INSTITUTUL de CHIMIE TIMIŞOARA al ACADEMIEI ROMÂNE
B-dul. Mihai Viteazul, nr. 24,
300223 – Timişoara, România
Tel: +40-256-491818; Fax: +40-256-491824

Vizat

DIRECTOR

Dr. Otilia COSTIŞOR

PROGRAM DE CERCETARE

PENTRU ANUL 2014

Activitatea de cercetare a Institutului de Chimie Timişoara al Academiei Române prevăzută pentru anul 2014 este reflectată în **3** Programe de cercetare.

Programul 1. Proiectarea moleculară asistată de calculator.
Programul 2. Compuşi organici şi hetero-organici cu N, P, O, S şi F. Elaborarea de micro şi nanomateriale cu proprietăți speciale.
Programul 3. Compuşi anorganici şi hibrizi cu relevanță în ştiința materialelor nanostructurate. Precursori pentru materiale avansate.

INSTITUTUL DE CHIMIE TIMISOARA AL ACADEMIEI ROMANE
Bd. Mihai Viteazul nr. 24, RO-300223, Timişoara
tel: 0256-491818; fax: 0256-491824

Director,

Dr. Otilia Costişor

Sef de Secție: Dr. Liliana Păcureanu

Programul de cercetare nr.1

PROIECTAREA MOLECULARĂ ASISTATĂ DE CALCULATOR

Coordonator: **Prof. Dr. Zeno Simon (Membru corespondent al Academiei Române)**
CP1-Director Onorific al Institutlui de Chimie Timişoara

Proiectul nr.1.1.: Studiul proprietăților biologice, toxicologice şi tehnice ale compuşilor organici prin chemometrie, metode cuanto-chimice, de modelare moleculară şi tehnici QSAR/QSPR/QSTR.
Responsabil: Dr.ing. Simona Funar-Timofei, CS I

Tema 1.1.1. Studiul proprietăților toxicologice şi tehnice ale compuşilor organici prin chemometrie, metode cuanto-chimice, de modelare moleculară şi tehnici QSPR/QSTR. **Coordonator: Dr. Ing. Simona Funar-Timofei**			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1. Studiul relațiilor structură-proprietăți ale unor compuşi organici cu fosfor prin metode computaționale	1.1. Studiul relațiilor structură-flamabilitate prin aplicarea metodei PLS (partial least squares) pe seria de polimeri cu fosfor şi biciclofosfați 1.2. Evaluarea predictivității modelelor obținute pentru flamabilitatea unor polimeri cu fosfor şi ai unor biciclofosfați pe baza mai multor criterii statistice	- Dr. Ing. Simona Funar-Timofei - Dr. Ana Borota - Dr. Sorin Avram - Dr. Luminița Crişan - Dr. Alina Bora Colaboratori externi: - Universitatea de Medicină şi Farmacie Victor Babeş Timişoara, Facultatea de Farmacie (Dr. Daniela Ionescu) - Natural Science Laboratory, Toyo University, Tokyo, Japonia (Prof. Dr. Takahiro Suzuki
Faza 2 Trim.II	2. Determinarea criteriilor structurale specifice pentru activitatea agrochimică a unor compuşi	2.1. Studiu de literatură privind determinarea caracteristicilor structurale specifice pentru determinarea cantitativă a criteriilor de 'pesticide-likeness' ale compuşilor agrochimici. 2.2. Calculul distribuțiilor proprietăților moleculare ale compuşilor agrochimici şi al funcțiilor ce definesc conceptul de ‚pesticide-likeness'.	
Faza 3 Trim.III	3. Relații structură-proprietăți aplicate unor compuşi cu activitate cu activitate agrochimică	3.1. Studiul structurii derivaților substituiți de imidacloprid (din grupa neonicotinoizilor) prin calcule de mecanică moleculară. 3.2. Calculul descriptorilor structurali ai derivaților substituiți de imidacloprid şi alegerea parametrilor relevanți pentru activitatea insecticidă prin algoritm genetic.	
Faza 4 Trim.IV	4. Studiul relațiilor structură-proprietăți aplicate prin metode specifice cheminformatice şi de QSAR	4.1. Evaluarea cantitativă a activității insecticide unei serii de derivați *N3* substituiți de imidacloprid folosiți pentru insecta *Musca Domestica* prin aplicarea metodelor regresionale şi evaluarea predictivității modelelor obținute pe baza mai multor criterii statistice. 4.2. Compararea rezultatelor obținute prin diferite metode regresionale liniare şi neliniare pentru flamabilitatea unor polimeri cu fosfor şi ai unor biciclofosfați.	

Tema 1.1.2. Studiul interacţiei ligand-receptor pentru o clasă de trifenilalchene active pe receptorul estrogenic alpha **Coordonator: Dr. Ramona Curpăn**			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanţi
Faza 1 Trim.I	1. Selectarea structurilor experimentale pentru receptorul estrogenic alpha	1.1. Analiza bazei de date PDB pentru identificarea şi extragerea tuturor structurilor de raze X ale receptorului ERalpha. 1.2. Calcule de similaritate 3D între liganzii studiaţi şi cei extraşi din PBD. 1.3. Analiza rezultatelor, identificarea structurilor de raze X pentru studii de docare pe baza similarităţii 3D dintre liganzii studiaţi şi cei din complecşi ERalpha extraşi.	- Dr. Ramona Curpăn - Dr. Liliana Halip - Dr. Ana Borota Colaboratori externi: Colaboratori externi: - Prof. Dr. Craig Jordan, - Dr. Philipp Maximov Georgetown University Medical Center, Washington DC, USA. - Prof. Dr. Tudor I. Oprea, -Dr. Cristian G. Bologa University of Mexico School of Medicine, Albuquerque, USA.
Faza 2 Trim.II	2. Calcule cuanto-chimice pentru liganzii investigaţi	2.1. Generarea de structuri 3D 2.2. Optimizarea geometriilor 3D în cadrul formalismului DFT, la diferite nivele de teorie. 2.3. Compararea rezultatelor obţinute, selectarea celor mai bune geometrii pentru studiile de docare.	
Faza 3 Trim.III	3. Studiul interacţie ligand-receptor prin docare moleculară	3.1. Pregătirea structurilor de raze X selectate pentru docare moleculara. 3.2. Docarea liganzilor în situsul de legare al receptorului ERalpha. 3.3. Evaluarea modelelor pentru stabilirea conformaţiei potrivite a receptorului.	
Faza 4 Trim.IV	4. Studii de dinamică moleculară	4.1. Pregătirea structurilor proteice pentru simulări. 4.2. Selectarea liganzilor şi pregătirea lor pentru simulări. 4.3. Analiza rezultatelor pentru identificarea rolului Asp351 în conformaţia agonistă şi antagonistă a ERalpha.	

Proiectul nr.1.2. Aplicații ale metodelor de modelare moleculară la liganzi activi pe proteine membranare şi protein-kinaze
Responsabil*:* Dr. Liliana Păcureanu, CS II

Tema 1.2.1. Screening virtual pe receptori cuplați cu proteine G (GPCR) cu relevanță farmacologică prioritară **Coordonator: Dr. Liliana Ostopovici-Halip**			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim 1	1. Studiu de literatură pentru identificarea şi prioritizarea receptorilor GPCR cu relevanță farmacologică.	1.1. Stabilirea criteriilor de selecție a receptorilor GPCR de interes. 1.2. Clasificarea receptorilor GPCR pe baza relevanței lor farmacologice. 1.3. Prioritizarea pentru studiul ulterior al celor mai promițători receptori GPCR. 1.4. Pregătire strucurilor receptorilor de interes pentru screeningul virtual. (atribuire sarcini parțiale, minimizări, etc).	*Colectiv:* -Dr. Liliana Halip, CS III -Dr. Ramona Curpăn, CS III -Dr. Ana Borota, CS -Dr. Alina Bora, CS III -Dr. Sorin Avram, CS *Colaboratori externi:* - Prof. Dr. Tudor I. Oprea, University of New Mexico School of Medicine, Albuquerque, USA - Dr. Cristian G. Bologa University of New Mexico School of Medicine, Albuquerque, USA
Faza 2 Trim 2	2. Identificarea şi pregătirea seturilor liganzilor pentru screening virtual.	2.1. Selectare de liganzi activi pe GPCR de interes. 2.2. Selectare de compuşi inactivi pe GPCR de interes. 2.3. Selectare de compuşi tip “decoys”. 2.4. Selectare compuşi cu structură diferită dar cu proprietăți electrostatice, formă şi volum similare cu liganzii activi pe receptori GPCR. 2.5. Pregătirea seturilor de liganzi pentru screening (generare tautomeri, distribuții sarcini parțiale, minimizare geometrii, etc).	
Faza 3 Trim 3	3. Stabilirea unui protocol valid pentru screeningul virtual.	3.1. Andocarea moleculară a seturilor de compuşi activi, inactivi şi decoys în situsurile receptoriale de interes. 3.2. Evaluarea rezultatelor de andocare (evaluare parametrilor ROC şi AUC). 3.3. Optimizarea procesului de andocare până la obținerea parametrilor care permit discrimarea compuşilor activi de cei inactivi şi decoys.	
Faza 4 Trim 4	4. Screeningul virtual pe receptorii GPCR de interes.	4.1. Andocarea moleculară a compuşilor similari în situsurile receptoriale, folosind protocolul de lucru stabilit anterior. 4.2. Selectare de compuşi potențiali activi pentru confirmare biologică.	

Tema 1.2.2. Indentificarea de compuşi noi cu potențială activitate biologică pe diverse ținte proteice **Coordonator: Dr. Alina Bora, CSIII**			
Faza 1 Trim 1	1. Identificare de compuşi cu profil farmacologic îmbunătățit comparativ cu cel al quercetinului	1.1. Analiza bazei de date ChEMBL pentru identificarea şi selectarea compuşilor cu structură diferită de cea a quercetinului 1.2. Analiza bazei de date PDB pentru identificarea şi selectarea structurilor de raze X ale proteinelor implicate în cancer 1.3. Stabilirea caracteristicilor structurale importante pentru activitatea anticanceroasă	*Colectiv:* Dr. Sorin Avram Dr. Liliana Păcureanu Dr. Luminița Crişan Dr. Liliana Halip Dr. Ramona Curpăn *Colaboratori externi:* -Prof. Dr. Ludovic Kurunczi Universitatea de Medicină şi Farmacie Victor Babeş Timişoara, Facultatea de Farmacie - Prof. Dr. Tudor I. Oprea University of Mexico School of Medicine, Albuquerque, USA -Dr. Cristian G. Bologa University of Mexico School of Medicine, Albuquerque, USA . -Farm. Marius Mioc, Universitatea de Medicină şi Farmacie Victor Babeş Timişoara, Facultatea de Farmacie -Farm. Bogdan Dragos, Universitatea de Medicină şi Farmacie Victor Babeş Timişoara, Facultatea de Farmacie
Faza 2 Trim 2	2. Calcule cuanto-chimice aplicate liganzilor studiați	2.1. Generarea de structurilor 3D 2.2. Optimizarea geometriilor 3D folosind metoda DFT cu nivele diferite de teorie 2.3. Compararea rezultatelor obținute în vederea selectării celor mai bune geometrii utilizate la studiile de andocare moleculară	
Faza 3 Trim 3	3. Dezvoltare şi validare modele farmacoforice	3.1. Elaborarea farmacoforilor comuni țintelor biologice alese. 3.2 Validarea calității modelului farmacoforic prin metoda 3D-QSAR 3.3 Validare modelului farmacoforic prin analiza proprietăților electronice	
Faza 4 Trim 4	4. Selectare compuşi cu acțiune în tratarea dependenței de alcool/opioizi	4.1. Analiza bazei de date ZINC, a patentelor şi a literaturii existente pentru identificarea compuşilor activi pe ținte terapeutice implicate în tratamentul dependenței de alcool/opioizi 4.2. Studiu de similaritate 3D a compuşilor reprezentativi	

Tema 1.2.3. Modelarea activității biologice şi a selectivității pentru inhibitorii ATP-competitivi ai GSK-3 **Coordonator: Dr. Luminița Crişan, CS**			
Faza 1 Trim 1	1. Identificarea inhibitorilor selectivi si neselectivi ai GSK3	1.1. Analiza bazelor de date de compuşi biologic activi (ChEMBL, BindingDB) şi a literaturii de specialitate în vederea colectării informațiilor de activitate biologică determinata pentru GSK-3, CDK-2/4/5. 1.2. Filtrarea compuşilor, excluderea dublurilor şi a activităților redundante, clacularea rapoartelor de selectivitate şi stabilirea seturilor de compuşi selectivi şi neselectivi fața de GSK-3. 1.3. Evaluarea similarității structurale a compuşilor selectivi față de cei neselectivi.	*Colectiv:* -Dr. Liliana Păcureanu, CSII -Dr. Alina Bora, CSIII -Dr. Sorin Avram, CS -Dr. Cristian Neanu, CSIII -Chim. Daniela Ivan, CS *Colaboratori externi:* -Prof. Dr. Ludovic Kurunczi Universitatea de Medicină şi Farmacie Victor Babeş Timişoara, Facultatea de Farmacie
Faza 2 Trim 2	2. Elaborarea modelelor de clasificare.	2.1. Selectarea descriptorilor relevanți pentru construirea modelelor de clasificare. 2.2. Elaborarea modelelor de clasificare supervizată PLSDA şi Random Forest. 2.3. Validarea modelelor de clasificare.	
Faza 3 Trim 3	3.Selectarea conformatiilor 3D ale proteinelor pentru procedeul de andocare.	3.1. Suprapunerea conformerilor proteinelor şi selectarea conformațiilor distincte. 3.2. Andocarea încrucişată a liganzilor cocristalizați cu GSK3 în situsul de legare. 3.3. Andocarea inhibitorilor selectivi şi neselectivi ţn situsul de legare al ATP.	
Faza 4 Trim 4	4. Asamblarea unei baze de date de compuşi activi şi inactivi reprezentativă pentru spațiul chimic.	4.1. Identificarea funcțiilor scor care prioritizează compuşii selectivi față de cei neselectivi. 4.2. Evaluarea în detaliu a interacțiilor ligand-receptor pe fiecare aminoacid ce interacționează cu ligandul . 4.3. Aplicarea metodelor de clasificare supervizată pentru construirea modelelor cu ajutorul parametrilor obținuți prin andocare.	

Tema 1.2.4. Exploatarea bazei de date CFRCEBS şi implementarea metricilor de relevanță graduală în chemoinformatică **Coordonator: Dr. Sorin Avram, CS**			
Faza 1 Trim 1	1. Investigarea exhaustivă a literaturii de specialitate pentru identificarea surselor de erori specifice determinărilor HTS.	1.1. Sistematizarea surselor de erori şi a protocoalelor de filtrare existente. 1.2. Identificarea datelor ce pot fi utilizate pentru optimizarea schemelor de înlăturare a compuşilor de tip fals pozitivi.	*Colectiv:* -Dr. Liliana Păcureanu, CSII -Dr. Alina Bora, CSIII -Dr. Luminița Crişan, CS *Colaboratori externi:* -Prof. Dr. Ludovic Kurunczi Universitatea de Medicină şi Farmacie Victor Babeş Timişoara, Facultatea de Farmacie -Dr. Ştefana Avram, S.L. Universitatea de Medicină şi Farmacie Victor Babeş Timişoara, Facultatea de Farmacie.
Faza 2 Trim 2	2. Pregăritrea datelor şi stabilirea metodologiei în scopul identificării inhibitorilor luciferazei.	2.1. Standardizarea structurilor şi generarea descriptorilor moleculari. 2.2. Identificarea algorimilor de predicție potriviți pentru datele obținute.	
Faza 3 Trim 3	3. Construirea de modele predictive pentru inhibitori ai luciferazei.	3.1. Aplicarea şi optimizarea metodelor de indentificare (predicție) a inhibitorilor luciferazei. 3.2 Evaluarea performanțelor modelelor obținute.	
Faza 4 Trim 4	4. Utilizarea modelelor de predicție obținute pentru identificarea de noi inhibitori ai luciferazei.	4.1. Aplicarea modelelor pe rezultatele unor serii celulare, experimentale, depozitate în PubChem Bioassay. 4.2. Evaluarea rezultatelor şi estimarea proporției compuşilor care generează fals pozitivi prin inhibarea luciferazei în experimente de tip HTS.	

Tema 1.2.5. Evaluarea rezultatelor experimentale obtinute prin high-throughput screening (AID 463203 şi AID 434954) cu ajutorul metodelor chemoinformatice **Coordonator: Dr. Liliana Păcureanu, CSII**			
Faza 1 Trim 1	1. Pregătirea proteinelor şi a seturilor de compuşi activi şi inactivi pentru andocare.	1.2. Evaluarea deplasărilor lanțurilor proteice în toate structurile de raze X ale GSK-3β precum şi a conformațiilor catenelor laterale. 1.3. Evaluarea similarității tridimensionale dintre liganzii cocristalizați cu GSK-3 şi compuşii activi din AID 463203 şi AID 434954. 1.2. Pregătirea proteinelor şi a seturilor de compuşi activi şi inactivi pentru andocare şi evaluarea interacțiilor cu ajutorul funcțiilor scor.	*Colectiv:* -Dr. Sorin Avram, CS -Dr. Alina Bora, CSIII -Dr. Luminița Crişan, CS *Colaboratori externi:* -Prof. Dr. Ludovic Kurunczi Universitatea de Medicină şi Farmacie Victor Babeş Timişoara, Facultatea de Farmacie.
Faza 2 Trim 2	2. Aplicarea protocolului PLSDA DOCET la seturile de compuşi AID 463203 şi AID 434954.	2.1. Elaborarea modelelor statistice de clasificare supervizată utilizând descriptorii structurali şi termenii energetici calculați de funcțiile scor. 2.2. Implementarea algoritmului PLSDA DOCET şi extinderea protocolului.	
Faza 3 Trim 3	3. Calculul similarităților tridimensionale.	3.1. Analiza diversitătii structurale pentru seturile de compusi activi si inactivi din AID 463203 şi AID 434954. 3.2. Elaborarea unor seturi standard de validare ce contin compuşi activi şi inactivi în diferite proporții pe baza similarității tridimensionale.	
Faza 4 Trim 4	4. Evaluarea şi compararea parametrilor statistici obținuți cu ajutorul tuturor metodelor implementate.	4.1. Analiza abilităților de "scaffold-hopping" şi de detectare de chemotipuri diverse ale metodelor utilizate. 4.2. Compararea performanțelor metodelor de scrining virtual în ceea ce priveşte separarea dintre compuşii activi şi cei inactivi.	

INSTITUTUL de CHIMIE TIMIŞOARA al ACADEMIEI ROMÂNE
Blvd. Mihai Viteazul, nr. 24, 300223 - Timişoara
Tel: +40-256-491818; Fax: +40-256-491824

Director,

Dr. Otilia Costişor

Şef de Secție : Dr. Ing. Eugenia Făgădar-Cosma

Programul de cercetare nr. 2.

COMPUŞI ORGANICI ŞI HETERO-ORGANICI CU N, P, O, S ŞI F. ELABORAREA DE MICRO ŞI NANOMATERIALE CU PROPRIETĂȚI SPECIALE.

Coordonator : Dr. Ing. Eugenia Făgădar Cosma

Proiectul nr. 2.1.: **Materiale avansate cu proprietaţi speciale opto-electrice pe baza de porfirine şi combinaţiile lor complexe. Aplicatii biologice si tehnice.**
Coordonator: Dr. Ing. Eugenia Făgădar-Cosma, CS I

Tema 2.1.1. Cromofori de tip porfirinic simetric si nesimetric substituiti si combinatiile lor complexe. Obţinere şi caracterizare. Reacţii de funcţionalizare a porfirinelor. Studiul potenţialelor aplicaţii tehnice şi biologice.
Coordonator: Dr. Ing. Făgădar-Cosma Eugenia, CSI

Faza	Obiective	Activităţi	Cercetători
Faza 1 Trim I. II, III	1. Obtinerea de noi porfirine simetric şi asimetric mixt-substituite, aplicand variante ale metodelor multicomponente 2. Obţinerea complecsilor porfirinelor cu metale tranzitionale 3d.	1.1. Obtinerea, separarea şi purificarea de noi structuri asimetrice, mixt substituite la nucleul fenilic cu grupe amino, hidroxil, di-metoxi si fenoxi. 1.2. Depunerea de straturi subtiri de porfirine pe diferite substraturi prin tehnici PLD si MAPLE sau LB(prin colaborare cu institutele platformei-Magurele). 1.3. Electropolimerizarea porfirinelor 2.1. Sinteza combinatiilor complexe cu Zn(II), Co(II), Fe (III) si Mn (III) cu liganzi de tipul porfirinelor simetrice si asimetrice A_3B si *trans*-A_2B_2.	*Colectiv:* -Dr. Eugenia Fagadar-Cosma, CSI - Dr. Ing. CSIII Anca Lascu - Ing. Creangă Ionela. - Chim. Palade Anca *Colaboratori externi:* - Universitatea "Politehnica" Timişoara, - Univ. de Vest Timişoara - Institutul National de Electrochimie şi Materiale Condensate - Institutul National C&D pentru Fizica Materialelor Bucuresti-Magurele -Institutul National de Cercetare-Dezvoltare pentru Stiinte Biologice Bucuresti-Universitatea de Medicina si Farmacie "Victor Babes" Timisoara *Colaborări internaţionale:* - Faculty of Pharmacy, Collegium Medicum, Nicolaus
Faza 2 Trim II, III	3. Studiul structurii si proprietatilor opto-electronice, morfologice si topografice ale derivatilor porfirinici obtinuti	3.1. Caracterizarea prin spectroscopie UV-vis, fluorimetrie, FT-IR, RMN, MS şi HPLC, TLC a compusilor porfirinici obţinuti. 3.2. Analiza prin microscopie AFM a structurilor supramoleculare formate, prin depunere din diversi solventi 3.3. Studiul influenţei fazei staţionare si a naturii/compozitiei fazei mobile asupra separării derivaţilor porfirinici prin HPLC la scara analitică şi preparativă.	
Faza 3 Trim. III	4. Identificarea posibilităţilor de aplicare a porfirinelor/ metalo-porfirinelor ca ionofori în componenţa electrozilor ion-selectivi cu membrană polimerică sau ca senzori chimici si optici	4.1. Teste asupra porfirinelor bază si metaloporfirinelor sintetizate, ca ionofori in componenta membranelor polimerice a senzorilor pentru cationi/anioni sau evaluarea capacitatii de actiune ca senzori electrochimici sau optici pentru metale grele, medicamente sau substante organice toxice.	
Faza 4 Trim IV	5. Investigarea proprietatilor electrochimice ale porfirinelor si metaloporfirinelor. Straturi subtiri cu	5.1. Studiu de comportament electrochimic (studii de inhibare a coroziunii, prin metode electrochimice).	

	aplicatii in senzoristica si inhibarea coroziunii 6. Teste de activitate biologică 7. Redactare lucrari-actiuni de diseminare rezultate	6. Teste de toxicologie si de activitate biologica (antimicotic/antibacterian) 7. Minimum 3 lucrari ISI, lucrari in reviste cu sistem *peer-review,* participare Key-note speaker la Conferinte/video-conferinte	Copernicus University, Bydgoszcz, Polonia -Kiev National University of Technologies & Design -Atos Research-Barcelona - Institute of Macromolecular Compounds Russian Academy of Sciences, - Instituto Tehnologico de la Energia, Valencia, Spania, - Institutul Petru Poni Iasi

Tema 2.1.2. Materiale hibride obtinute prin incorporarea de porfirine si metaloporfirine in matrici anorganice si/sau polimerice. Complecsi Coloidali cu nano-Ag si Porfirine. Investigarea proprietăților optice.
Coordonator: Dr. Anca Lascu, CSIII

Faza	Obiective	Activitati	Cercetători
Faza 1,2 Trim I, II	1. Obținerea si testarea micro si nano-materialelor fotochimic active obtinute prin imobilizarea porfirinelor pe matrici anorganice si/sau polimerice prin tehnici de sinteza organica, coloidale si sol-gel	1.1. Imobilizarea porfirinelor divers functionalizate pe matrici anorganice si/sau polimerice. 1.2. Obtinerea de complecsi coloidali porfirina- nanoAg cu domeniu larg de absorbtie UV-vis (controlul dimensiunii nanoparticulelor)	*Colectiv:* -Dr. Ing. Anca Lascu -Ing. drd.Creangă Ionela -Ing. drd. Anca Palade -Dr. Eugenia Fagadar-Cosma *Colaborări interne:* - INEMC - National Institute for Lasers, Plasma and Radiation Physics Lasers Department Bucharest-Magurele *Colaborări internaționale:* - Faculty of Pharmacy, Collegium Medicum, Nicolaus Copernicus University, Bydgoszcz, Polonia
Faza 3 Trim III	2. Caracterizarea fizico-chimica a materialelor obtinute	2.1. Caracterizarea prin tehnici microscopice(AFM), analiza termica, UV-vis, FT-IR, BET si fluorescenta a materialelor hibride obtinute. 2.2. Studii privind topografia suprafetelor, comparativ cu porfirinele corespunzatoare libere	
Faza 4 Trim IV	3.Redactare lucrari, brevetare	3.1.Testari preliminare ale proprietăților optice, biologice si catalitice precum si ca materiale cu potential in detectia/captarea de metale grele 3.2. Minim 1 lucrare ISI	

Proiectul nr. 2.2.: Sinteza, caracterizarea, aplicațiile şi studiul relației structură –reactivitate – proprietăți în chimia compuşilor fosforului, azotului şi a altor heteroelemente.

Coordonator: Dr. Ing. Gheorghe Ilia, CS I

Tema 2.2.1. Metode "Green" utilizate in sinteza unor compusi cu molecula mica sau polimeri continad heteroelemente, in particular fosfor si/sau fluor si utilizarea acestora pentru obtinerea de materiale speciale cu aplicatii in medicina, agricultura, cataliza etc.
Coordonator: Dr. Gheorghe Ilia, CS I

Faza	Obiective	Activitati	Cercetători
Faza 1 Trim I, II	1. Obtinere de noi fosfinomaidati prin metode neconventionale	1.1. Sinteze de amidofosfinati	*Colectiv:* -Dr. M. Petric. -Dr. Cornelia Crasmareanu -Dr. Manuela Crisan -Dr. Lavinia Macarie *Colaboratori externi:* - Univ. de Vest Timişoara - Univ. Creta, Grecia - Univ Cape Peninsula, Africa de Sud - Universitatea Tehnica si Economica Budapesta
Faza 2 Trim II, III		2.1. Stabilirea condițiilor optime de reacție: raport molar reactanți, temperatura, solvenți.	
Faza 3 Trim. III	2. Condensare intramoleculara a compusilor cu fosfor	3.1. Studii preliminare privind condensarea intramoleculara prin metode neconventionale.	
Faza 4 Trim IV		4.1. Analiza seriilor de compusi ce contin fosfor prin spectrometrie de masă, IR, RX.	

Tema 2.2.2. Oținerea de noi structuri de iminofosforani pornind de la difenilfosforil azidă
Coordonator: Dr.Mihaela Petric, CS

Faza	Obiective	Activitati	Cercetători
Faza 1 Trim I, II, III	1.Reactia difenilfosforilazidei cu diferiti compusi cu P si N in molecula	1.1 Sinteza difenilfosforilazidei cu mono- si difosfine 1.2. Stabilirea condițiilor optime de reacție: raport molar reactanți, temperatura, solvenți.	*Colectiv:* - Dr. Manuela Crisan - Dr. Gheorghe Ilia *Colaboratori externi:* - Institutul de Fizică Aplicată-Chişinău, Moldova
Faza 2 Trim I, II, III	2. Caracterizarea compusilor noi sintetizati prin FT-IR. MS-ESI, RMN, analiza termica (TG. TGA, DTA, DSC), RX	2.1 Caracterizarea compusilor noi sintetizati prin FT-IR. MS-ESI, RMN, analiza termica (TG. TGA, DTA, DSC), RX 2.2 Determinarea structurii cristaline si moleculare pentru mono-cristalele obtinute	
Faza 3 Trim. IV	3. Identificarea de noi aplicatii a iminofosforanilor sintetizati (ex. domeniul farmaceutic)	3.1. Caracterizarea structurala de noi forme solide (ex. forme polimorfe) ale noilor iminofosforani sintetizati 3.2. Calcule cuanto-chimice ale geometriilor moleculare	

Tema 2.2.3. Materiale compozite (hibride) organice-anorganice obtinute prin incorporare de coloranti monoazoici acizi cu grupari sulfonice si carboxilice utilizand ca molecule de cuplare compuşi cu fosfor (acizi di-fosfonici si tri-fosfonici). **Coordonator: Dr. Gheorghe Ilia, CS I**			
Faza	Obiective	Activitati	Cercetători
Faza 1 Trim I	1. Stabilirea variantelor optime de sinteza ale materialelor compozite organice-anorganice conținând compuşi cu fosfor	1.1.Variante de sinteza ale materialelor compozite cu fosfor utilizand ca molecule de cuplare, acizi di-fosfonici si tri-fosfonici.	*Colectiv:* - Dr. Eleonora Crăşmăreanu - Dr. Gheorghe Ilia *Colaboratori externi:* - Centre for Materials Research, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Dr. Ing. Vasile Simulescu - Institute of Chemical Research of Catalonia, Tarragona, Spain-Drd.Chim. Carmen Biriescu
Faza 2 Trim II	2. Sinteza materialelor compozite organice-anorganice conținând compuşi cu fosfor	2.1. Metoda sol-gel utilizata in sinteza materialelor compozite cu fosfor.	
Faza 3 Trim III	3. Caracterizarea materialelor compozite organice-anorganice conținând compuşi cu fosfor	3.1. Utilizarea metodelor de analiza specifice acestor compusi, IR, UV-Vis, SEM, EDX, spectroscopie de masa, analiza termica in caracterizarea materialelor compozite organice-anorganice conținând compuşi cu fosfor.	
Faza 4 Trim IV	4. Aplicatii ale materialelor compozite organice-anorganice conținând compuşi cu fosfor	4.1. Grefare pe suporturi anorganice a compusilor fosfonici 4.2. Extinderea ariei de aplicabilitate a acestor materiale hibride.	

Tema 2.2.4. Dezvoltarea si functionalizarea de noi precursori din clasa acizilor carboxilici pentru materiale hibride **Coordonator: Dr. chim. Manuela Crisan, CSIII**			
Faza	Obiective	Activitati	Cercetători
Faza 1 Trim. I, II, III	1. Obtinerea de noi precursori	1.1. Sinteza si purificarea derivatilor carboxilici monosubstituiti in *orto*-, *meta*- si *para*- si a celor disubstituiti. 1.2. Stabilirea conditiilor optime de reactie.	*Colectiv:* Dr. Mihaela Petric Dr. Gheorghe Ilia *Colaboratori externi:* - Institutul de Fizică Aplicată-Chişinău, Moldova
Faza 2 Trim. I, II, III	2. Caracterizarea precursorilor obtinuti	2.1. Caracterizarea compusilor sintetizati prin RX, FT-IR, MS, analiza termogravimetrica, DSC. 2.2. Caracterizarea structurala de noi forme solide (cristale multicomonente - saruri, solvați, hidrati) ale noilor precursori obtinuti.	
Faza 3 Trim. IV	3. Determinarea structurii moleculare si cristaline a compusilor obtinuti	3.1. Calcule cuanto-chimice a geometriilor moleculare. 3.2. Investigatii asupra impachetarii moleculare in structurile cristaline ale compusilor obtinuti.	

Proiectul nr. 2.3.: Compuşi organici multifuncționali, materiale cu aplicații în medicină, industrie şi protecția mediului.
Coordonator: Dr. Ing. Nicoleta Pleşu, CS III

Tema 2.3.1. Compuşi cu funcțiune azo cu afinitate pentru suporturi macromoleculare naturale şi de sinteză. **Coordonator: Dr. Ing. Simona Gabriela Muntean, CS III**			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1, Trim.I, II, III	1. Studii privind sinteza si caracterizarea de noi compusi cu funcțiune azo ai DASDS.	1.1. Obtinerea de noi compusi cu funcțiune azo ai DASDS. 1.2. Separarea, purificarea şi caracterizarea compusilor prin TLC, HPLC, spectroscopie IR, UV-Vis şi MS.	*Colectiv* - Dr. Radulescu-Grad M. - Drd. Todea A. - Dr. Muntean S.G. *Colaboratori externi*: - UMF Victor Babes, Timisoara -UPT, Facultatea de Chimie Industrială si Ingineria Mediului - Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni" Iasi - Institutul National de Electrochimie şi Materiale Condensate Timisoara - Azur Timisoara - ICECHIM, Bucuresti - UPB, Facultatea de Chimie Aplicata si Stiinta Materialelor
Faza 2, Trim.I, II, III	2.. Studiul adsorptiei compusilor cu functiune azo cu aplicatii în protectia mediului.	2.1. Studiul experimental al indepartarii din solutii apoase a colorantilor directi folosind sorbanti macromoleculari naturali. 2.2. Studiul experimental al indepartarii din solutii apoase a colorantilor directi folosind sorbanti macromoleculari de sinteza. 2.3. Studiul teoretic al adsorptiei colorantilor folosind sorbanti macromoleculari naturali si/sau de sinteza.	
Faza 3, Trim. III	3. Utilizarea spectroscopiei UV-Vis pentru studiul agregarii si a activitatii antioxidante.	3.1. Studiul spectrofotometric de culoare pentru compusi cu funcțiune azo ai DASDS. 3.2. Studiul calitativ si cantitativ al agregarii colorantilor directi în soluție apoasă. Influenta concentratiei asupra agregarii. 3.3. Determinarea activitatii antioxidante la uleiuri esentiale, folosind spectroscopia UV-Vis.	
Faza 4, Trim.IV	4. Studii privind obtinerea de compuşi cu funcțiune azo prin metode moderne.	4.1. Stabilirea conditiilor optime de reactie: solventi. pH, raport molar reactanti, temperatura. 4.2. Sinteza de noi compusi cu funcțiune azo prin cuplare N-P. 4.3. Separarea, purificarea si caracterizarea compusilor sintetizati prin TLC, UV-Vis, FT-IR, MS, ^{31}P RMN.	

Tema 2.3.2. Aplicații ale materialelor compozite pe bază de conductori organici intrinseci ca senzori analitici şi electrozi modificați pentru electrocataliză şi biochimie. **Coordonator: Dr. Ing. Nicoleta Pleşu CS II**			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1, Trim.I	1. Obtinerea de compozite pe baza de polianiline (PANI)	1.1. Prepararea unor compozite pe baza de PANI. Stabilirea condițiilor de reacție pentru obținerea compozitelor. 1.2. Prepararea unor filme şi/sau membrane compozite pe baza de PANI prin impregnare. Stabilirea condițiilor de sinteză. 1.3. Prepararea unor membrane compozite pe baza de PANI prin reticulare la UV. Stabilirea condițiilor de sinteză	*Colectiv:* -Dr. ing. Plesu N. - drd.ing. Țară-Lungă-Mihali M. -Dr.ing Muntean S.G. *Colaboratori externi*: -Universitatea Politehnica Timişoara, Facultatea de Chimie Industrială şi Ingineria Mediului - Universitatea de Vest Timişoara - Universitatea de Medicină şi Farmacie Victor Babeş, Timişoara, -INCEMC -Timişoara, - ISIM- Timişoara, - INMR -Bucureşti.
Faza 2, Trim.II	2. Caracterizarea compozitelor şi/sau membranelor preparate. Modelarea datelor experimentale	2.1. Caracterizarea compozitelor sintetizate, pe baza de PANI prin ATR, SEM, viscositate) 2.2. Caracterizarea filmelor (membranelor) de PANI obtinute spectroscopie de impedanta (EIS). Determinarea rezistentei membranelor preparate prin impregnare. 2.3. Modelarea datelor EIS	
Faza 3, Trim.III	3. Caracterizarea membranelor preparate. Modelarea datelor experimentale	3.1. Caracterizarea filmelor de PANI obtinute prin spectroscopie de impedanta (EIS). Testarea capacitatii de protectie coroziva. 3.2. Modelarea datelor EIS 3.3. Determinari preliminare, proprietati mecanice pentru membranele reprezentative	
Faza 4, Trim.IV	4. Investigarea prin spectroscopie de impedanta a unor compusi organici si/sau element organici, hibrizi organici anorganici	4.1. Investigarea proprietatilor anticorozive ale unor compusi anorganici si/sau organici. 4.2. Caracterizarea electrozilor modificați cu hibrizi organici- anorganici prin spectroscopie de impedanță. 4.3. Studiul agregării compuşilor cu funcțiune azo prin tehnici electrochimice (spectroscopie de impedanta). 4.4. Redactare lucrari-actiuni de diseminare rezultate.	

Proiectul nr. 2.4.: **Compuşi macromoleculari conținând heteroatomi cu proprietăți controlate şi direcționate: biopolimeri, nanocompozite, reactanți polimerici, ignifuganți, catalizatori şi biocide polimerice de tipul: 1. Polimeri cu fosfor şi/sau azot în catena principală; 2. Polimeri cu grupări funcționale pendante cu fosfor şi/sau azot şi oxigen; 3. Polimeri acrilici fotoreticulați cu conținut de nanomateriale ca aditivi reactivi.**
Coordonatori: Dr. Ing. Smaranda Iliescu, CS I; Dr. ing Adriana Popa, CS I

Tema 2.4.1. Co(poliesteri) cu fosfor si/sau azot in catena principala Coordonator: Dr. Ing. Smaranda Iliescu, CSI			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim.I	1. Sinteza poliesterilor cu fosfor in conditiile green chemistry	1.1 Policondensarea in faza solida a fenildiclorfosfonatului cu bisfenolul A mediata de ultrasunete 1.2 . Caracterizarea polimerului prin IR, ^{1}H-RMN, viscozitate inerenta, masa molara, analiza termica, inflamabilitate.	*Colectiv* - Dr. S. Iliescu, - Dr. A. Popa - Dr. L. Macarie - Dr. A. Visa - Dr. B. Maranescu *Colaboratori interni* - Dr. N. Plesu *Colaboratori externi*: - UPT - UVT -Institutul de Chimie Macro-moleculara „Petru Poni" Iasi - Universitatea de Studii Tehnologice si Economice Budapesta Ungaria
Faza 2, Trim.II	2. Sinteza poliesterilor cu fosfor in conditiile green chemistry	2.1. Studiul parametrilor de reactie: viscozitatea inerenta, timpul de reactie si raportul molar al reactantilor 2.2. Optimizarea parametrilor de reactie prin folosirea programului experimental design	
Faza 3, Trim.III	3.Membrane polimerice continand fosfor in catena principala	3.1. Sinteze de noi co(poliesteri) cu fosfor prin policondensarea in conditii "green chemistry" a hexildiclorfosfonatului cu bisfenol M si polietilen glicol 3.2. Caracterizarea polimerului prin IR, ^{1}H-RMN, viscozitate inerenta, masa molara, analiza termica, evaluarea proprietatilor de inflamabilitate	
Faza 4, Trim.IV	4. Membrane polimerice continand fosfor in catena principala	4.1. Obtinerea co(poliesterului) cu fosfor electrolit 4.2. Evaluarea proprietatilor electrice si de inflamabilitate ale membranei continand co(poliesterul) cu fosfor	
Tema 2.4.2. Polimeri modificati chimic cu grupari active cu fosfor si/sau azot **Coordonator: Dr. Ing. Adriana Popa, CSI**			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective in cadrul fazei	Executanti
Faza 1 Trim I	1. Studii experimentale ale polimerilor modificati chimic cu grupari active, prin reactii "one-pot"	1.1. Obtinerea de polimeri reactivi cu grupari active aminofosfonice plecand de la polimeri functionalizati cu grupari aminice. 1.2. Stabilirea conditiilor optime de reactie: raport molar reactanti, temperatura, solventi. 1.3 Caracterizarea reactantilor polimerici prin: EDX, IR,SEM.	*Colectiv:* dr. S. Iliescu dr. L. Macarie dr. A. Visa dr. B. Maranescu
Faza 2,	2. Aplicatii ale polimerilor	2.1. Testarea materialelor polimerice cu grupari reactive	

Trim.II	modificati chimic cu grupari de tip fosfonice sintetizati prin reactii "one-pot"	(amino)fosfonice ca agenti antimicrobieni fata de diferite culturi bacterine. 2.2. Influenta naturii suportului polimer fata de efectul antimicrobian. 2.3. Comparatie intre efectul retinerii culturilor gram pozitive si gram negative pe suporturile polimerice.	*Colaboratori externi:* -UPT Timisoara - USAMV Timisoara - Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni" Iasi - Institutul de Chimie Fizica „I. Murgulescu" Bucuresti - Prof. Konstantinos Demadis Department of Chem., Univ. of Crete Heraklion, Greece -Prof. Zhang Zhengpu, Institute of Polym. Chem., Nankai Univ., R.P. China - Dr. M. D. Somoano, Instituto National del Carbon - CSIC, Oviedo, Spania
Faza 3, Trim.III	3. Studii experimentale ale polimerilor modificati chimic cu grupari active, prin reactii "one-pot"	3.1. Modificarea chimica a poli(stirenului-co-divinilbenzen) cu 3-oxi-benzaldehida 3.2. Obtinerea de polimeri reactivi cu grupari aminofosfonice plecand de la polimeri modificati chimic cu 3-oxi-benzaldehida. 3.3. Caracterizarea produselor de sinteza prin: IR, EDX, dozare de P.	
Faza 4, Trim.IV	4. Aplicatii ale polimerilor modificati chimic cu grupari de tip (amino)fosfonic, sintetizati prin reactii "one-pot"	4.1. Indepartarea compusilor fenolici din solutii apoase folosind sorbanti modificati chimic cu grupari reactive aminofosfonice. 4.2. Studii experimentale si teoretice in vederea determinarii conditiilor optime de indepartare a compusilor fenolici (pH, temperatura, mod de lucru).	
Tema 2.4.3. Polimeri si copolimeri acrilici obtinuti prin polimerizare fotoinitiata **Coordonator: Dr. Ing. Lavinia Macarie, CSII**			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim.I	1. Obtinerea de copolimeri cu grupari fosfonice in catena laterala	1.1. Proiectarea de sisteme fotopolimerizabile pentru obtinerea de copolimeri cu fosfor in catena laterala 1.2. Studii privind influenta naturii si continutului de comonomeri	*Colectiv:* Dr. Macarie L. Dr. Iliescu S. Dr. Popa A. *Colaboratori interni*: - Dr. Ilia Gh. - Dr. N. Plesu *Colaboratori externi*: - UPT Timisoara
Faza 2, Trim.II	2. Obtinerea de sisteme fotopolimerizabile vinilice, epoxiacrilice sau epoxiuretanice cu co-monomeri derivati ai acidului vinilfosfonic, vinilalcoxisilani, vinilimidazoli	2.1. Utilizarea de monomeri/oligomeri, fotoinitiatori/sisteme de fotoinitiere si a co-monomerilor reactivi derivati ai acidului vinilfosfonic, vinilalcoxisilani, vinilimidazoli, pentru a obtine un sistem fotoreticulabil. 2.2. Studii privind influenta naturii si continutului de co-monomer asupra formularilor fotoreticulabile pentru a obtine pelicule 2.3. Studiul polimerizarii termice si fotoinitiate asupra formularilor de comonomeri	

Faza 3, Trim.III	3. Studii experimentale privind influenta raportului dintre co-monomeri asupra proprietatilor finale ale copolimerilor.	3.1. Determinarea experimentala a conditiilor de polimerizare fotoinitiata. 3.2. Utilizarea spectroscopiei FTIR si a analizei termice pentru monitorizarea polimerizarii /copolimerizarii 3.3. Studii de copolimerizare prin actiunea microundelor si a ultrasunetelor	- UVT Timisoara -Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni" Iasi - Cape Peninsula University of Technology, Cape Town, Africa de Sud - Universitatea de Studii Tehnologice si Economice Budapesta, Ungaria
Faza 4, Trim.IV	4. Analiza si caracterizarea materialelor peliculogene obtinute, prin metode fizico-mecanice, termice (DSC, TGA) si evaluarea proprietatilor ionice/conductoare si ignifugante (LOI).	4.1. Determinarea proprietatilor mecanice, chimice si optice ale peliculelor copolimerice obtinute. 4.2. Determinarea proprietatilor ionice/ conductoare si ignifugante ale peliculelor 4.3. Utilizarea microscopiei electronice in studiul particularitatilor peliculelor obtinute.	

Tema 2.4.4. Retele metal organice fosfonice si/sau carboxilice **Coordonator: Dr. Aurelia Visa, CSIII**			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim. I	1. Modelarea moleculara a retelelor metal organice	1.1. Studii de literatura privind retele metal organice fosfonice si carboxilice 1.2. Generarea de structuri 3D pentru compusii selectati 1.3. Optimizarea retelelor metal organice cu metode semiempirice	*Colectiv:* Dr. A. Visa Dr. B. Maranescu *Colaboratori externi:* - INEMC Timisoara, - Universitatea din Leipzig, Institutul de Chimie Analitica, Germania, Prof J. Matysik -Universitatea din Bath, Anglia, Prof.Dr. D. Pantos - Universitatea Ca`Foscari, Venetia, Italia, Prof. Dr. P. Tundo - Universitatea Marie Curie-Skłodowskiej,
Faza 2, Trim. II	2. Modelarea moleculara a retelelor metal organice	2.1. Extragerea informatiilor structurale si termodinamice 2.2. Extinderea metodologiei pentru determinari catalitice 2.3. Compararea datelor experimentale de raze X cu cele calculate cu metode semiempirice	
Faza 3, Trim. III	3. Sinteze de retele metal organice fosfonice si/sau carboxilice	3.1. Sinteze de retele metal organice fosfonice si/sau carboxilice ce prezinta activitate catalitica 3.2. Influenta temperaturii, a modului de sinteza, stoichiometriei, sarurilor metalice si a acizilor fosfonici si/sau carboxilici la formarea retelelor metal organice cu metale tranzitionale (III) si (IV)- Ce si La si Zr. 3.3. Caracterizarea compusilor sintetizati prin TG, FT-IR si difractie de raze X	

Faza4 Trim. IV	4. Teste catalitice preliminare pentru retelele metal organice sintetizate	4.1. Identificarea factorilor ce influenteaza procesele catalitice 4.2. Optimizarea factorilor si stabilirea unui protocol de lucru 4.3. Studiul reutilizarii catalizatorului	Polonia, Prof. Dr. O. Demchuk

Tema 2.4.5. Polimeri de coordinatie continand grupari fosfonice si metale bivalente
Coordonator: Dr. Bianca Maranescu, CSIII

Faza	Obiectivul fazei	Obiective in cadrul fazei	Executanti
Faza1 Trim. I Faza 2 Trim. II	1. Sinteza si caracterizarea de noi polimeri de coordinatie pornind de la acizi difosfonici si/sau fosfonici si saruri ale metalelor divalente utilizand tehnici de sinteza hidrotermala	1.1. Optimizarea conditiilor de sinteza prin varierea pH-ului, temperaturii, raportului intre reactanti; 1.2. Sinteza de noi serii de compusi variind acidul fosfonic in reactia cu acelasi ion metalic (Co, Zn, Ni); 1.3. Sinteza de noi serii de compusi variind ionul metalic in reactia cu acelasi acid fosfonic; 1.4. Punerea in evidenta a atribuirilor structurale prin tehnici si metode de analiza (analiza elementara, analiza termo-gravimetrica, spectroscopie de raze X, spectroscopie IR) pentru compusii sintetizati; 1.5. Efectuarea analize GPC necesare caracterizarii polimerilor noi sintetizati in cadrul ICT.	*Colectiv:* Dr. Bianca Maranescu Dr. Aurelia Visa *Colaboratori externi:* - Universitatea Politehnica Timisoara, Dr. Valentin Maranescu -University of Crete Heraklion, Department of Chemistry, Greece Prof. Dr. Konstantinos Demadis
Faza 3 Trim. III	2.Analiza datelor structurale si a proprietatilor electronice cu ajutorul metodelor cuanto-chimice	2.1. Generarea de structuri cristaline; 2.2. Optimizarea structurilor generate cu metode cuanto-chimice; 2.3. Estimarea proprietatilor electronice; 2.4. Efectuarea analize GPC necesare caracterizarii polimerilor noi sintetizati in cadrul ICT.	
Faza 4 Trim. IV	3.Confirmarea proprietatilor electrice estimate teoretic, prin determinarea experimetala a conductivitatii polimerilor de coordinatie	3.1. Identificarea experimentala a tipului de conductie; 3.2. Determinarea energiei de activare utilizand caracteristica Arrhenius; 3.3. Determinarea dependetei de temperatura si umiditate a conductivitatii; 3.4. Efectuarea analize GPC necesare caracterizarii polimerilor noi sintetizati in cadrul ICT.	

INSTITUTUL de CHIMIE TIMIŞOARA al ACADEMIEI ROMÂNE
Blvd. Mihai Viteazul, nr. 24, 300223 - Timişoara
Tel: +40-256-491818; Fax: +40-256-491824

Director,

Dr. Otilia Costişor

Sef Sectie Anorganica: Dr. Cecilia Savii

Programul de cercetare nr. 3.

COMPUŞI ANORGANICI ŞI HIBRIZI CU RELEVANȚĂ ÎN ŞTIINȚA MATERIALELOR NANOSTRUCTURATE. PRECURSORI PENTRU MATERIALE AVANSATE.

Coordonator : Dr. Cecilia Savii

Proiectul nr. 3.1. Combinații complexe homo- şi heteropolinucleare ale unor elemente 3d, precursori pentru:
(1) materiale avansate;
(2) sisteme supramoleculare cu implicații în: sistemele biologice.
Coordonator: Dr. Otilia Costişor, CS I

Tema 3.1.1. Combinatii complexe ale unor elemente 3d precursori pentru arhitecturi supramoleculare cu proprietati multifunctionale (luminiscenta, mezomorfism, fotocromism) **Coordonator: Dr. Cseh Liliana, CS III**			
Faza 1, Trim.I	1.1. Obținerea unui nou ligand bicompartimental, 2,6-bis(2-hidroxibenziliden)ciclohexanona (HBC) 1.2. Obtinerea si caraterizarea intermediarilor si ligandului: esterul 4-[(2-hidroxi-benzilidene)-amino]-fenilic al acidului 4-deciloxi-2-pent-4-eniloxi-benzoic,(HBAP), baza Schiff cu proprietati potential mesogene	1.1.1. Sinteza 2,6-bis(2-hidroxibenziliden)ciclohexanona (HBC). 1.1.2. Caracterizarea HBC prin TLC, FTIR, RMN. 1.1.3. Verificarea purității HBC şi rezolvarea structurii. 1.1.4. Optimizarea metodei de sinteza a HBC. 1.2.1. Obtinerea intermediarilor de sinteza si a HBAP. 1.2.2. Caracterizarea lor prin NMR, EA, UV-Vis. 1.2.2. Stabilirea conditiilor optime de reactie in vederea cresterii randamentului de obtinere al HBAP.	*Colectiv:* - Dr. Pana Ana Maria - Drd. Crețu Carmen - Drd. Păuşescu Iulia *Colaboratori externi*: - Univ. Politehnica Timisoara -INCDEMC-Timisoara -Univ. din Sheffield, UK -Univ. Bucuresti -Univ. Aristotel, Salonik, Grecia - Institutul de Fizica Cluj-Napoca -Univ. Koln, Germania -Univ. Tehnica Viena, Austria -Univ. din Hull, Anglia - Univ. Cosenza, Italia
Faza 2, Trim.II	2.1. Studiul proprietatilor fotochromice ale 2,6-bis(2-hidroxibenziliden)ciclohexanonei (HBC) 2.2. Studiul proprietatilor mesogene ale ligandului esterul 4-[(2-hidroxi-benzilidene)-amino]-fenilic al acidului 4-deciloxi-2-pent-4-eniloxi-benzoic,(HBAP)	2.2.1. Studiul comportamentului HBC în mediu acid, bazic şi neutru cu ajutorul spectroscopiei UV-Vis 2.2.2. Stabilirea structurii speciilor stabile pe baza NMR si UV-Vis. 2.2.1. Microscopie optica cu polarizare (POM), 2.2.2. Analiza calorimetrica diferentiala (DSC)	

Faza 3, Trim.III	3.1. Studiul proprietăților optice ale 2,6-bis(2-hidroxibenziliden)ciclohexanonei (HBC) 3.2. Obtinerea combinatiei complexe a Cu (II) cu ligandul esterul 4-[(2-hidroxi-benzilidene)-amino]-fenilic al acidului 4-deciloxi-2-pent-4-eniloxi-benzoic,(HBAP)	3.1.1. Studiul in solutie si solid a proprietatilor luminescente ale HBC 3.2.1. Sinteza combinatiei complexe 3.2.2. Purificarea si caracterizarea combinatiei complexe prin: AAS, EA, UV-Vis, FT-IR, RMN	
Faza 4, Trim.IV	4.1. Calcule teoretice privind capacitatea HBC de a funcționa ca ligand 4.2. Studiul proprietatilor mesogene ale combinatiei complexe a Cu(II) cu ligandul: esterul 4-[(2-hidroxi-benzilidene)-amino]-fenilic al acidului 4-deciloxi-2-pent-4-eniloxi-benzoic,(HBAP).	4.1.1. Calculele de optimizare a moleculei si analiza populationala 4.1.2. Calculul unor descriptori de reactivitate chimica: potentialul chimic, electrofilicitate, indici Fukui 4.2.1. Microscopie optica cu polarizare (POM), 4.2.2. Analiza calorimetrica diferentiala (DSC)	

Tema 3.1.2. Combinatii complexe polinucleare precursori pentru materiale avansate **Coordonator: Dr. Ramona Tudose, CS II**			
Faza 1, Trim.I	1. Obținerea ligandului de tip baza Mannich N,N'-bis-(salicilamido-N-metilen)-piperazina (SAP).	1.1. Studiul obtinerii bazei Mannich SAP 1.2. Sinteza si purificarea ligandului SAP 1.3. Caracterizarea primara prin TLC si RMN 1.4. Optimizarea metodei de sinteza	*Colectiv:* - Chim. Aparaschivei Diana - Ing. Mosoarca Elena – concediu de maternitate - Ing. Costinas Ioana – concediu de maternitate - Ing. Buta Ildiko – concediu de maternitate
Faza 2, Trim.II	2.1. Caracterizarea ligandului de tip baza Mannich SAP prin metode fizico-chimice 2.2. Studiul comportarii termice a ligandului	2.1 Caracterizarea SAP prin analiza elementala, ^{13}C, ^{1}H-RMN, UV-Vis si IR. 2.2.1 Analiza termica in aer si azot 2.2.2. Interpretarea rezultatelor etapelor de descompunere termica	

Faza 3, Trim.III	3.1. Obtinerea de combinatii complexe cu elemente 3d continand ca ligand SAP. 3.2.Caracterizarea noilor combinatii complexe prin metode fizico-chimice.	3.1. Sinteza de combinatii complexe continand SAP ca ligand (metoda clasica sau solvotermala). 3.2. Caracterizarea combinațiilor complexe obținute prin: analiza elementala, conductibilitate electrica molara, spectroscopie de absorbție atomică, IR, UV-VIS. 3.3 Obținerea de monocristale adecvate difracției de raze X.	*Colaboratori externi*: - Univ. Politehnica Timisoara - Institutul de Fizica Cluj-Napoca -Univ. Szeged, Ungaria -Univ. Koln, Germania -Univ. Tehnica Viena, Austria
Faza 4, Trim.IV	4.1. Studiul activitatii biologice a bazei Mannich si a combinatiilor complexe care o contin	4.1. Testarea culturilor microbiene in vederea stabilirii activitatilor potential biologice 4.2. Aplicarea metodei difuzimetrice de testare a activitatii bilogice.	

Proiectul nr. 3.2. Sisteme multicomponente cu proprietăți optice, magnetice şi farmaceutice speciale (oxizi şi săruri obținute prin tehnicile: coprecipitare, ceramică, sol - gel, sonosinteză si utilizând precursori – săruri şi combinatii complexe.
Coordonator: Dr. ing Cecilia Savii, CS I

Proiect nr. 3.2. Sisteme multicomponenete cu proprietati optice si magnetice speciale, obtinute prin tehnicile ceramica, sol-gel, sonosinteza si utilizand precursori combinatii complexe. **Coordonator: Dr.ing. Cecilia Savii, CS I**			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati în cadrul fazei	Executanți
Faza 1, Trim.I	*Obiectiv* 1. Matrici de silice hibride mezoporoase obtinute in sistemul SiO2-PVA	1.1. Sinteza matricilor hibride SiO2-PVA, utilizand polimeri cu diferite mase moleculare; 1.2. Testarea limitelor de miscibilitate PVA-SiO2 ; 1.3. Testarea unor metode de eliminare completa a partii organice (metode termice si chimice 1.4 Caracterizarea morfologica si structurala a materialelor obtinute	*Colectiv* Dr. Putz Ana-Maria, CS III Ing. Catalin Ianasi, CS Chim. Piciorus Elena Chim. Crisan Roxana *Colaboratori interni*: - Universitatile "Politehnica"si "de Vest" Timisoara; - Institutul National C&D pentru Electrochimie si Materie Condensata,Timis
Faza 2, Trim.II	*Obiectiv* 2. Particule sferice mezoporoase de silice, ;	*2.1.* Sinteze sol-gel in prezenta unor agenti de directionare polimerici(ionici si neionici) si Lichide ionice 2.2. Sinteza sol-gel in amestecuri de cosolventi;Studiul interactiunilor precursor alcoxidic-solvent si influenta solventului atat asupra formei particulelor cat si asupra	

		distributiei dimensionale si ordinii porilor; 2.3. Caracterizarea fizico-chimica a materialelor obtinute;	*Colaboratori externi*: -Inst. Chim. Anorg. Rez, Ac.Stiințe Republica Cehă;UAChR.Cz -Inst. Fizica Starii Solide si Optica, Budapesta, Acad. Ungara de St.KFKI
Faza 3, Trim.III	Obiectiv 3. Nanocompozite magnetice in sistemul Fe2O3-SiO2-PVA si Fe2O3-SiO2	3.1.Sinteza nanocompozitelor magnetice utilizand matrici sintetizate in faza I, cu continut variabil de Fe2O3, in intervalul 10-35% Fe2O3 3.2. Caracterizarea structurala, magnetica si morfologica a nanocompozitelor obtinute;	
Faza 4, Trim.IV	Obiectiv 4. Particule sferice de oxizi spinelici (Fe3O4) cu proprietati superparamagnetice	4.1. Obtinerea particulelor micrometrice si nanometrice de magnetita prin metoda coprecipitarii din amestecuri stoechiometrice Fe^{2+} :Fe^{3+} , variind natura precursorului, utilizarea efectului ultrasunetelor si a tratamentului hidrotermal; 4.2. Caracterizarea morfologica structurala si a proprietatilor magnetice si studiu comparativ;	

Proiectul nr. 3.3. Proiectarea la nivel molecular si sinteza de compusi cu activitate catalitica dirijata pentru reactii de transformare a substantelor obtinute din surse regenerabile in intermediari organici sau in surse de energie si pentru reactii de distrugere a unor poluanti
Coordonator*:* Dr. ing. Viorel Sasca, C.S.II

Tema 3.3.1. Proiectare la nivel molecular si sinteze de compusi solizi cu activitate catalitica dirijata pentru reactiile de transformare a substantelor obtinute din surse regenerabile si pentru reactii de distrugere a unor poluanti **Responsabil: Dr.ing. Sasca Viorel, CS I**			
Faza 1, Trim.I	I. Sinteze de heteropolicompusi ai acidului tungstofosforic cu Cs si Ag pentru obtinerea unor suprafete specifice mari, asa numitii catalizatori „self-supported”.	I.1. Sinteze de heteropolicompusi ai acidului tungstofosforic cu Cs si Ag. I.2. Determinarea compoziției heteropolicompusilor acidului tungstofosforic cu Cs si Ag prin analiză termogravimetrică, analiză UV-Vis, spectroscopie de absorbție atomică în flacară I.3. Caracterizarea structurală a heteropolicompusilor acidului tungstofosforic cu Cs si Ag prin spectroscopie IR, spectroscopie UV-Vis-DRS, analiza difractometrica (ultimele doua prin colaborare cu Institutul National de Cercetare Dezvoltare pentru Electrochimie si Materie Condensata–INCEMC-Timisoara). Analize XPS si LEIS prin colaborare cu Universitatea din Szeged si Grupul de Cercetare al Cineticii Reactiilor si al Chimiei Suprafetelor al Academiei Maghiare de Stiinte-Prof. Andras Erdőhelyi. I.4. Studiul stabilitatii termice al heteropolicompusilor acidului	*Colectiv*: Dr.ing A. Popa, CS II Drd. chim. Orsina Verdeş, CS. *Colaboratori interni:* Institutul National de Cercetare Dezvoltare pentru Electrochimie si

		tungstofosforic cu Cs si Ag si al reactiilor in faza solida intre componentii existenti in heteropolicompusii sintetizati	Materie Condensata– INCEMC-Timisoara Universitatea "Politehnica" din Timisoara, Universitatea de Vest – din Timisoara <u>*Colaboratori externi*</u>: Universitatea din Szeged si Grupul de Cercetare al Cineticii Reactiilor si al Chimiei Suprafetelor al Academiei Maghiare de Stiinte
Faza 2, Trim.II	II. Caracterizarea fizico-chimică a heteropolicompusilor acidului tungstofosforic cu Ag preparați prin: analiza termogravimetrică, spectroscopie IR, UV-VIS absorbție atomică in flacara, analiză difractometrică.	II. 1. Testarea activității catalitice □n reacția de conversie a etanolului prin metoda prin metoda in flux continuu reactant și selectarea celor mai performanti catalizatori dintre heteropolicompusii acidului tungstofosforic cu Cs si Ag. II.2. Teste de activitate catalitica de lunga durata a celor mai performanti catalizatori □n reacția de conversie a etanolului prin metoda in flux continuu pentru studiul dezactivarii. II.3. Studii de adsorbție/desorbție programată termic-TPD(prin TG-DTA) a etanolului cuplata cu spectrometria de masa. Studii de adsorbtie /desorbtie prin FTIR in reflexie difuza II.4. Testarea activității catalitice □n reacția de conversie a dioxidului de carbon cu metanol prin metoda in prin metoda in flux continuu reactant și selectarea celor mai performanti catalizatori	
Faza 3, Trim.III.	III. Studiul stabilitatii termice al heteropolicompusilor acidului tungstofosforic cu Cs si Ag si al reactiilor in faza solida intre componentii existenti in heteropolicompusii sintetizati.	III.1. Studii de adsorbție/desorbție programată termic-TPD(cuplata cu spectrometria de masa) a etanolului pr catalizatorii de Cs si Ag pe catalizatori. III.2. Studii de adsorbție/desorbție programată termic-TPD(cuplata cu spectrometria de masa) a dioxidului de carbon si metanolului pe catalizatori.	
Faza 4, Trim.IV	IV. Testari ale activitatii catalitice in reactiile de conversie ale etanolului la etena și a dioxidului de carbon cu metanol la dimetil carbonat. V. Studiul mecanismului reacțiilor catalitice ale conversiei etanolului și dioxidului de carbon cu metanol prin adsorbția/desorbția programată termic cuplata cu spectrometria de masa. VI. Prelucrarea si interpretarea datelor experimentale, redactarea de articole, comunicari, rapoarte.	IV.1. Testarea activității catalitice a celor mai performanti catalizatori □n reacția de conversie a metanului si dioxidului de carbon prin metoda in flux continuu. IV.2. Studierea procesului de dezactivare al catalizatorilor in reactia de conversie a etanolului IV.3. Prelucrarea datelor experimentale in vederea analizarii lor (calcularea conversiei, selectivitatii, parametrilor cinetici ai reactiilor principale). IV.4. Stabilirea conținutului şi titlurilor comunicărilor şi articolelor, respectiv a manifestărilor şi publicațiilor ştiințifice la care vor fi prezentate rezultatele cercetărilor □n 2014; redactarea comunicărilor şi articolelor si a raportului de activitate.	

Tema 3.3.2. Catalizatori suportati pentru reactia de conversie a alcoolilor alifatici inferiori (intensificarea proceselor chimice de conversie prin marirea suprafetei specifice a catalizatorilor) **Responsabil: Dr. ing. Alexandru Popa, CS II**			
Faza 1, Trim.I	I. Prepararea unor noi heteropoliacizi (HPA) şi heteropolioxometalati de tipul $Me_xH_{3-x}[PMo_{12}O_{40}]$ si $Me_xH_{3-x}[P\ W_{12}O_{40}]$ unde Me = Ni, Co, Cs şi Ag, iar x = 0.25 - 3, şi depunerea lor in grade diferite de acoperire pe site moleculare obtinute prin utilizarea diferitilor surfactanti şi pe alte suporturi mezoporoase in scopul obtinerii unor selectivităţi ridicate in compuşi de oxidare parţială la reacţia de conversie a etanolului;.	I.1 Sinteza unor site moleculare prin metoda sol-gel cu utilizarea diferitilor surfactanti. I.2 Prepararea heteropolioxometalati depusi pe site moleculare la diferite grade de acoperire a suprafetei suportului. Optimizarea compoziţiei suportului şi a gradului de acoperire cu substanţă activă în scopul obtinerii unor selectivităţi ridicate in compuşi de oxidare parţială (ex: acetaldehida) la reacţia de conversie a etanolului; I.3 Analiza fizico-chimica a compusilor preparati pentru determinarea continutului de apa, aciditatii Bronsted si continutului de Me prin: analiza termogravimetrica, termodesorbtie programata a amoniacului şi n-butilaminei, spectroscopie de absorbtie atomica in flacara.	*Colectiv*: Dr. ing. Viorel Sasca, CS I Dr.ing. Orsina Verdes *Colaboratori externi*: Universitatea din Belgrad
Faza 2, Trim.II	II. Caracterizarea fizico-chimică a HPAs depuşi pe suport prin: spectroscopie IR si Raman, analiza termica TG-DTA cuplat cu spectrometrie de masă şi DSC, masuratori de suprafata specifica şi porozitate prin metoda BET, difractie de raze X, microscopie electronica SEM-EDS;	II.1 Caracterizarea texturala a heteropolioxometalatilor preparaţi prin masuratori de suprafata specifica si porozitate prin metoda BET-BJH. II.2. Caracterizarea structurala a heteropolioxometalatilor depuşi pe site moleculare prin: spectroscopie IR si Raman, analiza termica cuplata cu MS, analiza difractometrica la unghiuri mici, microscopie electronica SEM-EDS.	
Faza 3, Trim.III	III. Evaluarea proprietatilor catalitice a HPAs depuşi pe suport in reactia de conversie a alcoolilor inferiori şi a oxizilor de carbon prin reacţii în flux continuu.	III.1 Stabilirea influentei metodei de preparare si a gradului de acoperire a HPA depusi pe suport asupra vitezelor de formare ale produsilor de reactie prin teste pe instalatia în pulsuri de reactanţi şi în flux continuu; III.2 Teste de activitate catalitica cu modificarea conditilor de lucru pentru determinarea mecanismelor de reactie	

Faza 4, Trim.IV	IV. Prelucrarea si interpretarea datelor experimentale, redactarea comunicarilor, articolelor si rapoartelor de activitate.	IV.1 Calcularea vitezelor de formare a produsilor de reactie importanti si a bilanturilor de materiale. IV.2 Formularea mecanismului de reactie si stabilirea relatiilor de corelare activitate catalitica-compozitie-structura-textura. IV.3. Stabilirea conținutului şi titlurilor comunicărilor şi articolelor, respectiv a manifestărilor şi publicațiilor științifice la care vor fi prezentate; redactarea comunicărilor şi articolelor si a raportului de activitate.	