



ACADEMIA ROMÂNĂ
INSTITUTUL DE CHIMIE „CORIOLAN DRĂGULESCU”

Bd. Mihai Viteazu, nr. 24, RO-300223, Timișoara, România
tel: 0256-491818; fax: 0256-491824



Director,

Dr. Chim. Otilia COSTIȘOR

Programul de cercetare nr.1-2021

PROIECTAREA MOLECULARĂ ASISTATĂ DE CALCULATOR

Responsabil program: Dr. Liliana Pacureanu

***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**

<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.</i>			
<i>Coordonator: Dr. Ing. Simona Funar-Timofei, CSI</i>			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.1	1. Crearea unei baze de date de literatură pentru insecticide active față de afide.	1. Studiu de literatură privind activitatea insecticidă față de afide a pesticidelor. 1.2. Crearea unei baze de date de compuși și de date experimentale de activitate insecticidă față de afide. 1.3. Alegerea unei serii de insecticide în vederea efectuării unui studiu de QSAR. 1.4. Analiza conformațională a compușilor aleși.	- Dr. Ing. Simona Funar-Timofei, CSI - Dr. Ana Borota, CSIII - Dr. Sorin Avram, CSIII - Dr. Luminița Crișan, CSIII - Dr. Alina Bora, CSIII Colaboratori externi: - Natural Science Laboratory, Toyo University, Tokyo, Japonia (Prof. Dr. Takahiro Suzuki)
Faza 2 Trim.2	2. Studiu QSAR aplicat unor insecticide active față de afidele <i>Aphis craccivora</i> de fasoliță (<i>Vigna unguiculata</i>). prin metode de regresie liniare.	2.1. Calculul descriptorilor structurali ai insecticidelor alese. 2.2. Evaluarea cantitativă a activității insecticide prin aplicarea metodei regresiei liniare multiple (MRL). 2.3. Evaluarea cantitativă a activității insecticide prin aplicarea metodei proiecțiilor în structuri latente prin metoda celor mai mici pătrate (PLS).	

		2.4. Alegerea de modele robuste statistic și predictive pe baza mai multor criterii statistice de validare internă și externă.	
Faza 3 Trim. 3	3. Modelarea toxicității față de animale și a ecotoxicității pesticidelor prin metode chemometrice.	3.1. Studiu de literatură în vederea creării unei baze de date de toxicități acute a pesticidelor față de animale. 3.2. Alegerea unei serii de pesticide și calculul parametrilor structurali ai acestora pentru modelarea toxicității acute față de mamifere. 3.3. Analiza calitativă și cantitativă a datelor toxicologice alese și a parametrilor structurali calculați prin analiza componentelor principale și metode statistice.	
Faza 4 Trim. 4	4. Determinarea impactului pesticidelor asupra sănătății umane prin metode chemometrice.	4.1. Studiu de literatură pentru crearea unei baze de date toxicologice de referință referitor la expunerea pe termen lung a pesticidelor asupra sănătății umane. 4.2. Alegerea unei serii de pesticide și calculul parametrilor structurali ai acestora pentru modelarea dozei acute de referință a pesticidelor. 4.3. Analiza calitativă a datelor toxicologice alese și a parametrilor structurali prin analiza componentelor principale.	

Tema 1.1.2. Modelarea interacției receptorului estrogenic alfa cu diverși modulatori selectivi, implicați în tratamentul cancerului mamar			
Coordonator: Dr. Ramona Curpan, CS II			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.1	1. Generarea sistemelor receptor-ligand pentru diverși liganzi SERM.	1.1. Identificarea și extragerea structurilor proteice din baza de date PDB. 1.2. Analiza și prelucrarea structurilor pentru andocare moleculară. 1.3. Generarea structurilor mutante ale ER α și pregătirea structurilor pentru andocare moleculară.	- Dr. Ramona Curpăn, CSII - Dr. Liliana Halip, CSIII - Dr. Ana Borota, CSIII - Dr. Cristian Neanu, CSIII Colaboratori externi: - Prof. Dr. Craig Jordan University of Texas MD Anderson Cancer Center, USA
Faza 2 Trim. 2	2. Studiarea modului de legare a liganzilor nvestigați în situsul receptorului ER α .	2.1. Pregătirea structurilor liganzilor pentru andocare moleculară. 2.2. Andocarea rigidă și flexibilă a liganzilor în situsul de legare al receptorului ER α . 2.3. Evaluarea modelelor pentru identificarea conformației potrivite a receptorului.	- 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. 3	3. Pregătirea sistemelor nativ/mutant ER α -SERM.	3.1. Solvatarea sistemelor ligand-receptor pentru structurile native și mutante. 3.2. Echilibrarea sistemelor solvate. 3.3 Rularea simulărilor de dinamică moleculară pentru sistemele echilibrate.	

Faza 4 Trim. 4	4. Analiza traiectoriilor rezultate din dinamica moleculară.	4.1. Verificarea calității simulărilor prin monitorizarea energiilor de-a lungul traiectoriilor. 4.2. Monitorizarea parametrilor structurali: RMSD, distanțe, unghiuri, contacte, etc. 4.3. Clusterizarea traiectoriilor pentru identificarea conformațiilor reprezentative. 4.4. Analiza comparativă a traiectoriilor pentru conformațiile native și mutante.	
Tema 1.1.3. Studii in silico de potență și toxicitate a medicamentelor și compușilor agrochimici pe baza interacțiilor chimice-biologice. Coordonator: Dr. Ana Borota, CS III			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim. 1	1. Extragerea datelor despre specii, mutații și erbicide implicate în procesul de rezistență la inhibarea acetolactat sintetazei (ALS)	1.1. Identificarea speciilor de plante invazive care suferă mutații inductoare de rezistență erbicidă la nivelul enzimei ALS. 1.2. Analiza și clasificarea biotipurilor rezistente în funcție de tipul și numărul de mutații survenite. 1.3. Extragerea din „baza de date internațională a buruienilor rezistente la erbicide” și din literatura de specialitate a tuturor erbicidelor cunoscute pentru care a fost dobândită rezistența.	- Dr. Ana Borota, CSIII - Dr. Ing. Simona Funar-Timofei, CSI - Dr. Luminița Crișan, CSIII - Dr. Ramona Curpan, CSII - Dr. Liliana Halip, CSIII - Dr. Alina Bora, CSIII
Faza 2 Trim. 2	2. Generarea structurilor 3D pentru enzimele ALS	2.1. Identificarea celor mai potrivite proteine șablon pentru a fi utilizate	

		<p>în realizarea modelelor de omologie pentru enzimele ALS.</p> <p>2.2. Realizarea alinierilor secvențiale țintă-șablon cu ajutorul programelor Blast și T-Coffee.</p> <p>2.3. Construirea modelelor 3D pentru proteinele ALS în varianta mutată și sălbatică.</p>	
Faza 3 Trim. 3	3. Andocarea moleculară în modelele de omologie obținute	<p>3.1. Evaluarea calitativă a modelelor de omologie realizate.</p> <p>3.2. Rafinarea și îmbunătățirea calității structurilor proteice acolo unde este cazul.</p> <p>3.3. Andocarea setului cunoscut de erbicide pentru care buruienile au dobândit rezistență.</p> <p>3.4 Andocarea unei noi biblioteci de compuși naturali.</p>	
Faza 4 Trim. 4	4. Definirea caracteristicilor structurale diferențiale pentru variantele ALS mutate și cele sălbatice	<p>4.1. Compararea, analiza și interpretarea rezultatelor andocării în variantele ALS mutate și sălbatice.</p> <p>4.2. Propunerea unor noi compuși ecologici cu potențial erbicid.</p> <p>4.3. Diseminarea rezultatelor cercetării.</p>	
<p>Tema 1.1.4 Dezvoltarea, implementarea și testarea de aplicații pentru explorarea și analiza unor librării chimice</p> <p>Coordonator: Dr. Cristian Neanu, CS III</p>			
Faza	Obiectivul fazei	Obiective în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim. 1	1. Pregătirea seturilor de date din structurile de cristale	1.1. Extragerea și prelucrarea bazei de date cu structuri macromoleculare RCSB PDB.	-Dr. Cristian Neanu CS III - Dr. Sorin Avram CS III - Dr. Ramona Curpăn CS II

		1.2. Identificarea parametrilor experimentali lipsa (sau eronati) care cauzeaza erori la obtinerea DPI.	- Dr. Ana Borota CS III
Faza 2 Trim. 2	2. Generarea indicatorilor DPI pentru RCSB PDB	2.1. Aplicarea unui algoritm de calcul al DPI la întreaga bază de date. 2.2. Identificarea unor solutii pentru obtinerea DPI in situatiile in care formulele Cruickshank si Blow nu dau rezultate. 2.3. Aplicarea solutiei propuse la proteinele cu eroare la calcularea DPI.	
Faza 3 Trim. 3	3. Evaluare indicatori DPI si Ql. Analize comparative.	3.1. Evaluarea bazei de date proteice cu DPI. 3.2. Evaluarea bazei de date proteice cu Ql. 3.3. Compararea calitatii structurilor de raze X depozitate in PDB prin cei 2 indici.	
Faza 4 Trim. 4	4. Identificarea unor criterii pentru alegerea cristalelor pentru chimia computațională	4.1. Studiu comparativ ai indicatorilor DPI si Ql. 4.2. Analize de similaritate si corelare intre cei 2 indici. 4.3. Identificarea unor criterii pentru alegerea cristalelor pentru chimia computațională.	

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

Responsabil: Dr.ing. Liliana Păcureanu, CS II

Tema 1.2.1 Clasificarea receptorilor GPCR pe baza zonei de contact dintre aceștia și proteinele G

Coordonator: Dr. Liliana Halip, CSIII

Trim.	Obiective	Activități	Executanti
Faza 1 Trim 1	1. Determinarea tiparului de aminoacizi ai proteinelor G responsabil pentru cuplarea cu receptorii GPCR.	1.1 Studiu de literatură și documentare privind cuplarea receptorilor GPCR cu proteinele G. 1.2. Extragerea informației despre fragmentele de proteine G responsabile de cuplarea cu receptorii GPCR 1.3 Alinierea secvențială a proteinelor G. 1.4 Stabilirea tiparelor pentru cuplarea cu receptorii GPCR	Dr. Liliana Halip, CS III Dr. Ramona Curpăn, CS II Dr. Ana Borota, CS III Dr. Alina Bora, CS III Dr. Sorin Avram, CS III <i>Colaboratori externi:</i> Universitatea New Mexico School of Medicine, Albuquerque, USA (Prof. Dr. Tudor I. Oprea, Dr. Cristian G. Bologna).
Faza 2 Trim 2	2. Clasificarea filogenetică a fragmentelor intracelulare a receptorilor GPCR.	2.1 Delimitarea zonei intracelulare din alinierea GPCR. 2.2 Obținerea alinierii zonei intracelulare a receptorilor GPCR umani. 2.3 Generarea matricilor de similaritate și distanță. 2.4. Clusterizarea ierarhică a fragmentelor intracelulare GPCR	
Faza 3 Trim 3	3. Atribuirea zonelor de contact dintre receptor GPCR și proteina G	3.1 Identificarea proteinei G specifice fiecărui receptor GPCR 3.2 Estimarea zonelor de contact cu proteina G pentru fiecare receptor uman 3.3 Ansamblarea informației despre zona de contact receptor GPCR-	

		proteină G	
Faza 4 Trim 4	4. Clasificarea receptorilor GPCR pe baza descriptorilor interfatei receptor GPCR-proteina G	4.1. Generarea unor descriptori pentru zona de contact 4.2. Obținerea unor modele de clasificare 4.3 Evaluarea performanțelor modelelor obținute	
Tema 1.2.2. Proiectarea de compuși noi eficienți în tratarea infecțiilor virale și/sau inflamatorii Coordonator: Dr. Alina Bora, CSIII			
Trim.	Obiective	Activități	Executanți
Faza 1 Trim 1	1. Studiu de literatură în vederea stabilirii protocolului de lucru	1.1. Identificarea țintelor biologice cu implicare virală și/sau inflamatorie 1.2. Căutare medicamente aprobate cu rol viral și/sau inflamator 1.3. Stabilirea criteriilor de selecție a compușilor și/sau structurii șablon și țintelor biologice	Dr. Alina Bora CS III Dr. Sorin Avram CS III Dr. Liliana Păcureanu CS II Dr. Luminița Crișan CS III Dr. Liliana Halip CS III Dr. Ramona Curpăn CS II
Faza 2 Trim 2	2. Definitivarea setului de compuși și/sau structurii(lor) șablon și a țintelor biologice	2.1. Compilarea setului de compuși și/sau a structurii șablon și a țintelor biologice folosite în procesul de andocare 2.2. Selectarea librăriei(ilor) de compuși utilizate pentru <i>screeningul</i> virtual 2.3. Pregătirea librării(lor) de compuși și a structurilor de start (verificare, filtrare, standardizare, optimizare, etc)	Colaboratori externi: University of Mexico School of Medicine, Albuquerque, USA (Prof. Dr. Tudor I. Oprea, Dr. Cristian G. Bologa).
Faza 3 Trim 3	3. Căutari de similaritate bazate pe lingand	3.1. <i>Screening</i> virtual aplicat librării(lor) de date selectate, folosind ligandul șablon	

		3.2. Prezicerea proprietăților farmacocinetice (ADME) și toxicologice pentru compuși prioritizați 3.3. Evaluarea rezultatelor în urma prezicerii proprietăților ADME/Tox prin comparație cu structura/structurile șablon	
Faza 4 Trim 4	4. Andocarea moleculară a compușilor prioritizați sau a medicamentelor repoziționate	4.1. Andocarea moleculară a compușilor prioritizați din <i>screeningul</i> virtual și calculul de proprietăți ADME/Tox 4.2. Analiza rezultatelor de andocare moleculară prin comparație cu structura(ile) șablon, cu posibilitatea repoziționării acțiunii vechi a unui compus pentru o nouă terapie 4.3. Diseminarea rezultatelor	
Tema 1.2.3. Profilul de selectivitate al inhibitorilor cistein - kinazelor Coordonator: Dr. Liliana Păcureanu, CS II			
Trim.	Obiective	Activități	Executanti
Faza 1 Trim 1	1. Actualizarea bazei de date de inhibitori covalenti	1.1. Investigarea spațiului chimic al inhibitorilor covalenti, inclusi in bazele de date ChEMBL si Drug Central. 1.2. Clasificarea lor in functie de grupele reactive si de scheletele moleculare (Bemis-Murko frameworks).	Dr. Liliana Pacureanu CS II Dr. Luminița Crișan CS III Dr. Sorin Avram CS III Dr. Alina Bora CS III <i>Colaboratori externi:</i> Dr. Costin Ioan Popescu Institutul de Biochimie al Acadmiei Romane
Faza 2	2. Evaluarea selectivitatii	2.1. Actualizarea criteriilor de	

Trim 2	inhibitorilor covalenti	selectivitate 2.2. Identificarea structurilor selective și neselective ale inhibitorilor noncovalenti. 2.3. Calculul descriptorilor quanto-chimici moleculari și corelarea lor cu afinitatea-selectivitatea.	
Faza 3 Trim 3	3. Proiectarea unor schelete moleculare cu potentiala afinitate crescuta fata de proteina tinta	3.1 Selectarea scheletelor moleculare selective pentru cistein-kinaze 3.2 Optimizarea structurala prin andocare, calcule cuanto-chimice.	
Faza 4 Trim 4	4. Optimizarea computationally a afinitatii inhibitorilor covalenti proiectati	4.1. Optimizarea reactivitatii grupelor functionale. 4.2. Optimizarea substituentilor și a elementelor de lagatura.	
Tema 1.2.4 Studiul translațional al medicamentelor și identificarea compușilor biologic activi Coordonator: Dr. Sorin Avram, CS III			
Trim.	Obiective	Activități	Executanti
Faza 1 Trim 1	1. Construirea setului de date medicament – boală	1.1 Construirea protoalelor SQL pentru baza de date DrugCentral PostgreSQL 1.2 Extragerea indicațiilor și a reacțiilor adverse (FAERS) 1.3 Îmbogățirea termenilor medicali cu sinonime 1.4 Suprapunerea indicațiilor cu reacțiile adverse și clarificarea datelor	- Dr. Sorin Avram CS III - Dr. Ramona Curpăan, CSII - Dr. Liliana Halip, CSIII - Dr. Alina Bora, CSIII <i>Colaboratori externi:</i> - Dr. Tudor Oprea, Prof. univ, University of New Mexico, USA
Faza 2	2. Construirea setului de date	2.1 Extragerea datatelor de	

Trim 2	medicament – țintă biologică	activitate biologică din DrugCentral și standardizarea acestora 2.2. Separarea țintelor de tip mecanism de acțiune 2.3. Îmbogățirea cu sinonime a țintelor proteice	
Faza 3 Trim 3	3. Construirea setului de date țintă biologică – boală	3.1. Estragerea și standardizarea datelor GWAS 3.2. Identificarea relațiilor semnificative.	
Faza 4 Trim 4	4. Proiectarea mecanismelor de acțiune pentru reacții adverse ale medicamentelor	4.1. Asamblarea seturilor medicament-boală- țintă biologică prin suprapunere elementelor comune 4.2. Analiza mecanismelor propuse și confirmarea unor ipoteze în publicații științifice	

Tema 1.2.5 Repoziționarea computațională a unor medicamente identificarea de compuși naturali pentru noi scopuri terapeutice
Coordonator: Dr. Luminița Crișan, CS III

Trim.	Obiective	Activități	Executanti
Faza 1 Trim 1	1. Evaluarea computațională a medicamentelor aprobate și a celor retrase de pe piață, inclusiv a medicamentelor experimentale, investigaționale și a metaboliților.	1.1. Descărcarea medicamentelor din bazele de date cunoscute (DrugBank, DrgCentral, DrugHunters etc.) 1.2. Calcularea proprietăților fizico-chimice, ADMETox și a diversității chimice.	-Dr. Luminita Crisan CS III - Dr. Liliana Pacureanu, CS II - Dr. Alina Bora, CS III - Dr. Sorin Avram, CS III - Chim. Daniela Varga, CS
Faza 2 Trim 2	2. Alcătuirea unei baze de date de date de medicamente repoziționate	2.1. Studiul de literatură 2.2. Alcătuirea unei baze de date de date de medicamente repoziționate cu structuri unice 2.3. Calcularea proprietăților fizico-chimice, ADMETox și a diversității	

		chimice 2.4. Aplicarea metodologiei de lucru în cazul particular al infecției cu virusul SARS-Cov2	
Faza 3 Trim 3	3. Studiul medicamentelor aprobate și a celor retrase de pe piață, inclusiv a medicamentelor experimentale, investigaționale și a metaboliților pe domenii terapeutice	3.1. Evaluarea proprietăților fizico-chimice, ADMETox și a diversității chimice . 3.2. Divizarea medicamentelor cu indicații pentru Sistemul Nervos Central față de restul medicamentelor	
Faza 4 Trim 4	4. Compararea și analiza statistică a proprietăților medicamentelor aprobate, a celor retrase și a celor re-poziționate.	4.1. Analiza statistică a proprietăților medicamentelor 4.2. Analizarea rezultatelor privind conceptul de reutilizare a medicamentelor pentru utilizarea viitoare a medicamentelor vechi împotriva altor maladii.	



ACADEMIA ROMÂNĂ
INSTITUTUL DE CHIMIE „CORIOLAN DRĂGULESCU”

Bd. Mihai Viteazu, nr. 24, RO-300223, Timișoara, România
tel: 0256-491818; fax: 0256-491824



Director,

Dr. Chim. Otilia COSTIȘOR

Programul de cercetare nr. 2 - 2021

**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 Ilia, CS I

Tema 2.1.1 Studii privind obtinerea unor retele organice-anorganice continand fosfor prin metode prietenoase mediului			
Coordonator: Dr. Ing. Vasile Simulescu, CS III			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim I	1. Obtinerea unor retele organice-anorganice continand fosfor, prin utilizarea acizilor fosfinici, folosind procesul sol-gel	1.1. Sinteza unor retele organice-anorganice continand fosfor si zirconiu, prin metoda sol-gel, pornind de la acizi fosfinici 1.2. Stabilirea conditiilor optime de reactie: raport molar, viteza de agitare, timp de reactie	Colectiv: - Dr. Ing. Vasile Simulescu - Dr. Ing. Gheorghe Ilia, CSI - Dr. Ing. Eleonora Cornelia Crasmareanu, CS III Colaboratori externi: - Universitatea Tehnica Brno, Republica Ceha - Universitatea Malaga, Spania
Faza 2, Trim II	2. Obtinerea unor retele organice-anorganice continand fosfor, prin utilizarea acizilor fosfonici, folosind procesul sol-gel hidrolitic si nehidrolitic si hidrotermal (solvotermal)	2.1. Sinteza unor retele organice-anorganice continand fosfor si zirconiu, prin metoda sol-gel, pornind de la acizi fosfonici sau derivati ai acestora si diferiti oxizi de metale 2.2 Sinteza unor retele organice-anorganice continand fosfor, prin metoda hidrotermala (solvotermala)	
Faza 3, Trim III	3. Sinteza prin procesul sol-gel a unor materiale hibride continand fosfor, zirconiu si bor	3.1. Sinteza unor retele organice-anorganice continand fosfor, zirconiu si bor, prin metoda sol-gel, pornind de la acizi fosfinici 3.1. Sinteza unor retele organice-anorganice continand fosfor, zirconiu si bor, prin metoda sol-gel, pornind de la acizi fosfonici	
Faza 4, Trim IV	4. Analiza materialelor obtinute	4.1. Analiza materialelor hibride obtinute folosind metodele IR si TGA 4.2. Analiza hibrizilor obtinuti prin SEM si EDX	
Tema 2.1.2. Dezvoltarea si functionalizarea de noi precursori din clasa acizilor carboxilici pentru materiale hibride multifunctionale			
Coordonator: Dr. chim. Manuela Crisan, CSIII			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti

Faza 1, Trim. I	1. Obținerea de noi sisteme multicomponent organice de tip acid-baza	1.1 Sinteza de compusi multicomponent pornind de la acizi benzoici mono/disubstituiti si alcanolamine 1.2 Stabilirea conditiilor optime de reactie 1.3 Purificarea compusilor obtinuti prin diferite tehnici de cristalizare	<u>Colectiv:</u> -Dr. Manuela Crisan -Dr. Mihaela Petric -Dr. Gheorghe Ilia
Faza 2, Trim. II	2. Caracterizarea fizico-chimica si structurala a compusilor obtinuti	2.1 Caracterizarea structurala prin spectroscopie FTIR si difractie de raze X pe monocristal 2.2 Investigarea stabilitatii si descompunerii termice prin analiza termica (TG, DTG, DSC)	<u>Colaboratori interni</u> -Dr. Liliana Halip <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. dr. Pavlina Bouros, Institutul de Fizica Aplicata-Chisinau, Moldova - Prof. Yurii Chumakov, Univ. Tehnica Gebze, Turcia
Faza 3, Trim. III	3. Determinarea proprietatilor fotoluminescente	3.1 Spectre de emisie. Interpretarea datelor experimentale 3.2 Studiul structura-proprietati fotoluminescente a noilor precursori organici	- Dr. Alessandra Forni, Institutul de Stiinte si Tehnologii Moleculare – CNR, Milano, Italia - Dr. Elena Cariati, Universitatea de Studii din Milano, Italia - Prof. univ. dr. Radu Sumalan, Universitatea de Stiinte Agricole si Medicina Veterinara a Banatului din Timisoara, Facultatea de Horticultura si Silvicultura
Faza 4, Trim. IV	4. Investigarea activitatii biologice ca reglatori de crestere a plantelor	4.1 Studii de docare moleculara a compusilor obtinuti - receptor auxinic TIR1 pentru principalele specii de legume din Romania 4.2 Testarea noilor compusi comparativ cu auxina naturala clasica (AIA) asupra germinarii semintelor si cresterii plantelor de tomate (<i>Solanum lycopersicum</i>) si castraveti (<i>Cucumis sativus</i>) 4.3 Analiza statistica a datele experimentale obtinute	
Tema 2.1.3. Dezvoltarea si functionalizarea de noi structuri de fosfin imide cu proprietati luminescente			
Coordonator: Dr.Mihaela Petric, CS III			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1 Trim I	1.Obținerea de fosfin imide pornind de la difenilfosforil azida	1.1. Determinarea conditiilor optime de reactie: raport molar reactanti, temperatura, solventi	<u>Colectiv:</u> - Dr. Mihaela Petric

Faza 2 Trim II	2.Obtinerea de fosfin imide pornind de la difenilfosforil azida	2.1 Sinteza difenilfosforilazidei cu fosfine aromatice 2.2 Purificarea compusilor prin diferite metode de cristalizare (evaporare, difuzie de diferiti solventi, etc.)	- Dr. Manuela Crisan - Dr. Gheorghe Iliu <u>Colaborator intern:</u> -Dr. Luminita Crisan
Faza 3 Trim. III	3. Caracterizarea fizico-chimica si structurala a fosfin imidelor sintetizate	3.1 Caracterizarea compusilor noi sintetizati prin FTIR/ATR si analiza termica (TG, DTG, DSC) 3.2 Determinarea structurala prin difractie de raze X	<u>Colaboratori externi:</u> - Prof. dr. Pavlina Bouros, Prof. dr. Victor Kravtsov, Institutul de Fizica Aplicata-Chisinau, Moldova - Prof. dr. Yurii Chumakov, Univ.Tehnica Gebze, Cayirova, Turcia - Dr. Elena Cariati, Universitatea de Studii din Milano, Italia
Faza 4 Trim. IV	4. Investigarea structurii electronice a compusilor obtinuti prin studii teoretice	4.1 Calcularea parametrilor electronici pentru compusii sintetizati; prezicerea reactivitatii si stabilitatii lor cu ajutorul calculelor computationale. 4.2 Corelarea studiilor experimentale cu cele teoretice	

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. Adriana Popa, CS I			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim I	I. Evaluarea polimerilor modificati chimic cu grupari pendante active cu potenziale aplicatii ca si adsorbanti	1.1. Studiu in vederea indepartarii acidului acetic salicilic din apa utilizand suporturi polimere de tip stiren-divinilbenzen functionalizate cu grupari pendante active continand fosfor. 1.2. Utilizarea copolimerului stiren-6.7%divinilbenzen functionalizat cu gruparea pendantsa de tip (dibenzil-(fosfono)metilen)glicina la adsorbtiia din apa a colorantului azo rosu congo.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Adriana Popa - Dr. Lavinia Macarie - Dr. Nicoleta Plesu <u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Aurelia Visa - Dr. Bianca Maranescu

Faza 2, Trim II	2. Investigarea pentru obtinerea materialelor polimerice (<i>S-DVB</i>) prin reactii multicomponent (MCR)	2.1. Sinteza de tip multicomponent a copolimerilor stiren- 6.7% (10% si 15%) divinilbenzen (S-DVB) cu grupari pendante de tip aminobenzoic si studiul combinatiei optime grad de grupare functionalizata /suport polimer. 2.2. Investigatii prin metode fizico-chimice.	<i>Colaboratori externi:</i> - Facultatea de Chimie Industriala si Ingineria Mediului, Universitatea Politehnica Timisoara - Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni” Iasi - Institutul de Chimie Fizica „I. Murgulescu” Bucuresti - Facultatea de Medicina Veterinara Timisoara - Dr. Mercedes Diaz Somoano, Instituto Nacional del Carbon - CSIC, Oviedo, Spania
Faza 3, Trim III	3. Analiza si evaluarea impregnarii materialelor polimerice cu grupari pendante prin metoda cu ultrasonare	3.1. Sinteza prin modificare chimica a copolimerului stiren-6.7% divinilbenzen cu gruparea de tip acid aminoacetic. 3.2. Impregnarea prin ultrasonare cu $Zn(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$ a copolimerului S-6.7%DVB grefat cu acid aminoacetic.	
Faza 4, Trim IV	4. Evaluarea impregnarii bipolimerilor cu grupari active prin metoda mecano-chimica	4.1. Documentare privind metodele de impregnare prin tehnica mecano-chimica a biopolimerilor si compozitelor pe baza de chitosan, celuloza. 4.2. Testari de impregnare a chitosanului si caracterizarea probelor.	

Tema 2.2.2. Polimeri si copolimeri acrilici obtinuti prin polimerizare fotoinitiata

Coordonator: Dr. Ing. Lavinia Macarie, CSII

Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim I	1. Sinteza polimerilor si copolimerilor cu grupari fosfonice in catena laterala	1.1. Studii privind polimerizarea fotoinitiata pentru a obtine polimeri si copolimeri cu grupari fosfonice in catena laterala. 1.2. Studii privind influenta naturii si continutului de comonomeri derivati de acid vinilfosfonic si monomeri acrilici. 1.3. Documentare in domeniul aplicatiilor polimerilor cu grupari fosfonat si fosfat in catena laterala.	<i>Colectiv:</i> - Dr. Lavinia Macarie - Dr. Adriana Popa - Dr. Nicoleta Plesu - Dr. Milica Tara-Lunga Mihali <i>Colaboratori interni</i> - Dr. Gh. Iliu

Faza 2, Trim II	2. Evaluarea metodelor si tehnicilor de polimerizare pentru sinteza de polimeri ai acidului vinilfosfonic	2.1. Studiul polimerizarii termice, in microunde sau in ultrasunete asupra formularilor polimerizabile. 2.2. Utilizarea de monomeri/oligomeri, fotoinitiatori/sisteme de fotoinitiere si a comonomerilor reactivi derivati ai acidului vinilfosfonic, vinilalcoxisilani, vinilimidazoli, pentru a obtine un sistem fotoreticulabil.	-Dr. V. Simulescu <i>Colaboratori externi:</i> - Universitatea Politehnica Timisoara - Universitatea de Vest Timisoara -Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni” Iasi - Universitatea de Studii Tehnologice si Economice Budapesta, Ungaria - Universitatea Tehnologica Brno
Faza 3, Trim III	3. Caracterizarea morfologica/structurala a polimerilor prin metode fizico-chimice (FTIR, TG, RMN).	3.1. Utilizarea spectroscopiei FTIR si RMN pentru monitorizarea polimerizarii /copolimerizarii. 3.2. Investigarea comportarii termice (TG). 3.3. Determinarea absorbtiei de apa in diferite conditii de temperatura si pH.	
Faza 4, Trim IV	4. Analiza, caracterizarea si aplicatiile materialelor polimerice obtinute pe baza de polimeri si copolimeri sintetizati prin evaluarea proprietatilor ionice/conductoare (EIS), ignifugante (LOI), de suprafata, de absorbtie de apa	4.1. Determinarea proprietatilor ionice/ conductoare (EIS) si ignifugante ale peliculelor (LOI). 4.2. Determinare proprietatilor anticorozive 4.3. Determinarea proprietatilor de absorbtie.	
Tema 2.2.3. Conductori organici intrinseci si formulari de compozite pe baza acestora cu posibilitati de utilizare ca senzori si electrozi modificati pentru electrocataliza si biochimie. Metode electrochimice aplicate in caracterizarea suprafetei materialelor si filmelor nanocompozite Coordonator: Dr. Ing. Nicoleta Plesu CS II			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti

Faza 1, Trim I	1. Obținerea și caracterizarea de compozite pe baza de polianilina	1.1. Prepararea electrochimică și/sau chimică a polianilinei (PANI) și a compozitelor pe baza de PANI. Stabilirea condițiilor de obținere. 1.2. Studiul de literatură referitor la metodele de îndepărtare a grasimilor din apele reziduale menajere.	<i>Colectiv:</i> - Dr. Nicoleta Plesu - Dr. Milica Tara-Lunga Mihali - Dr. Lavinia Macarie
Faza 2, Trim II	2. Studiul proprietăților protectoare a filmelor compozite pe baza de PANI. Comportarea în soluție salină.	2.1. Caracterizarea filmelor de PANI obținute prin voltametrie ciclică (CV) și spectroscopie de impedanță (EIS). 2.2. Modelarea datelor experimentale. 2.3. Studiu de literatură privind Metodele de sinteză a rasiilor poliesterice.	<i>Colaboratori interni:</i> - Dr. Aurelia Visa - Dr. Bianca Maranescu - Dr. Manuela Crisan - Dr. Mihaela Petric
Faza 3, Trim III	3. Investigarea proprietăților speciale (electrice și/sau anticorozive) a unor compusi organici și/sau element organici, hibridi organici anorganici prin voltametrie ciclică (CV)	3.1. Studiul conductometric al sarurilor organice. 3.2. Interpretarea datelor de conductanță. 3.3. Studiu de literatură privind metodele de sinteză a rasiilor copolimerilor pe baza de PU	<i>Colaboratori externi:</i> - Univ. Politehnica Timisoara, - Prof. Konstaninos - Demadis Universitatea din Creta, Grecia
Faza 4, Trim IV	4. Investigarea prin spectroscopie de impedanță a proprietăților speciale (electrice și/sau anticorozive) unor compusi organici și/sau element organici, hibridi organici anorganici	4.1. Studiul proprietăților electrice ale unor compusi organici și/sau element organici, hibridi organici anorganici prin spectroscopie de impedanță (EIS). 4.2. Modelarea datelor EIS. 4.3. Interpretarea datelor EIS. 4.4. Studiu de literatură privind acoperirile utilizate în marcaje rutiere și/sau anticorozive.	

Denumirea Proiectului nr 2.3: Compusi multifuncționali cu proprietăți dirijate și aplicații în protecția mediului
Responsabil: Dr. chim. Aurelia Visa, CS II

Tema 2.3.1 Sinteza de rețele metal organice și proprietățile acestora			
Coordonator: Dr. Aurelia Visa, CSII			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1,	1. Sinteze de rețele metal organice	1.1. Sinteza rețelelor metal organice	<i>Colectiv:</i>

Trim. I	fosfonice si/sau carboxilice	1.2. Stabilirea conditiilor optime de reactie. 1.3. Influenta conditiilor de reactie asupra cristalinitatii compusilor obtinuti.	- Dr. Aurelia Visa - Dr. Bianca Maranescu
Faza 2, Trim. II	2. Caracterizarea retelelor metal organice sintetizate	2.1. Caracterizarea compusilor sintetizati prin FT-IR si TG. 2.2. Caracterizarea structurala a noilor compusi obtinuti prin difractie RX pe pulberi. 2.3. Investigarea interactiunilor generate in retea.	<u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Luminita Crisan - Dr. Adriana Popa - Dr. Simona Muntean - Drd. Andreea Nistor
Faza 3, Trim. III	3. Sinteze de retele metal organice fosfonice si/sau carboxilice	3.1. Sinteze de retele metal organice in conditii hidrotermale pe baie de apa/ulei, in autoclava si la ultrasunete. 3.2. Studiul influentei factorilor fizico-chimici. 3.3. Caracterizarea compusilor sintetizati prin TG, FT-IR si difractie de raze X.	<u>Colaboratori externi:</u> - Universitatea Ca`Foscari, Venetia, Italia, Prof. Pietro Tundo - Universitatea din Malaga, Prof. dr. Aurelio Cabeza
Faza 4 Trim. IV	4. Studiul aplicatiilor retelelor metal organice sintetizate	4.1. Analiza corelatiei dintre parametrii de sinteza si morfologia compusilor. 4.2. Identificarea factorilor ce influenteaza aplicatiile compusilor sintetizati. 4.3 Investigarea proprietatilor catalitice ale compusilor sintetizati	- Universitatea din Creta, Grecia Prof. Dr. Konstantinos Demadis

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 de noi polimeri de coordinatie utilizand diverse tehnici de sinteza hidrotermala	1.1. Sinteza de noi serii de polimeri de coordinatie variind ionul metalic bivalent in reactia cu acelasi acid fosfonic. 1.2. Optimizarea conditiilor de sinteza prin varierea temperaturtii, a pH-ului si a raportului molar intre reactanti.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Bianca Maranescu - Dr. Aurelia Visa <u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Adriana Popa
Faza 2, Trim. II	2. Sinteza de noi polimeri de coordinatie utilizand tehnici de sinteza hidrotermala	2.1. Sinteza de noi serii de compusi variind acidul fosfonic in reactia cu acelasi ion metalic bivalent. 2.2 Optimizarea conditiilor de sinteza prin varierea temperaturtii, a pH-ului si a raportului molar intre	- Dr. Crisan Luminita - Dr. Plesu Nicoleta <u>Colaboratori externi:</u>

		reactanti.	- UPT, Facultatea de Electronica si Telecomunicatii - University of Crete Heraklion, Department of Chemistry, Greece Prof. Dr. Konstantinos Demadis
Faza 3, Trim. III	3. Caracterizarea fizico-chimica a compusilor obtinuti	3.1. Punerea in evidenta a atribuirilor structurale prin tehnici si metode de analiza fizico- chimica (FTIR, TGA, XRD) pentru compusii sintetizati. 3.2. Evidentierea structurii cristaline a compusilor noi sintetizati prin microscopie electronica de baleaj.	
Faza 4, Trim. IV	4. Prezicerea proprietatilor anticorozive si electrice a polimerilor de coordinatie obtinuti	4.1. Determinarea proprietatilor anticorozive a polimerilor de coordinatie. 4.2. Identificarea experimentală a tipului de conductie.	
Tema 2.3.3. 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. Optimizarea procesului de adsorbției a coloranților pe nanocompozite magnetice.	1.1. Evaluarea efectelor combinate ale variabilelor procesului de adsorbție. 1.2. Optimizarea procesului de adsorbție. 1.3. Analiza suprafetelor de raspuns.	<u>Colectiv</u> - Dr. Simona Gabriela Muntean - Drd. Andreea Nistor (concediu ingrijire copil)
Faza 2, Trim. II	2. Degradarea fotocatalitica a colorantilor utilizand combinatii complexe ale unor elemente 3d cu liganzi de tip baze Schiff.	2.1. Studiu spectrofotometric al degradarii colorantilor. Influenta variabilelor procesului. 2.2. Analiza comparativa a performanțelor combinațiilor complexe în procesul de fotodegradare a coloranților. 2.3. Modelarea cinetica a fotodegradarii colorantilor.	<u>Colaboratori interni:</u> - Dr. Liliana Halip - Drd. Ildiko Buta - Dr. Aurelia Visa - Dr. Roxana Nicola
Faza 3, Trim. III	3. Aplicarea rețelelor metal organice fosfonice (MOF) în îndepărtarea coloranților din soluții apoase	3.1. Testarea MOF ca adsorbanti în procese de adsorbție a coloranților din soluții apoase. 3.2. Testarea proprietăților fotocatalitice a MOF aplicate în degradarea coloranților. 3.3. Efectul intensității si a lungimii de unda a radiației asupra degradării coloranților.	<u>Colaboratori externi:</u> - UPT, Facultatea de Chimie Industrială si Ingineria Mediului
Faza 4, Trim. IV	4. Aplicarea oxizilor de fier si a oxizilor de fier dopati pentru îndepărtarea colorantilor din solutii apoase prin fotodegradare.	4.1. Determinarea randamentelor de fotodegradare a coloranților din solutii apoase la iradiere cu lumina UV. 4.2. Determinarea randamentelor de fotodegradare a coloranților din solutii apoase la iradiere cu lumina	

		vizibila. 4.3. Studiul cinetic al procesului de fotodegradare a colorantilor.	
Tema 2.3.4. Compusi cu functiune azo si combinatii complexe ale azoliganzilor, cu afinitate pentru diverse materiale.			
Coordonator: Dr. Ing. Maria Elena Radulescu-Grad, CS III			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati in cadrul fazei	Executanti
Faza 1, Trim. I	1.Studiul proprietăților optice, si de culoare ale coloranților si ale azo complexilor sintetizati	1.1. Studiul proprietăților optice, si de culoare ale coloranților sintetizati 1.2 Studiul proprietăților optice, si de culoare ale azo complexilor sintetizati	<u>Colectiv</u> -Dr. Ing. Maria Elena Radulescu-Grad
Faza 2, Trim. II	2.Studiul proprietăților electrochimice si de si de dispersare ale azo-colorantilor studiat	2.1. Studiul proprietăților electrochimice si de ale azo –colorantilor studiat. 2.2. Studiul proprietăților de dispersare ale azo-colorantilor studiat	<u>Colaboratori interni:</u> -Dr. Ing. Simona Funar-Timofei -Dr. Ing. Nicoleta Plesu -Dr. Ing. Vasile Simulescu
Faza 3, Trim. III	3. Studii privind sinteza de noi compusi cu functiune azo	3.1.Obtinerea de noi azo compusi alternativi, netoxici 3.2.Utilizarea metodelor specifice de analiza, TLC, HPLC, spectroscopie FTIR, UV-Vis, MS, ¹³ C-RMN, ¹ H-RMN , in scopul caracterizarii compusilor azo sintetizati	-Dr. Ing. Catalin Ianasi -Drd. Ing. Adeline Andelescu <u>Colaboratori externi:</u> -UPT, Facultatea de Chimie
Faza 4, Trim. IV	4.Studii privind sinteza de noi complexi azo metalici	4.1.Obtinerea de noi combinatii complexe ale compusilor cu functiune azo 4.2.Caracterizarea combinatiilor complexe ale compusilor cu functiune azo prin:spectroscopie UV-Vis, FTIR, Aas, TGA, difractia de raze X	Industrială si Ingineria Mediului,Timisoara, -Institutul National de Cercetare-Dezvoltare pentru Electrochimie si Materie Condensata, Timis Timisoara



ACADEMIA ROMÂNĂ
INSTITUTUL DE CHIMIE „CORIOLAN DRĂGULESCU”

Bd. Mihai Viteazu, nr. 24, RO-300223, Timișoara, România
tel: 0256-491818; fax: 0256-491824



Director,

Dr. Chim. Otilia COSTIȘOR

Programul de cercetare nr. 3 - 2021

CHIMIA ȘI APLICAȚIILE COMPUȘILOR TETRAPIROLICI DIN CLASA PORFIRINELOR

Coordonator : CS I. Dr. Ing. Eugenia FĂGĂDAR-COSMA

Denumirea Proiectului nr. 3.1.: Materiale avansate cu proprietăți speciale opto-electrice pe bază de porfirine și combinațiile lor complexe. Aplicații biologice și tehnice.

Coordonator: Dr. Ing. Eugenia Făgădar-Cosma, CS I

Tema 3.1.1. Cromofori de tip porfirinic simetric si nesimetric substituiti si combinatiile lor complexe. Obținere și caracterizare. Reacții de dimerizare/trimerizare a porfirinelor. Studiul potențialelor aplicații tehnice și biologice. Coordonator: Dr. Ing. Făgădar-Cosma Eugenia, CS I			
Faza	Obiective	Activități	Cercetători
Faza 1 Trim I, II, III	1. Obținerea de noi porfirine simetric și A ₃ B asimetric mixt-substituite, aplicand variante ale metodelor multicomponente (A=COOH, B=C ₆ H ₄ -CH ₃ ; B=C ₆ H ₄ -CH ₂ -CH ₃); 2. Obținerea complexilor porfirinelor cu metale din grupa metalelor platinice.	1.1. Obținerea, separarea și purificarea de noi structuri asimetrice, mixt substituite la nucleul fenilic cu grupe cu efect donator de electroni si carboxilice 1.2. Caracterizarea prin spectroscopie UV-vis, fluorimetrie, FT-IR, RMN, MS, HPLC și TLC , analiza elementara, electrochimica, AFM si RX a compusilor porfirinici obținuti.	<u>Colectiv:</u> -Dr. Ing. CS I Eugenia Fagadar-Cosma, - Dr. Ing. Ionela Fringu - Chim. AS drd. Diana Anghel - Chim. AS drd. Camelia Epuran Chim. AS drd. Ion Fratilescu <u>Colaboratori externi:</u> - Institutul National C&D pentru Fizica Materialelor Bucuresti-Magurele <u>Colaborări internaționale:</u> -Istituto per lo Studio delle Macromolecole (ISMAC), Consiglio Nazionale delle Ricerche, Milano, Dr. Erika
Faza 2 Trim II, III		1.3. Depunerea de straturi subtiri de porfirine simple si compozite cu calcogenide prin tehnici PLD si MAPLE sau LB. Caracterizare SEM, TEM. 2.1. Sinteza combinatiilor complexe cu Pt (II) cu liganzii porfirinici nou obtinuti. 2.2. Studiul capacitatii de complexare/recuperare a PtNPs cu liganzii porfirinici obtinuti.	
Faza 3 trim			

III	3. Sisteme fluorescente heterodimere obtinute intre o porfirina si o metaloporfirina, sau intre un derivat porfirinic si un derivat care potenteaza fluorescenta	3.1. Alegerea structurilor, realizarea sintezelor, caracterizare fizico-chimica completa a sistemelor porfirinice heterodimere.	Kozma -The Fundació Institut Català d'Investigació Química, Spain
Faza 4 si 5 Trim IV	4. Identificarea posibilităților de aplicare a derivatilor porfirinici in formularea de senzori/ materiale antibacteriene	4.1. Teste asupra porfirinelor bază / metaloporfirinelor sintetizate dar si a structurilor dimere/trimere pentru evaluarea capacitatii de actiune ca senzori electrochimici sau optici/fluorimetrice pentru metale grele, medicamente sau analiti cu relevanta medicala. 4.2. Teste de activitate biologică	
	5. Investigarea proprietatilor electrochimice ale porfirinelor substituie cu grupari carboxilice. Straturi subtiri cu aplicatii in inhibarea corozionii.	5.1. Studii de inhibare a corozionii, prin metode electrochimice si clasice. 5.2. Realizarea de demonstratori	<u>Colaboratori externi:</u> Institutul National de Electrochimie și Materie Condensata
	6. Redactare lucrari-actiuni de diseminare rezultate	6. 1. Minimum 3 lucrari ISI , lucrari in reviste cu sistem <i>peer-review</i> , participare Key-note speaker la Conferinte/video-conferinte. 1 Brevetare.	

Tema 3.1.2. Reactii de functionalizare a porfirinelor la grupele functionale OH cu zaharide/glicozide. Investigarea noilor compusi privind capacitatea catalitica.

Coordonator: Dr. Ing. Anca Lascu, CS III

Faza	Obiective	Activități	Cercetători
Faza 1,2 Trim I, II	1. Obținerea de structuri porfirinice cu grupe functionale hidroxilice. Functionalizarea cu zaharide sau glicozide.	1.1 Sinteza si separarea pe coloana cromatografica a porfirinelor A ₂ B ₂ substituie cu grupari hidroxilice 1.2. Functionalizarea la gruparea OH cu zaharide /glicozide.	<p><u>Colectiv:</u></p> -Dr. Ing. CS III Anca Lascu - Dr. Ing CS Ionela Fringu - Chim. AS Diana Anghel - Chim. AS drd. Camelia Epuran - Chim. AS drd. Ion Fratilesco
	2. Caracterizarea fizico-chimica a porfirinelor obtinute inainte si dupa functionalizare.	2.1. Studiul influenței fazei staționare si a naturii /compozitiei fazei mobile asupra separării derivaților porfirinici OH substituiti prin cromatografie pe coloana si/sau HPLC la scara analitică 2.2. Caracterizarea prin spectroscopie UV-vis, fluorimetrie, FT-IR, RMN, HPLC și TLC a compusilor porfirinici obținuti inainte si dupa functionalizare. 2.3. Analiza prin microscopica a morfologiei suprafetelor, dupa depunere pe diferite substraturi.	
Faza 3, 4 Trim III Trim IV	3. Demonstrarea capacitatii catalitice a porfirinelor A ₂ B ₂ substituie cu grupari hidroxilice si a materialelor functionalizate cu zaharide/glicozide 4. Redactare lucrari, participare conferinte	3.1. Testari preliminare ale proprietăților catalitice ale porfirinelor A ₂ B ₂ cu grupari OH 3.2. Aplicatii in reactii organice catalizate. Studii de cinetica chimica.	<p><u>Colaborări internaționale:</u></p> - Instituto per lo Studie delle Macromolecole - CNR, Milano, Dr. Erika Kozma
		4.1. Minim 2 lucrări ISI; participare conferințe	

		internaționale și naționale.	
Tema 3.1.3. Materiale hibride obtinute prin incorporarea de porfirine si metaloporfirine in matrici anorganice si/sau polimerice. Complecsi coloidali cu nano-Cu/Ag/Au/Pt si porfirine. Investigarea proprietăților optice. Coordonator: Dr. Ing. Ionela Fringu, CS			
Faza	Obiective	Activități	Cercetători
Faza 1,2 Trim I, II	1. Obținerea și testarea micro și nano-materialelor fotochimic active obtinute prin imobilizarea porfirinelor pe matrici anorganice și/sau polimerice prin tehnici de sinteza organica, coloidala și sol-gel 2. Caracterizarea materialelor hibride cu proprietati plasmonice și optice avansate.	1.1. Imobilizarea porfirinelor divers functionalizate pe matrici anorganice de tip silice și/sau polimerice și pe nanotuburi de carbon/grafene. 1.2. Obținerea de complecsi coloidali porfirine- nano-Cu/Ag/Au /Pt /Pd cu domeniu larg de absorbtie UV-vis (controlul dimensiunii și formei nanoparticulelor). 1.3 Coloizi micști Cu/Au, Cu/Pt, Ag/Pt și integrarea lor în materialele hibride cu porfirine 2.1. Caracterizarea prin tehnici microscopice (SEM, TEM, AFM, tomografie), analiza termica, UV-vis, FT-IR, BET și fluorescența a materialelor hibride obtinute. 2.2. Studii privind topografia suprafetelor și capacitatea de detectie comparativ cu porfirinele corespunzatoare libere	<u>Colectiv:</u> -Dr. Ing. CS III Anca Lascu -Dr. Ing CS Ionela Fringu -Chim. AS Diana Anghel - Chim. AS drd. Camelia Epuran - Chim. AS drd. Ion Fratilesco <u>Colaborări interne:</u> - Institutul National de Electrochimie și Materie Condensata <u>Colaborări internaționale:</u> - Instituto per lo Studie delle Macromolecole - CNR, Milano, Dr. Erika Kozma
		Faza 3, Trim III	3. Identificarea de noi aplicatii.

	4. Redactare lucrari, participare conferinte	porfirine privind detectia de gaze, alcooli volatili, amine.	
		4.1. Minim 1 lucrare ISI; 1 lucrare in volum peer- review; participare conferinte internationale si nationale.	



ACADEMIA ROMÂNĂ
INSTITUTUL DE CHIMIE „CORIOLAN DRĂGULESCU”

Bd. Mihai Viteazu, nr. 24, RO-300223, Timișoara, România
tel: 0256-491818; fax: 0256-491824



Director

Dr. Otilia COSTISOR

PROGRAMUL DE CERCETARE NR. 4 - 2021

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

Coordonator : Dr. Szerb Elisabeta I., CS II

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. Costișor Otilia, CS I

Tema 4.1.1. Cristale lichide pe bază de fluorenonă cu proprietăți optice

Coordonator: Cseh Liliana, CS II

Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1. Obținerea intermediarilor ce stau la baza derivaților fluorenonici	1.1.1. Sinteza, purificarea și caracterizarea structurală a compușilor	<u>Colectiv:</u> - Cozma Ioana, AsC - Dr. Belean Anca, CS III - Vorga Milenca. AsC - Dr. Tudose Ramona CSII - Balazs Tiberiu, AC1 <u>Colaboratori externi:</u> -Prof. Ungar G. și Dr. Xianbing Zeng, Universitatea din Sheffield, UK
Faza 2 Trim.II	2.1 Obținerea compușilor pe bază de fluorenonă	2.1.1. Sinteza, purificarea și caracterizarea structurală a compușilor	
Faza 3 Trim.III	3.1. Investigarea proprietăților cristalin lichide	3.1.1. Studiu prin metodele: DSC, POM și difracție de raze X	
Faza 4 Trim.IV	4.1. Studiul organizării supramoleculare și al proprietăților optice	4.1.1. Stabilirea unor modele privind modul de organizare al compușilor în mezofaze. 4.1.2. Studiul proprietăților optice pe mezofază prin POM, dicroism circular și UV-Vis, pentru mezofazele cubice.	

Tema 4.1.2. Sisteme supramoleculare cu proprietăți optice pe bază de combinații complexe homo- și heteroleptice ale unor metale tranziționale.

Coordonator: Dr. Szerb Elisabeta Ildyko, CS II

Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1. Obținerea de metalomesogeni luminescenți pe bază de metale d^6 , d^8 și d^{10} cu liganzi tip $N^{\wedge}N$ și $N^{\wedge}N^{\wedge}N$ funcționalizați cu catene alchilice.	1.1.1. Obținerea liganzilor 1.1.2. Caracterizarea liganzilor obținuți prin AE, spectroscopie RMN, IR și UV. 1.1.3 Sinteza combinațiilor complexe. 1.1.4. Caracterizarea structurală prin AE, spectroscopie RMN, IR și UV-Vis, conductivitate electrică molară.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Tudose Ramona, CSII - Dr. Crețu Carmen, CS III - Dr. Marinescu Sorin, CS III - Drd. Andelescu Adelina A., CS - Popa Evelyn, AsC

Faza 2 Trim.II	2.1. Determinarea proprietăților mezomorfe și optice ale combinațiilor complexe obținute la punctul 1.1.	2.1.1 Caracterizare prin microscopie optică cu polarizare (POM). 2.1.2 Determinarea stabilității termice (DSC, TGA) 2.1.3. Caracterizarea structurală prin metode difractometrice (PXRD). 2.1.4. Determinarea proprietăților fotofizice în solvenți organici. 2.1.5. Determinarea proprietăților fotofizice în diferite stări condensate	- Poenaru Mihaela-Marilena, AC <i>Colaboratori externi:</i> - Prof. Crispini Alessandra, Dr. Oliviero Rossi Cesare, Dr. la Deda Massimo: University of Calabria, Department of Chemistry and Chemical Technologies, Italia - Dr. Calandra Pietro: National Council of Research (CNR), Institute of nanostructured materials (ISMN), Roma, Italia. - Dr. Donnio Bertrand, Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (IPCMS), CNRS- Université de Strasbourg, Strasbourg, Franța. - Dr. Len Adél, Wigner Research Centre for Physics, Neutron Spectroscopy Department, Budapest Neutron Centre, Ungaria. - Prof. Silvestru Anca, Prof. Chiș Vasile, Universitatea “Babes-Bolyai”, Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică, Cluj-Napoca.
Faza 3 Trim.III	3.1. Sinteza unor liganzi chelanți N donori funcționalizați cu grupări hidrofile. 3.2 Obținerea de combinații complexe homoleptice ale metalelor d ¹⁰ cu liganzi derivați ai piridinei.	3.1.1 Stabilirea condițiilor optime de reacție în vederea obținerii liganzilor. 3.1.2 Caracterizarea structurală prin AE, spectroscopie RMN și IR. 3.2.1. Studiul organizării supramoleculare a combinațiilor complexe.	
Faza 4 Trim.IV	4.1. Obținerea de combinații complexe ionice ale unor elemente d ⁶ , d ⁸ și d ¹⁰ cu contraioni funcționali. 4.2. Studiul proprietăților optice ale combinațiilor complexe obținute la punctul 4.1	4.1.1 Sinteza contraionilor funcționali. 4.1.2 Sinteza combinațiilor complexe. 4.1.2 Caracterizarea structurală prin AE, spectroscopie RMN, IR și UV-Vis, conductivitate electrică molară. 4.2.1. Determinarea proprietăților fotofizice în apă și solvenți organici. 4.2.2. Determinarea proprietăților fotofizice în diferite stări condensate	
Tema 4.1.3. Combinații complexe ale elementelor tranziționale conținând liganzi de tip baze Schiff cu implicații în magnetism și protecția mediului. Coordonator: Dr. Costișor Otilia, CS I			
Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți

Faza 1 Trim.I	1.1 Obținerea unor liganzi polidentati de tip baze Schiff. 1.2 Obținerea de combinații complexe ale cuprului(II).	1.1.1 Stabilirea condițiilor optime pentru obținerea liganzilor. 1.1.2 Sinteza liganzilor. 1.1.3 Caracterizarea prin AE, RMN și IR. 1.2.1 Sinteza combinațiilor complexe. 1.2.2 Studiul influenței raportului molar, contraionului și a solventului. 1.2.3 Stabilirea condițiilor optime pentru obținerea de monocristal.	<i>Colectiv:</i> - Drd. Buta Ildiko Mariana, CS <i>Colaboratori interni:</i> - Dr. Muntean Simona Gabriela, CSII <i>Colaboratori externi:</i> - Dr. Lönnecke Peter, Prof. Hey-Hawkins Evamarie, Institute of Inorganic Chemistry, Universität Leipzig, Faculty of Chemistry and Mineralogy, Germania. - Prof. Andruh Marius, Universitatea din București, Facultatea de Chimie
Faza 2 Trim.II	2.1 Caracterizarea combinațiilor complexe obținute la punctul 1.2. 2.2 Studiul proprietăților magnetice ale combinațiilor complexe obținute.	2.1.1 Caracterizarea prin AE, IR, UV-Vis și conductivitate electrică molară. 2.2.2 Caracterizarea structurală prin difracție de raze X pe monocristal. 2.2.1 Studiul variației susceptibilității magnetice cu temperatura în intervalul 2-300 K.	
Faza 3 Trim.III	3.1 Prelucrarea datelor experimentale. 3.2. Studiul proceselor de magnetizare.	3.1.1 Fitarea datelor experimentale 3.1.2. Interpretarea datelor fitate obținute. 3.2.1 Studiul variației magnetizării în funcție de intensitatea câmpului la diferite temperaturi	
Faza 4 Trim.IV	4.1 Studiul proprietăților fotocatalitice ale combinațiilor complexe obținute în procesul degradării coloranților din soluții apoase.	4.1.1 Studiul proprietăților fotocatalitice ale combinațiilor complexe în procesul de degradare a coloranților cu evaluarea: - timpului de iradiere - cantității de catalizator - concentrației inițiale a soluțiilor de colorant. 4.1.2. Studiul stabilității combinațiilor complexe utilizate ca și catalizatori.	

Denumirea Proiectului nr. 4.2 Sisteme multicomponente cu proprietăți optice, magnetice și farmaceutice speciale.

Responsabil: Dr. Putz Ana-Maria, CS III

Tema 4.2.1. Materiale oxidice nanostructurate pe bază de silice și hibride și structuri organometalice. Sinteze prin metoda sol-gel, cu agenți de direcționare clasici și lichide ionice, caracterizare și testări preliminare în aplicații biomedicale și în protecția mediului.

Coordonator: Dr. Putz Ana-Maria, CS III

Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1 Sinteza și caracterizarea de materiale magnetice nanostructurate prin coprecipitare și sol-gel.	1.1.1. Sinteza nanocompozitelor, oxizi de fier-silice și ferite, prin coprecipitare și sol gel. 1.1.2. Caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute prin: IR, UV-VIS, SEM, TEM, BET, difracție de raze X, Moessbauer, SANS, SAXS. 1.1.3. Selectarea probelor de materiale magnetice nanostructurate (oxizi de fier și nanocompozite) cu proprietăți optime în adsorbție. 1.1.4. Testarea pe probe sintetice de apă contaminată pentru adsorbția unor ioni ai metalelor grele din soluții apoase și a unor coloranți cât și testarea acestora ca și fotocatalizatori.	<u>Colectiv:</u> -Dr. Ianăși Cătălin, CS III -Dr. Crețu Carmen, CS III -Chim. Drd. Nicola Roxana, AsC -Chim. Picioruș Elena-Mirela, AsC <u>Colaboratori externi:</u> -Prof. Dr. Negrea Adina, Conf Dr. Radu Lazau, Universitatea Politehnica Timișoara. - Dr. Sacarescu Liviu, Institutul de Chimie Macromoleculara Petru Poni, Iasi.
Faza 2 Trim.II	2.1. Obținerea de materiale magnetice pe bază de oxid de fier dopate cu diferite elemente rare.	2.1.1. Sinteza materialelor microporoase și mezoporoase magnetice prin co-precipitare. 2.1.2. Dezvoltarea materialelor prin doparea cu elemente rare (luminescente) în vederea utilizării în domenii biomedicale. 2.1.3. Varierea metodelor de obținere a materialelor prin agitare mecanică și ultrasonicare. 2.1.4. Acoperirea particulelor magnetice obținute cu polimeri sau silicați și caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute prin: IR, UV-VIS, SEM, TEM, BET, difracție de raze X, Moessbauer, SANS, SAXS, VSM, Raman și AFM.	- Conf. Dr. Ercuța Aurel, Universitatea de Vest, Timișoara. - Conf Dr. Barabas Reka, Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca. - Dr. Sfirloaga Paula, Institutul National de Cercetare-Dezvoltare pentru Electrochimie și Materie Condensata, Timisoara. -Dr. Almásy László, Dr. Len Adél, Academia Ungară de Științe, Institutul de Cercetare pentru Fizica și Optica

Faza 3 Trim.III	3.1. Sinteza, caracterizarea și testarea unor materiale pentru capacitatea de încărcare cu diferite molecule.	3.1.1. Sinteza sol-gel de materiale mezoporoase în prezența unor agenți de direcționare și funcționalizarea cu diferite grupări organice folosind metodele: co-condensării și cea de post grefare. 3.1.2. Caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute. 3.1.3. Selectarea probelor pentru încărcarea cu diferite molecule, pe baza caracteristicilor obținute. 3.1.4. Evaluarea capacității de încărcare cu diferite molecule.	Stării Solide și Centrul de Neutroni Budapesta, Ungaria. - Dr. Policicchio Alfonso, Departamentul de Fizică, Universitatea din Calabria, Italia. - Dr. Kuklin Alexander, JINR-Joint Institute for Nuclear Research (IUCN-Institutul Unificat de Cercetări Nucleare) Dubna, regiunea Moscovei, Federația Rusă. -Dr. Jirka Plocek, Academia de Științe a Republicii Cehe, Institutul de Chimie Anorganică, Rez, Republica Cehă.
Faza 4 Trim.IV	4.1. Sinteza de structuri organo-metalice, de tip MOF, utilizând precursori de Zr(IV) și Zn(II) cu liganzi dicarboxilici și liganzi de tip N,N.	4.1.1. Sinteza de materiale policristaline de tip Zr-MOF, prin metoda hidro/solvotermală. 4.1.2. Sinteza de materiale de tip Zn-MOF prin metoda activării în câmp ultrasonor. 4.1.3. Sinteza de materiale hibride de tip Zn-MOF/Zr-MOF.	

Tema 4.2.2. Regenerarea asfaltului prin îmbunătățirea proprietăților reologice ale bitumului utilizând materiale reciclate.

Coordonator: Dr. Ana-Maria Putz, CS III

Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1. Selectarea de noi agenți de întinerire a bitumului, cu evidențierea proprietăților reologice necesare.	1.1. Studii de literatură privind utilizarea celulozei și a cauciucului uzat ca agenți de întinerire a bitumului. 1.2. Studii comparative de literatură în vederea argumentării avantajelor folosirii noilor agenți selectați de întinerire a bitumului.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Szerb Elisabeta I., CS II -Chim. Drd. Nicola Roxana, AsC <u>Colaboratori externi:</u> Dr. Oliviero Rossi Cesare, PhD Student Porto Michele, University of Calabria, Department of Chemistry and Chemical Technologies, Italia
Faza 2 Trim.II	2.1. Utilizarea celulozei esterificate ca agent de întinerire a bitumului.	2.1.1. Obținerea celulozei din hârtie reciclată. 2.1.2. Esterificarea celulozei cu acizi grași.	
Faza 3 Trim.III	3.1 Pregătirea cauciucului reciclat ca agent de întinerire în bitum.	3.1.1. Extragerea și separarea cauciucului din resturile obținute/rămase din procesul tehnologic. 3.1.2. Caracterizarea fizico-chimică a cauciucului obținut prin metode spectroscopice (IR, RMN) și reologice.	

Faza 4 Trim.IV	4.1. Prepararea agregatelor de asfalt și testarea proprietăților lor mecanice.	4.1.1 Obținerea bitumului modificat cu celuloza esterificata în diferite concentrații de masă. 4.1.2. Obținerea bitumului modificat cu cauciuc reciclat, in diferite concentrații de masă. 4.1.3. Determinarea proprietăților reologice și mecanice pentru agregatele de asfalt astfel obținute.	
Tema 4.2.3. Dezvoltarea unor metode de determinare electrochimice a unor produse farmaceutice și compuși biologic activi utilizând materiale de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat.			
Coordonator: Dr. Ilieș Sorina, CS			
Faza	Obiectivul fazei	Activitati în cadrul fazei	Executanți
Faza 1 Trim.I	1.1. Obținerea unor materiale de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat.	1.1.1. Obținerea materialelor de electrod de tip pastă pe bază de carbon nanostructurat (CNT, CNF, fullerenă, graphenă) 1.1.2. Studiul influenței compoziției raportului masic al compușilor pe bază de carbon asupra stabilității materialului de electrod. 1.1.3. Modificarea materialelor de electrod pe bază de carbon nanostructurat cu cristale lichide/ metalomesogeni pe bază de metale tranziționale.	<u>Colectiv:</u> - Dr. Dr. Szerb Elisabeta Ildyko, CS II - Dr. Cretu Carmen, CS III - Drd. Andelescu, Adelina CS <u>Colaboratori externi:</u> - Prof. Manea Florica, Prof. Pode Rodica, Ș.L. Pop Aniela, C.S. Baciuanamaria, Universitatea “Politehnica”-Timișoara, Facultatea de Chimie si Ingineria Mediului. - Dr. Bertrand Donnio, Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (IPCMS), CNRS- Université de Strasbourg, Strasbourg, Franța.
Faza 2 Trim.II	2.1 Caracterizarea morfostructurală și electrochimică a materialelor de electrod pe bază de carbon nanostructurat modificat.	2.1.1 Caracterizarea morfostructurală a materialelor de electrod prin SEM/ EDAX, FTIR, RX. 2.1.2. Caracterizarea electrochimică a materialelor de electrod: -determinarea ariei suprafeței electroactive prin metoda clasica feri/ferocianură; -determinarea caracteristicilor electrochimice specifice aplicațiilor electroanalitice (fereastra de potențial, curent de fond, caracteristici de rețele de micro/ nanoelectrozi). 2.1.3. Teste preliminare de detecție voltametrică a unor analiți țintă din clasa produșilor farmaceutici și a compușilor biologic activi.	

Faza 3 Trim.III	3.1 Dezvoltarea metodelor de detecție electrochimică individuală a analiților țintă (ex. ibuprofen, citostatice, glucoză, acid uric, acid ascorbic)	3.1.1 Detecția voltametrică a analiților țintă prin CV, DPV, SWV. Determinarea parametrilor electroanalitici (sensibilitate, limită de detecție). 3.1.2. Detecția amperometrică a analiților țintă prin CA și MPA. Determinarea parametrilor electroanalitici (sensibilitate, limită de detecție). 3.1.3. Stabilirea interferențelor; Determinarea reproductibilității și a acurateții metodei; Aplicarea metodelor propuse pentru probe reale (produse farmaceutice, ser fiziologic, urină).	
Faza 4 Trim.IV	4.1 Dezvoltarea metodelor de detecție electrochimică simultană/ selectivă a analiților țintă (ex. ibuprofen, citostatice, glucoză, acid uric, acid ascorbic)	4.1.1 Detecția electrochimică simultană/ selectivă a produselor farmaceutice. Stabilirea condițiilor (tehnică, condiții de operare) pentru detecția simultană sau selectivă. 4.1.2. Detecția electrochimică simultană/ selectivă a compușilor biologic activi. Stabilirea condițiilor (tehnică, condiții de operare) pentru detecția simultană sau selectivă.	

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. Popa Alexandru, CS II

Tema 4.3.1. Proiectare la nivel molecular și sinteze de compuși solizi depuși pe suport cu activitate catalitică dirijată pentru reacțiile de conversie a alcoolilor alifatici inferiori și pentru distrugerea sau conversia de poluanți în substanțe utile

Coordonator: Dr.ing. Popa Alexandru, CS II

Faza	Obiectivul fazei	Activități în cadrul fazei	Executanți
------	------------------	----------------------------	------------

<p>Faza 1 Trim.I</p>	<p>1.1 Prepararea unor suporturi de tip sită moleculară (SBA-15 modificată, MCM-41, MCM-48, KIT 6) cu proprietăți texturale controlate prin utilizarea diferiților surfactanți și agenți de expandare a volumului porilor (mesitylen, butil benzen și 1-fenil-decan).</p> <p>1.2. Funcționalizarea suporturilor de silice preparate anterior prin grefare cu ajutorul unor agenți de silanizare prin utilizarea mai multor tipuri de amine.</p> <p>1.3 Prepararea unor heteropolioxometalați cu activitate catalitică de tipul $Me_xH_{3-x}[PW_{12}O_{40}]$ unde $Me = Ag, K, Cs, Ni, Co$, iar $x = 0.25 - 1.5$, și a unor oxizi metalici de tipul Me/SBA-15 respectiv Me/KIT-6 prin impregnare ($Me = Mg, Ti, Ag, Ni, Mn$).</p>	<p>1.1.1. Sinteza sitelor moleculare (SBA-15 modificata, MCM-41, MCM-48, KIT 6) prin metoda sol-gel cu utilizarea diferiților surfactanți și agenți de expandare a volumului porilor</p> <p>1.1.2 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.</p> <p>1.2.1. Funcționalizarea suporturilor de silice de tip sită moleculară prin grefarea unor amine (primare, secundare, terțiare, etc) cu ajutorul unor agenți de silanizare sau grefarea directă folosind amino-silani (ex: APTES). Aceste compozite sunt utilizate la adsorbția dioxidului de carbon la temperaturi sub 100°C.</p> <p>1.3.1 Prepararea unor heteropolioxometalati cu activitate catalitică ridicată de tipul $Me_xH_{3-x}[PW_{12}O_{40}]$ unde $Me = Ag$, iar $x = 0.5 - 3$, și depunerea lor în grade diferite de acoperire pe cărbune activ și respectiv zeoliți (ex: BEA, ZSM-5). Utilizarea acestor HPA la reacția de conversie a etanolului în scopul obținerii unor selectivități ridicate în etenă/acetaldhidă.</p> <p>1.3.2 Sinteza heteropolicompușilor de tipul $H_{3-x}Cs_xPW$ ($x=0, 1, 2, 2.25, 2.5$ si 3), urmate de depunerea acestora prin impregnare pe site moleculare de tip MCM-48 si KIT-6.</p> <p>1.3.3 Prepararea de oxizi metalici de tipul Me/SBA-15 respectiv Me/KIT-6 prin impregnare ($Me = Mg, Ti, Ag, Ni, Mn$).</p>	<p><u>Colectiv:</u> Dr. Verdeș Orsina Dr. Ing. Suba Mariana Dr. Ing. Borcănescu Silvana</p> <p><u>Colaboratori externi:</u> - Dr.ing. Banica Radu, Dr. Ursu Daniel - Institutul National de Cercetare Dezvoltare pentru Electrochimie si Materie Condensata–INCEMC-Timisoara - Conf. Barvinschi Paul - Facultatea de Fizica, Universitatea de Vest Timisoara - Prof. Dr. Konya Zoltan, Universitatea din Szeged, Ungaria: Reaction Kinetics and Surface Chemistry. -Prof. Holclajner Ivanka - Antunovic - Universitatea din Belgrad- Serbia - Conf. Dr. Uskoković–Marković Snezana - Facultatea de Farmacie, Universitatea din Belgrad, Serbia</p>
--------------------------	--	--	--

Faza 2 Trim.II	2.1. Caracterizarea fizico-chimică a compozitelor de silice grefate cu amine și a HPAs puri și depuși pe suport 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 compozitelor de silice grefate cu amine și a heteropolioxometalaților preparați prin măsurători de suprafață specifică și porozitate prin metoda BET-BJH. 2.1.2. Caracterizarea structurală a compozitelor de silice grefate cu amine și 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 de adsorbție/desorbție ale CO ₂ pe compozitele de silice grefate cu amine la temperaturi sub 100 °C. 3.2. Stabilirea condițiilor optime de reacție prin teste de activitate catalitică.	3.1.1 Măsurători de cicluri de adsorbție-desorbție programată termic-TPD a CO ₂ pe compușii sintetizați cu metoda adaptată pentru analiza TG-DTA cuplată cu spectrometria de masă. 3.2.1. Teste de activitate catalitică cu modificarea condițiilor de lucru pentru stabilirea temperaturii optime în vederea obținerii unei conversii ridicate. 3.2.2 Prelucrarea și interpretarea datelor experimentale, redactare comunicări științifice, postere pentru simpozioane științifice.	
Faza 4 Trim.IV	4.1 Evaluarea proprietatilor catalitice a HPAs depuși pe suport in reactia de conversie a alcoolilor inferiori. Corelarea activitatii catalitice cu proprietatile texturale și structurale.	4.1.1 Studiul dezactivării și regenerării catalizatorilor prin teste de activitate catalitică de lunga durată la diferite temperaturi pentru cei mai performanți catalizatori. 4.1.2 Calcularea vitezelor de formare a produsilor de reactie importanti si a bilanturilor de materiale. 4.1.3 Formularea mecanismului de reactie si stabilirea relatiilor de corelare activitate catalitica-compozitie-structura-textura.	