



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

Plan de cercetare al Centrului de Chimie Organică pentru anul 2020

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. Condensări McMurry de compusi 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 Liege, Belgia; Academia Bulgară, 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 configurației absolute a moleculelor chirale
- 3.1.2. Studiul reacțiilor N-ilidelor. Mecanisme de reacție, izomerie elicoidală
- 3.1.3. Compuși heterociclici chirali: sinteză, discriminare enantiomerică, determinarea configurației absolute

3.2. Compuși heterociclici mezoionici

- 3.2.1. Sinteza și reacțiile compusilor cu structura mezoionica

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 4
Materiale noi
responsabil - dr.ing. Mircea Vuluga

4.1. Sisteme organice structurate 3D, cu proprietăți optice neliniare.

Cooperare cu École normale supérieure de Lyon, Laboratoire de Chimie, Dr Chantal ANDRAUD si Dr Patrice BALDECK, pentru microscopie confocala, microscopie SHG.

Cooperare cu University of Angers, Institute of Sciences and Molecular Technologies of Angers, Prof Bouchta SAHRAOUI, pentru stocare optica de date (gratings, imaging, holography)

Cooperare cu UPB, Prof I.Rau, Prof. F.Kajzar si cu INFLPR, Dr A.Petriș.

4.2. Noi sisteme organice de tip hidrogel, controlabile prin stimuli multipli.

Cooperare cu Univ Ghent, Dept Organic & Macromolar Chemistry, Supramolecular Chemistry Group, Prof. Richard Hoogenboom

Cooperare cu UPB, Prof. R.Stan, cu IBCP “N.Simionescu”, Dr. S Cecoltan, și cu INCDMM “Cantacuzino”, Dr. E.D.Giol

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

5.1. Cataliză heterogenă selectivă în chimia organică

5.2. Sinteze organice catalizate de schimbători de ioni

5.3. Conversia biomasei în compuși organici de bază

Director,

Dr.ing. Dumitru Mircea VULUGA