



Academia Română
Centrul de Chimie Organică "Costin D. Nenițescu"
Splaiul Independenței 202B, 060023 București 35, C.P. 108, ROMANIA
Tel. +(4021) 31 67 900 ÷ 902; Fax. +(4021)31 21 601

Plan de cercetare al Centrului de Chimie Organică pentru anul 2021

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 1

"Chimie organică teoretică" – Program prioritar al Academiei Române
responsabili - Dr ing. Petru FILIP și Dr ing. Isabela TRAISTARU (MAN)

Studiul mecanismelor de reacție prin tehnici experimentale și modelarea proceselor moleculare în medii omogene și pe suprafețe catalitice; Simularea și predicția proprietăților moleculare.

- 1.1.– Studiul cinetic și al mecanismelor de reacție prin tehnici experimentale (RMN de înaltă rezoluție) și prin tehnici de modelare a structurii moleculare (studii DFT).
- 1.2.- Modelarea suprafețelor catalitice și a proceselor moleculare induse pe ele. Influența defectelor și modificărilor în rețeaua cristalină
- 1.3.- Modelarea și predicția proprietăților moleculare - studii QSAR/QSPR , noi indici topologici de generația a 3-a.

Colaborări cu Univ.Tehnică din Danemarca (DTU), Univ. Eindhoven, U.T. Dresda, Univ.Liège, UPB.

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 2

Sinteze de structuri organice cu proprietăți dirijate
responsabil - Dr chim. Florea DUMITRAȘCU

Sisteme polinucleare carbociclice și heterociclice cu conjugare extinsă; Sinteze și aplicații.

- 2.1.– Studiul legăturii de halogen în derivați heterociclici halogenați în stare solidă și în soluție; halogenopiroli, halogenopirolopirazoli, halogenopirolocarbazoli și halogenopirolosidnone
- 2.2.- Cicloadiții [3+2] ale unor dipoli de tip alilic (sidnone, muchnone, N-ilide hetroaromatice) mediate fotochimic sau termic.
- 2.3.- Provoacări sintetice: heterocicli cu 5 atomi anelați asimetric cu ciclobutadiena.
- 2.4.-Aplicații ale unor sisteme aromatice nebenzenoide.

Colaborări cu Univ. din Cape Town, Univ.București

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 3

Chimie organică verde
responsabili - Dr ing. Petru FILIP și Dr ing. Emeric BARTHA

Tehnici neconvenționale de activare a proceselor chimice; Valorizare produși naturali și bioresurse regenerabile; Reacții în solvenți ecologici

- 3.1.- Utilizarea de tehnici neconvenționale în activarea proceselor chimice.
- 3.2.- Extracția și caracterizarea compușilor naturali cu proprietăți alelopatiche.
- 3.3.- Reciclarea unor deșeuri industriale organice sub formă de materii prime.

Colaborări cu ICECHIM, ICPAO-Mediaș

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 4

Materiale organice inteligente

responsabili - Dr ing. Valentin Victor Jerca si Dr ing. Dumitru Mircea VULUGA

Sinteze de precursori si generarea de ahitecturi moleculare organice pentru aplicații în medicină și fonică

- 4.1.- Noi metode pentru obținerea derivaților funcționali de 2-oxazolină utilizând în principal sinteza fină organică. Sinteze de 2-oxazoline cu funcțiuni polimerizabile prin mecanism radicalic și/sau anionic.
- 4.2.- Materiale organice multifuncționale cu răspuns complex la stimuli externi care pot fi controlate prin aplicarea ortogonală a unor stimuli diverși (temperatură, pH, enzime, câmp magnetic, lumină).
- 4.3.- Materiale organice cu structură tridimensională pentru eliberare controlată și direcționată a agenților terapeutici. Sisteme proiectate pentru tratamentul bolilor caracterizate printr-o reacție inflamatorie și răspuns autoimun al organismului.
- 4.4.- Proiectarea și sinteza de noi materiale organice structurate cu aplicații în fonică. Dezvoltarea experienței acumulate în ingineria moleculară a azo derivaților pentru obținerea de materiale cu eficiență sporită a proprietăților neliniare de ordinul III.

Colaborări cu R.U.Ghent-Belgia, UPB, ICECHIM, INFLPR, ENS Lyon-Franta, INCDMM "Cantacuzino", U.Claude Bernard Lyon-Franta, IBCP "N.Simionescu".

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 5

Metode din chimia organică în serviciul științelor vieții

responsabil - Dr ing. Călin DELEANU

- 5.1.- Sinteze fine organice, studiul mecanismelor de reacție și determinarea structurii unor compuși heterociclici care au în componența lor schelete sau fragmente prezente în natură care îi face candidați pentru diverse tipuri de activitate biologică
 - 5.2.- Chimie bioorganică analitică; studiul metaboliților organici din matrici biologice complexe; studii fundamentale de metabolism vegetal, aplicații privind caracterizarea rapidă a unor produse sau materii prime de interes agro-alimentar și a depistării adulterărilor sau a altor tipuri de fraudă.
- Colaborari cu ICM "Petru Poni", UPB, Chimcomplex SA., Institutul Mamei și Copilului, Chișinău, R. Moldova., U.M.F. "Iuliu Hațieganu", Spitalul Clinic Județean de Urgență Craiova.*

Director,

Dr.ing. Dumitru Mircea VULUGA