemente din blocul *d* sau materiale hibride cu proprietăți optice și fotocatalitice țintite;

determinarea relației structură moleculară-structură supramoleculară-proprietate, optimizarea structurilor moleculare și/sau supramoleculare pentru aplicații în știința materialelor sau protecția mediului. Dezvoltarea și caracterizarea materialelor de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat, în vederea aplicării acestora în metode avansate de detecție electrochimică individuală și simultană/selectivă a unor analiți țintă. Sinteza și caracterizarea unor materiale anorganice și compozite cu scopul de a obține proprietăți morfo-structurale țintite în vederea utilizării lor pentru aplicații biologice și în protecția mediului, folosind alături de metodele clasice de sinteză, pe cele prin metode "verzi": hidrotermală, ultrasonare, sinteza asistată de microunde. Sinteza, caracterizarea structurală și testarea activității biologice a unor compuși noi ce conțin ingrediente active de tip tiofen, tiazol și morfolină. Dezvoltarea unor materiale hibride/compozite cu structură și textură controlată pe bază de materiale mezoporoase anorganice obținute din subproduse alimentare și catalizatori din clasa heteropolioxometalaților (HPOMs).

Obiective specifice

- Obținerea și caracterizarea structurală, morfologică și optică a unor materiale hibride cristalin lichide și luminescente pe bază de metalomesogeni și nanomateriale;
- Obținerea și caracterizarea unor combinații complexe ale unor elemente din blocul *d* cu liganzi de tip baze Schiff cu proprietăți fotocatalitice;
- Obținerea și caracterizarea morfostructurală și electrochimică unor materiale de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat;
- Dezvoltarea unor modele de detecție electrochimică individuală și simultană/ selectivă a unor analiți țintă (ex. ibuprofen, citostatice, glucoză, acid uric, acid ascorbic);
- Sinteza sol-gel și caracterizarea unor materiale de silice funcționalizată și a unor nanocompozite de oxid de fier-silice funcționalizată pentru aplicații în biomedicină sau protecția mediului;
- Sinteza prin metode "verzi" a unor materiale structurate poroase pe bază de carbon din deșeuri vegetale și determinarea proprietăților optice sau a altor proprietăți pentru aplicații în biomedicină sau protecția mediului;
- Selectarea și testarea materialelor obținute pentru aplicații în biomedicină sau protecția mediului.
- Obținerea și caracterizarea de structuri organice ce conțin farmacofori, evaluarea "in silico" și a proprietăților potențial biologice și determinarea relației structură-proprietăți;
- Obținerea unor platforme hibride pe bază de heteropoli oxometalați (HPOMs) pe suporturi de tip sită moleculară cu textură controlată derivate din subproduse vegetale ca surse alternative și determinarea proprietăților catalitice ale acestora.
- Dezvoltarea de complecși de coordinație luminescenți, biocompatibili, bazați pe metale din blocul *d* și derivați ai alcaloizilor naturali ca liganzi pentru aplicații biomedicale.

Echipa programului de cercetare 4

Nr. crt.	Cercetător Prenume NUME	Rolul	Grad profesional	Norma în P4
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> , Ing.chim. Evelyn POPA	Membru subprogramul 4.1	ACS	1
7	<i>Drd.</i> , Ing.chim. Alexandru VIȘAN	Membru subprogramul 4.1	ACS	1
8	<i>Drd.</i> , Chim. Diana-Oana RUSU	Membru subprogramul 4.1	ACS	1
9	<i>Drd.</i> , Ing.chim. Raluca DANCIAR	Membru subprogramul 4.1	ACS	1
Dr. Ana-Maria LACRĂMĂ <i>Responsabil subprogramul 4.2</i>				
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> , Farm. Bogdan-Ionuț MARA	Membru subprogramul 4.2	ACS	1
15	<i>Drd.</i> , Biolog. Cezarina-Alina MOGOȘANU	Membru subprogramul 4.2.	ACS	1
Dr. Orsina VERDEȘ <i>Responsabil subprogramul 4.3</i>				
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	As. I	1
20	Mihaela-Marilena MUDURA	Membru programul de cercetare 4	As. I	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: 8 (6 cu bursă, 2 fără bursă) din care 6 sunt membri ai programului de cercetare 4;

Conducători de doctorat: 2

Colaborare/realizare activități cu alte Programe din institut: (i) dr. B. MARA colaborează cu dr. R. Curpan (programul 1, tema 1.1.4); (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 (programul 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, conform OME nr. 5671/02.12.2021

Dr. Liliana Cseh, conform OME nr. 5670/02.12.2021

Cei doi conducători de doctorat coordonează, în anul universitar 2025–2026, un număr total de 8 (opt) doctoranzi, dintre care 6 (șase) sunt membri ai Programului 4. De asemenea, pentru anul universitar 2026–2027, au solicitat alocarea a 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 **1.960.344 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 functionale supramoleculare avansate cu aplicatii în stiinta 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-polimetalice ale unor elemente din blocul d sau materiale hibride 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 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Sinteza de liganzi premesogenici de tip N/O donori și combinațiile lor complexe cristalin lichide cu metale din blocul d.	1.1. Proiectarea și sinteza unor liganzi premesogenici 1.2. Caracterizarea structurală a liganzilor obținuți prin metode spectroscopice (RMN, IR și UV) și analitice. 1.3. Obținerea combinațiilor complexe/materialelor bimetalice conținând liganzii de la punctul 1.1.	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Elisabeta I. Szerb Dr. Adelina A. Andelesc Drd. Evelyn Popa Drd. Diana-Oana Rusu <u>Personal auxiliar</u> Tiberiu Balasz Mihaela-Marilena Mudura
Faza II – Trim. II 2. Obținerea de materiale hibride cristalin lichide, luminescente pe bază de metalomesogeni și nanomateriale de tip carbon dots.	2.1. Determinarea condițiilor de obținere a materialelor hibride. 2.2. Caracterizarea structurală prin spectroscopie IR, UV-Vis pe solid	<u>Colaboratori externi</u> Prof. Alessandra Crispini, Dr. Cesare Oliviero Rossi, Dr. Massimo La Deda, Universitatea din Calabria, Departamentul de Chimie și Tehnologie,

<p>Faza III – Trim. III 3. Studiul proprietăților cristaline lichide ale combinațiilor complexe/materialelor bimetalice /materialelor hibride obținute.</p>	<p>3.1. Caracterizare prin microscopie optică cu polarizare (POM), metode microscopice avansate. 3.2. Determinarea stabilității termice prin calorimetrie de scanare diferențială (DSC) și termogravimetrie (TGA). 3.3. Caracterizarea structurală prin metode difractometrice (PXRD).</p>	<p>Prof. Maria de Santo, Universitatea din Calabria, Departamentul de Fizică, Italia</p>
<p>Faza IV – Trim. IV 4. Studiul proprietăților optice ale combinațiilor complexe/materialelor bimetalice, respectiv materialelor hibride obținute.</p>	<p>4.1. Determinarea proprietăților fotofizice în solvenți organici (fluorimetrie), în stare solidă, precum și în diferite stări condensate (POM-EPIFL și fluorimetrie).</p>	<p>Dr. Bertrand Donnio, Dr. Mircea Rastei, Institutul de Fizică și Chimie a Materialelor (IPCMS), CNRS-Universitatea din Strasbourg Strasbourg, Franța.</p> <p>Dr. Adél Len, Centrul de Cercetare pentru Fizică Wigner, Departamentul de Spectroscopie cu Neutroni, Budapesta, Ungaria</p>

PROIECTE DE CERCETARE coordonate sau implementate cu participarea membrilor temei.
Finanțare: Academia Română și UEFISCDI

Proiect bilateral AR-VAST: *Luminescent biocompatible coordination complexes based on d-block metals and derivatives of natural alkaloids as ligands for biomedical applications*, Responsabil ICCD: **Andelescu, Adelina**, Membri echipă ICCD: **Szerb E.**, Cretu C., Bută I., **Popa E.**, Responsabil Vitenam: Dr. Truong Ngoc Hung, 2026-2027, Academia Română -VAST Vietnam, valoare totală ICCD: 8000 euro (4000 euro/an);

Proiectul CoEx 2024 - CERSUS: *Centru de excelență în managementul apei, valorificarea materialelor, subproduselor și deșeurilor pentru implementarea bioeconomiei circulare (CERSUS)*, Director proiect: Teodosiu Carmen, **Responsabil ICCD** ca partener proiect, **P6: Szerb Elisabeta**, Membri echipă **P6:** Lacrămă A., Muntean S., Ilies S., **Cretu C.**, Halip L., **Andelescu A.**, Nistor A., **Popa E.**, Vișan A., Nicola R., Balasz T., PN-IV-P6-6.1-CoEx-2024-0056, 2025-2030, UEFISCDI, valoare totală partener P6: 4.295.000lei, valoare anul 2026: 730.400lei.

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 unor noi combinații complexe cu proprietăți fotocatalitice în vederea investigării capacității de fotodegradare a poluanților din apele uzate.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Obținerea unor liganzi 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> Dr. Simona G. Muntean Dr. M. Andreea Nistor
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	<u>Colaboratori externi</u> Dr. Sergiu Shova, Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni", Iași
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 Determinarea stabilității termice	
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	

PROIECTE DE CERCETARE coordonate sau implementate cu participarea membrilor temei. Finanțare: Academia Română și UEFISCDI

Proiect bilateral AR-VAST: *Luminescent biocompatible coordination complexes based on d-block metals and derivatives of natural alkaloids as ligands for biomedical applications*, Responsabil ICCD: **Andelescu, Adelina**, Membri echipă ICCD: **Szerb E., Cretu C., Bută I., Popa E.**, Responsabil Vitenam: Dr. Truong Ngoc Hung, 2026-2027, Academia Română -VAST Vietnam, valoare totală ICCD: 8000 euro (4000 euro/an);

Proiectul PED 2025 - SusBioGly: *Dezvoltarea unei metode sustenabile de obținere a flavonolilor glicozilați folosind biocatalizatori imobilizați pe suporturi regenerabile*, Director de proiect: Dr. Livia Nicoleta Deveseleanu-Corîci, Membri echipă ICCD: Cseh L., Buta I., Buzatu A.R., Popescu C.I., Spiridon L., Costache A., Badea R.A., talpau M., Contract nr. 87PED/2025, Cod proiect: PN-IV-P7-7.1-PED-2024-2513, Durata proiect: 24 luni, Valoare totală proiect: 771.162 lei, Valoare anul 2026: 397.033 lei.

Proiectul CoEx 2024 - ARES: *Centru Național Multidisciplinar de Excelență pentru Combaterea Rezistenței la Tratamentele Antiinfecțioase (ARES)*, Director proiect: Carmen Chifiriuc, Responsabil ICCD ca partener proiect, **P7:** Cseh Liliana, Membri echipă: Vișa A., Bora A., Crișan M., Crisan L., Deveseleanu-Corici L., **Buta I.**, Haidu D., Mara B., Andrei I., PN-IV-P6-6.1-CoEx-2024-0196, 2025-2030, UEFISCDI, valoare totală partener **P7:** 5.583.500lei, valoare anul 2026: 1.046.000lei.

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. Sorina Ilies

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 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
<p>Faza I – Trim. I 1. Obținerea unor materiale de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat.</p>	<p>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 metale tranziționale.</p>	<p><u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Elisabeta Szerb Dr. Carmen Crețu Dr. Adelina A. Andelesc Drd. Alexandru Vișan Drd. Evelyn Popa</p> <p><u>Colaboratori externi</u> Prof. dr.Florica Manea, Conf. dr. Aniela Pop, Dr. Anamaria Baci, Universitatea Politehnica Timișoara, Facultatea de Chimie și Ingineria Mediului.</p>
<p>Faza II – Trim. II 2. Caracterizarea morfostructurală și electrochimică a materialelor de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat.</p>	<p>2.1. Caracterizarea morfostructurală a materialelor de electrod prin SEM/EDAX, FTIR, RX. 2.2. Caracterizarea electrochimică a materialelor de electrod: determinarea ariei suprafeței electroactive prin metoda clasică feri/ferocianură; determinarea caracteristicilor electrochimice specifice aplicațiilor electroanalitice (fereastra de potențial, curent de fond, caracteristici de rețele de micro/ nanoelectrozi). 2.3. Teste preliminare de detecție voltametrică a unor analiți țintă din clasa produșilor farmaceutici și a compușilor biologic activi.</p>	<p>Dr. Sorina Negrea, INCD-ECOIND Timisoara</p> <p>Dr. Bertrand Donnio, CNRS-Universitatea din Strasbourg, Institutul de Fizică și Chimie a Materialelor din Strasbourg (IPCMS), Strasbourg, Franța.</p>
<p>Faza III – Trim. III 3. Dezvoltarea metodelor de detecție electrochimică individuală a analiților țintă (ex. ibuprofen, citostatice,</p>	<p>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</p>	

glucoză, acid uric, acid ascorbic).	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.	

PROIECTE DE CERCETARE coordonate sau implementate cu participarea membrilor temei.
Finanțare: Academia Română și UEFISCDI

Proiect bilateral AR-VAST: *Luminescent biocompatible coordination complexes based on d-block metals and derivatives of natural alkaloids as ligands for biomedical applications*, Responsabil ICCD: **Andelescu, Adelina**, Membri echipă ICCD: **Szerb E., Cretu C., Bută I., Popa E.**, Responsabil Vitenam: Dr. Truong Ngoc Hung, 2026-2027, Academia Română -VAST Vietnam, valoare totală ICCD: 8000 euro (4000 euro/an);

Proiectul CoEx 2024 - CERSUS: *Centru de excelență în managementul apei, valorificarea materialelor, subproduselor și deșeurilor pentru implementarea bioeconomiei circulare (CERSUS)*, Director proiect: Teodosiu Carmen, **Responsabil ICCD** ca partener proiect, **P6: Szerb Elisabeta**, Membri echipă **P6: Lacrămă A., Muntean S., Ilies S., Cretu C., Halip L., Andelescu A., Nistor A., Popa E., Vișan A., Nicola R., Balasz T., PN-IV-P6-6.1-CoEx-2024-0056, 2025-2030, UEFISCDI, valoare totală partener P6: 4.295.000lei, valoare anul 2026: 730.400lei.**

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 încărcare și eliberare controlată de medicamente) cât și în protecția mediului, folosind alături de metodele clasice de sinteză, pe cele prin metode "verzi": hidrotermală, ultrasonare, sinteza asistată de microunde.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2026

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, cu varierea metodelor, prin agitare mecanică, ultrasonare sau sub acțiunea microundelor, în prezența unor agenți de direcționare: cationici și lichide ionice, surfactanți dimerici. 1.2. Sinteza unor nanocompozite de oxid de fier-silice funcționalizată. 1.3. Funcționalizarea materialelor obținute în activitățile 1.1 și 1.2 cu diferite grupări organice folosind metodele co-condensării și cea de post grefare. 1.4. Caracterizarea structurală, morfologica și fizico-chimică a materialelor obținute folosind metode spectroscopice, difractometrice, optice, analitice sau microscopice.	<u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Cătălin Ianăși Dr. Roxana Nicola 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 pentru Fizică Wigner, Departamentul de Spectroscopie cu Neutroni, 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 pentru 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. 2.5. Determinarea proprietăților fotofizice în stare solidă și în solvenți organici pentru materialele obținute la punctul 2.2.	
Faza III – Trim. III 3. Sinteza și caracterizarea de structuri organo-	3.1. Sintetizarea de materiale policristaline de tip Zr-MOF prin metoda hidro/solvotermală.	

metalice, de tip MOF, utilizând precursori de Zr(IV) cu liganzi dicarboxilici și chelați de tip N,N.	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.	
Faza IV – Trim. IV 4. Selectarea și testarea materialelor obținute pentru aplicații în biomedicină sau protecția mediului.	4.1. Selectarea materialelor cu proprietăți morfo-structurale optime pentru aplicații țintite. 4.2. Testarea materialelor selectate pentru încărcarea și eliberarea controlată de medicamente (clotrimazol, captopril). 4.3. Testarea materialelor selectate pentru capacitatea de încărcare cu hidrogen. 4.4. Testarea unor materiale selectate pentru adsorbția unor ioni metalici din soluții apoase.	

PROIECTE DE CERCETARE coordonate sau implementate cu participarea membrilor temei.
Finanțare: Academia Română și UEFISCDI

Proiect bilateral AR-VAST: *Luminescent biocompatible coordination complexes based on d-block metals and derivatives of natural alkaloids as ligands for biomedical applications*, Responsabil ICCD: **Andelescu, Adelina**, Membri echipă ICCD: Szerb E., **Cretu C.**, Bută I., Popa E. Responsabil Vitenam: Dr. Truong Ngoc Hung, 2026-2027, Academia Română -VAST Vietnam, valoare totală ICCD: 8000 euro (4000 euro/an);

Proiectul CoEx 2024 - CERSUS: *Centru de excelență în managementul apei, valorificarea materialelor, subproduselor și deșeurilor pentru implementarea bioeconomiei circulare (CERSUS)*, Director proiect: Teodosiu Carmen, **Responsabil ICCD** ca partener proiect, **P6:** Szerb Elisabeta, Membri echipă **P6:** Lacrămă A., Muntean S., Ilies S., **Cretu C.**, Halip L., **Andelescu A.**, Nistor A., Popa E., **Vișan A.**, **Nicola R.**, Balasz T., PN-IV-P6-6.1-CoEx-2024-0056, 2025-2030, UEFISCDI, valoare toatală partener P6: 4.295.000lei, valoare anul 2026: 730.400lei.

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.: Sinteza și caracterizarea structurală a unor compuși noi, analogi de curcumină, obținuți prin mono- și dicondensarea ciclohexanonei cu diferite salicilaldehide. Evaluarea activității potențial antioxidante și proprietăților cromice dependente de stimulii externi ale compușilor sintetizați.

Calendarul desfășurării activităților în anul 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
-------------------------	------------	------------

<p>Faza I – Trim. I 1. Sinteza unor noi analogi de curcumină</p>	<p>1.1. Obținere de noi structuri pe bază de ciclohexanonă și salicilaldehide. 1.2. Caracterizare structurală prin RMN 1D și 2D, HR-MS și IR. 1.3. Caracterizare prin difracție de raze X pe monocristale pentru compușii cu o cristalizare corespunzătoare.</p>	<p><u>Colectiv de cercetare</u> Dr. Liliana Cseh Dr. Livia Deveseleanu-Corîci Dr. Ildiko Bută Dr. Adelina Andelesc <i>Drd.</i> Bogdan-Ionuț Mara <i>Drd.</i> Alina Mogoșanu</p>
<p>Faza II – Trim. II 2. Evaluarea "in silico" a structurilor obținute</p>	<p>2.1. Standardizare structuri, generare microstări și conformeri în solvent implicit, apă. 2.2. Optimizare geometrică la nivele avansate de teorie, DFT. 2.3. Evaluare geometrii optimizate. 2.4. Extragere parametrii geometrici și energeticii pentru evaluarea stabilității structurilor.</p>	<p><u>Colaboratori interni</u> Dr. Ramona Curpân</p> <p><u>Colaboratori externi</u> Prof. Dr. Codruța Șoica, Universitatea de Medicină și Farmacie „Victor Babeș”, Timișoara</p>
<p>Faza III – Trim. III 3. Evaluarea proprietăților fotocromice și halocromice ale compușilor sintetizați</p>	<p>3.1. Studiul transformărilor chimice ale compușilor obținuți în funcție de factorii externi (lumină și pH). 3.2. Influența naturii și poziției substituenților pe nucleul benzenic asupra proprietăților cromice.</p>	<p>Dr. Valentin Badea, Universitatea Politehnica Timișoara</p>
<p>Faza IV – Trim. IV 4. Evaluarea proprietăților potențial antioxidante ale compușilor sintetizați.</p>	<p>4.1. Studiul activității antioxidante a compușilor sintetizați utilizând metoda DPPH. 4.2. Studiul activității antioxidante a compușilor sintetizați utilizând metoda ABTS.</p>	<p>Dr. Alina Nicolescu, Prof. Sergiu Shova, Institutul de Chimie Macromoleculară „Petru Poni”, Iași</p> <p>Prof. Dr. Ersilia Alexa, Universitatea de Științe Agricole și Medicină Veterinară a Banatului „Regele Mihai I al României” din Timișoara, Facultatea de Inginerie Alimentară</p>

PROIECTE DE CERCETARE coordonate sau implementate cu participarea membrilor temei.
Finanțare: UEFISCDI

Proiectul PED 2025 - SusBioGly: Dezvoltarea unei metode sustenabile de obținere a flavonolilor glicozilați folosind biocatalizatori imobilizați pe suporturi regenerabile, Director de proiect: Dr. Livia Nicoleta Deveseleanu-Corîci, Membri echipă ICCD: Cseh L., Buta I., Buzatu A.R., Popescu C.I., Spiridon L., Costache A., Badea R.A., talpau M., Contract nr. 87PED/2025, Cod proiect: PN-

IV-P7-7.1-PED-2024-2513, Durata proiect: 24 luni, Valoare totală proiect: 771.162 lei, Valoare anul 2026: 397.033 lei.

Proiectul CoEx 2024 - ARES: Centru Național Multidisciplinar de Excelență pentru Combaterea Rezistenței la Tratamentele Antiinfecțioase (ARES), Director proiect: Carmen Chifiriuc, Responsabil ICCD ca partener proiect, **P7:** Cseh Liliana, Membri echipă: Vișa A., Bora A., Crișan M., Crisan L., Deveseleanu-Corici L., **Buta I.**, Haidu D., Mara B., Andrei I., PN-IV-P6-6.1-CoEx-2024-0196, 2025-2030, UEFISCDI, valoare totală partener **P7:** 5.583.500lei, valoare anul 2026: 1.046.000lei.

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.: Dezvoltarea unor materiale hibride/compozite cu structură și textură controlată pe baza de materiale mezoporoase anorganice și catalizatori din clasa heteropolioxometalaților (HPOMs).

Calendarul desfășurării activităților în anul 2026

Faza / Obiectivul fazei	Activități	Executanți
Faza I – Trim. I 1. Sinteza unor suporturi de tip sită moleculară cu textură controlată derivate din subproduse vegetale ca surse alternative. Prepararea unor heteropoli oxometalați (HPOMs) cu activitate catalitică ridicată.	1.1. Preparare de site moleculare prin metoda sol-gel. 1.2. Funcționalizarea suporturilor de tip sită moleculară prin grefarea unor grupări funcționale organice. 1.3. Obținerea materialelor oxidice de tip Me/SBA-15 și Me/KIT-6 (Me = Ni, Ce, Cu, Au, Mg) prin metoda impregnării. 1.4. Studiul influenței temperaturii și timpului de sinteză asupra formării structurii sitei moleculare funcționalizate cu diferite amine.	<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 Dr. Radu Bănică, Dr. Daniel Ursu, Institutul Național de Cercetare Dezvoltare pentru Electrochimie și
Faza II – Trim. II 2. Caracterizarea fizico-chimică a compozitelor grefate și a HPOMs puri și depuși pe suporturi	2.1. Determinarea proprietăților texturale a compozitelor și a heteropoli oxometalaților sintetizați prin măsurători de suprafață specifică și porozitate prin metoda BET-BJH.	

<p>prin diferite metode de analiză texturală și structurală.</p>	<p>2.2. Caracterizarea structurală a compozitelor grefate cu amine și a heteropolioxometalaților depuși pe site moleculare prin: spectroscopie FT-IR-Raman, analiză termică cuplată cu MS (TGA-MS), difracție la unghiuri mici (SAXRD) și microscopie electronică (SEM-EDS și TEM).</p>	<p>Materie Condensată (INCEMC) Timișoara</p> <p>Prof. Dr. Ersilia Alexa, Universitatea de Științe Agricole și Medicină Veterinară a Banatului „Regele Mihai I al României” din Timișoara, Facultatea de Inginerie Alimentară</p>
<p>Faza III – Trim. III 3. Evaluarea proprietăților de adsorbție/desorbție ale CO₂ pe compozitele grefate la temperaturi sub 100°C.</p>	<p>3.1. Măsuratori de cicluri de adsorbție-desorbție programată termic-TPD a CO₂ pe compușii sintetizați cu metoda adaptată pentru analiza TG-DTA cuplată cu FT-IR.</p>	<p>Prof. Dr. Adina Negrea, Universitatea</p>
<p>Faza IV – Trim. IV 4. Determinarea proprietăților catalitice a HPOMs depuși pe suporturi în reacția de conversie a alcoolilor inferiori. Corelarea capacității de adsorbție a CO₂ cu proprietățile texturale și structurale ale sitelor moleculare sintetizate.</p>	<p>4.1. Determinarea mecanismului de adsorbție - desorbție de CO₂ pe baza unor modele cinetice prezentate în literatura de specialitate.</p> <p>4.2. Studiul dezactivării și regenerării catalizatorilor prin teste de activitate catalitică de lungă durată la diferite temperaturi pentru cei mai performanți catalizatori.</p> <p>4.3. Prelucrarea și interpretarea datelor experimentale, redactare comunicări științifice, postere pentru simpozioane științifice.</p>	<p>Politehnica Timișoara, Facultatea de Chimie și Ingineria Mediului, Timișoara</p> <p>Conf. Dr. Snezana Uskoković –Marković Facultatea de Farmacie, Universitatea din Belgrad, Serbia</p>