



INSTITUTUL de CHIMIE TIMIȘOARA al ACADEMIEI ROMÂNE

B-dul. Mihai Viteazul, nr. 24,
300223 – Timișoara, România
Tel: +40-256-491818; Fax: +40-256-491824



Vizat

DIRECTOR

Dr. Otilia COSTIȘOR

PROGRAM DE CERCETARE PENTRU ANUL 2015

Activitatea de cercetare a Institutului de Chimie Timișoara al Academiei Române prevăzută pentru anul 2015 este reflectată în **4** Programe de cercetare.

Programul 1: Proiectarea moleculară asistată de calculator.

Programul 2: Contributii la chimia compusilor organici, element-organici si polimerici continand F, N, P, S. Sinteza, caracterizare, aplicatii.

Programul 3: Chimia si aplicatiile compusilor tetrapirolici din clasa porfirinelor.

Programul 4: Compuși anorganici și hibrizi cu relevanță în știința materialelor nanostructurate. Precursori pentru materiale avansate.



INSTITUTUL de CHIMIE TIMIȘOARA al ACADEMIEI ROMÂNE

B-dul. Mihai Viteazul, nr. 24,
300223 – Timișoara, România
Tel: +40-256-491818; Fax: +40-256-491824



Director,

Dr. Otilia Costișor

Sef de Secție: Dr. Liliana Păcureanu, C.S.II

Programul de cercetare nr.1

PROIECTAREA MOLECULARĂ ASISTATĂ DE CALCULATOR

Coordonator: Prof. Dr. Zeno Simon (membru corespondent al Academiei Române)
CP1-Director Onorific al Institutului de Chimie Timișoara

Proiectul nr.1.1: Studiul proprietăților biologice, toxicologice și tehnice ale compușilor organici prin chemometrie, metode cuanto-chimice, de modelare moleculară și tehnici QSAR/QSPR/QSTR.

Responsabil: Dr.ing. Simona Funar-Timofei, CS I

Tema 1.1.1. Studiul proprietăților toxicologice și tehnice ale compușilor organici prin chemometrie, metode cuanto-chimice, de modelare moleculară și tehnici QSPR/QSTR.

Coordonator: Dr. Ing. Simona Funar-Timofei, CSI

Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1. Studiul rezistenței la flacără a unor polimeri cu fosfor prin metode computaționale	1.1. Studiul structurii unor polimeri cu fosfor și biciclofosfați prin metode cuanto-chimice. 1.2. Calculul descriptorilor structurali ai polimerilor cu fosfor și biciclofosfați și alegerea parametrilor relevanți pentru proprietățile de ardere prin algoritm genetic.	<i>Colectiv:</i> - Dr. Ana Borota - Dr. Sorin Avram - Dr. Luminița Crișan - Dr. Alina Bora - Dr. Ludovic Kurunczi
Faza 2 Trim.II	2. Analiza comparativă a bazelor de date existente ale compușilor cu activitate agrochimică	2.1. Calculul distribuțiilor proprietăților hidrofobe ale compușilor agrochimici din bazele de date existente. 2.2. Studiul influenței coeficientului de partiție octanol/apă calculat prin diferite metode asupra indicelui de "pesticide-likeness". 2.3. Identificarea compușilor agrochimici cu funcționalitate multiplă utilizând indicele de "pesticide-likeness" și alte metode "ligand-based".	<i>Colaboratori externi:</i> - Universitatea de Medicină și Farmacie Victor Babeș Timișoara, Facultatea de Farmacie - Natural Science Laboratory, Toyo University, Tokyo, Japonia
Faza 3 Trim.III	3. Relații structură-proprietăți aplicate unor compuși triazolici cu activitate fungicidă	3.1. Studiul structurii derivaților 1,2,4-triazolici prin calcule de mecanică moleculară. 3.2. Calculul descriptorilor structurali ai derivaților 1,2,4-triazolici și alegerea parametrilor relevanți pentru activitatea fungicidă.	

Faza 4 Trim.IV	4. Studiul relațiilor structură-proprietăți aplicate prin metode specifice chiminformatice și de QSAR	4.1. Evaluarea cantitativă a activității fungicide prin aplicarea metodelor regresionale pe o serie de derivați 1,2,4-triazolici și evaluarea predictivității modelelor obținute pe baza mai multor criterii statistice. 4.2. Studiul relațiilor structură-proprietăți prin metode regresionale pe seria de polimeri cu fosfor și biciclofosfați și propunerea de modele predictive.	
-------------------	---	---	--

Tema 1.1.2. Studiul interacției ligand-receptor pentru o clasă de trifenilalchene active pe receptorul estrogenic alpha (ERα) Coordonator: Dr. Ramona Curpă, CSIII			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1. Studiarea mecanismului de interacție ligand-receptor ERα prin docare moleculară	1.1. Pregătirea structurilor de raze X selectate pentru docare moleculară. 1.2. Docarea liganzilor în situsul de legare al receptorului ERα. 1.3. Evaluarea modelelor pentru stabilirea conformației potrivite a receptorului.	Colectiv: - Dr. Liliana Halip - Dr. Ana Borota Colaboratori externi: - University of Texas MD Anderson Cancer Center, USA - University of Mexico School of Medicine, Albuquerque, USA
Faza 2 Trim.II	2. Estimarea afinității de legare a liganzilor la ERα prin metoda MM-GBSA (Molecular Mechanics/Generalized Born Surface Area)	2.1. Selectarea conformațiilor liganzilor care urmează a fi investigate. 2.2. Calcularea afinității de legare a liganzilor la diferite conformații ale receptorului. 2.3. Corelarea și analiza rezultatelor estimate cu cele experimentale.	

Faza 3 Trim.III	3. Generarea mutațiilor pentru studii de dinamică moleculară	3.1. Pregătirea receptorului ER α în cele două conformații. 3.2. Generarea mutațiilor pentru Asp351 la Tyr, Glu și Gly. 3.3. Optimizarea proteinelor mutante.	
Faza 4 Trim.IV	4. Studii de dinamică moleculară	4.1. Pregătirea structurilor proteice mutante pentru simulări. 4.2. Rularea simulărilor de dinamică moleculară pentru mutații ER α . 4.3. Analiza rezultatelor pentru identificarea rolului Asp351 în conformația agonistă și antagonistă.	

Proiectul nr.1.2: Aplicații ale metodelor de modelare moleculară la liganzi activi pe proteine membranare și protein-kinaze

Responsabil: Dr.ing. Liliana Pacureanu, CS II

Tema 1.2.1. Studiul relațiilor evolutive dintre receptorii cuplați cu proteine G (GPCR) caracterizați și orfani. Influența conservării și a similarității secvențiale.

Coordonator: Dr. Chim. Liliana Halip, CSIII

Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim 1	1. Alinierea secvențială a receptorilor GPCR.	1.1. Obținerea secvențelor receptorilor umani GPCR. 1.2. Alinierea automată a secvențelor proteice. 1.3. Rafinarea manuală a alinierii secvențiale.	Colectiv: Dr. Ramona Curpăn Dr. Ana Borota Dr. Alina Bora Colaboratori externi: Universitatea Mexico School of Medicine, Albuquerque, USA
Faza 2 Trim.II	2. Generarea alinierilor și fragmentelor de aliniere pentru clusterizarea secvențială.	2.1. Stabilirea domeniilor conservate; 2.2. Extragerea fragmentelor de aliniere conținând domeniul transmembranar. 2.3. Extragerea fragmentelor de aliniere conținând zonele conservate. 2.4. Extragerea fragmentelor de aliniere conținând zonele dis-similare;	

Faza 3 Trim.III	3. Clusterizarea secvențială	3.1. Calcularea matricilor de similaritate pentru fiecare aliniere și fragment de aliniere obținute anterior; 3.2. Calcularea matricilor de distanță pentru fiecare aliniere și fragment de aliniere obținute anterior; 3.3. Clusterizarea secvențelor GPCR pe baza similității și a conservării secvențiale	
Faza 4 Trim.IV	4. Analiza relațiilor de rudenie între secvențele GPCR.	4.1. Construirea arborilor filogenetici pentru familiile receptorilor GPCR pe baza alinierilor secvențiale; 4.2. Identificarea apartenenței receptorilor orfani la familiile GPCR deja existente .	

Tema 1.2.2. Profilul chimic al modulatorilor de kinaze.

Coordonator: Dr. Alina Bora, CSIII

Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim 1	1. Studiu de literatură pentru identificarea kinazelor cu relevanță farmacologică	1.1. Analiza literaturii de specialitate și a bazelor de date de compuși biologic activi 1.2. Colectarea informațiilor de activitate biologică relevante pentru kinaze 1.3. Prelucrarea datelor prin excluderea informațiilor redundante de tipul: compuși identici, activitate biologică inutilă, etc.	<i>Colectiv:</i> Dr. Sorin Avram Dr. Liliana Păcureanu Dr. Luminița Crișan Dr. Liliana Halip Dr. Ramona Curpăn
Faza 2 Trim 2	2. Structurarea informațiilor de activitate biologică față de kinaze	2.1. Stabilirea și aplicarea criteriilor de clasificare a informațiilor biologice 2.2. Evaluarea ponderii compușilor biologic activi față de kinaza aferentă 2.3. Stabilirea și aplicarea protocolului de standardizare a moleculelor biologic active	<i>Colaboratori externi:</i> Universitatea de Medicină și Farmacie Victor Babeș Timișoara, Facultatea de Farmacie University of Mexico School of Medicine, Albuquerque, USA Dr. S. D. T. L. O. D.

Faza 3 Trim 3	3. Analiza diversității chimice a datelor	3.1. Stabilirea criteriilor de selecție în vederea analizei diversității chimice a datelor 3.2. Calculul descriptorilor de tipul BMF, f_{MF} , etc, stabilirea chemotipurilor relevante pentru evaluarea complexității structurale a compușilor 3.3. Interpretarea datelor rezultate din calculul descriptorilor, chemotipurilor	
Faza 4 Trim 4	4. Pregătirea datelor necesare generării modelelor de farmacofor	4.1. Generare forme tautomere 4.2. Generarea descriptorilor de tip amprentă moleculară (<i>fingerprint</i>) 4.3 Generare modele preliminare farmacofor	

Tema 1.2.3. Studiu exhaustiv de literatura și prelucrarea datelor cu metode computaționale pentru estimarea penetrării barierei hematoencefalice

Coordonator: Dr. Luminița Crișan, CS

Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim 1	1. Elaborarea metodo-logiei standard de lucru pornind de la medicamentele cunoscute	1.1. Analiza diferitelor mecanisme pentru traversarea membranei hematoencefalice 1.2. Analiza literaturii de specialitate în vederea colectării informațiilor despre medicamentele cu logBB determinat experimental. 1.3. Analiza metodologiei de determinare experimentală a logBB 1.4. Identificarea și studierea structurilor de	<i>Colectiv:</i> - Dr. Liliana Păcureanu - Dr. Alina Bora - Dr. Sorin Avram - Prof. Dr. Ludovic Kurunczi

Faza 2 Trim 2	2. Selectarea seturilor standard de validare pentru metodele aplicate ulterior și generarea modelelor de farmacofori	2.1. Calcularea logBB și a proprietăților ADMETox (coeficientul de partiție octanol/apa, QPlogPo/w, coeficientul de partiție BB, QplogBB, etc) cu QikProp din Schrodinger 2.2. Construirea și validarea de modele QSAR pe aceste seturi standard 2.3. Elaborarea, analiza și validarea modelelor de farmacofori
Faza 3 Trim 3	3. Elaborarea modelelor bazate pe clasificare pe baza descriptorilor calculați și validarea acestora prin mai multe metode consacrate în domeniul chimiei computaționale	3.1. Alegerea descriptorilor relevanți 1D, 2D și 3D pentru construirea modelelor de discriminare. 3.2. Elaborarea modelelor de discriminare. 3.3. Validarea externă a modelelor construite prin aplicarea criteriilor Golbraikh-Tropsha. 3.4. Validarea randomizată a modelelor 3.5. Construite și alegerea modelelor predictive
Faza 4 Trim 4	4. Elaborarea unei baze de date	4.1. Selectarea informațiilor fizico-chimice, biologice și farmacologice 4.2. Filtrarea și normalizarea acestor informații pentru compușii selectați 4.3. Eliminarea moleculelor lipsite de interes aplicativ 4.4. Analiza și valorificarea rezultatelor obținute, prin participarea la conferințe și prin publicarea lor în reviste de specialitate

Tema 1.2.4. Studiul modulatorilor angiogenezei și limfangiogenezei prin metode ale chimiei computaționale Coordonator: Dr. Sorin Avram, CS			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim 1	1. Investigarea exhaustivă a literaturii de specialitate.	1.1. Studiul țintelor biologice implicate în angiogeneza țesutului canceros. 1.2. Alegerea unei ținte biologice relevante implicate în angiogeneză și structurarea datelor de activitate existente.	<i>Colectiv:</i> - Dr. Liliana Păcureanu - Dr. Alina Bora - Dr. Luminița Crișan - Dr. Ramona Curpăn - Dr. Liliana Halip - Prof. Dr. Ludovic Kurunczi. <i>Colaboratori externi:</i> - Universitatea de Medicină și Farmacie Victor Babeș Timișoara, Facultatea de Farmacie.
Faza 2 Trim 2	2. Pregătirea compușilor și a metodologiei pentru modelarea activității pe ținta biologică stabilită.	2.1. Standardizarea structurilor. 2.2. Generarea de descriptori moleculari 2.3. Selectarea algoritmilor modelare.	
Faza 3 Trim 3	3. Construirea de modele predictive pentru modulatori ai angiogenezei.	3.1. Explorarea de metode de predicție a unor modulatori ai inhibitorilor angiogenezei. 3.2. Evaluarea performanțelor modelelor obținute.	
Faza 4 Trim 4	4. Aplicarea modelelor de predicție pentru identificarea de noi compuși de interes.	4.1. Aplicarea modelelor și a altor metode de cheminformatică. 4.2. Interpretarea rezultatelor	

Tema 1.2.5. Real screening (HTS) versus virtual screening aplicatie la inhibitorii glicogen sintetaz kinazei - 3 (GSK-3)
Coordonator: Dr. Liliana Pacureanu, CS II

Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim 1	1. Elaborarea unui set de validare standard pentru GSK-3 bazat pe informatiile prezente in AID 463203 și AID 434954	1.1. Analiza diversitatii chimice a compusilor activi din assay-urile PubChem AID 463203 și AID 434954 cu ajutorul metodelor de clasificare nesupervizata. 1.2. Selectarea chemotipurilor reprezentative. 1.3. Identificarea compusilor inactivi cu similaritatea ce mai pronuntata fata de compusii activi selectati.	Colectiv: - Dr. Cristian Neanu - Dr. Luminita Crisan - Dr. Sorin Avram - Dr. Alina Bora
Faza 2 Trim 2	2. Aplicarea metodelor de screening virtual bazate pe ligand si pe structura la seturile de compusi din AID 463203 și AID 434954	2.1. Docarea compusilor activi si inactivi in toate structurile 3D ale GSK-3 depozitate in baza de date PDB. 2.2. Calculul similaritatilor tridimensionale ale compusilor activi si inactivi din AID 463203 și AID 434954 fata de toti liganzii co-cristalizati cu GSK-3 din PDB. 2.3. Elaborarea modelelor de farmacofor pentru compusii activi AID 463203 și AID 434954 urmat de screening.	
Faza 3 Trim 3	3. Aplicarea metodelor de screening virtual bazate pe ligand si pe structura la setul de validare standard construit.	2.1. Docarea compusilor activi si inactivi din setul standard in toate structurile 3D ale GSK-3 depozitate in baza de date PDB. 2.2. Calculul similaritatilor tridimensionale ale compusilor activi si inactivi din setul standard fata de toti liganzii co-cristalizati cu GSK-3 din PDB. 2.3. Elaborarea modelelor de farmacofor pentru compusii activi prezenti in setul standard.	
Faza 4 Trim 4	4. Evaluarea si compararea rezultatelor obtinute cu ajutorul celor doua metodologii propuse.	4.1. Aplicarea metodelor de evaluare a screening-ului virtual ROC-AUC, e-ROCE si AROCE rezultatelor obtinute cu metodele bazate pe structura, ligand si farmacofor. 4.2. Compararea rezultatelor obtinute.	



INSTITUTUL de CHIMIE TIMIȘOARA al ACADEMIEI ROMÂNE

B-dul. Mihai Viteazul, nr. 24,

300223 – Timișoara, România

Tel: +40-256-491818; Fax: +40-256-491824



Director,

Dr. Otilia Costișor

Programul de cercetare nr. 2.

CONTRIBUTII LA CHIMIA COMPUSILOR ORGANICI, ELEMENT-ORGANICI SI POLIMERICI CONTINAND F, N, P, S. SINTEZA, CARACTERIZARE, APLICATII

Coordonator : Dr. Aurelia Visa, C.S. II

Proiectul nr. 2.1: Metode “green” in sinteza unor compusi continand heteroelemente (P, F, N) si utilizarea acestora pentru obtinerea de materiale speciale

Responsabil: Dr. Gheorghe Ilia, CS I

Tema 2.1.1. 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	Cercetatori
Faza 1 Trim I, Trim II	1. Utilizarea acidului hipofosforos in obtinerea unor compusi cu fosfor folosind metode green	1.1. Studii preliminare privind sinteza unor alfa hidroxifosfiti sau polimeri pornind de la acidul hipofosforos.	Colectiv: -Dr. Mihaela Petric. -Dr. Cornelia Crasmareanu -Dr. Manuela Crisan -Dr. Vasile Simulescu -Dr. Lavinia Macarie Colaboratori externi: - Univ. de Vest Timisoara - Univ. Creta, Grecia - Univ Cape Peninsula, Africa de Sud - Universitatea Tehnica si Economica Budapesta
Faza 2 Trim II, Trim. III		2.1. Stabilirea conditiilor optime de reactie: raport molar reactanti, temperatura, solventi.	
Faza 3 Trim. III	2. Condensare intramoleculara si intermoleculara a compusilor cu fosfor	3.1. Studii preliminare privind utilizarea glioximelor in obtinerea unor compusi elemetorganici continan fosfor si azot prin metode neconventionale.	
Faza 4 Trim IV		4.1. Analiza seriilor de compusi ce contin fosfor prin spectrometrie de masa, IR, RX.	

Tema 2.1.2. Dezvoltarea si functionalizarea de noi precursori din clasa acizilor carboxilici pentru materiale hibride

Coordonator: Dr. chim. Manuela Crisan, CSIII

Faza	Obiective	Activitati	Cercetatori
Faza 1, Trim. I, II, III	1. Obtinerea de noi precursori	1.1 Sinteza si purificarea derivatilor carboxilici diferit substituiti. 1.2 Stabilirea conditiilor optime de reactie	Colectiv: Dr. Mihaela Petric Dr. Gheorghe Ilia Colaboratori externi: - Univ. de Vest Timisoara
Faza 2, Trim. I, II, III	2. Caracterizarea precursorilor sintetizati	2.1 Caracterizarea compusilor sintetizati prin FT-IR, RX, analiza termogravimetrica, DSC. 2.2. Caracterizarea structurala de noi forme solide (ex. forme	

		polimorfe) ale noilor precursori obtinuti. 2.3 Investigarea interactiunilor generate	- Institutul de Fizica Aplicata-Chisinau, Moldova
Faza 3, Trim. III, IV	3. Sinteza compusilor organici-anorganici pentru materiale hibride	3.1 Obtinerea compusilor organici-anorganici folosind precursorii sintetizati. 3.2 Stabilirea conditiilor optime de reactie. 3.3 Caracterizarea fizico-chimica a compusilor obtinuti.	
Faza 4, Trim. IV	4. Determinarea structurii moleculare si cristaline a compusilor sintetizati	4.1 Calcule cuanto-chimice a geometriilor moleculare. 4.2 Investigatii asupra impachetarii moleculare in structurile cristaline ale compusilor obtinuti.	

Tema 2.1.3. Obținerea materialelor compozite utilizand ca molecule de cuplare, acizi fosfonici (acid N,N-bis-(fosfometil)-glicina, acid nitrilo-trimetil-fosfonic, acid fenil-fosfonic, acid vinil-fosfonic, etc.)

Coordonator: Dr. Eleonora Crasmareanu, CS

Faza	Obiective	Activitati	Cercetatori
Faza 1 Trim I	1. Stabilirea conditiilor optime de sinteza ale materialelor compozite	1.1.Stabilirea conditiilor optime de sinteza ale materialelor compozite in functie de raportul molar, temperatura, viteza de agitare, solvent, pH, durata timpului de reactie.	Colectiv: - Dr. Gheorghe Ilia Colaboratori interni: - Univ. de Vest Timisoara - Univ.“Politehnica” Timisoara Colaboratori externi: - Faculty of Chemistry, Brno University of Technology - Institute of Chemical Research of Catalonia, Tarragona, Spain
Faza 2 Trim II	2. Sinteza materialelor compozite	2.1. Obținerea materialelor compozite sub forma de cristale in functie de solventul utilizat.	
Faza 3 Trim III	3. Caracterizarea materialelor compozite sintetizate	3.1. Utilizarea metodelor de analiza specifice acestor compusi, FT-IR, UV-Vis, TG, SEM, TEM, RX, RMN, pentru caracterizarea materialelor compozite sintetizate.	
Faza 4 Trim IV	4. Aplicatii ale materialelor compozite continand compusi cu P	4.1. Grefare pe suporturi anorganice a compusilor fosfonici 4.2. Largirea domeniilor de aplicabilitate a acestor materiale compozite.	

Proiectul nr 2.2: Compusi macromoleculari continand fosfor si/sau azot cu proprietati controlate si directionate: polimeri reactivi, sorbanti, electroliti, membrane, ignifuganti, catalizatori, agenti antimicrobieni si de protectie anticoroziva

Responsabil: Dr. ing Adriana Popa, CSI

Tema 2.2.1. 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. Sinteza biopolimerilor de tip chitosan modificati chimic cu grupari aminofosfonice. 1.2. Caracterizarea gruparilor pendante functionale din compusi sintetizati prin: determinarea continutului de fosfor; modelarea statistica a unitatii repetitive structurale a polimerului modificat chimic. 1.3. Caracterizarea produselor de sinteza prin: EDX, SEM, FTIR, analiza TG.	<i>Colectiv</i> - Dr. S. Iliescu - Dr. L. Macarie - Dr. A. Visa - Dr. B. Maranescu <i>Colaboratori interni:</i> -Dr. Simona Funar-Timofei
Faza 2, Trim.II	1. Aplicatii ale polimerilor modificati chimic cu grupari de tip amino(fosfonic), sintetizati prin reactii „one-pot”	2.1. Studiul experimental si teoretic al biopolimerilor de tip chitosan ca si agenti antimicrobieni. 2.2. Testarea biopolimeri de tip chitosan cu grupari reactive (amino)fosfonice ca agenti. antimicrobieni fata de diferite culturi bacterine Gram pozitive respectiv Gram negative.	-Dr. G. Ilia <i>Colaboratori externi:</i> - Universitatea Politehnica Timisoara - Universitatea de Vest Timisoara
Faza 3, Trim.III	1. Polimeri cu grupari cu fosfor si azot obtinuti prin modificare chimica cu ultrasunete	3.1. Modificarea chimica a biopolimerilor de tip chitosan cu saruri cuaternare de fosfoniu prin ultrasonare. 3.2. Caracterizarea produselor de sinteza prin: EDX, SEM, FTIR, analiza TG.	-Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni” Iasi - Institutul de Chimie Fizica

Faza 4, Trim.I V	1. Noi aplicatii ale polimerilor modificati chimic cu grupari pendante cu fosfor si azot obtinuti prin ultrasonare	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).	„I. Murgulescu” Bucuresti - Facultatea de Medicina Veterinara - Instituto Nacional del Carbon - CSIC, Oviedo, Spania - Institute of Polymer Chemistry, Nankai University
------------------------	--	---	---

Tema 2.2.2. 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.Polimeri cu fosfor solid electroliti (PSSE)	1. 1. Sinteza PSSE prin policondensarea in solutie (trietil amina) a ciclohexildiclorfosfonatului cu polietilen glicol (PEG 6000) si poli(tetrametilenglicol). 1. 2 .Caracterizarea PSSE prin IR, ¹ H-RMN, viscozitate inerenta, masa molară.	<i>Colectiv</i> - Dr. A. Popa - Dr. L. Macarie - Dr. N. Plesu - Dr. A. Visa - Dr. B. Maranescu <i>Colaboratori interni:</i> - Dr. G. Ilia <i>Colaboratori externi:</i> - Universitatea Politehnica Timisoara - Universitatea de Vest
Faza 2, Trim.II	1.Membrane polimerice pe baza de PSSE	2.1. Obtinerea membranelor bazate pe sarurile PSSE complexate cu concentratii diferite de triflat de litiu. 2.2. Studii de stabilitate termica si inflamabilitate pentru PSSE si membranele corespunzatoare.	
Faza 3, Trim.III	1. Membrane polimerice pe baza de PSSE	3.1. Determinarea conductivitatiei ionice a membranelor obtinute. 3.2. Studiul relatiei conductivitatiei ionice a membranei PSSE functie de temperatura.	

Faza 4, Trim.IV	1.Polimeri cu fosfor in catena obtinuti prin policondensare in faza solida, fara solvent si cu ultrasunete	4.1. Polifosfati obtinuti prin policondensarea fenildiclor fosfatului cu 4,4-difenol. 4.2. Caracterizarea polifosfatului prin IR, ¹ H-RMN, analiza termica, indice de inflamabilitate. 4.3. Comparatie intre policondensarea solid lichid si policondensarea in faza solida cu ultrasunete.	Timisoara -Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni” Iasi - Universitatea de Studii Tehnologice si Economice Budapesta Ungaria
--------------------	--	--	--

Tema 2.2.3. 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. Sinteze de copolimeri cu grupari fosfonice in catena laterala prin polimerizare fotoinitiata. 1.2. Studii privind influenta naturii si continutului de comonomeri.	<i>Colectiv:</i> Dr. Iliescu S. Dr. Popa A. Dr. N. Plesu Dr. M. Tara-Lunga Mihali <i>Colaboratori interni:</i> - Dr. Gh. Ilia <i>Colaboratori externi:</i> - Universitatea Politehnica Timisoara - Universitatea de Vest Timisoara -Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni” Iasi
Faza 2, Trim.II	1. Obtinerea de sisteme fotopolimerizabile vinilice, 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 fotoinitiate, termice, in microunde sau ultrasunete asupra formularilor de comonomeri.	
Faza 3, Trim.III	1. Studiul proprietatilor finale ale copolimerilor privind influenta naturii si raportului dintre co-monomeri	3.1. Utilizarea spectroscopiei FTIR si a analizei termice pentru monitorizarea polimerizarii /copolimerizarii . 3.2. Studii de copolimerizare prin actiunea microundelor si a ultrasunetelor. 3.3. Determinarea preliminara a proprietatilor ionice sau anticorozive.	

Faza 4, Trim.I V	1. 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.	- Cape Peninsula University of Technology, Cape Town, Africa de Sud - Universitatea de Studii Tehnologice si Economice Budapesta, Ungaria - Universitatea Tehnologica Brno
------------------------	---	---	--

Tema 2.2.4. Conductori organici intrinseci si formulari de compozite pe baza acestora cu posibilitati de utilizare ca senzori si electrozi modificati pentru electrocataliza si biochimie Coordonator: Dr. Ing. Nicoleta Plesu CS II			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim.I	1.Obtinerea de compozite pe baza de polianiline (PANI)	1.1. Prepararea unor compozite pe baza de PANI. Stabilirea conditiilor de sinteza pentru obtinerea compozitelor. 1.2. Prepararea unor filme si/sau membrane compozite pe baza de PANI. Stabilirea conditiilor de sinteza. 1.3. Prepararea unor membrane compozite pe baza de PANI prin reticulare la UV. Stabilirea conditiilor de sinteza.	Colectiv: - drd. Ing. Mihali M. - Dr. Macarie L. - Dr. Iliescu S. Colaboratori externi: -Univ. Politehnica Timisoara, -Univ. Vest Tim -INCDEMC Timisoara
Faza 2, Trim.II	2.Caracterizarea compozitelor si/sau membranelor preparate.	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).	
Faza 3, Trim.III	3.Caracterizarea membranelor preparate. Modelarea datelor experimentale	3.1. Modelarea datelor EIS. Determinarea rezistentei membranelor. 3.2 Studii privind influenta compozitiei membranei asupra proprietatilor electrice. 3.3. Studiul relatiei conductivitatii ionice a filmelor functie de temperatura.	

Faza 4, Trim.IV	4.Caracterizarea compozitelor si/sau membranelor preparate. Capacitatea de protectie coroziva.	4.1. Caracterizarea filmelor de PANI obtinute prin spectroscopie de impedanta (EIS). Testarea capacitatii de protectie coroziva. 4.2. Modelarea datelor EIS.	
--------------------	--	---	--

Proiectul nr 2.3: Rețele metal organice fosfonice si/sau carboxilice cu proprietati dirijate

Responsabil: Dr. chim. Aurelia Visa, CS II

Tema 2.3.1 Sinteza de rețele metal organice cu metale trivalente si proprietatile catalitice ale acestora			
Coordonator: Dr. Aurelia Visa, CSII			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim. I	1. Sinteze de rețele metal organice fosfonice si/sau carboxilice	1.1. Sinteze de rețele metal organice fosfonice si/sau carboxilice. 1.2. Studiul influentei factorilor fizico-chimici: temperatura, stoichiometria reactiei si a pH-ului la formarea rețelelor metal organice cu metale trivalente. 1.3. Caracterizarea compusilor sintetizati prin TG, FT-IR si difractie de raze X.	Colectiv: Dr. Bianca Maranescu Dr. Smaranda Iliescu Dr. Luminita Crisan Colaboratori externi: - INEMC Timisoara - Universitatea din Leipzig, Germania - Universitatea Ca`Foscari, Venetia, Italia - Universitatea Marie Curie-Skłodowskiej, Polonia - Univeritatea Nova Lisabona - Universitatea din Malaga, - Universitatea din Creta, Grecia
Faza 2, Trim. II	2. Modelarea moleculara a rețelelor metal organice	2.1. Generarea de structuri pentru compusii selectati cu ajutorul programului HyperChem. 2.2. Optimizarea rețelelor metal organice cu metode semiempirice. 2.3. Extragerea informatiilor structurale si compararea datelor experimentale de raze X cu cele calculate cu metode semiempirice. 2.4. Prezicerea proprietatilor catalitice din calcule quantochimice.	
Faza 3, Trim. III	3. Sinteze de rețele metal organice fosfonice si/sau carboxilice	3.1. Sinteze de rețele metal organice fosfonice si/sau carboxilice ce prezinta activitate catalitica. 3.2. Efectuarea de sinteze hidrotermale pe baie de apa/uilei, in autoclava si la ultrasunete.	

		3.3. Caracterizarea compusilor sintetizati prin TG, FT-IR si difractie de raze X	
Faza 4 Trim. IV	4. Teste catalitice pentru retelele metal organice sintetizate	4.1. Analiza corelatiei dintre activitatea catalitica, parametrii de sinteza si morfologia compusilor. 4.2 Identificarea factorilor ce influenteaza procesele catalitice. 4.3. Optimizarea factorilor si stabilirea unui protocol de lucru. 4.4 Studiul reutilizarii catalizatorului .	

Tema 2.3.2. 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	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.	<i>Colectiv:</i> Dr. Aurelia Visa Dr. Adriana Popa <i>Colaboratori externi:</i> - Universitatea Politehnica Timisoara -University of Crete Heraklion, Department of Chemistry, Greece - INEMC Timisoara
Faza 2 Trim. II		1.2. Sinteza de noi serii de compusi variind acidul fosfonic in reactia cu acelasi ion metalic. 1.3. Sinteza de noi serii de compusi variind ionul metalic (Cu, Ni, Pb, Cd, Co) in reactia cu acelasi acid fosfonic.	
Faza 3 Trim. III	2. Caracterizarea fizico-chimica a compusilor obtinuti	2.1. 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.	
Faza 4 Trim. IV	3. Determinarea proprietatilor electrice prin determinarea experimetala a conductivitatii polimerilor de coordinatie	3.1. Identificarea experimentală a tipului de conductive. 3.2. Determinarea energiei de activare utilizand caracteristica Arrhenius. 3.3. Determinarea dependetei de temperatura si umiditate a conductivitatii.	

Proiectul nr. 2.4: Compusi azo multifunctionali ca vectori de indepartare a poluantilor colorati cu aplicatii in protectia mediului

Responsabil: Dr. Ing. Simona Gabriela Muntean, CS III;

Tema 2.4.1. Compusi cu functiune azo si combinatii complexe ale azoliganzilor, cu afinitate pentru materiale neconventionale Coordonator: Dr. Ing. Maria Elena Radulescu-Grad, CS III			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim.I, II, III	1. Studii privind sinteza compusilor cu functiune azo si a colorantilor metal complecsi.	1.1. Sinteza si purificarea de azo compusi alternativi, netoxici. 1.2. Sinteza si purificarea de noi compusi cu functiune azo prin cuplare azot-fosfor, fosforilare. 1.3 Stabilirea conditiilor optime de sinteza ale colorantilor metal complecsi 1.4. Obtinerea de noi combinatii complexe ale azoliganzilor.	Colectiv Dr. Halip L. Dr. S.G.Muntean Colaboratori externi: - UMF Victor Babes, Timisoara -UPT, Facultatea de Chimie Industriala si Ingineria Mediului - Azur Timisoara - ICECHIM, Bucuresti - UPB, Facultatea de Chimie Aplicata si Stiinta Materialelor
Faza 2, Trim. III	2. Studiul proprietatilor de culoare a compusilor cu functiune azo	2.1. Studiul experimental de culoare al compusilor cu functiune azo. 2.2. Studiul teoretic de culoare al compusilor cu functiune azo. 2.3. Studiul spectrofotometric de culoare al colorantilor metal complecsi	
Faza 3, Trim. IV	3. Studiul agregarii compusilor cu functiune azo in solutie apoasa.	3.1. Studiul calitativ al agregarii compusilor cu functiune azo in solutie apoasa. Influenta concentratiei asupra agregarii. 3.2. Studiul teoretic al agregarii compusilor cu functiune azo in solutie apoasa.	
Faza 4, Trim.IV	4. Caracterizarea compusilor cu functiune azo si a colorantilor metal complecsi.	4.1. Utilizarea metodelor specifice de analiza, TLC, HPLC, spectroscopie IR, UV-Vis, MS, ¹³ CRMN, ³¹ PRMN pentru caracterizarea compusilor azo sintetizati. 4.2. Caracterizarea complecsilor azo liganzi prin UV-Vis, IR, AAs.	

Tema 2.4.2. Tehnici combinate pentru combaterea poluarii cu compusi azo si metale grele. Aplicatii ale unor biopolimeri in protectia mediului.

Coordonator: Dr. Ing. Simona Gabriela Muntean, CS III

Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim.I, II, III	1. Studiul experimental al adsorptiei compusilor cu functiune azo cu aplicatii in protectia mediului.	1.1. Studiul experimental al indepartarii din solutii apoase a colorantilor folosind sorbanti macromoleculari naturali, de sinteza si de semi-sinteza. 1.2. Studiul experimental al indepartarii din solutii apoase a colorantilor folosind sorbanti macromoleculari de sinteza. 1.3. Evaluarea capacitatii de reutilizare in sistem discontinuu si continuu a sorbantilor.	<i>Colectiv</i> - Ing. Buzatu N.C. - Drd. Todea A. <i>Colaboratori externi:</i> -UPT, Facultatea de Chimie Industrială si Ingineria Mediului - Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni” Iasi - INMCD Timisoara - Azur Timisoara - Universitatea Wageningen, Olanda - Universitatea din Debrecen
Faza 2, Trim. II, III	2. Elucidarea mecanismului de adsorbție a compusilor cu functiune azo	2.1. Studiul teoretic al adsorptiei compusilor cu functiune azo folosind sorbanti macromoleculari naturali si/sau de sinteza.	
Faza 3, Trim. II, III	3. Investigarea mecanismului de adsorbție a complexilor metalici.	3.1. Studiul teoretic al adsorptiei ionilor metalici. 3.2. Studiul teoretic al adsorptiei colorantilor metal complexi.	
Faza 4, Trim. I, II, III, IV	4. Studiul degradarii compusilor cu functiuni azo utilizand catalizatori de natura proteica	4.1. Selectarea compusilor azo 4.2. Stabilirea conditiilor optime de reactie: pH, temperatura, concentratie de substrat si co-substrat. 4.3. Caracterizarea produsilor de reactie prin metode spectroscopice TLC, HPLC, spectroscopie IR, UV-Vis si MS. 4.3. Imbunatatirea stabilitatii operationale ale catalizatorilor de natura proteica prin tehnici de imobilizare (adsorbție, legare covalenta, entrapare in matrici de sol-gel). 4.4. Caracterizarea morfologica a biocatalizatorilor (SEM, suprafata specifica). 4.5. Studiul stabilitatii si performantelor biocatalizatorilor in diferite conditii de temperatura, pH, reutilizare in mai multe cicluri de reactie.	



INSTITUTUL de CHIMIE TIMIȘOARA al ACADEMIEI ROMÂNE

B-dul. Mihai Viteazul, nr. 24,

300223 – Timișoara, România

Tel: +40-256-491818; Fax: +40-256-491824



Director,

Dr. Otilia Costișor

Program de cercetare nr. 3

CHIMIA SI APLICATIILE COMPUSILOR TETRAPIROLICI DIN CLASA PORFIRINELOR

Coordonator: Dr. ing. Eugenia Făgădar-Cosma, CSI

Proiectul nr: 3.1. Materiale avansate cu proprietăți speciale opto-electrice pe baza de porfirine și combinațiile lor complexe.

Aplicații biologice și tehnice.

Responsabil: Dr. ing. Făgădar-Cosma Eugenia, CS I

Tema 3.1.1. Cromofori de tip porfirinic simetric și nesimetric substituiți și combinațiile lor complexe. Obținere și caracterizare. Reacții de funcționalizare a porfirinelor. Studiul potențialelor aplicații tehnice și biologice.

Coordonator: Dr. Ing. Făgădar-Cosma Eugenia, CSI

Faza	Obiective	Activități	Cercetători
Faza 1 Trim I, II, III	1. Obținerea de noi porfirine simetric și asimetric mixt-substituite, aplicând variante ale metodelor multicomponente 2. Obținerea complexelor porfirinelor cu metale tranzitionale 3d.	1.1. Obținerea, separarea și purificarea de noi structuri asimetrice, mixt substituite la nucleul fenilic cu grupe amino, hidroxil, di-metoxi, fenoxi și diclorofosfinice. 1.2. Depunerea de straturi subțiri de porfirine/metaloporfirine pe diferite substraturi prin tehnici PLD și MAPLE sau LB (prin colaborare cu institutele platformei-Magurele). 1.3. Electropolimerizarea porfirinelor 2.1. Sinteza combinațiilor complexe cu Zn(II), Co(II), Fe (III) și Mn (III) cu liganzi de tipul porfirinelor simetrice și asimetrice A ₃ B și <i>trans</i> -A ₂ B ₂ .	<i>Colectiv:</i> - Dr. Ing. Anca Lascu - Ing. Creangă Ionela. - Chim. Palade Anca <i>Colaboratori externi:</i> - Universitatea "Politehnica" Timișoara, - Univ. de Vest Timișoara - Institutul National de Electrochimie și Materie Condensată - Institutul National C&D pentru Fizica Materialelor București-Magurele - Institutul National de Cercetare-Dezvoltare pentru Științe Biologice București - Universitatea de Medicină și Farmacie "Victor Babes" Timișoara
Faza 2 Trim II, III	3. Studiul structurii și proprietăților opto-electronice, morfologice și topografice ale derivatilor porfirinici obținuți și ale filmelor subțiri realizate	3.1. Caracterizarea prin spectroscopie UV-vis, fluorimetrie, FT-IR, RMN, MS, HPLC și TLC a compusilor porfirinici obținuți. 3.2. Analiza prin microscopie AFM, SEM, TEM a structurilor supramoleculare formate prin depunere din diverși solvenți.	

		3.3. Studiul influenței fazei staționare și a naturii/compoziției fazei mobile asupra separării derivaților porfirinici prin HPLC la scară analitică și preparativă.	<i>Colaborări internaționale:</i> - Faculty of Pharmacy, Collegium Medicum, Nicolaus Copernicus University, Bydgoszcz, Polonia -Kiev National University of Technologies & Design -Atos Research-Barcelona, Spania. - Institute of Macromolecular Compounds Russian Academy of Sciences, - Instituto Tecnológico de la Energía, Valencia, Spania. - Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Academy of Sciences, Kiev, Ukraine
Faza 3 Trim. III	4. Identificarea posibilităților de aplicare a porfirinelor/metaloporfirinelor ca ionofori în componența electrozilor ion-selectivi cu membrană polimerică sau ca senzori chimici și optici	4.1. Teste asupra porfirinelor bază și metaloporfirinelor sintetizate ca ionofori în componenta membranelor polimerice a senzorilor pentru cationi/anioni sau evaluarea capacității de acțiune ca senzori electrochimici sau optici pentru metale grele, medicamente sau substanțe organice toxice.	
Faza 4 Trim IV	5. Investigarea proprietăților electrochimice ale porfirinelor și metaloporfirinelor. Straturi subțiri cu aplicații în sensoristică și inhibarea coroziunii. 6. Teste de activitate biologică 7. Redactare lucrări-acțiuni de diseminare rezultate	5.1. Studiu de comportament electrochimic (studii de inhibare a coroziunii, prin metode electrochimice). 6.1. Teste de toxicologie și de activitate biologică (antimicotică/antibacteriană) 7. Minimum 3 lucrări ISI, lucrări în reviste cu sistem <i>peer-review</i> , participare Key-note speaker la Conferințe/video-conferințe. Brevetare.	

Tema 3.1.2. Materiale hibride obtinute prin incorporarea de porfirine si metaloporfirine in matrici anorganice si/sau polimerice. Complecsi coloidali cu nano-Ag/Au 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, coloidala si sol-gel	1.1. Imobilizarea porfirinelor divers functionalizate pe matrici anorganice si/sau polimerice. 1.2. Obținerea de complecsi coloidali porfirine-nanoAg/Au cu domeniu larg de absorbtie UV-vis (controlul dimensiunii nanoparticulelor).	<i>Colectiv:</i> -Ing. drd. Ionela Creangă -Chim. drd. Anca Palade -Dr. Ing Eugenia Fagadar-Cosma <i>Colaborări interne:</i> - Institutul National de Electrochimie și Materie Condensata - National Institute for Lasers, Plasma and Radiation Physics Lasers Department Bucharest-Magurele <i>Colaborări internaționale:</i> - Faculty of Pharmacy, Collegium Medicum, Nicolaus Copernicus University, Bydgoszcz, Polonia - Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Academy of Sciences, Kiev, Ukraine
	2. Identificarea factorilor de risc si analiza cailor alternative pentru obtinerea materialelor cu proprietati plasmonice si optice avansate.	2.1. Caracterizarea prin tehnici microscopice (SEM, TEM, AFM), analiza termica, UV-vis, FT-IR, BET si fluorescenta a materialelor hibride obtinute. 2.2. Studii privind topografia suprafetelor si capacitatea de detectie comparativ cu porfirinele corespunzatoare libere	
Faza 3 Trim III	3. Caracterizarea fizico-chimica a materialelor obtinute. Identificarea de noi aplicatii.	3.1. Testari preliminare ale proprietăților optice si biologice precum si ca materiale cu potential in detectia/captarea de metale grele. 3.2 Aplicatii in detectia de gaze si VOC.	
Faza 4 Trim IV	4. Redactare lucrari, brevetare	4.1. Minim 1 lucrare ISI; participare conferinte internationale si nationale.	



INSTITUTUL de CHIMIE TIMIȘOARA al ACADEMIEI ROMÂNE

B-dul. Mihai Viteazul, nr. 24,
300223 – Timișoara, România
Tel: +40-256-491818; Fax: +40-256-491824



Director,

Dr. Otilia Costișor

Programul de cercetare nr. 4

COMPUȘI ANORGANICI ȘI HIBRIZI CU RELEVANȚĂ ÎN ȘTIINȚA MATERIALELOR NANOSTRUCTURATE. PRECURSORI PENTRU MATERIALE AVANSATE.

Coordonator: Dr. Liliana Cseh, C.S. II

Proiect 4.1. Liganzi si combinatii complexe homo- și heteropolinucleare ale unor elemente 3d, precursori pentru:

(1) materiale avansate;

(2) sisteme supramoleculare cu implicatii în: sistemele biologice si stiinta materialelor .

Responsabil: Dr. Otilia Costișor, CS I

Tema 4.1.1. Liganzi si complecsi ai unor elemente 3d - precursori pentru arhitecturi supramoleculare cu proprietati multifunctionale (fotocromism, fluorescenta, mezomorfism)			
Coordonator: Dr. Cseh Liliana, CS II			
Faza 1, Trim	1.1. Obținerea ligand bicompartimental, 2,6-bis(2-hidroxibenziliden)ciclohexan oxima (HCO)	1.1.1. Sinteza 2,6-bis(2-hidroxibenziliden)ciclohexan oxima (HCO). 1.1.2. Caracterizarea HCO prin TLC, FTIR, RMN. 1.1.3. Verificarea purității HCO și stabilirea structurii.	<i>Colectiv:</i> - Drd. Crețu Carmen - Dr. Păușescu Iulia - Dr. Tudose Ramona - Ing. Costinaș Ioana - Dr. Corîci Livia
	1.2. Obținerea si caraterizarea ligandului: esterul 4-(deciloxi)-2-(pent-4-eniloxi) benzoat de 4-(4-(deciloxi)-2-hidroxi benzilidenamino)fenil (HDBAP), baza Schiff cu proprietati potential mesogene	1.2.1. Obținerea ligandului de tip baza 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.	<i>Colaboratori externi:</i> - Univ. Politehnica Timisoara - Univ. din Hull, Anglia - Univ. Cosenza, Italia - INCEMC Timisoara - Universitatea Nova din Lisabona Portugalia, Facultatea de Stiinta si Tehnologie - Institutul Petru Poni, Iasi
Faza 2, Trim II.I	2.1 Optimizarea metodei de sinteza a HCO.	2.1.1. Studiul influentei raportului molar si temperaturii asupra randamentului reactiei.	- Universitatea Nova din Lisabona Portugalia, Facultatea de Stiinta si Tehnologie
	2.2. Studiul comportamentului HCO în mediu acid, bazic și neutru.	2.2.1. Spectroscopie UV-Vis. 2.2.2. Cinetica reactiei.	- Institutul Petru Poni, Iasi
	2.3. Studiul proprietatilor mesogene ale ligandului esterul 4-(deciloxi)-2-(pent-4-eniloxi)benzoat de 4-(4-(deciloxi)-2-hidroxibenzilidenamino)fenil (HDBAP)	2.3.1. Microscopie optica cu polarizare (POM), 2.3.2. Analiza calorimetrica diferentiala (DSC)	- Universitatea din Sheffield, UK - Universitatea din Hangzhou, China

Faza 3, Trim.III	3.1. Studiul proprietăților optice ale HCO. 3.2. Obținerea combinației complexe a Cu (II) cu ligandul esterul 4-(deciloxi)-2-(pent-4-eniloxi)benzoat de 4-(4-(deciloxi)-2-hidroxibenzilidenamino)fenil (HDBAP)	3.1.1 Spectroscopie de fluorescență 3.2.1. Sinteza combinației complexe 3.2.2. Purificarea și caracterizarea combinației complexe prin: AAS, EA, UV-Vis, FT-IR, RMN	
Faza 4, Trim.IV	4.1. Calcule teoretice privind capacitatea HCO de a funcționa ca ligand. 4.2. Studiul proprietăților mesogene ale combinației complexe a Cu(II) cu ligandul: esterul 4-(deciloxi)-2-(pent-4-eniloxi)benzoat de 4-(4-(deciloxi)-2-hidroxibenzilidenamino)fenil (HDBAP)	4.1.1. Optimizarea geometrică a moleculei 4.1.2. Calculul densității de sarcină pe atomii potențial donori, a potențialului electrostatic, a energiei orbitalilor HOMO și LUMO. 4.2.1. Microscopie optică cu polarizare (POM), 4.2.2. Analiza calorimetrică diferențială (DSC)	

Tema.4.1.2. Proiectare și obținerea de liganzi de tip baze Schiff și combinații complexe ale unor elemente 3d cu relevanță în sisteme biologice și știința materialelor

Coordonator: Dr. Carmen Cretu, CS III

Faza 1, Trim.I	1.1 Optimizarea procedurii de obținere a Ligandului N,N'-bis[(2-hidroxibenziliden amino)-propil]-piperazina (HBPP) 1.2. Obținerea combinației complexe a Cu(II) continuând HBPP	1.1.1. Sinteza ligandului cu studiul variației parametrilor de reacție. 1.2.1. Obținerea și caracterizarea combinației complexe a Cu(II) 1.2.2. Rezolvarea structurii prin difracție de raze X .	<i>Colectiv:</i> - Dr. Tudose Ramona - Chim. Aparaschivei Diana - Dr. Cseh Liliana - Ing. Costinaș Ioana
-------------------	--	--	--

Faza 2, Trim II	2.1. Obținerea 2-hidroxi-5 carboxi – benzaldehida. 2.2 Obținerea bazei Schiff N,N'-bis[(2-hidroxi-5-carboxibenzilidenamino)-propil]-piperazina (CBPP)	2.1.1. Sinteza intermediarului 2.1.2 Caracterizarea intermediarului prin analiza elementală, spectroscopie RMN și IR 2.2.1 Stabilirea condițiilor optime de obținere a bazei Schiff 2.2.2. Caracterizarea bazei Schiff prin analiza elementală, spectroscopie RMN, IR și UV	<i>Colaboratori externi:</i> - Univ. Politehnica Timisoara - Univ. Tehnica Viena, Austria
Faza 3, Trim.III	3.1 Studiul activității biologice a combinației complexe a Cu(II) conținând ligandul N,N'-bis[(2-hidroxibenzilidenamino)-propil]-piperazina (HBPP) 3.2 Studiul activității biologice a bazei Schiff N,N'-bis[(2-hidroxi-5-carboxibenziliden amino)-propil]-piperazina (CBPP) 3.3. Studiul stabilității termice și fluorescența pentru compusii studiați	3.1.1 Studiu activităților de tip antimicrobian, antivirale și/sau citostatică 3.2.1 Studiu activităților de tip antimicrobian, antivirale și/sau citostatică 3.3.1. Analiza DTA 3.3.2. Proprietăți optice	- UMF Timisoara - Institutul de Biologie al Academiei Bulgare de Științe, Sofia - Institutul Petru Poni, Iasi - Universitatea din București, Fac. de Chimie - Universitatea Aristotle din Thessaloniki, Grecia
Faza 4, Trim.IV	4.1 Obținerea combinației complexe a Cu(II) conținând ligandul N,N'-bis[(2-hidroxi-5-carboxibenzilidenamino)-propil]-piperazina (CBPP)	4.1.1 Sinteza combinației complexe 4.1.2 Caracterizarea prin analiza elementală, conductivitate electrică molară, spectroscopie IR și UV-Vis.	

Proiectul nr. 4.2. Sisteme multicomponente cu proprietăți optice, magnetice și farmaceutice speciale (oxizi și săruri obținute prin tehnicile: coprecipitare, ceramică, sol - gel, sonosinteză și utilizând precursori – săruri și combinații complexe.

Responsabil: Dr. ing Cecilia Savii, CS I

Tema 4.2.1. Materiale oxidice nanostructurate mezoporoase pe baza de silice și hibride. Sinteze prin metoda sol-gel, cu agenți de directionare clasici și lichide ionice, caracterizare și testări preliminare în aplicații biomedicale.

Coordonator: Dr. Anamaria Putz, CS III

Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1, Trim.I	1. Particule sferice de silice obținute prin metoda Stober	1.1. Sinteza matricilor de silice. Influența variabilelor de proces asupra stabilității solurilor și asupra proprietăților morfologice ale silicei; 1.2. Caracterizarea privind stabilitatea solurilor și proprietățile morfologice ale materialelor obținute	Colectiv Dr. ing. Sorina Ilies Ing. Catalin Ianas Chim. Piciorus Elena Chim. Crisan Roxana Colaboratori interni: - Universitățile “Politehnica” și “de Vest” Timisoara; - Institutul National C&D pentru Electrochimie și Materie Condensată, Timis Colaboratori externi: - Inst. Chim. Anorg. Rez, Ac. Științe Republica Cehă; UChR.Cz - Inst. Fizica Stării Solide și Optica, Budapesta, Acad. Ungară de Șt. KFKI
Faza 2, Trim.II	2. Particule sferice mezoporoase de silice obținute prin templare cu surfactanți clasici;	2.1. Sinteze sol-gel în prezența unor agenți de directionare ionici, de tip CTA+, cu dimensiuni variabile ale catenei C ₈₋₁₆ 2.2. Caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute;	
Faza 3, Trim.III	3. Matrici particulare cu porozitate ordonată obținute în prezența unor lichide ionice	3.1. Sinteze sol-gel în prezența LI, în special cu cationi comuni surfactanților utilizați la Obiectivul 2. 3.2. Caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute;	

Faza 4, Trim.IV	Obiectiv 4. Functionalizarea unor materiale obtinute in fazele anterioare si testari preliminare	4.1. Functionalizarea cu grupari, de ex. amino-si/sau carboxil, in situ si prin post procesare. 4.2. Teste preliminare de evaluare a capacitatii de incarcare cu agenti farmacologici . 4.3. Studii comparative privind eficienta materialelor cu proprietati de carier, amorf-ordonat, functionalizat-nefunctionalizat	
Tema 4.2.2. Materiale (superpara-) magnetice nanostructurate (oxizi de fier si nanocompozite) obtinute prin coprecipitare, sol-gel si metode electrochimice de sinteza. Dezvoltarea potentialului ca sorbenti pentru aplicatii in protectia mediului Coordonator. Dr. ing. Sorina Ilies, CS			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati în cadrul fazei	Executanți
Faza 1, Trim.I	1. Materiale nanostructurate magnetice. Oxizi de fier cu comportament superparamagnetic.	1.1. Sinteze prin coprecipitare, cu si fara modifcatori chimici; 1.2. Urmărirea influenței parametrilor de sinteza asupra proprietatilor structurale si morfologice, corelarea cu proprietatile magnetice (magnetizare de saturatie, camp coercitiv); 1.3 Caracterizarea morfologica si structurala a materialelor obtinute	Colectiv: Dr. Ana-Maria Putz Ing. Catalin Ianasi Chim. Roxana Crisan Chim. Elena Piciorus Colaboratori interni: - Universitatile “Politehnica”si “de Vest” Timisoara; - Institutul National C&D pentru Electrochimie si Materie Condensata,Timis
Faza 2, Trim.II	2. Obținerea unor oxizi de fier spinelici prin metode electrochimice, in regim galvanostatic/ potentiostatic	2.1. Urmărirea influenței parametrilor de sinteza asupra proprietatilor structurale si morfologice, corelarea cu proprietatile magnetice (magnetizare de saturatie, camp coercitiv); 2.2 Caracterizarea morfologica si structurala a materialelor obtinute	

Faza 3, Trim.III	3. Nanocompozite magnetice in sistemul Fe ₂ O ₃ -SiO ₂ , obtinute in situ si post procesare;	3.1.Sinteza nanocompozitelor magnetice, prin post procesare utilizand particule sferice de oxid de fier obtinute in faza 1 si 2 3.2. Sinteza in situ, prin sol-gel si metode electrochimice a nanocompozitelor magnetice 3.3. Caracterizarea structurala, magnetica si morfologica a nanocompozitelor obtinute.	<i>Colaboratori externi:</i> -Inst. Chim. Anorg. Rez, Ac.Stiințe Republica Cehă;UACHR.Cz -Inst. Fizica Starii Solide si Optica, Budapesta, Acad. Ungara de St.KFKI
Faza 4, Trim.IV	4. Selectarea probelor cu proprietati optime, functionalizarea si testarea preliminara, pe probe sintetice de apa contaminata	4.1. Selectarea unor probe reprezentative si functionalizarea pentru optimizarea capacitatii de adsorbtie si accentuarea selectivitatii 4.2. Caracterizarea morfologica structurala a compusilor functionalizati ; 4.3. Testarea preliminara, pe probe sintetice de apa contaminata, privind capacitatea de adsorbtie a metalelor grele si/sau a unor produse farmaceutice.	

Proiectul nr. 4.3. 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

Responsabil: Dr. ing. Viorel Sasca, C.S.II

Tema 4.3.1. 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 Coordonator: Dr.ing. Sasca Viorel, CS I			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati în cadrul fazei	Executanți
Faza 1, Trim.I	I Prepararea de compuși solizi cu activitate catalitică potențială ridicată prin sinteze de heteropolicompusi ai acidului tungstosforic cu cationi Ni^{2+} introduși în Unitatea Keggin-UK ($PW_{12}O_{40}^{3-}$) în locul unor cationi W^{6+} în raporturile Ni^{2+}/UK de la 1:1 până la 3:1 pentru mărirea controlată a acidității în conformitate cu cercetările din anul anterior și determinarea raportului pentru care se obține aciditatea maximă a acestora. II. Mărirea suprafețelor specifice prin suportarea heteropolicompușilor acidului tungstosforic cu Ni^{2+} introdus în Unitatea Keggin-UK pe săruri neutre de Cs sau Ag, respectiv pe sită moleculară SBA15 cu scopul creșterii activității catalitice potențiale.	I.1. Sinteze de heteropolicompusi ai acidului tungstosforic cu cationi Ni^{2+} introduși în Unitatea Keggin-UK în locul unor cationi W^{6+} pentru mărirea controlată a acidității acestora pe baza cercetărilor anterioare. I.2. Sinteze de heteropolicompusi ai acidului tungstosforic cu Ni^{2+} cu aciditate mărită suportați pe $Ag_3PW_{12}O_{40}$ și $Cs_3PW_{12}O_{40}$. I.3. Determinarea compoziției heteropolicompușilor acidului tungstosforic cu Ni, Cs si Ag prin analiză termogravimetrică și spectroscopie de absorbție atomică în flacără. I.4. Caracterizarea structurală a heteropolicompușilor acidului tungstosforic cu Ni, Cs si Ag prin spectroscopie IR, spectroscopie UV-Vis-DRS, analiza difractometrică, analize XPS si LEIS. I.5. Analiza termică a heteropolicompușilor acidului tungstosforic cu Ni, Cs și Ag și evaluarea stabilității lor termice prin intermediul energiei de activare a procesului de distrugere a UK ca urmare a pierderii apei de constituție. I.6. Testarea activității catalitice în reacția de conversie a etanolului prin metoda în flux continuu de reactant și selectarea celor mai performanți catalizatori dintre heteropolicompusi acidului tungstosforic cu Ni, Cs si Ag.	Colectiv: Dr.ing A. Popa Drd. chim. Orsina Verdeș, Dr. ing Silvana Borcanescu Colaboratori interni: Institutul National de Cercetare Dezvoltare pentru Electrochimie si Materie Condensata–INCEMC-Timisoara Colaboratori externi: Universitatea din Szegeed si Grupul de Cercetare al Cineticii Reactiilor si al Chimiei Suprafetelor al Academiei Maghiare de Stiinte

	III. Studiul comportării termice a heteropolicompusilor acidului tungstofosforic cu Ni, Cs și Ag și evaluarea stabilității termice lor prin intermediul energiei de activare a procesului de distrugere a UK ca urmare a pierderii apei de constituție.	I.7. Studii de adsorbție/desorbție programată termic-TPD a etanolului pe heteropolicompusii acidului tungstofosforic cu Ni suportați pe $\text{Ag}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ și $\text{Cs}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ (cu metoda adaptată pentru analiza TG-DTA cuplata cu spectrometria de masa). I.8. Studiu TPD de CO_2 prin metoda în pulsuri de reactant (pe microreactor cuplat on-line la GC-TCD) și selectarea compușilor solizi care adsorb cele mai mari cantități de CO_2 și de pe care acesta se desoarbe prin încălzire până la 300°C. I.9. Prelucrarea și interpretarea datelor experimentale, redactare comunicări pentru „Al 24-lea Simpozion de Analiză Termică și Calorimetrie (1 comunicare) și Zilele Academice Timișene (2 comunicări).	
Faza 2, Trim.II	IV. Evaluarea activității catalitice a heteropolicompusilor acidului tungstofosforic în reacția de conversie a etanolului la etena și determinarea parametrilor cinetici.	II.1. Sinteze de heteropolicompusi ai acidului tungstofosforic cu Ni^{2+} (introdus în Unitatea Keggin-UK în locul unui cation W^{6+}) suportați pe sită moleculară SBA15. II.2. Determinarea compoziției heteropolicompusilor acidului tungstofosforic cu Ni suportați pe SBA15 prin analiză termogravimetrică și spectroscopie de absorbție atomică în flacăra. II.3. Caracterizarea structurală a heteropolicompuşilor acidului tungstofosforic cu Ni suportați pe SBA15 prin spectroscopie IR, spectroscopie UV-Vis-DRS, analiza difractometrică, analize XPS și LEIS	
	V. Elaborarea unui model al mecanismului reacției catalitice de conversie a etanolului în etenă pe baza desorbției programate termic cuplata cu spectrometria de masa și a relațiilor determinate între compoziție, structură, textură și proprietățile catalitice.	II.4. Testarea activității catalitice în reacția de conversie a etanolului prin metoda în flux continuu de reactant și selectarea celor mai performanți catalizatori dintre heteropolicompusii acidului tungstofosforic cu Ni suportați pe SBA15. II.5. Teste de activitate catalitica de lunga durată a celor mai performanți catalizatori în reacția de conversie a etanolului	

		prin metoda in flux continuu pentru studiul dezactivarii. II.6. Studii de adsorbție/desorbție programată termic-TPD (cu metoda adaptată pentru analiza TG-DTA cuplata cu spectrometria de masa) a etanolului pe heteropolicompusii acidului tungstosforic cu Ni suportați pe SBA15. II.7. Studiu TPD de metanol pe compuși solizi selectați în urma TPD de CO₂ (pe microreactor cuplat on-line la GC-TCD). II.8. Prelucrarea și interpretarea datelor experimentale, pregătire materiale pentru comunicare și trimitere tilu pentru prezentare la „20th International Symposium on Analytical and Environmental Problems, Szeged, September 2015 (1 comunicare)	
Faza 3, Trim.III	VI. Studiu prospectiv al conversiei dioxidului de carbon cu metanol în dimetil carbonat pe heteropolicompusi ai acidului tungstosforic cu cationi Ni ²⁺ .	III.1. Analiza termică a catalizatorilor utilizați în teste de durată la conversia etanolului. III.2. Teste de activitate catalitică pe catalizatori rezistenți la dezactivare pentru determinarea parametrilor cinetici ai reacției de conversie a etanolului la etena.	
		III.3. Teste ale reacției între CO₂ si CH₃OH prin adsorbția de CO₂ urmată de introducerea CH₃OH peste CO₂ adsorbit și invers, pe catalizatorii cu proprietăți adsorbante bune ale celor doi reactanți (în microreactor cuplat on-line la GC-TCD) . III.4 Prelucrarea și interpretarea datelor experimentale, redactare comunicare și trimitere lucrare pentru publicare în volum la „20th International Symposium on Analytical and Environmental Problems, Szeged , September 2015 (1 comunicare cu publicare integrală în volum).	

Faza 4, Trim.IV	VI. Studiu prospectiv al conversiei dioxidului de carbon cu metanol în dimetil carbonat pe heteropolicompuși ai acidului tungstosfosforic cu cationi Ni^{2+}. VII. Diseminarea rezultatelor cercetărilor prin redactarea de articole, comunicari, rapoarte și publicarea lor.	IV.1. Teste de activitate catalitică pe catalizatori rezistenți la dezactivare pentru determinarea valorilor optime ale raportului etanol-azot în amestecul de reacție și a vitezei la conversia catalitică a etanolului. IV.2. Teste de confirmare ale reacției între CO_2 și CH_3OH prin adsorbția de CO_2 urmată de introducerea CH_3OH peste CO_2 adsorbit și invers, pe catalizatorii cu proprietăți adsorbante bune ale celor doi reactanți (cu metoda adaptată pentru analiza TG-DTA cuplata cu spectrometria de masă).	
		IV.3. Calcularea conversiei, selectivității, parametrilor cinetici ai reacțiilor principale la conversia etanolului. IV.4. Stabilirea conținutului și titlurilor comunicărilor și articolelor, respectiv a manifestărilor și publicațiilor științifice la care vor fi prezentate rezultatele cercetărilor în 2016; redactarea pentru Simpozionul internațional de cataliză "Romcat 2016" și a raportului de activitate.	

Tema 4.3.2. Catalizatori suportati pentru reactia de conversie a alcoolilor alifatici inferiori (intensificarea proceselor chimice de conversie prin marirea suprafetei specifice a catalizatorilor)

Coordonator: Dr. ing. Alexandru Popa, CS II

Faza	Obiectivul fazei	Activitati în cadrul fazei	Executanți
Faza 1, Trim.I	I. Prepararea unor heteropolioxometalati cu activitate catalitica ridicata de tipul $\text{Me}_x\text{H}_{3-x}[\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}]$ unde $\text{Me} = \text{Cu}$, iar $x = 0.25 - 1.5$, și depunerea lor în grade diferite de acoperire pe site moleculare obtinute prin utilizarea diferitilor surfactanti (SBA-15).	I.1 Prepararea sitelor moleculare prin metoda sol-gel cu utilizarea diferitilor surfactanti I.2 Depunerea prin grefare a (HPA) pe silica functionalizata cu ajutorul 3- aminopropil-trietoxi-silan (APTES) si prepararea heteropolioxometalati depusi pe site moleculare la diferite grade de acoperire a suprafetei suportului;	<i>Colectiv:</i> Dr. ing. Viorel Sasca Dr.ing. Orsina Verdes Dr. Ing.Silvana Borcanescu

		I.3 Analiza fizico-chimica a compusilor preparati pentru determinarea continutului de apa, aciditatii Bronsted si continutului de Me prin: analiza termogravimetrica, termodesorbție programata TPD a amoniacului, spectroscopie de absorbție atomica in flacara. I.4 Prelucrarea și interpretarea datelor experimentale, redactare comunicări, postere pentru simpozioane stiintifice	<i>Colaboratori externi:</i> Universitatea din Belgrad, Serbia
Faza 2, Trim.II	II. Depunerea prin grefare a unor heteropoliacizi (HPA) și heteropolioxometalati de tipul $Me_xH_{3-x}[PMo_{12}O_{40}]$ unde Me = Cs, Ni, Co, iar $x = 0.25 - 2.5$, pe silica functionalizata cu ajutorul unor agenti de tipul 3- aminopropil-trietoxi-silan (APTES). Utilizarea acestor HPA la reactia de conversie a etanolului in scopul obtinerii unor selectivitati ridicate in acetaldehida.	II.1 Determinarea proprietatilor texturale a heteropolioxometalatiilor preparati prin masuratori de suprafata specifica si porozitate prin metoda BET-BJH. II.2. Caracterizarea structurala a heteropolioxometalatiilor depusi pe site moleculare prin: spectroscopie IR si Raman, analiza termica cuplata cu MS, analiza difractometrica la unghiuri mici, microscopie electronica SEM-EDS.	
	III. Caracterizarea fizico-chimică a HPAs puri si depusi pe suport prin: difractie de raze X, spectroscopie IR si Raman, analiza termica TG-DTA cuplat cu spectrometrie de masă și DSC, masuratori de suprafata specifica și porozitate prin metoda BET, microscopie electronica SEM-EDS;	II.3 Prelucrarea și interpretarea datelor experimentale, redactare comunicări, postere pentru simpozioane stiintifice.	
Faza 3, Trim.III	IV.Evaluarea proprietatilor catalitice a HPAs depusi pe suport in reactia de conversie a alcoolilor inferiori și a oxizilor de carbon. Corelarea activitatii catalitice cu proprietatile texturale și structurale.	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 reactanți și în flux continuu;	

		III.2 Teste de activitate catalitica cu modificarea conditiilor de lucru pentru determinarea mecanismelor de reactie III.3 Prelucrarea și interpretarea datelor experimentale, redactare comunicări, postere pentru simpozioane stiintifice	
Faza 4, Trim.IV	IV.Evaluarea proprietatilor catalitice a HPAs depuși pe suport in reactia de conversie a alcoolilor inferiori și a oxizilor de carbon. Corelarea activitatii catalitice cu proprietatile texturale și structurale. V. Prelucrarea si interpretarea datelor experimentale, redactarea comunicărilor, 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 și titlurilor comunicărilor și articolelor, respectiv a manifestărilor și publicațiilor științifice la care vor fi prezentate; redactarea comunicărilor pentru Simpozionul internațional de cataliză "Romcat 2016" si a raportului de activitate	