



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 2022

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 1

Compuși heterociclici. Sinteze, stereochemie, reactivitate

responsabil - Dr ing. Florea Dumitrașcu

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

- 1.1.- Studiul legăturii de halogen în derivați heterociclici halogenați în stare solidă și în soluție; halogenopiroli, halogenopirazoli, halogenocarbazoli și halogenosidnone
- 1.2.- Cicloadiții [3+2] ale unor dipoli de tip alilic (sydnone, munchnone, N-ilide hetroaromatice) mediate fotochimic sau termic.
- 1.3.- Investigarea proprietăților biologice a compușilor sintetizați
- 1.4.- Provoacări sintetice: heterocicli cu 5 atomi anelați asimetric cu ciclobutadiena.
- 1.5.- Aplicații ale unor sisteme aromatice nebenzenoide.
- 1.6.- Sinteza de catalizatori Grubbs și testarea lor în reacții de metateză.
- 1.7.- Sinteza de noi bis-polimetilenquinolin-bis-carboxamide și acizi bis-polimetilenquinolinici-bis-carboxilici, derivați de, 4,4'-(ethane-1,2-diyl)dianiline cu posibilă acțiune antiacetilcolinesterazică în boala Alzheimer, pentru care se efectuează studii ADMET structura-activitate și simulări de dinamică moleculară pentru a stabili potențialul lor ca inhibitori de acetilcolinesteraza (AChE) și butirilcolinesteraza (BChE).
- 1.8.- Sinteza de noi ditiocarbamați derivați de amine nesaturate și complexii lor metalici corespunzători, analiza profilului lor biologic precum și obținerea de nanoparticule, nanofibre cu posibile acțiuni în domeniul senzorilor, electromagnetism, dispozitive medicale

Colaborări cu Univ. din Cape Town, Univ.București, Facultatea de Farmacie Bucuresti

1. Finalizare proiect compuși mezoionici de publicare în monografia Adv. Heterocycl. Chem. a următoarelor două review-uri:
 - a. **Christopher A. Ramsden and Florea Dumitrascu Type A mesoionic compounds (1980-2020)**
 - b. **Florea Dumitrascu and Christopher A. Ramsden Type B mesoionic compounds (1980-2020)**
2. Funcție de disponibilitatea colaboratorilor încercarea de publicare a 1-2 articole din tematica propusă
3. "Cotutelă" la teza de doctorat: Sinteza și caracterizarea structurală a unor noi compuși heterociclici cu nucleu pirolic sau pirolic condensat cu potențială acțiune biologică.
4. Colaborator la un proiectul având ca responsabil pe dna dr. Georgescu Florentina. Subiect: Mimici de strigolactone (fitohormoni sau hormoni de creștere a plantelor)

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 2

Materiale organice inteligente

responsabil - Dr ing. Valentin Victor Jerca

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

- 2.1.- 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.
- 2.2.- 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).
- 2.3.- 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.
- 2.4.- 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 II și III.

Colaborări cu Ghent University-Belgia, UPB, ICECHIM, INFLPR, ENS Lyon-Franta, INCDMM "Cantacuzino", U.Claude Bernard Lyon-Franta, IBCP "N.Simionescu", Bogazici University - Turcia., Bradford University – UK, Adam Mickiewicz University – Polonia.

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 3

Metabolomică și chimia compușilor de origine sau inspirație naturală

responsabil - Dr ing. Călin Deleanu

- 3.1.- Sinteze în seriile unor heterociclii cu azot, a iminozaharurilor cu testarea metodelor specifice chimiei verzi, sinteza unor complecși de paladiu cu liganzi polidentati, sinteze unor compuși schelet flavonic.
- 3.2.- Formularea unor materiale cu rețele interpenetrante din polizaharide biodegradabile cu aplicație potențială ca sisteme cu eliberare controlată a unor medicamente.
- 3.3.- Formularea unor biomateriale pe baza de hidrogeluri termoreversibile pentru printare 3D.
- 3.4.- Studii structurale, inclusiv pentru determinarea stereochemiei la compuși sintetizați.
- 3.5.- Studii preliminare privind metabolismul vegetal la struguri și tomate (Tema comună cu ICM "Petru Poni").
- 3.6.- Diagnosticul unor boli metabolice rare (Tema comună cu ICM "Petru Poni").

Colaborări cu ICM "Petru Poni", Universitatea Politehnica București, Enpro Soctech București, Institutul Mamei și Copilului, Chișinău, R. Moldova., U.M.F. "Iuliu Hațieganu" Cluj, Spitalul Clinic Județean de Urgență Craiova.

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 4

Bioresurse și Chimie Organică Sustenabilă

responsabil - Dr. ing. Florina Teodorescu

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

- 4.1.- Utilizarea de tehnici neconvenționale în activarea proceselor chimice.
- 4.2.- Extracția și caracterizarea compușilor naturali cu activitate biologică.
- 4.3.- Valorificarea bioresurselor, a deșeurilor și a subproduselor industriale urmărind conceptele chimiei sustenabile.
- 4.4.- Sinteze chimice bazate pe principiile chimiei verzi.

Colaborări cu ICECHIM, ICPAO-Mediaș, Universitatea Politehnica din București, Universitatea București, Natural Ingredients R&D S.R.L., Expergo Business Network S.R.L., SC Casa Natura online S.R.L.

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 5

Studii teoretice-structură și reactivitate

responsabil - Dr ing. Petru Filip

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

- 5.1.- Studiul cinetic și al mecanismelor de reacție prin tehnici experimentale (RMN de înaltă rezoluție) și prin tehnici de modelare a structurii moleculare (studii DFT).
 - 5.1.1 - Mecanismul termolizei azido chinonelor și azido ciclopentadienonelor
 - 5.1.2 - Mecanismul adițiilor 1,3 dipolare “ cu bromonitrometan
 - 5.2.- Modelarea suprafețelor catalitice și a proceselor moleculare induse pe ele. Influența defectelor și modificărilor în rețeaua cristalină
 - 1.2.1 - Modelarea suprafeței mxene – lor cu aplicații în cataliza organică
 - 1.2.2 - Quantum dots și nanoribbons din grafena în cataliză cu aplicații în pilele de combustie
 - 5.3.- Modelarea și predicția proprietăților moleculare - studii QSAR/QSPR, noi indici topologici de generația a 3-a.
 - 5.3.1 - Indici topologici de generația a 3-a obținuți din matricea de linii a grafului molecular corelați cu deplasările chimice ^{13}C din alcani saturati
 - 5.3.2 - Matricea de linii pentru molecule heteroatomice, corelari cu spectre de ^{13}C
- Colaborări cu Univ.Tehnică din Danemarca (DTU), Univ. Eindhoven, U.T. Dresda, Univ.Liège, UPB, Rm. Vâlcea,*

PROGRAMUL DE CERCETARE Nr. 6

Chimie metalosupramoleculară și inginerie cristalină

responsabil - Dr Simona Nica (Ion)

- 6.1.- Design și sinteză de rețele-metal organice proiectate rațional pentru separarea izotopilor hidrogenului (*Colaborare cu UB și ICSI Rm. Valcea*)
- 6.2.- Studiul legăturii de halogen între derivați azulenici și compuși aromatici substituiți cu halogeni diferiți - caracterizare în stare solidă
- 6.2.- Ingineria cristalină a cuștilor organice și metal-organice ca materiale electroactive cu arhitecturi supramoleculare exotice și cavități de diferite mărimi; proiectarea și sinteza de rețele covalente poroase (*covalent organic framework*)
- 6.3.- Materiale organice multifuncționale proiectate pentru recunoașterea vizuală de cationi și/sau anioni- investigații în stare solidă și în soluție prin spectroscopie RMN și X-Ray
- 6.4.- Materiale grafenice covalent funcționalizate cu derivați azulenici pentru aplicații în fabricarea de electrozi inovativi pentru pile de combustibil PEMFC (*Colaborare ICSI Rm. Valcea*)
- 6.5.- Sinteza de materiale tip *photoswitch* combinând chimia ditienilciclopentadienelor și cea a derivaților azulenici pentru a obține materiale multifuncționale cu răspuns complex la stimuli externi – investigații ale proprietăților fluorescente și electrochimice