



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

PLANUL DE CERCETARE PENTRU ANUL 2017

Activitatea de cercetare a Institutului de Chimie Timișoara al Academiei Române prevăzută pentru anul 2017 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.

Acestea sunt prezentate în continuare.



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

PLANUL DE CERCETARE

PENTRU ANUL 2017

Activitatea de cercetare a Institutului de Chimie Timișoara al Academiei Române prevăzută pentru anul 2017 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.

Acestea sunt prezentate în continuare.



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 Costisor

Responsabil de Program: Dr. Liliana Pacureanu

Programul de cercetare nr.1-2017

PROIECTAREA MOLECULARĂ ASISTATĂ DE CALCULATOR

Coordonator: Prof. Dr. Ludovic Kurunczi, CS I

Denumirea: 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 rezidului la ardere al unor polifosfoesteri prin metode regresionale.	1.1. Modelarea structurii polifosfoesterilor prin metode cuanto-chimice. 1.2. Calculul descriptorilor structurali ai polifosfoesterilor. 1.3. Evaluarea cantitativă a activității ignifuge a polifosfoesterilor prin aplicarea metodelor regresionale. 1.4. Alegerea de modele stabile statistic și predictive pe baza mai multor criterii statistice.	- Dr. Ing. Simona Funar-Timofei, CSI - Dr. Ana Borota, CS - Dr. Sorin Avram, CS - Dr. Luminița Crișan, CS - Dr. Alina Bora, CSIII - Dr. Ludovic Kurunczi, CSI Colaboratori externi: - Universitatea de Medicină și Farmacie Victor Babeș Timișoara, Facultatea de Farmacie (Dr. Daniela Ionescu) - Natural Science Laboratory, Toyo University, Tokyo, Japonia (Prof. Dr. Takahiro Suzuki)
Faza 2 Trim.II	2. Studiul relațiilor structură-proprietăți aplicate prin metode specifice cheminformatic și de QSAR unor ierbicide heterociclice inhibitori ai proteinei D1 din sistemul foto al plantelor	2.1. Modelarea structurii ierbicidelor prin metode de mecanică moleculară. 2.2. Analiza conformațională a compușilor studiați cu ajutorul metodelor de mecanică moleculară și docare. 2.3. Identificarea diferitelor modele de interacție a derivaților heterociclici cu activitate ierbicidă pentru situsul de legare al proteinei D1 în fotosistemul II.	

Faza 3 Trim.III	3. Relații structură- activitate insecticidă aplicate unor compuși neonicotinoidici și a derivaților de dibenzoilhidrazină	3.1. Analiza structurii derivaților de dibenzoilhidrazină prin metode de modelare moleculară. 3.2. Calculul descriptorilor structurali ai derivaților derivaților de dibenzoilhidrazină și alegerea parametrilor relevanți pentru activitatea insecticidă. 3.3. Studiul interacțiilor derivaților neonicotinoidici cu receptorul nicotinic de acetilcolină prin calcule de docare rigidă.	
Faza 4 Trim.IV	4. Evaluarea cantitativă a relațiilor structură-proprietăți aplicate prin metode specifice chiminformatică și de QSAR	4.1. Calculul unor parametrii structurali ai ierbicidelor heterociclice inhibitori ai proteinei D1 din sistemul de fotosinteză al plantelor. 4.2. Evaluarea cantitativă a activității ierbicide prin aplicarea metodelor regresionale liniare. 4.3. Construirea și alegerea de modele predictive pentru insecticide din clasa neonicotinoididelor și a derivaților de dibenzoilhidrazină prin metode liniare regresionale.	
Tema 1.1.2. Studiarea modificărilor conformaționale induse de modulatorii selectivi ai receptorului estrogenic alfa (ERα) asupra structurii receptorului.			
Coordonator: Dr. Ramona Curpan, CS II			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1. Pregătirea și optimizarea structurilor liganzilor investigați.	1.1. Generarea conformațiilor 3D. 1.2. Minimizarea energetică a conformațiilor 3D, semiempiric și în cadrul formalismului DFT. 1.3. Compararea rezultatelor obținute, selectarea celor mai bune geometrii pentru studiile de andocare	- Dr. Ramona Curpăan, CSII - Dr. Liliana Halip, CSIII - Dr. Ana Borota, CS - Dr. Cristian Neanu Colaboratori externi:

Faza 2 Trim.II	2. Modelarea interacției ligand-receptor ER α	2.1. Pregătirea structurilor experimentale ale ER α selectate pentru andocare moleculară. 2.2. Andocarea liganzilor în situsul de legare al receptorului ER α . 2.3. Evaluarea modelelor pentru identificarea conformației potrivite a receptorului.	- Prof. Dr. Craig Jordan University of Texas MD Anderson Cancer Center, USA - Dr. Philipp Maximov University of Texas MD Anderson Cancer Center, USA - Dr. Cristian G. Bologa University of Mexico School of Medicine, Albuquerque, USA.
Faza 3 Trim.III	3. Studiarea modificărilor structurale induse de liganzi receptorului la trecerea din conformație agonistă în cea antagonistă	3.1. Pregătirea structurilor complexe ligand-receptor. 3.2. Rularea simulărilor de dinamică moleculară pentru aceste structuri. 3.3. Analiza și interpretarea traiectoriilor obținute din simulările de dinamică moleculară.	
Faza 4 Trim.IV	4. Estimarea afinității de legare a liganzilor la ER α prin metoda MM-GBSA	4.1 Selectarea conformațiilor liganzilor care urmează să fie investigate. 4.2 Calcularea afinității de legare a liganzilor la diferite conformații ale receptorului. 4.3 Analiza comparativă a rezultatelor estimate cu cele experimentale.	

Tema 1.1.3. Studii in silico de potență și toxicitate a medicamentelor și compușilor agrochimici pe baza interacțiilor chimico-biologice
Coordonator: Dr. Ana Borota, CS III

Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1. Actualizarea studiului de literatură în scopul identificării de receptori țintă pentru: medicamente/compuși agrochimici, precum și a unor serii de compusi cu activitate biologică de interes (determinată experimental)	1.1 Analiza bazelor de date disponibile și a literaturii pentru identificarea unor receptori cu potențial farmacologic și/sau agrochimic. 1.2 Identificarea unor serii de compusi chimici care să aibă afinitate pentru receptorii în prealabil identificați.	- Dr. Ana Borota - Dr. Ing. Simona Funar-Timofei - Dr. Luminița Crișan - Dr. Ramona Curpan - Dr. Liliana Halip
Faza 2 Trim.II	2. Prelucrarea receptorilor și a seriilor de compusi identificate	2.1 Pregătirea structurilor de raze X sau modelarea prin omologie a receptorilor care nu au structura cristalografică determinată. 2.2 Pregătirea liganzilor prin optimizare geometrică, atribuirea tautomeriei și a stereochemiei potrivite la un pH optim.	
Faza 3 Trim.III	3. Aplicarea metodelor de andocare moleculară și generare de farmacofori	3.1 Andocarea compușilor selectați în receptori țintă. 3.2 Generarea de farmacofori pentru evidențierea grupurilor cheie responsabile de interacția ligand-receptor 3.2 Studiul modelului de interacție diferențial agonist versus antagonist.	
Faza 4 Trim.IV	4. Virtual screening al unor baze de compusi pentru identificarea unor noi hit-uri medicament/pesticid	4.1. Validarea ipotezelor farmacofore. 4.2. Ligand-based virtual screening (prin căutarea în baze de date a unor compuși care să fi fost găsiți pe modelele de farmacofor găsite). 4.3 Structure-based virtual screening (prin andocare).	

Denumirea: 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. Corelarea pozițiilor pe transmembrane a amino acizilor esențiali în legarea liganzilor și structura chimică a liganzilor.

Coordonator: Dr. Liliana Halip, CSIII

Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim 1	1. Identificarea aminoacizilor esențiali pentru legarea liganzilor GPCR	1.1 Analiza literaturii de specialitate și a bazelor de date pentru obținerea datelor de mutagenză direcționate pe situsul receptorilor GPCR 1.2 Extragerea automată a perechilor ligand-amino acid esențial în legarea liganzilor GPCR	- Dr. Ramona Curpăan, CS II - Dr. Ana Borota, CS III, III - Dr. Alina Bora, CS III - Dr. Sorin Avram, CS III
Faza 2 Trim 2	2. Procesarea datelor de mutagenză direcționată pe situsul GPCR.	2.1 Identificarea pozițiilor de pe elicile transmembrana ale aminoacizilor implicați în legarea liganzilor GPCR. 2.2 Obținerea structurilor 2D ale liganzilor GPCR pentru care există date de mutagenză	<i>Colaboratori externi:</i> - Dr. Cristian Bologa, Universitea New Mexico, Albuquerque, USA - Dr. Tudor I. Oprea, Universitea New Mexico, Albuquerque, USA
Faza 3 Trim 3	3. Generarea matricilor binare fragment chimic versus poziție amino acid pentru fiecare receptor GPCR.	3.1 Generarea unei librării de fragmente pentru liganzii GPCR cu date de mutagenză 3.2 Generarea vectorilor de tip fingerprint pentru fiecare ligand GPCR 3.3 Asamblarea matricilor de tip fingerprint fragment chimic versus poziție amino acid.	
Faza 4 Trim 4	4. Corelarea pozițiilor pe transmembrane a amino acizilor esențiali în legarea liganzilor și structura chimică a liganzilor.	4.1. Asamblarea matricei finale pentru liganzii GPCR 4.2. Corelarea pozițiilor aminoacizilor cu fragmentele chimice 4.3 Analiza rezultatelor obținute.	

Tema 1.2.2. Explorarea spațiului chimic pentru identificarea timpurie a compușilor de tip hit

Coordonator: Dr. Alina Bora, CSIII

Faza 1 Trim 1	1. Compilarea unui set de compuși de tipul <i>frequent hitter</i> (FH)	1.1. Căutarea compușilor în baze de date consacrate (PubChem, ChEMBL, etc) 1.2. Optimizare structurilor chimice 1.3. Calcul parametrilor fizico-chimici (criterii de tip <i>lead-like, drug-like, blockbuster, Lipinski-Ro5</i>)	-Dr. Sorin Avram CS III -Dr. Liliana Păcureanu CS II -Dr. Luminița Crișan, CS III -Dr. Liliana Halip, CS III -Dr. Ramona Curpăan, CS III
------------------	--	---	--

Faza 2 Trim 2	2. Compilarea unui set de compuși activi/selectivi	2.1. Căutarea de compuși în baze de date consacrate (PubChem, ChEMBL, etc) 2.2. Optimizarea structurilor chimice 2.3. Calculul parametrilor fizico-chimici (criterii de tip <i>lead-like</i> , <i>drug-like</i> , <i>blockbuster</i> , Lipinski-Ro5)	-Prof. Dr. Ludovic Kurunczi, CS I <i>Colaboratori externi:</i> -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.
Faza 3 Trim 3	3. Compilarea unui set de compuși inactivi	3.1. Căutarea de compuși în baze de date consacrate (PubChem, ChEMBL, etc) 3.2. Optimizarea structurilor chimice 3.3. Calcul parametrilor fizico-chimici (criterii de tip <i>lead-like</i> , <i>drug-like</i> , <i>blockbuster</i> , Lipinski-Ro5)	
Faza 4 Trim 4	4. Descrierea spațiului chimic	4.1. Compararea distribuției în spațiul chimic pe baza parametrilor calculați 4.2. Analiza și identificarea compușilor posibil <i>hit</i>	
Tema 1.2.3. Modelarea interacției ligand-receptor și a selectivității pentru inhibitorii ciclooxigenazelor Coordonator: Dr. Luminița Crișan, CSIII			
Faza 1 Trim 1	1. Elaborarea metodologiei standard de lucru pornind de la medicamentele cunoscute, selective și neselective care inhibă COX-1/2.	1.1. Analiza literaturii de specialitate în vederea colectării informațiilor de activitate biologică și a actualizării structurilor de raze X ale COX-1/2. 1.2. Elaborarea criteriilor de selecție pentru datele colectate din literatură. 1.3. Identificarea și studierea structurilor de raze X ale COX-1/2 cocristalizate cu medicamente aprobate.	-Dr. Liliana Păcureanu, CS II -Dr. Alina Bora, CS III -Dr. Sorin Avram, CS III -Prof. Dr. Ludovic Kurunczi, CS I
Faza 2 Trim 2	2. Pregătirea datelor și stabilirea metodologiei prin selectarea seturilor standard în scopul identificării inhibitorilor ciclooxigenazei	2.1. Pregătirea datelor necesare generării modelelor de farmacofor, selectarea compușilor relevanți pentru construirea acestuia. 2.2. Generarea modelelor de farmacofor. 2.3. Analiza și validarea modelelor de farmacofori.	<i>Colaboratori externi:</i> - Prof. Dr. Mariana Palage Universitatea de Medicină și Farmacie „Iuliu Hațieganu” Cluj-

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 construite și alegerea modelelor predictive obținute fără șansă. 3.5. Definirea domeniilor de aplicabilitate pentru modelele selectate	Napoca, Facultatea de Farmacie - Ș.l. Smaranda Oniga Universitatea de Medicină și Farmacie „Iuliu Hațieganu” Cluj-Napoca, Facultatea de Farmacie
Faza 4 Trim 4	4. Selectarea conformațiilor 3D ale proteinelor pentru procedeul de andocare (rigid și flexibil)	4.1. Andocarea inhibitorilor selectivi și neselectivi în situsul COX 4.2. Evaluarea similarității structurale a compușilor activi (selectivi și neselectivi) 4.3. Eliminarea compușilor ce se dovedesc a fi lipsiti de interes aplicativ. 4.4. Analiza și valorificarea rezultatelor obținute, prin participarea la conferințe și prin publicații în reviste de specialitate.	
Tema 1.2.4. Studiul modulatorilor angiogenezei și limfangiogenezei prin metode ale chimiei computaționale			
Coordonator: Dr. Sorin Avram, CS III			
Faza 1 Trim 1	1. Pregătirea seturilor de compuși activi și inactivi pentru unele kinaze implicate în angiogeneză.	1.1. Selectarea unor seturi de modelare a inhibitorilor de kinaze relevante pentru angiogeneză. 1.2. Standardizarea seturilor. 1.3. Generarea descriptorilor moleculari.	-Dr. Liliana Păcureanu, CS II -Dr. Alina Bora, CS III -Dr. Luminița Crișan, CS III
Faza 2 Trim 2	2. Generarea unui număr mare de modele de predicție pentru inhibitorii de kinase.	2.1. Divizarea compusilor în set de modelare și set test. 2.2. Generarea de modele de predicție. 2.3. Implementarea pașilor anteriori într-un mod de lucru iterativ.	-Dr. Ramona Curpăan, CS II -Dr. Liliana Halip, CS III
Faza 3 Trim 3	3. Evaluarea predicțiilor pentru clasificare și “screening” virtual.	3.1. Rularea modului de lucru pentru 100 de iterații. 3.2. Calculul parametrilor de evaluare pentru clasificare. 3.3. Calculul parametrilor de evaluare pentru “screening”-ul virtual.	-Prof. Dr. Ludovic Kurunczi.
Faza 4 Trim 4	4. Analiza statistică a rezultatelor.	4.1. Asamblarea valorilor parametrilor. 4.2. Calculul intervalelor de toleranță. 4.3. Interpretarea rezultatelor	

Tema 1.2.5 Investigarea chemoinformatica a medicamentelor care nu au promovat testele clinice			
Coordonator: Dr. Liliana Pacureanu, CS II			
Faza 1 Trim 1	1. Asamblarea unui set de validare standard pentru medicamente bazat pe informatia chimico-biologica din bazele de date Biomedtracker, ChEMBL și DrugBank.	1.1. Extragerea informatiilor relevante din bazele de date Biomedtracker, ChEMBL și DrugBank. 1.2. Calculul descriptorilor si selectarea chemotipurilor unice pentru medicamentele aprobate si pentru candidatii de medicamente care au cazut in testele clinice. 1.2. Analiza diversitatii spatiului chimic descris de compusii selectati.	- Dr. Sorin Avram, CS III - Dr. Luminita Crisan, CS III - Dr. Sorin Avram, CS III - Dr. Ana Borota, CS III - Dr. Alina Bora, CS III - Chim. Daniela Varga, CS
Faza 2 Trim 2	2. Evaluarea setului standard de validare prin metode de screening virtual	2.1. Calculul unui set extins de descriptori structurali 2D, fingerprint-uri si calculul similaritatilor. 2.2. Generare de conformeri, suprapunere 3D si calculul similaritatilor structurale. 2.3. Generare de farmacofori pentru medicamentele aprobate 2.4. Evaluarea rezultatelor cu ajutorul metodelor specifice.	
Faza 3 Trim 3	3. Elaborarea modelelor QSAR de clasificare.	3.1. Identificarea si calculul descriptorilor relevanti 3.2. Construirea modelelor QSAR 3.3. Validarea modelelor QSAR	
Faza 4 Trim 4	4. Repozitionarea computationally a unor medicamente – candidat excluse in testele clinice pentru alte scopuri terapeutice.	4.1. Generarea de descriptori structurali, fingerprint-uri si conformeri. 1.2. Calculul similaritatilor bi si tridimensionale. 1.2. Prioritizarea structurilor pe baza unei scheme de consens.	



INSTITUTUL de CHIMIE TIMIȘOARA al ACADEMIEI ROMÂNE

Blvd. Mihai Viteazul, nr. 24, 300223 - Timișoara

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



Director,

Dr. Chim. Otilia COSTIȘOR

Programul de cercetare nr. 2 - 2017

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

Coordonator : Dr. chim. Aurelia VISA

Denumirea Proiectului 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 Iliu, CS I

Tema 2.1.1. Metode “Green” utilizate in sinteza unor compusi cu molecula mica sau polimeri continand 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 Iliu, CS I			
Faza	Obiective	Activitati	Cercetători
Faza 1 Trim I	1. Utilizarea acidului hipofosforos si a hidroxialdehidelor in obtinerea unor compusi cu fosfor folosind metode green	1.1 Studii preliminare privind sinteza unor polimeri pornind de la acidul hipofosforos si hidroxialdehide 1.2. Stabilirea condițiilor optime de reacție: raport molar reactanți, temperatura, solvenți.	<u>Colectiv:</u> -Dr. Mihaela Petric. -Dr. Cornelia Crasmareanu -Dr. Manuela Crisan -Dr. Vasile Simulescu -Dr. Lavinia Macarie
Faza 2 Trim II	2. Utilizarea acidului hipofosforos si a dialdehidelor in obtinerea unor compusi cu fosfor folosind metode green	2.1 Studii preliminare privind sinteza unor polimeri pornind de la acidul hipofosforos si dialdehide 2.2. Stabilirea condițiilor optime de reacție: raport molar reactanți, temperatura, solvenți.	<u>Colaboratori externi:</u> - Univ. de Vest Timișoara - Univ. Creta, Grecia - Univ Cape Peninsula, Africa de Sud
Faza 3 Trim. III	3. Condensare intramoleculara a compusilor cu fosfor	3.1. Studii preliminare privind utilizarea glioximelor in obtinerea unor compusi elementorganici 3.2. Analiza seriilor de compusi ce contin fosfor prin spectrometrie de masă, IR, RX.	- Universitatea Tehnica si Economica Budapesta
Faza 4 Trim IV	4. Condensare intermoleculara a compusilor cu fosfor	4.1. Studii preliminare privind utilizarea glioximelor in obtinerea unor compusi elementorganici 4.2. Analiza seriilor de compusi ce contin fosfor prin spectrometrie de masă, 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	Cercetători
Faza 1 Trim. I	1. Obținerea de noi precursori carboxilici aromatici	1.1 Sinteza si purificarea derivatilor carboxilici aromatici diferit substituiti. 1.2 Stabilirea conditiilor optime de reactie.	<u>Colectiv:</u> Dr. Gheorghe Iliu Dr. Mihaela Petric Dr. Nicoleta Plesu
Faza 2 Trim. II	2. Caracterizarea fizico-chimica si structurala a precursorilor sintetizati	2.1 Caracterizarea compusilor sintetizati prin spectrometrie FTIR-ATR, difracție de raze X, analiză termică TGA/DSC. 2.2. Caracterizarea structurala de noi forme solide ale	drd. Milica Tara-Lunga-Mihali <u>Colaboratori externi:</u>

		noilor compusi obtinuti. 2.3 Investigarea interactiunilor generate.	- Univ. de Vest Timișoara - Institutul de Fizică Aplicată-Chișinău, Moldova - Univ. Tehnica Gebze, Cayirova, Turcia
Faza 3 Trim. III	3. Sinteza compusilor organici-anorganici pentru materiale hibride	3.1 Obținerea compusilor organici-anorganici folosind precursorii sintetizati. 3.2 Stabilirea condițiilor optime de reacție. 3.3 Caracterizarea fizico-chimica a compusilor obtinuti.	
Faza 4 Trim. IV	4. Investigarea proprietatilor anticorozive	4.1 Inregistrarea curbelor de polarizare 4.2 Interpretarea datelor experimentale	

Tema 2.1.3. Obținerea materialelor compozite utilizand ca metoda, grefarea acizilor fosfonici pe oxizi metalici

Coordonator: Dr. Eleonora Crășmăreanu, CS III

Faza	Obiective	Activitati	Cercetători
Faza 1 Trim I	1. Stabilirea condițiilor optime de obținere ale materialelor compozite	1.1. Stabilirea condițiilor optime de sinteza ale materialelor compozite in functie de raportul molar, viteza de agitare, solvent, timp de reacție.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Gheorghe Ilia - Dr. Eleonora Crășmăreanu
Faza 2 Trim II	2. Sinteza materialelor compozite	2.1. Utilizarea mai multor variante de grefare a acizilor fosfonici pe oxizi metalici, urmarind randamentul sa fie cat mai mare si costurile cat mai mici.	-Dr. Vasile Simulescu - Drd. Ramona Gheonea
Faza 3 Trim III	3. Caracterizarea materialelor materialelor hibride organice-anorganice sintetizate	3.1. Utilizarea metodelor de analiza caracteristice acestor compusi, IR, UV-VIS, TGA, EDX, SEM, TEM, Rx, RMN, pentru caracterizarea materialelor compozite sintetizate.	<u>Colaboratori interni:</u> - Univ. de Vest Timișoara - Univ. "Politehnica" Timișoara
Faza 4 Trim IV	4. Aplicatii ale hibrizilor sintetizati	4.1. Materialele compozite sintetizate se aplica in urmatoarele domenii: optica, mecanica electricitate, in domeniul energetic precum si al absorbtiei., medicina, biochimie. 4.2. Largirea ariei de aplicabilitate ale acestor materiale compozite.	<u>Colaboratori externi:</u> - 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

Tema 2.1.4. Reactii de esterificare, transesterificare si polimerizare ale compusilor continand heteroelemente (P,F,N), prin utilizarea microundelor sau a ultrasunetelor

Coordonator: Dr. Vasile Simulescu, CS III

Faza	Obiective	Activitati	Cercetători
------	-----------	------------	-------------

Faza 1 Trim I	1. Utilizarea acizilor fosfonici pentru obtinerea unor esteri cu fosfor prin folosirea microundelor	1.1. Sinteza unor esteri organici cu fosfor, prin folosirea microundelor pornind de la acizi fosfonici. 2.1. Stabilirea structurii compusilor astfel obtinuti, prin folosirea spectrometriei de masa cu sursa „electrospray” (ESI-MS), in diferiti solventi.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Vasile Simulescu - Dr. Gheorghe Ilia - Dr. Eleonora Crăsmăreanu <u>Colaboratori externi:</u> - Univ. de Vest Timișoara - Univ. Tehnica Brno, Republica Cehă, Prof. Miloslav Pekař - Institute of Chemical Research of Catalonia, Tarragona, Spania, Dr. Sorin Sauca
Faza 2 Trim II	2. Utilizarea acizilor fosfonici pentru obtinerea unor esteri cu fosfor prin folosirea ultrasunetelor	1.1. Sinteza unor esteri organici cu fosfor, prin folosirea ultrasunetelor, pornind de la acizi fosfonici. 2.1. Stabilirea structurii compusilor astfel obtinuti, prin folosirea spectrometriei de masa cu sursa „electrospray” (ESI-MS), in diferiti solventi.	
Faza 3 Trim. III	3. Obținerea unor polimeri care contin heteroelemente (P,F,N) prin reactii de polimerizare utilizand microunde	3.1. Sinteza unor polimeri continand heteroelemente (P,F,N) prin folosirea microundelor. 3.2. Verificarea solubilitatii polimerilor sintetizati.	
Faza 4 Trim IV	4. Obținerea unor polimeri care contin heteroelemente (P,F,N) prin reactii de polimerizare utilizand microunde	4.1. Analiza polimerilor obtinuti prin spectrometrie de masa si SEC-MALLS („size exclusion chromatography - multi angle laser light scattering), in solutii apoase.	

Tema 2.1.5. Obținerea de noi structuri de iminofosforani pornind de la azide

Coordonator: Dr.Mihaela Petric, CS

Faza	Obiective	Activitati	Cercetători
Faza 1 Trim I	1.Obținerea de iminofosforani pornind de la difenilfosforil azida	1.1 Sinteza difenilfosforilazidei cu difosfine. 1.2. Stabilirea condițiilor optime de reacție: raport molar reactanți, temperatura, solvenți.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Manuela Crisan - Dr. Gheorghe Ilia <u>Colaboratori externi:</u> - Institutul de Fizică Aplicată-Chișinău, Moldova
Faza 2 Trim II	2. Caracterizarea compusilor noi sintetizati prin FT-IR, MS-ESI, RMN	2.1 Caracterizarea compusilor noi sintetizati prin FT-IR 2.2 Caracterizarea compusilor noi sintetizati prin MS-ESI 2.3 Caracterizarea compusilor noi sintetizati prin RMN	
Faza 3 Trim III	3. Caracterizarea compusilor noi sintetizati prin analiza termica (TG, TGA, DTA, DSC), RX	3.1 Caracterizarea compusilor noi sintetizati prin analiza termica (TG, TGA, DTA, DSC), RX. 3.2 Determinarea structurii cristaline si moleculare pentru monocristalele obtinute.	
Faza 4 Trim. IV	4. Identificarea de noi aplicatii a iminofosforanilor sintetizati (ex. domeniul farmaceutic)	4.1. Caracterizarea structurala de noi forme solide (ex. forme polimorfe) ale noilor iminofosforani sintetizati. 4.2. Calcule cuanto-chimice ale geometriilor moleculare.	

Denumirea Proiectului 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. Noi aplicatii ale polimerilor modificati chimic cu grupari pendante cu fosfor si azot	1.1. Recuperarea derivatilor fenolici (ex. fenol, 2,4,6-trimetil-fenolului) din solutii apoase reziduale folosind adsorbanti de tip stiren-divinilbenzen modificati chimic cu grupari de tip fosfonat. 1.2. Studierea variatiei parametrilor de lucru (viteza de agitare, temperatura) in vederea stabilirii conditiilor optime pentru indepartarea poluantilor fenolici. 1.3. Studiul izotermelor de adsorbție (ex. Langmuir si Freundlich).	<u>Colectiv</u> - Dr. Adriana Popa - Dr. Smaranda Ilescu - Dr. Lavinia Macarie - Dr. Aurelia Visa - Dr. Bianca Maranescu <u>Colaboratori interni:</u> -Dr. Simona Funar-Timofei
Faza 2 Trim.II	2. Modificarea chimica a polimerilor cu grupari pendante cu fosfor si azot, prin metoda „cataliza cu transfer interfazic”	2.1. Studii de modificare chimica cu grupari de tip aminoacid a copolimerilor de tip stiren-divinilbenzen (ex. reactia cu acid α -amino- β -tio-propanoic). 2.2.Determinarea parametrilor de sinteza: temperatura, timp de sinteza pentru obtinerea unui grad de functionalizare, continut de fosfor si randament optim a produselor.	-Dr. Gheorghe Ilia <u>Colaboratori externi:</u> - Universitatea Politehnica Timisoara - Universitatea de Vest Timisoara -Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni” Iasi
Faza 3 Trim.III	3. Studii experimentale ale polimerilor modificati chimic cu grupari pendante cu fosfor si azot, sintetizati prin metoda cu ultrasonare	3.1. Studiul teoretic si experimental al polimerilor de tip stiren-divinilbenzen modificati cu “oniu” prin ultrasonare si testarea lor preliminara ca si sorbanti. 3.2. Studierea parametrilor de lucru (temperatura, viteza de agitare, timp) in vederea stabilirii conditiilor optime pentru indepartarea metalelor grele din apele reziduale. 3.3. Studiul izotermelor de adsorbție (ex. Langmuir si Freundlich).	- Institutul de Chimie Fizica „I. Murgulescu” Bucuresti - Facultatea de Medicina Veterinara - Dr. Mercedes Diaz Somoano, Instituto Nacional del Carbon - CSIC, Oviedo, Spania
Faza 4 Trim.IV	4. Modificarea chimica a suporturilor polimere prin tehnica de iradiere cu microunde	4.1. Studii teoretice si experimentale utilizand tehnica de iradiere in grefarea gruparilor active cu fosfor pe suporturi polimerice. 4.2. Determinarea gruparilor pendante din produsele obtinute prin analize fizico-chimice si statistice a gruparilor functionale din polimerul modificat chimic.	- Institute of Polymer Chemistry, Nankai University: Prof. Tianying Gu

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.Noii polimeri cu fosfor obtinuti prin policondensare prin iradiere cu microunde (MW)	1.1. Polifosfonat (P)obtinut prin policondensarea fenilclorfosfonatului cu 4,4'(hexafluoroisopropylidene)diphenol (bisphenol AF) 1.2.Caracterizarea polifosfatului prin IR, ¹ H-RMN, mase molare, analiza termica, indice de inflamabilitate.	<u>Colectiv</u> - Dr. S. Iliescu, - Dr. A. Popa - Dr. L. Macarie - Dr. N. Plesu - Dr. A. Visa - Dr. B. Maranescu
Faza 2 Trim.II	2. Membrane polimerice pe baza de polifosfonat P	2.1. Obtinerea membranei polimerice prin complexarea polimerului P cu triflat de Li. 2.2. Caracterizarea membranei polimerice prin indice de inflamabilitate si conductivitate ionica.	<u>Colaboratori interni:</u> - Dr. G. Ilia <u>Colaboratori externi:</u>
Faza 3 Trim.III	3. Polimeri cu fosfor si sulf obtinuti prin iradiere cu microunde	3.1. Obtinerea polimerului cu fosfor si sulf (PS)prin policondensarea MW a hexylphosphonic dichloride (HFD) cu 4,4'-tiophenol (TDF). 3.2. Caracterizarea polimerului PS prin IR, ¹ H-RMN, mase molare, analiza termica, indice de inflamabilitate.	- Universitatea Politehnica Timisoara - Universitatea de Vest Timisoara -Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni” Iasi
Faza 4 Trim.IV	4. Membrane polimerice pe baza de polimer PS	4.1. Obtinerea membranei polimerice prin complexarea polimerului PS cu triflat de Li. 4.2. Caracterizarea membranei polimerice PS prin indice de inflamabilitate si conductivitate ionica.	- 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 polimeri cu grupari fosfonice in catena laterala, prin copolimerizare cu monomeri derivati ai acidului vinilfosfonic, vinilalcoxisilani, vinilimidazoli	1.1. Sinteze de copolimeri cu grupari fosfonice in catena laterala prin polimerizare fotoinitiata pentru a obtine pelicule. 1.2. Studii privind influenta naturii si continutului de comonomeri.	<u>Colectiv:</u> Dr. Lavinia Macarie Dr. Smaranda Iliescu Dr. Adriana Popa
Faza 2 Trim. II	2. Obtinerea de polimeri cu grupari fosfonice in catena laterala, prin copolimerizare cu monomeri derivati ai	2.1. Studiul polimerizarii in microunde, termic sau ultrasunete asupra formularilor de comonomeri 2.2. Utilizarea de monomeri/oligomeri,	Dr. Nicoleta Plesu Dr. Milica Tara-Lunga Mihali

	acidului vinilfosfonic, vinilalcoxisilani, vinilimidazoli	fotoinitiatori/sisteme de fotoinitiere si a comonomerilor reactivi derivati ai acidului vinilfosfonic, vinilalcoxisilani, vinilimidazoli, pentru a obtine un sistem fotoreticulabil.	<u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Gh. Ilia <u>Colaboratori externi:</u> - Universitatea Politehnica Timisoara - Universitatea de Vest Timisoara - Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni” Iasi - Cape Peninsula University of Technology, Cape Town, Africa de Sud
Faza 3 Trim.III	3.Caracterizarea polimerilor prin metode fizico-chimice.	3.1. Utilizarea spectroscopiei FTIR si a analizei termice pentru monitorizarea polimerizarii /copolimerizarii. 3.2. Determinarea preliminara a proprietatilor ionice sau anticorozive.	- Universitatea de Studii Tehnologice si Economice Budapesta, Ungaria - Universitatea Tehnologica Brno
Faza 4 Trim.IV	4. Analiza si caracterizarea materialelor peliculogene obtinute, prin metode fizico-mecanice, termice (DSC, TGA) si evaluarea proprietatilor ionice/conductoare (EIS) si ignifugante (LOI).	4.1. Determinarea proprietatilor mecanice, chimice si optice ale peliculelor polimerice obtinute. 4.2. Determinarea proprietatilor ionice/ conductoare (EIS) si ignifugante ale peliculelor (LOI). 4.3. Utilizarea microscopiei electronice in studiul particularitatilor peliculelor obtinute.	

Tema 2.2.4. Conductorii 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 electrozi modificati pe baza de polianilina	1.1. Prepararea electrochimica a unor electrozi modificati pe baza de polianilina (PANI). Stabilirea conditiilor de electropolimerizare. 1.2. Studii privind influenta naturii acidului folosit in sistemul solvent-electrolit suport	<u>Colectiv:</u> - Dr. Nicoleta Plesu - Dr. Milica Tara-Lunga Mihali - Dr. Lavinia Macarie - Dr. Smaranda Iliescu
Faza 2 Trim.II	2. Caracterizarea electrozilor sintetizati. Modelarea datelor experimentale.	2.1. Caracterizarea filmelor de Pani depuse pe electrod prin ATR, SEM. 2.2.Caracterizarea filmelor de PANI obtinute prin voltametrie ciclica (CV) si spectroscopie de impedanta (EIS).	<u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Manuela Crisan <u>Colaboratori externi:</u> -Univ. Politehnica Timisoara, -Univ. Vest Tim -INCDEMC Timisoara
Faza 3 Trim.III	3. Investigarea voltametrie ciclica (CV) a unor compusi organici si/sau element organici, hibridi organici anorganici	3.1. Interpretarea datelor de voltametrie ciclica. 3.2. Modelarea datelor de spectroscopie de impedanta.	

Faza 4 Trim.IV	4. Investigarea prin spectroscopie de impedanta a unor compusi organici si/sau element organici, hibrizi organici anorganici	4.1. Studiul proprietatilor electrice ale unor compusi organici si/sau element organici, hibrizi organici anorganici prin spectroscopie de impedanta (EIS). 4.2. Modelarea datelor EIS. 4.3. Interpretarea datelor EIS.	
---------------------------	--	---	--

Denumirea Proiectului 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 din seria lantanidelor			
Coordonator: Dr. Aurelia Visa, CSII			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1 Trim. I	1. Analiza structurala a rețelelor metal organice fosfonice	1.1 Efectuarea unui set de lucru bazat pe structuri de raze X ale rețelelor metal organice fosfonice cu metale trivalente din seria lantanidelor 1.2 Analiza structurii si potentialele aplicatii ale acestor rețele.	<u>Colectiv:</u> Dr. Aurelia Visa Dr. Bianca Maranescu Dr. Smaranda Iliescu
Faza 2 Trim II	2. Sinteze de rețele metal organice fosfonice cu metale trivalente din seria lantanidelor	2.1. Sinteze de rețele metal organice fosfonice 2.2. Studiul influentei factorilor fizico-chimici: temperatura, stoichiometria reactiei si a pH-ului 2.3 Efectuarea de sinteze hidrotermale pe baie de apa/ulei, in autoclava si la microunde.	<u>Colaboratori interni:</u> Dr. Luminita Crisan <u>Colaboratori externi:</u> - INEMC Timisoara, Dr. Alexandra Bucur
Faza 3 Trim III	3. Sinteze de rețele metal organice carboxilice cu metale trivalente din seria lantanidelor	3.1. Sinteze de rețele metal organice carboxilice. 3.2. Studiul influentei factorilor fizico-chimici: temperatura, stoichiometria reactiei si a pH-ului la formarea rețelelor metal organice cu metale trivalente. 3.3 Efectuarea de sinteze hidrotermale pe baie de apa/ulei, in autoclava si la microunde.	- Universitatea din Leipzig, Germania, Prof Joerg Matysik - Universitatea Ca`Foscari, Venetia, Italia, Prof. Dr. Pietro Tundo
Faza 4 Trim. IV	4. Caracterizarea fizico-chimica si structurala a rețelelor metal organice sintetizate	4.1. Caracterizarea compusilor sintetizati prin TG, FT-IR si difractie de raze X. 4.2. Investigarea interactiunilor generate in rețeaua cristalina	- Universitatea din Malaga, Prof. dr. Aurelio Cabeza - Universitatea din Creta, Grecia Prof. Dr. Konstantinos Demadis

Tema 2.3.2. Polimeri de coordinație conținând grupări fosfonice și metale bivalente 3d			
Coordonator: Dr. Bianca Maranescu, CSIII			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim. I	1. Sinteza de noi polimeri de coordinație utilizând tehnici de sinteză hidrotermală	1.1. Sinteza de noi serii de polimeri de coordinație variind ionul metalic bivalent 3d în reacția cu același acid fosfonic. 1.2. Optimizarea condițiilor de sinteză prin varierea temperaturii, a pH-ului și a raportului molar între reactanți	<u>Colectiv:</u> Dr. Bianca Maranescu Dr. Aurelia Visa Dr. Adriana Popa <u>Colaboratori externi:</u>
Faza 2 Trim. II	2. Sinteza de noi polimeri de coordinație utilizând tehnici de sinteză hidrotermală	2.1. Sinteza de noi serii de compuși variind acidul fosfonic în reacția cu același ion metalic bivalent 3d. 2.2. Optimizarea condițiilor de sinteză prin varierea temperaturii, a pH-ului și a raportului molar între reactanți	- Universitatea Politehnică Timișoara, Dr. Valentin Maranescu - University of Crete Heraklion, Department of Chemistry, Greece Prof. Dr. Konstantinos Demadis
Faza 3 Trim. III	3. Caracterizarea fizico-chimică a compusilor obținuți	3.1. Punerea în evidență a atribuirilor structurale prin tehnici și metode de analiză fizico-chimică (analiza elementară, analiză termo-gravimetrică, spectroscopie de raze X, spectroscopie IR) pentru compușii sintetizați. 3.2. Evidențierea structurii cristaline a compusilor noi sintetizați prin microscopie electronică de baleaj.	- Institutul Național de C&D pentru Electrichimie și Materie Condensată Timișoara Dr. Alexandra Bucur
Faza 4 Trim. IV	4. Precizarea proprietăților electrice prin determinarea experimentală a conductivității polimerilor de coordinație	3.1. Identificarea experimentală a tipului de conducție. 3.2. Determinarea energiei de activare utilizând caracteristica Arrhenius. 3.3. Determinarea dependenței de temperatură și umiditate a conductivității.	

Denumirea Proiectului nr. 2.4: Compusi azo multifunctionali - 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	1. Studii privind sinteza compusilor cu functiune azo.	1.1. Sinteza de azo compusi alternativi, netoxici. 1.2 Purificarea compuşilor azo sintetizati	<u>Colectiv</u> - Dr. Radulescu-Grad M. - Dr. Muntean S.G. - Dr. Halip L. - Dr. Sasca Viorel - Drd. Andelescu A.
Faza 2 Trim. II	2. Studii privind sinteza complexilor azo metalici	2.1. Stabilirea conditiilor optime de sinteza ale colorantilor metal complexi 2.2. Obtinerea de noi combinatii complexe ale azoliganzilor.	
Faza 3 Trim. III	3.Caracterizarea compusilor cu functiune azo si a colorantilor metal complexi.	3.1. Utilizarea metodelor specifice de analiza, TLC, HPLC, spectroscopie IR, UV-Vis, MS, ¹³ C-RMN, pentru caracterizarea compusilor azo sintetizati. 3.2. Caracterizarea complexilor azo liganzi prin UV-Vis, IR, AAS, analiza termica	<u>Colaboratori externi:</u> - 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 4 Trim. IV	4. Studiul proprietatilor de agregare si culoare a colorantilor si a complexilor metalici ai acestora	4.1. Studiul experimental de culoare al compusilor cu functiune azo. 4.2. Studiul teoretic de culoare al compusilor cu functiune azo. 4.3. Studiul experimental al agregarii compusilor cu functiune azo. 4.4. Studiul teoretic al agregarii compusilor cu functiune azo.	

Tema 2.4.2. Metodologii pentru combaterea poluarii cu compusi azo si metale grele. Aplicatii in protectia mediului.			
Coordonator: Dr. Ing. Simona Gabriela Muntean, CS II			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1 Trim. I	1. Investigarea unor compusi minerali in tratarea apelor reziduale	1.1. Studiul experimental al indepartarii coloranţilor din solutii apoase, folosind compusi minerali pe baza de carbune activ si diatomit. Influenta naturii si cantitatii de sorbant. 1.2. Studiul experimental al indepartarii coloranţilor din solutii apoase, folosind compusi	<u>Colectiv</u> - Drd. Nistor M.A. - Drd. Andelescu A. - Dr. Muntean S.G.

		<p>pe baza de carbune activ si diatomit. Influenta concentratiei.</p> <p>1.3. Studiul experimental al indepartarii ionilor metalici (Cu, Cd, Zn) din solutii apoase, folosind compusi pe baza de carbune activ si diatomit. Influenta naturii si cantitatii de sorbant.</p> <p>1.4. Studiul experimental al indepartarii ionilor metalici (Cu, Cd, Zn) din solutii apoase, folosind compusi pe baza de carbune activ si diatomit. Influenta concentratiei.</p>	<p><u>Colaboratori externi:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> - UPT, Facultatea de Chimie Industriala si Ingineria Mediului - Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni” Iasi - Institutul de Chimie al Academiei de Stiinte a Moldovei
Faza 2 Trim. II	2. Studiul experimental al adsorbției poluantilor cu aplicații în protecția mediului.	<p>2.1. Studiul experimental al îndepărtării coloranților din soluții apoase, folosind nanocompozite magnetice. Influența naturii sorbantului</p> <p>2.2. Studiul experimental al îndepărtării coloranților din soluții apoase, folosind nanocompozite magnetice. Influența concentrației poluantului.</p> <p>2.3. Studiul experimental al îndepărtării ionilor metalici, folosind nanocompozite magnetice. Influența naturii sorbantului.</p> <p>2.4. Studiul experimental al îndepărtării din soluții apoase a ionilor metalici folosind nanocompozite magnetice. Influența concentrației.</p>	
Faza 3 Trim. III	3. Studiul teoretic (cinetic, termodinamic) al adsorbției.	<p>3.1. Studiul cinetic al adsorbției coloranților folosind suporturi funcționalizate.</p> <p>3.2. Studiul cinetic al adsorbției ionilor metalici folosind suporturi funcționalizate.</p> <p>3.3. Studiul termodinamic al adsorbției coloranților folosind sorbanti specifici.</p> <p>3.4. Studiul termodinamic al adsorbției ionilor metalici folosind sorbanti specifici.</p>	
Faza 4 Trim. IV	4. Testarea eficienței sorbanților în cicluri de adsorbție-desorbție	<p>4.1. Studiul eficienței sorbanților specifici pentru îndepărtarea coloranților în cicluri de adsorbție-desorbție succesive.</p> <p>4.2. Studiul eficienței sorbanților specifici pentru îndepărtarea ionilor metalici în cicluri de adsorbție-desorbție succesive.</p>	



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. Chim. Otilia COSTIȘOR

Programul de cercetare nr. 3-2017

CHIMIA SI APLICATIILE COMPUSILOR TETRAPIROLICI DIN CLASA PORFIRINELOR

Coordonator : Dr. Ing. Eugenia FĂGĂDAR-COSMA

Denumirea Proiectului 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. Eugenia Făgădar-Cosma, 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.	1. Obținerea de noi porfirine simetric și asimetric mixt-substituite, aplicând variante ale metodelor multicomponente	1.1. Obținerea, separarea și purificarea de noi structuri asimetrice, mixt substituite la nucleul fenilic cu grupe cu efect donor de electroni 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 pentru realizarea de electrozi pe diferite suporturi.	<u>Colectiv:</u> -Dr. Ing. CSI Eugenia Fagadar-Cosma, - Dr. Ing. CSIII Anca Lascu - Drd. Ing. CS Creangă Ionela. - Drd. Chim. CS Palade Anca <u>Colaboratori externi:</u> - Universitatea "Politehnica" Timișoara, - Univ. de Vest Timișoara - Institutul National de Electrochimie și Materie Condensata - Institutul National C&D pentru Fizica Materialelor Bucuresti-Magurele
	2. Obținerea complexilor porfirinelor cu metale tranzitionale 3d.	2.1. Sinteza combinațiilor complexe cu Zn(II), Co(II), Fe (III) și Mn (III) cu liganzi de tipul porfirinelor	
Faza 2 Trim II	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 diversi solvenți. 3.3. Studiul influenței fazei staționare și a naturii/compoziției fazei mobile asupra separării derivaților porfirinici prin HPLC la scara analitică și preparativă.	-Institutul National de Cercetare-Dezvoltare pentru Stiinte Biologice Bucuresti -Universitatea de Medicina si Farmacie "Victor Babes" Timisoara - INCDTIM, Cluj-Napoca

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 componența 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, inclusiv gaze.	<u>Colaborări internaționale:</u> - Faculty of Pharmacy, Collegium Medicum, Nicolaus Copernicus University, Bydgoszcz, Polonia - Atos Research- Barcelona, Spania. - Institute of Macromolecular Compounds Russian Academy of Sciences, - Instituto Tehnologico de la Energia, Valencia, Spania. -The Fundació Institut Català d'Investigació Química, Spain
Faza 4 Trim IV	5. Investigarea proprietăților electrochimice ale porfirinelor și metaloporfirinelor. Stratouri subțiri cu aplicații în senzorială și inhibarea coroziunii.	5.1. Studiu de comportament electrochimic (studii de inhibare a coroziunii, prin metode electrochimice).	
	6. Teste de activitate biologică 7. Redactare lucrări-acțiuni de diseminare rezultate	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 obținute prin incorporarea de porfirine și metaloporfirine în matrici anorganice și/sau polimerice. Complexi coloidali cu nano-Ag/Au și porfirine. Investigarea proprietăților optice.
Coordonator: Dr. Anca Lascu, CSIII

Faza	Obiective	Activități	Cercetători
Faza 1 Trim I	1. Obținerea și testarea micro și nano-materialelor fotochimic active obținute prin imobilizarea porfirinelor pe matrici anorganice și/sau polimerice prin tehnici de sinteză	1.1. Imobilizarea porfirinelor divers funcționalizate pe matrici anorganice de tip oxid și/sau polimerice și pe nanotuburi de carbon. 1.2. Obținerea de complecși coloidali porfirine-nanoAg/Au cu domeniu larg de absorbție UV-vis (controlul dimensiunii și formei nanoparticulelor).	<u>Colectiv:</u> -Dr. Ing. CSIII Anca Lascu -Ing. drd. CS Ionela Creangă -Chim. drd. CS Anca Palade -Dr. Ing CSI Eugenia Fagadar-Cosma <u>Colaboratori externi:</u> - Institutul Național de Electrochimie

Faza 2 Trim II	organica, coloidală și sol-gel 2. Identificarea factorilor de risc și analiza cailor alternative pentru obținerea materialelor cu proprietăți plasmonice și optice avansate.	2.1. Caracterizarea prin tehnici microscopice (SEM, TEM, AFM, topografie), analiza termică, UV-vis, FT-IR, BET și fluorescența a materialelor hibride obținute. 2.2. Studii privind topografia suprafețelor și capacitatea de detecție comparativ cu porfirinele corespunzătoare libere	și Materie Condensată - National Institute for Lasers, Plasma and Radiation Physics Lasers Department Bucharest-Magurele <u>Colaborări internaționale:</u> - Faculty of Pharmacy, Collegium Medicum, Nicolaus Copernicus University, Bydgoszcz, Polonia - University of Liege - Istituto per lo Studio delle Macromolecole - CNR, Milano,
Faza 3 Trim III	3. Caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute. Identificarea de noi aplicații.	3.1. Testări preliminare ale proprietăților optice și biologice precum și ca materiale cu potențial în detecția/captarea de metale grele. 3.2. Aplicații în detecția de gaze și VOC. Investigatii comparative ale materialelor hibride nanoAu-porfirine și nanotuburi de carbon-porfirine.	
Faza 4 Trim IV	4. Redactare lucrări, brevetare	4.1. Minim 1 lucrare ISI; participare conferințe internaționale și naționale.	



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 COSTISOR

PROGRAMUL DE CERCETARE NR. 4 - 2017

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

Coordonator : Dr. Cseh Liliana

Denumirea Proiectului nr. 4.1: Liganzi și combinații complexe homo- și heteropolinucleare ale unor elemente 3d, precursori pentru: (1) materiale avansate; (2) sisteme supramoleculare cu implicații în: sistemele biologice și știința materialelor
Responsabil: Dr. chim. Otilia Costișor, CS I

Tema 4.1.1. Compuși organici și combinații complexe ale elementelor 3d precursori pentru sisteme moleculare și/sau supramoleculare			
Coordonator: Dr. Cseh Liliana, CS II			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1. Obținerea derivaților de tip simetric ai ciclohexanonei prin reacții de condensare cu benzaldehide substituie cu diferite grupări funcționale. 1.2. Obținerea combinațiilor complexe de cupru cu liganzi de tip baze Schiff	1.1.1. Studiul în mediu bazic 1.1.2. Studiul în mediu acid 1.1.3. Caracterizarea primară în scopul identificării produșilor de condensare obținuți 1.2.1. Sinteza combinațiilor complexe 1.2.2. Caracterizarea combinațiilor complexe prin IR, AE, UV-Vis.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Devesleanu-Corici Livia CS III - Dr. Pana Ana Maria CSIII - Dr. Szerb Elisabeta Ildyko CSII - Dr. Crețu Carmen CS III - Dr. Tudose Ramona CSII - Drd.Aparaschivei Diana AC - Drd. Buta Ildiko - Anamaria Ardelean
Faza 2 Trim.II	2.1 Optimizarea metodei de sinteză a derivaților de ciclohexanonă obținuți la act.1.1. 2.2. Caracterizarea combinațiilor complexe obținute în act. 1.2	2.1.1. Studiul influenței raportului molar și temperaturii asupra randamentului reacției. 2.1.2. Caracterizarea compușilor obținuți în scopul stabilirii purității și identificării structurilor: NMR, punct de topire, FTIR, XRD pe monocristale. 2.2.1. Studiul comportării termice 2.2.2. Caracterizarea compușilor în scopul identificării structurilor: XRD pe monocristale.	<u>Colaboratori externi:</u> - Univ. Politehnica Timișoara - Univ. din Calabria, Italia - INCEMC Timișoara - Universitatea Nova din Lisabona Portugalia, Facultatea de Știință și Tehnologie - Institutul de Chimie Macromoleculara “Petru Poni”, Iași - Universitatea Zhejiang Sci-Tech, Hangzhou, China

Faza 3 Trim.III	3.1. Studiul comportamentului compușilor obținuți în act. 2.1 pe tot domeniul de pH. 3.2. Obținerea de combinații complexe cu liganzi de tip baze Schiff și diverși co-liganzi	3.1.1. Studiul se va realiza prin spectroscopie UV-Vis. 3.2.1. Sinteza de noi combinații complexe utilizând diverși co-liganzi 3.2.2. Caracterizarea lor prin IR, AE, UV-Vis.	- Univ. Tehnica Viena, Austria - Univ. Leipzig, Germania
Faza 4 Trim.IV	4.1. Studiul proprietăților optice ale compușilor obținuți în act. 2.1. 4.2. Studiul proprietăților optice ale compușilor obținuți în act. 1.2 și 3.2	4.1.1 Spectroscopie de fluorescență 4.2.1. Spectroscopie de fluorescență	
Tema 4.1.2. Combinații complexe homo- și heteroleptice ale unor elemente 3d conținând liganzi de tip $N^{\wedge}N$, $O^{\wedge}O$ și $N^{\wedge}O$ cu proprietăți optice Coordonator: Dr. Szerb Elisabeta Ildyko, CS II			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1. Obținerea de liganzi de tip $N^{\wedge}N$ funcționalizați. 1.2. Obținerea de combinații complexe heteroleptice ale unor elemente 3d cu liganzi de tip $N^{\wedge}N$ și liganzi de tip $O^{\wedge}O$ sau $N^{\wedge}O$ cu cicluri aromatice extinse.	1.1.1. Sinteza liganzilor $N^{\wedge}N$ funcționalizați. 1.1.2. Optimizarea metodei de sinteză a liganzilor. 1.1.2. Caracterizarea compușilor obținuți prin spectroscopie RMN și IR. 1.2.1. Obținerea de precursori ai unor elemente 3d cu liganzi $N^{\wedge}N$. 1.2.2. Sinteza combinațiilor complexe heteroleptice. 1.2.3. Caracterizarea combinațiilor complexe prin AE, spectroscopie RMN, IR și RAMAN, conductivitate electrică molară.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Tudose Ramona CSII - Dr. Cseh Liliana CSII - Dr. Crețu Carmen CS III - Dr. Pana Ana-Maria CSIII -Drd. Andelescu Adelina AC <u>Colaboratori externi:</u> - Univ. Politehnica Timișoara - Univ. din Calabria, Italia - UMF Timisoara - Universitatea “Aurel Vlaicu”, Arad -Univ. Politehnica București - National Council of Research (CNR),

Faza 2 Trim.II	<p>2.1. Obținerea de combinații complexe ale unor elemente 3d cu liganzii obținuți la act. 1.1 conținând diverși contraioni.</p> <p>2.2. Studiul combinațiilor complexe heteroleptice obținute la act. 1.2.</p>	<p>2.1.1. Sinteza combinațiilor complexe. 2.1.2 Optimizarea metodei de sinteză a combinațiilor complexe. 2.1.3. Caracterizarea compușilor obținuți prin AE, spectroscopie RMN și IR, UV-Vis, conductivitate electrică molară.</p> <p>2.2.1 Caracterizarea structurală prin metode difractometrice și spectroscopice. 2.2.2 Determinarea stabilității termice 2.2.3. Determinarea proprietăților fotofizice.</p>	Institute of nanostructured materials (ISMN), Roma.
Faza 3 Trim.III	<p>3.1. Studiul proprietăților optice ale combinațiilor complexe obținute la act. 2.1.</p> <p>3.2. Studiul activității optice și biologice a combinațiilor complexe obținute la act.2.2.</p>	<p>3.1.1 Caracterizarea structurală prin metode difractometrice. 3.1.2 Determinarea proprietăților fotofizice.</p> <p>3.2.1 Determinarea proprietăților fotofizice 3.2.2 Determinarea activităților de tip antimicrobian, antivirale și/sau citostatică.</p>	
Faza 4 Trim.IV	<p>4.1. Studiul proprietăților mesogene ale combinațiilor complexe obținute la act. 2.1</p> <p>4.2. Funcționalizarea liganzilor de tip N^N și N^O</p>	<p>4.1.1. Caracterizare prin microscopie optică cu polarizare (POM). 4.1.2. Caracterizare prin analiza calorimetrică diferențială (DSC). 4.1.3. Difracție de raze X pe mezofază.</p> <p>4.2.1 Sinteza liganzilor funcționalizați 4.2.2 Caracterizarea prin AE, conductivitate electrică molară, spectroscopie IR, NMR și UV-Vis.</p>	

Denumirea Proiectului 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 direcționare clasici și lichide ionice, caracterizare și testări preliminare în aplicații biomedicale.

Coordonator: Dr. Ana-Maria Putz, CS III

Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1. Matrici obținute în prezența unor surfactanți clasici și lichide ionice imidazolice.	1.1. Sinteze sol-gel în prezența unor surfactanți cationici clasici și a lichidelor ionice imidazolice cu diferiți anioni. 1.2. Caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute.	<i>Colectiv:</i> -Ing. Drd. Catalin Ianasi, CS -Chim. Drd. Roxana Crisan As. C -Chim. Elena Piciorus, As. C
Faza 2 Trim.II	2. Materiale (superpara-) magnetice nanostructurate (oxizi de fier și nanocompozite) obținute prin coprecipitare și sol gel.	2.1. Sinteza oxizilor de fier și a nanocompozitelor. 2.2. Caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute.	<i>Colaboratori externi:</i> -Institutul National C&D pentru Electrochimie și Materie Condensată -Universitatea de Vest-Timișoara. Facultatea de Chimie-Biologie-Geografie:
Faza 3 Trim.III	3. Funcționalizarea unor materiale obținute în fazele anterioare și testări preliminare.	3.1. Funcționalizarea cu grupări: hidrofobe, amino și sulfhidril in situ și prin post procesare. 3.2. Caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute.	-Universitatea "Politehnica"-Timișoara. -Universitatea de Medicină și Farmacie "Victor Babes" Timișoara -Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni" , Iasi
Faza 4 Trim.IV	4. Teste preliminare de încărcare și descărcare, cu medicamente.	4.1. Evaluarea capacității de încărcare cu agenți farmacologici: captopril, ketoprofen și clotrimazol. 4.2. Studii comparative privind eficiența materialelor cu proprietăți de carier, amorf-ordonat, funcționalizat-nefuncționalizat;	-Inst. Chim. Anorg. Rez, Ac.Stiințe Republica Cehă;UChR.Cz -Inst. Fizica Stării Solide și Optica, Budapesta, Acad. Ungară de Științe.KFKI

Denumirea Proiectului nr. 4.3: Proiectarea la nivel molecular și sinteza de compuși cu activitate catalitică dirijată pentru reacții de transformare a substanțelor obținute din surse regenerabile în intermediari organici sau în surse de energie și pentru reacții de distrugere a unor poluanți.

Responsabil: Dr. ing Viorel Sasca, CS I

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	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1 Prepararea de suporturi-site mezoporoase pe bază de silice, tip SBA15, cu proprietăți adecvate pentru conversia CO ₂ .	1.1.1 Sinteze de suporturi (site mezoporoase tip SBA 15) cu proprietăți adecvate pentru depunerea de compuși solizi cu activitate catalitică potențială pentru conversia CO ₂ .	<u>Colectiv:</u> -Dr. ing. Alexandru Popa, CS II -Dr. chim. Orsina Verdeș, CS III -Dr. Ing. Mariana Suba, AC.
	1.2 Prepararea de compuși solizi cu activitate catalitică potențială pentru conversia CO ₂ prin suportare de faze active pe SBA15.	1.2.1 Sinteze de compuși solizi cu activitate catalitică potențială pentru conversia CO ₂ .	<u>Colaboratori externi:</u> -Institutul National de Cercetare Dezvoltare pentru Electrochimie si Materie Condensata-INCENM-Timisoara -Institutul de Fizică Atomică-Măgurele -Universitatea din Szeged și Grupul de Cercetare al Cineticii Reacțiilor și al Chimiei Suprafețelor al Academiei Maghiare de Științe - Prof. Andras Erdöhelyi.
	1.3 Caracterizarea compușilor sintetizați sub aspectele: compoziție chimică, comportare termică, structură și textură.	1.3.1 Determinarea compoziției compușilor sintetizați prin analiză termogravimetrică și spectroscopie de absorbție atomică în flacără. 1.3.2 Evaluarea stabilității termice a compușilor sintetizați. 1.3.3 Caracterizarea structurală a compușilor sintetizați prin spectroscopie IR, spectroscopie UV-Vis-DRS, analiza difractometrica. 1.3.4 Prelucrarea și interpretarea datelor experimentale, redactare comunicare pentru „Al 26-lea Simpozion de Analiză Termică și Calorimetrie (1 comunicare).	

Faza 2 Trim.II	2.1 Selectarea compușilor suportați cu proprietăți de adsorbție/desorbție ale CO ₂ la temperaturi relativ joase (100-400 °C).	2.1.1 Determinări experimentale de desorbție programată termic-TPD a CO ₂ pe compușii sintetizați cu metoda adaptată pentru analiza TG-DTA cuplata cu spectrometria de masa. 2.1.2 Determinări experimentale de desorbție -TPD a CO ₂ pe compușii sintetizați cu un microreactor cuplat on-line la GC-TCD.
	2.2 Evaluarea activității catalitice a compușilor suportați cu proprietăți de adsorbție/desorbție ale CO ₂ în reacția de conversie a CO ₂ cu H ₂ .	2.2.1 Testarea activității catalitice a compușilor sintetizați în reacția de conversie a CO ₂ cu H ₂ . 2.2.2 Prelucrarea datelor experimentale și selectarea catalizatorilor performanți.
Faza 3 Trim.III	3.1 Evaluarea activității catalitice a compușilor suportați cu proprietăți de adsorbție/desorbție ale CO ₂ în reacția de conversie a CO ₂ cu alcooli inferiori (metanol și etanol).	3.1.1 Testarea activității catalitice a catalizatorilor suportați în reacția de conversie a CO ₂ cu alcooli inferiori (metanol și etanol). 3.1.2 Studii de cinetica conversiei CO ₂ pe catalizatorii performanți. 3.1.3 Prelucrarea datelor de testare și calcule cinetice.
Faza 4 Trim.IV	4.1 Studiul dezactivării/regenerării catalizatorilor prin teste de activitate catalitică de durată și analiza termică a catalizatorilor testați cuplată cu spectrometria de masa.	4.1.1 Teste de activitate catalitică de durată mai mare la diferite temperaturi pe cei mai performanți catalizatori pentru studiul dezactivării și regenerării catalizatorilor. 4.1.2 Analiza termică a catalizatorilor testați cuplată cu spectrometria de masă pentru studiul dezactivării catalizatorilor
	4.2 Diseminarea rezultatelor cercetărilor prin redactarea de articole, comunicari, rapoarte și publicarea lor.	4.2.1 Stabilirea titlurilor și conținutului comunicărilor și articolelor, respectiv a manifestărilor și publicațiilor științifice la care vor fi prezentate rezultatele cercetărilor în 2018. 4.2.2 Redactarea rapoartelor de activitate și a programului de cercetare pe 2018.

Tema 4.3.2. Catalizatori suportați pentru reacția de conversie a alcoolilor alifatici inferiori (intensificarea proceselor chimice de conversie prin mărirea suprafeței specifice a catalizatorilor)

Coordonator: Dr. ing. Alexandru Popa, CS II

Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1 Sinteza unor suporturi de tip sită moleculară cu proprietăți texturale controlate (volum pori, mărimea porilor, suprafața specifică) prin utilizarea diferiților surfactanți și agenți de expandare a volumului porilor.	1.1.1 Sinteza sitelor moleculare prin metoda sol-gel cu utilizarea diferiților surfactanți și agenți de expandare a volumului porilor	<p><u>Colectiv:</u> Dr.ing. V. Sasca Dr. O. Verdeș, Dr. Ing M. Suba</p> <p><u>Colaboratori externi:</u> -Institutul National de Cercetare Dezvoltare pentru Electrochimie și Materie Condensata–INCEMC-Timisoara -Universitatea din Szeded și Grupul de Cercetare al Cineticii Reacțiilor și al Chimiei Suprafețelor al Academiei Maghiare de Științe -Prof. Andras Erdöhelyi. -Universitatea din Belgrad</p>
	1.2 Funcționalizarea suporturilor de silice de tip sită moleculară prin grefare cu ajutorul unor agenți de tipul amine primare, secundare și terțiare (ex: 3-aminopropil-trietoxy-silane, 3-glycidiloxypopyl trimethoxy-silane).	1.2.1 Grefarea unor amine primare, secundare și terțiare în scopul funcționalizării suporturilor de silice de tip sită moleculară.	
	1.3 Sinteza unor compozite obținute prin grefarea unor heteropoliacizi puri (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 suporturile de silice funcționalizată cu amine obținute anterior.	1.3.1 Depunerea prin grefare a (HPA) pe silica funcționalizată și prepararea heteropolioxometalați depuși pe site moleculare la diferite grade de acoperire a suprafeței suportului; Utilizarea acestor HPA la reacția de conversie a etanolului și izopropanolului în scopul obținerii unor selectivități ridicate în etenă/acetaldehidă, respectiv propenă/propionaldehidă.	

Faza 2 Trim.II	2.1 Caracterizarea fizico-chimică a HPAs puri și depuși pe suport și a suporturilor de silice de tip sită moleculară grefate cu amine prin: difracție de raze X, spectroscopie IR și Raman, analiză termică TG-DTA cuplat cu spectrometrie de masă și DSC, măsurători de suprafață specifică și porozitate prin metoda BET, microscopie electronică SEM-EDS și TEM;	2.1.1 Determinarea proprietăților texturale a heteropolioxometalaților preparați prin măsuratori de suprafață specifică și porozitate prin metoda BET-BJH. 2.1.2 Caracterizarea structurală a heteropolioxometalaților depuși pe site moleculare prin: spectroscopie IR și Raman, analiză termică cuplată cu MS, analiză difractometrică la unghiuri mici, microscopie electronică SEM-EDS și TEM. 2.1.3 Prelucrarea și interpretarea datelor experimentale, redactare comunicări, postere pentru simpozioane științifice.	
Faza 3 Trim.III	3.1 Evaluarea proprietăților catalitice a HPAs depuși pe suport în reacția de conversie a alcoolilor inferiori și a oxizilor de carbon. Corelarea activității catalitice cu proprietățile texturale și structurale.	3.1.1 Stabilirea influenței metodei de preparare și a gradului de acoperire a HPA depuși pe suport asupra vitezelor de formare ale produșilor de reacție prin teste pe instalația în pulsuri de reactanți și în flux continuu. 3.1.2 Teste de activitate catalitică cu modificarea condițiilor de lucru pentru determinarea mecanismelor de reacție. 3.1.3 Prelucrarea și interpretarea datelor experimentale, redactare comunicări, postere pentru simpozioane științifice. 3.1.4 Calcularea vitezelor de formare a produșilor de reacție importanți și a bilanșurilor de materiale. 3.1.5 Formularea mecanismului de reacție și stabilirea relațiilor de corelare activitate catalitică-compoziție-structură-textură.	

Faza 4 Trim.IV	4.1 Prelucrarea și interpretarea datelor experimentale, redactarea comunicărilor, articolelor și rapoartelor de activitate.	4.1.1 Stabilirea conținutului și titlurilor comunicărilor și articolelor, respectiv a manifestărilor și publicațiilor științifice la care vor fi prezentate; redactarea comunicărilor și articolelor 4.1.2 Redactarea raportului de activitate și a programului pe 2018.	
-------------------	---	---	--