



Academia Română
Centrul de Chimie Organică "Costin D. Nenițescu"
Splaiul Independenței 202B, 060023 București 15, C.P. 254, ROMANIA
Tel. +(4021) 31 67 900 ÷ 902; Fax. +(4021)31 21 601

1. Plan 2019

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 1

“Chimie organică teoretică” – Program prioritar al Academiei Române
responsabil - dr.ing. Petru Filip

1.1. Modele QSAR-QSPR

- 1.1.1. Dezvoltarea de descriptori moleculari pe grafuri bazate pe descrieri de tip “valence bond”
- 1.1.2. Noi descriptori pentru proprietăți moleculare și programe de evaluare și utilizare a acestora în calcule QSAR-QSPR

1.2. Modelarea proceselor chimice prin metode quantice

- 1.2.1. Modelarea prin tehnici *ab initio* a unor mecanisme de reacție
- 1.2.2. Modelarea fenomenelor de pe suprafața catalizatorilor prin tehnici *ab initio*

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 2

Chimia hidrocarburilor și a derivaților lor funcționali
responsabil - dr.ing. Alexandru Razuș

2.1 Sinteze și proprietăți în seria unor hidrocarburi nesaturate, cuprinzând sau nu sisteme azulenice, ca atare sau condensate.

- 2.1.1. Condensari McMurry de compuși carbonilici azulenici
- 2.1.2. Comportare electrochimică a unor sisteme azulenice în condiții oxidative și de reducere
[Cooperare cu Universitatea Tehnică din Darmstadt, Germania]
- 2.1.3. Condensarea bazelor Schiff cu compuși care au în structura lor grupări metilenice active
[Cooperare cu Universitatea Tehnică din Darmstadt, Germania]
- 2.1.4. Sinteza și reacțiile unor alchene substituie cu grupări aril, heteroaril și azulenil
[Cooperare cu Universitatea Tehnică din Darmstadt, Germania]
- 2.1.5. Sinteze de saruri de azulenpiriliu

2.2. Studiul comportării olefinelor și cicloolefinelor în prezența unor catalizatori de metateză. [Cooperare internațională cu: Universitatea Ghent, Belgia; Academia Bulgara, Institutul de Polimeri; Universitatea Veszprem, Ungaria]

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 3

Chimia compușilor heteroatomici
responsabil - dr.ing. Petride Horia

3.1. Chiralitate. Inductie chirala si analiza prin RMN” - Proiect prioritar al Academiei Române

3.1.1. Tehnici VCD in determinarea configuratiei absolute a moleculelor chirale

3.1.2. Studiul reactiilor N-ilidelor. Mecanisme de reactie. izomerie elicoidala

a. Sinteza de noi derivați de pirolofenantrolina. Determinarea necoplanarității sistemului pirolofenantrolinic prin analiza de raze X.

b. Cicloaditia 1,3-dipolara dintre 1,10-fenantroliniu N-ilide si olefine activate

c. Endo si regioselectivitate în cicloaditia 1,3-dipolară dintre ftalaziniu N-ilide si maleimide substituie la dubla legatura

3.1.3. Compuși heterociclici chirali: sinteză, discriminare enantiomerică, determinarea configuratiei absolute

3.2. Compuși heterociclici mezoionici

3.2.1. Sinteza si reactiile compusilor cu structura mezoionica

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 4

Materiale noi

responsabil - dr.ing. Mircea Vuluga

5.1. Obținerea unor compozite organic-anorganic direct din sinteză prin reacții pe suport heterogen

[Colaborare internațională cu Laboratorul de Chimie și Procedee de Polimerizare LCPP-Lyon, Franța. proiectul CNRS 17023]

5.2. Noi compusi cu proprietati tensioactive, bacteriostatice, de cristale lichide si anticorozive avand la baza saruri de (bis)-piridiniu substituie cu lanturi alchilice lungi.

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 5

Program interdisciplinar de prevenire a fenomenelor cu risc major la scara națională.

Program Fundamental al Academiei Române

responsabil - dr.ing. Petru Filip

6.1. Cataliză heterogenă selectivă în chimia organică

6.2. Conversia biomasei în compuși organici de bază