



ACADEMIA ROMANA
INSTITUTUL DE CHIMIE MACROMOLECULARA "PETRU PONI"
Aleea Grigore Ghica Voda, nr. 41A, 700487 IASI, ROMANIA
Tel. +40.332.880220; Fax: +40.232.211299

Nr...../.....

A v i z a t,
ACADEMIA ROMANA

Acad. Marius ANDRUH
Presedintele Sectiei de Stiinte Chimice

PROGRAM DE CERCETARE
COMPUSI MACROMOLECULARI SI
MATERIALE POLIMERE AVANSATE
2021- 2027

Director,

Dr. Valeria HARABAGIU

Secretar stiintific,

Dr. Marcela MIHAI

CUPRINS

CONSIDERATII GENERALE.....	4
Subprogram 1. STRUCTURI SUPRAMOLECULARE BIO-INSPIRATE SI MATERIALE AVANSATE CU APLICATII IN TEHNOLOGII EMERGENTE	6
<i>PROIECT 1.1. Entitati nano- si micro-structurate pentru aplicatii biomedicale specifice.....</i>	<i>11</i>
<i>PROIECT 1.2. Sisteme supramoleculare micro- si nanostructurate: proiectare, sinteza si aplicatii.....</i>	<i>15</i>
<i>PROIECT 1.3. Senzori electrochimici: de la materiale nanostructurate electroactive pana la aplicatii specifice pentru sanatate si mediu.....</i>	<i>17</i>
<i>PROIECT 1.4. Materiale (bio)polimere si arhitecturi nanostructurate multifunctionale pentru aplicatii specifice.....</i>	<i>20</i>
Subprogram 2. SINTEZA DE MONOMERI SI POLIMERI PRIN METODE CHIMICE SI FOTOCHIMICE. MATERIALE PENTRU ECO- SI BIO-APLICATII	23
<i>PROIECT 2.1. Structuri polimerice dirijate pentru incorporarea de nanoaditivi, cu aplicatii eco-tehnologice, utilizand metode chimice si fotochimice.....</i>	<i>27</i>
<i>PROIECT 2.2. Materiale poliuretanic ce includ bio-componenti ca perspectiva a chimiei ecologice</i>	<i>29</i>
Subprogram 3. STRUCTURI HETEROCATENARE/HETEROCLICE. SINTEZA, CARACTERIZARE, APLICATII PENTRU IMBUNATATIREA CALITATII VIETII.....	32
<i>PROIECT 3.1. Derivati de chitosan si/sau fenotiazina: sinteza, obtinere de materiale, formulare, investigare.....</i>	<i>37</i>
<i>PROIECT 3.2. Materiale polimerice care contin fosfor, sulf sau azot pentru obtinerea de filme, membrane sau acoperiri.....</i>	<i>40</i>
<i>PROIECT 3.3. Materiale hibride pe baza de polisulfone.....</i>	<i>43</i>
<i>PROIECT 3.4. Corelarea factorilor de mediu si stres cu studii structurale si de metabolica RMN in regnul vegetal si animal.....</i>	<i>46</i>
Subprogram 4. POLIMERI IONICI SINTETICI SI NATURALI. MATERIALE COMPOZITE MULTIFUNCTIONALE	48
<i>PROIECT 4.1. Polimeri (zwitter)ionici liniari si reticulati: sinteza, materiale, aplicatii.....</i>	<i>53</i>
<i>PROIECT 4.2. Sisteme polimerice multifunctionale cu arhitectura 3D controlata: sinteza si potentiale aplicatii ..</i>	<i>56</i>
Subprogram 5. POLIMERI NATURALI/SINTETICI PENTRU MATERIALE BIOACTIVE, BIOCOMPATIBILE, BIOMIMETICE.....	60
<i>PROIECT 5.1. Suporturi macromoleculare adaptive pentru aplicatii biomedicale</i>	<i>66</i>

<i>PROIECT 5.2. Polimeri amfifili si sisteme polimere complexe pe baza de compusi naturali si sintetici</i>	<i>68</i>
<i>PROIECT 5.3. Sisteme polimerice hibride structurate cu reticulanti functionali specifici</i>	<i>71</i>
<i>PROIECT 5.4. Valorificare biomasa vegetala. Procedee neconventionale de separare si functionalizare.....</i>	<i>74</i>
Subprogram 6. POLIMERI ELEMENT-ORGANICI, COMPLECSI METALICI SI MATERIALE ORGANIC/ANORGANICE.....	77
<i>PROIECT 6.1. Compusi, polimeri si materiale organic-anorganice cu proprietati adaptive.....</i>	<i>83</i>
<i>PROIECT 6.2. Compozite polimer-anorganice si materiale nanostructurate cu aplicatii in fotodetectie, cataliza si protectia mediului.....</i>	<i>86</i>
Subprogram 7. ARHITECTURI POLIMERE PENTRU APLICATII IN OPTO-ELECTRONICA SI ENERGIE.....	90
<i>PROIECT 7.1. Polimeri (hetero)aromatici pentru filme subtiri si acoperiri destinate unor aplicatii din (opto)electronica si energie.....</i>	<i>95</i>
<i>PROIECT 7.2. Polimeri semiconductor/amfifili cu aplicatii opto-electronice.....</i>	<i>98</i>
Subprogram 8. CHIMIA FIZICA A MATERIALELOR MULTICOMPONENTE IN SOLUTIE SI IN FAZA SOLIDA.....	101
<i>PROIECT 8.1. Interactiuni fizico-chimice in sisteme fotosensibile.....</i>	<i>106</i>
<i>PROIECT 8.2. Interactiuni si proprietati in sisteme polimerice complexe</i>	<i>108</i>
<i>PROIECT 8.3. Materiale polimere. Corelatii structura/morfologie/ proprietati optice si electrice.....</i>	<i>111</i>
<i>PROIECT 8.4. Bio(nano)compozite. Compatibilitate, studii cinetice si de degradare.....</i>	<i>114</i>
Subprogram 9. CARACTERIZARE vs. SINTEZA. ABORDARE HOLISTICA IN STUDIUL MATERIALELOR POLIMERE.....	117
<i>PROIECT 9.1. Fenomene de mobilitate moleculara specifice polimerilor si materialelor polimere.....</i>	<i>122</i>
<i>PROIECT 9.2. Proprietati fizico-chimice caracteristice materialelor polimere structurate.....</i>	<i>125</i>
Activitate extra-plan: CERCETARE PRECOMPETITIVA SI TRANSFER TEHNOLOGIC	
<i>Laborator de cercetare aplicativa si transfer tehnologic</i>	

PROGRAM DE CERCETARE

COMPUSI MACROMOLECULARI SI

MATERIALE POLIMERE AVANSATE

2021-2027

CONSIDERATII GENERALE

Scop

Programul de cercetare COMPUSI MACROMOLECULARI SI MATERIALE POLIMERE AVANSATE, 2021-2027, isi propune imbunatatirea performantei institutionale a Institutului de Chimie Macromoleculara "Petru Poni" (ICMPP), cu posibilitati de dezvoltare in domenii de interes pentru Romania si Uniunea Europeana, prin sustinerea si dezvoltarea competentelor de cercetare existente la nivelul ICMPP precum si a capacitatii de transfer a unor rezultate aplicabile.

Obiective specifice

Dezvoltarea capacitatii proprii de cercetare prin:

- valorificarea si difuzarea cunostintelor si rezultatelor de cercetare;
- acordarea de asistenta tehnica si de servicii stiintifice si tehnologice de inalt nivel in domenii prioritare pentru societate;
- initierea si dezvoltarea de colaborari viabile cu centre academice din tara si strainatate, cu parteneri din mediul economic public si privat;
- cresterea gradului de implicare si vizibilitate pe plan national/international;
- dezvoltarea si cresterea competentei resursei umane.

Rezultatele preconizate

Programul de cercetare 2021-2027 va asigura consolidarea competentelor stiintifice si tehnice in domenii de importanta strategica pentru dezvoltarea ICMPP, prin corelarea si coordonarea activitatilor si resurselor in cadrul institutului si valorificarea acestor competente prin rezultate ale cercetarii oferite mediului stiintific, economic si social.

Principali indicatori de rezultat

- publicatii in reviste cotate ISI;
- participari la manifestari stiintifice nationale si internationale;

- cereri brevete/brevete depuse la nivel national si international;
- (tineri) cercetatori nou angajati in institut; doctoranzi, post-doctoranzi instruiti in institut;
- servicii de cercetare oferite prin utilizarea infrastructurii de cercetare disponibile in institut;
- contracte de cercetare/servicii de cercetare extraplan, finantate din resurse publice sau private.

Lista completa a indicatorilor este cea stabilita de AR.

Structura Programului

Programul de cercetare este structurat in **noua Subprograme** care sunt realizate prin colaborarea unor grupuri de cercetare din cadrul Laboratoarelor ICMPP:

Laborator Centrul de cercetari avansate pentru bio-nano-conjugate si biopolimeri

Laborator Poliaditie si fotochimie

Laborator Policondensare si polimeri termostabili

Laborator Polimeri functionali

Laborator Polimeri naturali. Materiale bioactive si biocompatibile

Laborator Polimeri anorganici

Laborator Polimeri electroactivi si plasmochimie

Laborator Chimia fizica a polimerilor

Laborator Fizica polimerilor si materialelor polimere

Subprogramele sunt constituite din **Proiecte** componente, complementare in rezolvarea unitara a tematicii fiecarui Subprogram.

Etica

Directorii de Subprogram/Proiect au obligatia sa se asigure ca se vor respecta normele prevazute de Legea nr. 206/2004 privind buna conduita in cercetarea stiintifica, cu modificarile si completarile ulterioare, precum si de alte reglementari legislative de etica specifice domeniului de cercetare al Subprogramului/Proiectului.

Egalitatea de sanse

Egalitatea de sanse intre toti cercetatorii institutului si absenta discriminarilor de orice fel vor fi asigurate pentru toti participantii in perioada de implementare a Subprogramelor/ Proiectelor, in conformitate cu prevederile legale nationale si practicile europene. Directorii de Subprograme/Proiecte vor lua toate masurile pentru promovarea egalitatii de sanse in implementarea Subprogramului/Proiectului coordonat.

Programul de cercetare 2021-2027, aprobat de Consiliul Stiintific al ICMPP, este trimis spre validare la forul tutelar, Academia Romana.

Dupa aprobare la Academia Romana, lista de Subprograme/Proiecte derulate in cadrul Programului de cercetare 2021-2027 va fi publicata pe site-ul ICMPP, sectiunea "Program cercetare 2021-2027".

LABORATOR**CENTRU DE CERCETARI AVANSATE PENTRU BIONANOCONJUGATE SI BIOPOLIMERI****SUBPROGRAM 1. STRUCTURI SUPRAMOLECULARE BIO-INSPIRATE SI MATERIALE AVANSATE CU APLICATII IN TEHNOLOGII EMERGENTE****Director Subprogram 1, dr. Mariana PINTEALA, CS I****ECHIPA SUBPROGRAMULUI**

Nr. Crt.	Prenume NUME	Funcția	Categorie profesionala	Norma
1	Dr. Mariana PINTEALA	Director subprogram 1	CS I	
2	Dr. Lilia CLIMA	Director proiect 1.1	CSIII	1
3	Dr. Ioan CIANGA	Membru proiect 1.1	CSI	1
4	Dr. Mariana PINTEALA	Membru proiect 1.1	CSI	0,5
5	Dr. Luminita CIANGA	Membru proiect 1.1	CSIII	1
6	Dr. Dragos PEPTANARIU	Membru proiect 1.1	CS	1
7	Dr. Cristina AL-MATARNEH	Membru proiect 1.1	CS	1
8	Dr. Anca-Dana BENDREA	Membru proiect 1.1	CS	1
9	Dr. Andrei DASCALU	Membru proiect 1.1	AC	1
10	Dr. Adina COROABA	Membru proiect 1.1	AC	0,5
11	Dr. Bogdan Florin CRACIUN	Membru proiect 1.1	AC	1
12	Dr. Tudor VASILIU	Membru proiect 1.1	AC	1
13	Isabela SANDU	Membru proiect 1.1	AC	1
14	Drd. Petru TARNOVAN	Membru proiect 1.1	Drd	1
15	Dr. Alexandru ROTARU	Director proiect 1.2	CSII	1
16	Dr. Elena-Laura URSU	Membru proiect 1.2	CSIII	1
17	Dr. Irina ROSCA	Membru proiect 1.2	CS	0,3
18	Dr. Narcisa-Laura MARANGOCI	Membru proiect 1.2	AC	1
19	Dr. Lucian BAHRAIN	Membru proiect 1.2	AC	1
20	Dr. Monica SARDARU	Membru proiect 1.2	AC	1
21	Drd. Razvan GHIARASIM	Membru proiect 1.2	Drd	1
22	Dr. Adina ARVINTE	Director proiect 1.3	CSIII	1
23	Dr. Mariana PINTEALA	Membru proiect 1.3	CSI	0,3
24	Dr. Adrian FIFERE	Membru proiect 1.3	CS	1
25	Dr. Anca-Roxana PETROVICI	Membru proiect 1.3	CS	0,5

26	Dr. Irina ROSCA	Membru proiect 1.3	CS	0,4
27	Dr. Adina COROABA	Membru proiect 1.3	AC	0,3
28	Dr. Florica DOROFTEI	Membru proiect 1.3	Ing.	0,5
29	Dr. Dana BEJAN	Membru proiect 1.3	AC	1
30	Dr. Ioana-Andreea TURIN-MOLEAVIN	Membru proiect 1.3	AC	1
31	Dr. Lacramioara LUNGOCI	Membru proiect 1.3	AC	1
32	Drd. Oana RACHITA (CARP)	Membru proiect 1.3	Drd	1
33	Drd. Alexandra IACOBESCU	Membru proiect 1.3	Drd	1
34	Dr. Dan ROSU	Director proiect 1.4	CSI	1
35	Dr. Mariana PINTEALA	Membru proiect 1.4	CSI	0,2
36	Dr. Fonica MUSTATA	Membru proiect 1.4	CSI	0,4
37	Dr. Liliana ROSU	Membru proiect 1.4	CSIII	1
38	Dr. Carmen-Alice TEACA	Membru proiect 1.4	CSIII	1
39	Dr. Cristian-Dragos VARGANICI	Membru proiect 1.4	CSIII	1
40	Dr. Maurusa-Elena IGNAT	Membru proiect 1.4	CS	1
41	Dr. Leonard IGNAT	Membru proiect 1.4	CS	1
42	Dr. Irina ROSCA	Membru proiect 1.4	CS	0,3
43	Dr. Anca-Roxana PETROVICI	Membru proiect 1.4	CS	0,2
44	Dr. Adina COROABA	Membru proiect 1.4	AC	0,2
45	Livia ALBU	Membru proiect 1.4	Tehnician	1
46	Paul ZLATE	Membru Subprogram 1	Ing.	1

Total norme AC-CSI: CS I: 3,4; CS II: 1; CSIII: 7; CS: 7,7; AC: 11 = **30,1**

Alte categorii: Drd: 4; Teh: 1; Ing: 1,5 = **6,5**

Premizele propunerii

Motto: „Chimia este stiinta materiei si a transformarilor pe care le sufera materia; viata reprezinta cea mai inalta expresie a Chimiei.” (Jean Marie Lehn).

Dezvoltarea stiintei materialelor a fost intotdeauna punctul de plecare pentru schimbari fundamentale in viata de zi cu zi. Daca la inceputurile sale chimia era privita ca o stiinta de sine statatoare, la ora actuala o dezvoltare reala (concreta)/sustenabila se poate realiza doar printr-o abordare multidisciplinara, incepand cu proiectare asistata pe calculator, urmata de sinteza sau biosinteza, caracterizare structurala, morfologica si demonstrarea proprietatilor specifice ale materialelor pentru care au fost proiectate. *In acest context, subprogramul S1, printr-o colaborare interdisciplinara intre chimisti, fizicieni, medici, biologi si ingineri, propune dezvoltarea de (nano)materiale noi, ca (nano)platforme pentru componente inteligente si sisteme care sa aiba un impact asupra diferitelor domenii de mare relevanta sociala (ex. medicina, agricultura, energie).*

Tematica propusa prin Subprogramul S1 pentru urmatoarea perioada (2021-2027) se bazeaza pe experienta dobandita in cadrul diferitelor proiecte de cercetare (ex. *Biologically Inspired Systems for Engineered Structural and Functional Entities, PN-II-ID-PCCE-2011-2-0028; Hyperthermic Magnetic Nanoparticle Ablation of Liver and Pancreatic Tumors, PN-II-PT-PCCA-2011-3.1-0252; Wood and Derivatives Protection by Novel Bio-coating Solutions, ERA-IB-16-040; Functional DNA nanostructures-gold nanoparticles for targeted gene therapy purposes, PN-II-RU-TE-2014-4-1444; Mimicking living matter mechanisms by five-dimensional chemistry, PN-III-P4-ID-PCCF-2016-0050, etc.*), cu ajutorul carora s-au pus bazele intelegerii mecanismului de actiune a sistemelor complexe cu proprietati (prestabilite prin design) proiectate. Plecand de la aceste cunostinte, in cadrul proiectului Orizont 2020 SupraChem Lab

am avut ocazia sa ne dezvoltam in domeniul chimiei supramoleculare, beneficiind si de indrumarea stiintifica a Prof. Marc J. M. ABADIE, Universitatea Montpellier, Franta, expert in chimia interfetei/interfazei nanocompozitelor si in sinteza (ROMP, ROP) elastomerilor termoplastici biodegradabili, cat si de suportul Prof. Jean Marie LEHN, laureat al premiului Nobel pentru chimie supramoleculara. In acest context, directiile de cercetare ale Subprogramului S1, propuse pentru perioada 2021-2027, sunt in concordanta cu experienta acumulata in perioada 2012-2020. De asemenea, in contextul european actual, tematica pe care o propunem tine cont si de politicile de cercetare Europene, asa cum sunt incluse in Pactul Verde European (https://ec.europa.eu/info/strategy/priorities-2019-2024/european-green-deal_ro) pentru o dezvoltare sustenabila si trecerea la o economie circulara, mai curata, cat si in orientarile tematice cuprinse in cadrul programului Orizont Europa (https://ec.europa.eu/info/horizon-europe_en), cum ar fi misiunea dedicata combaterii cancerului, misiunea schimbarilor climatice (pe componenta de diminuare a poluarii) si misiunea pentru o agricultura durabila.

Din considerentele amintite mai sus, merita sa ne oprim asupra nanomaterialelor hibride multifunctionale bazate pe (bio)polimeri deoarece au demonstrat deja ca sunt solutii viabile pentru a raspunde la cererile existente in domenii prioritare precum sanatatea, mediul si energia. Astfel, descoperirile in nanotehnologiile de ultima generatie la scara larga pentru proiectarea si sintetizarea de nanomateriale hibride multifunctionale avansate, bazate pe polimeri cu performante imbunatatite, a deschis noi si incitante perspective pentru cercetatori pentru a dezvolta domeniul si a contribui la dezvoltarea tehnologica a viitorului. Producerea acestora poate duce la materiale multifunctionale cu proprietati superioare unice, cu o gama larga de aplicatii preconizate (ex. tehnologia portabila, e-Health, medicina personalizata). Cu toate acestea, designul, performanta si aplicatiile practice sunt inca provocatoare (Multifunctional Hybrid Nanomaterials for Sustainable Agri-food and Ecosystems (<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-821354-4.00001-7>)).

Scopul Subprogramului

Scopul subprogramului - **dezvoltare de structuri bio-inspirate si materiale avansate cu aplicatii in tehnologii emergente** - este in acord cu alinierea tematicilor de cercetare nationale cu politicile de cercetare Europene (incluse in Pactul Verde European pentru o dezvoltare sustenabila si trecerea la o economie circulara, mai curata, cat si ale celor incluse in cadrul programului Orizont Europa).

Obiectiv general

Proiectarea, obtinerea de materiale nanostructurate hibride multifunctionale si studiul aplicabilitatii acestora in tehnologii inovatoare pentru domeniul biomedical (de ex. combaterea cancerului sau a bolilor rare), ameliorarea schimbarilor climatice (prin monitorizarea si diminuarea poluarii) si misiunea pentru o agricultura durabila.

Obiective specifice

- Dezvoltarea unei noi generatii de nanomaterialele hibride multifunctionale, denumite si biomateriale inteligente, cu aplicatii biomedicale, incluzand terapia genica, livrarea de medicamente sau diagnostic.
- Intelegerea si asigurarea unei surse alternative de structuri (bio)polimerice din resurse regenerabile sau din materialele plastice, cu proprietati augmentate din punct de vedere aplicativ si care se aiba un impact asupra diferitelor domenii de mare relevanta sociala, cum ar fi economia circulara.

- Studiul aplicabilitatii structurilor si materialelor nou create in vederea cresterii eficacitatii proceselor de transfer tehnologic, imbunatatirea protectiei si a valorificarii rezultatelor din cercetare.
- Dezvoltarea unor echipe de specialisti cu competente integrate si complementare, capabila sa se adapteze in mod dinamic schimbarilor si celor mai noi tendinte in domeniile abordate, cat si sa interactioneze la nivel international.

Proiecte relevante realizate anterior

Dintre proiectele desfasurate in cadrul subprogramului (<https://www.intelcentru.ro/proiecte.php>) amintim: *Horizon 2020 WIDESPREAD 2-2014: ERA Chairs: SupraChem Lab Project* (no: 667387/2015) (2015-2020), coordonator dr. M. Pinteala; *Formulation of bio-absorbable class III medical device for local drug delivery*, Research agreement 5289/09.0.8.2019 - CORTHOTEC LIMITED, London, UK (Company), 2019-2020, coordonator dr. M. Pinteala; *Biologically inspired systems for engineered structural and functional entities*, PNII-PCCE-2011-2-0028, 2012-2016, coordonator dr. M. Pinteala; *Research on the achievement of products of fermentation by lactic bacteria and yeasts with application in bakery and pastry industry*, Research services 4598/1.09.2012 - ZEELANDIA H.J, 2012-2014.

Eficienta confirmata in aplicarea rezultatelor obtinute in domeniul specific proiectului

Pe tematica Subprogramului S1 au fost publicate in ultimii 5 ani peste 200 de articole in jurnale cotate ISI, 22 capitole de carte, 4 brevete, iar rezultatele au fost diseminate la peste 100 de manifestari stiintifice. De asemenea, rezultatele cercetarii au fost recunoscute la nivel international, relevante in acest caz fiind: M. Pinteala - bursa senior Fulbright; L. Rosu si A. Petrovici - Medalia de aur Inventica, C.D. Varganici - Best young researcher.

Expertiza resursei umane implicate

Grupul Subprogramului S1 este alcatuit din cercetatori cu expertize diferite: chimisti, fizicieni, biochimisti, biologi si medici, dintre care 11 au indicele Hirch peste 8. Fiecare Proiect component are resursa umana necesara implementarii temei cu succes. O parte din membrii echipei fac parte din colectivele de cercetare ale mai multor proiecte pentru a asigura expertiza necesara fiecarui proiect. De exemplu, dr. chimist M. Pinteala, dr. biolog I. Rosca, dr. fizician A. Coroaba, dr. biochimist A. Petrovici vor deservi mai multe proiecte pentru indeplinirea obiectivelor propuse. Dr. T. Rusu va oferi consultanta pentru proiecte nationale si internationale, iar Dr. N. L. Marangoci va monitoriza resursele financiare ale departamentului.

Infrastructura necesara pentru realizarea Subprogramului

Infrastructura Institutului - care cuprinde si infrastructura din IntelCentru - si infrastructura de cercetare a expertilor din strainatate vor asigura realizarea Subprogramului. Suplimentar, speram ca proiectul InfraSupraChemLab, din fonduri structurale, va fi finantat pana la sfarsitul anului 2020 si va asigura completarea infrastructurii de cercetare.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Subprogramului

Finantarea resursei umane din cadrul departamentului este asigurata de la bugetul de stat si din proiecte de cercetare. Resursele financiare pentru consumabilele de laborator si reactivii specifici se vor asigura prin proiectele in implementare: un proiect PNIII 5D-nanoP, un proiect TE, doua proiecte PD si un proiect EEA RO-NO. Echipa de coordonare a Subprogramului are o politica de atragere

continua de noi surse de finantare. Cheltuielile pentru diseminarea rezultatelor cercetarii si stagii de pregatire vor fi asigurate in limita fondurilor disponibile din proiectele de cercetare.

Colaborare cu alte Subprograme din institut

Colaborarea cu alte Subprograme din institut care se ocupa cu (de) caracterizarea fizico-chimica a structurilor polimerice se va mentine si va fi extinsa pe masura ce numarul si tipul de investigatii se vor diversifica. De asemenea, se intentioneaza continuarea colaborarilor dezvoltate cu grupurile de cercetare conduse de Dr. Maria Cazacu, Dr. Gheorghe Fundueanu, Dr. Luminita Marin, Dr. Marcela Mihai, Dr. Iuliana Spiridon. Alte tipuri de colaborari se vor dezvolta in functie de evolutia dezvoltarii domeniului. Dr. M. Pinteala a promovat colaborarea sau consultarea stiintifica cu cercetatorii din ICMPP. Astfel a initiat un proiect complex (5D-nanoP) in care sunt implicate grupuri din ICMPP, cu expertize complementare, pentru indeplinirea obiectivelor acestuia. De asemenea, din echipele proiectelor coordonate de Dr. M. Pinteala au facut parte intotdeauna colective care apartin administrativ altor departamente ale ICMPP.

Colaborare cu alte centre academice din tara

UMF, Iasi; Cemex, UMF, Iasi; Transcend, IRO Iasi; Universitatea Apollonia; Spitalul "Sf. Spiridon"; Spitalul Clinic Militar de Urgenta „Dr. Iacob Czihaç”; Extreme Light Infrastructure - Nuclear Physics (ELI-NP), Magurele, Bucuresti; Institutul de Chimie Organica „C. D. Nenitescu”, Bucuresti; Institutul de Biologie si Patologie Celulara „Nicolae Simionescu”, Bucuresti.

Colaborare cu alte centre academice din strainatate

Prof. Joao G. Crespo, FCT-Universidade Nova de Lisboa, Portugal; *Prof. Alice Mija*, Chemistry Department, University of Nice Sophia Antipolis, France; *Prof. Marc J.M. Abadie*, University of Montpellier, France; *Dr. Sylvia Wagner*, Fraunhofer Institute for Biomedical Engineering, Sankt Ingbert, Germany; *Prof. Danny O'Hare*, Imperial College London, UK; *Prof. Aatto Laaksonen*, Division of Physical Chemistry, Arrhenius Laboratory, Stockholm University, Sweden; *Dr. Cristina Iojoiu*, CNRS, LEPMI, Grenoble-INP, France; *Prof. Louise De Cola*, Louis Pasteur Strasbourg University, France; *Prof. Francesca Mocci*, Cagliari University, Italy; *Prof. Christoph Janiak*, University of Düsseldorf, Germany; *Prof. Claudiu Supuran*, University of Florence, Italy; *Prof. Ulrich Scherf*, Institute of Polymertechnology, Wuppertal University, Germany; *Prof. Carlos Aleman*, *Prof. Elaine Armelin* si *Prof. Jordi Puigalli* de la Universitatea Politehnica a Cataluniei, Spania; *Prof. Yusuf Yagci* si *Prof. Demet Göen Çolak*, Universitatea Tehnica din Istanbul, Turcia; *Prof. Suna Timur*, Univeristatea Ege, Facultatea de Stiinte, Departamentul de Biochimie, Izmir, Turcia.

Activitati de formare a tinerilor cercetatori: doctoranzi, post-doctoranzi

In cadrul Subprogramului 1 isi desfasoara activitatea masteranzi (ca voluntari) si doctoranzi cu stipendiu de la Academia Romana sau cu burse doctorale din proiecte de cercetare.

In ultimii 5 ani, in cadrul Subprogramului 1 au fost sustinute mai mult de 10 teze de doctorat si, de asemenea, mai mult de 10 pozitii post-doctorale au fost finantate din veniturile extrabugetare.

Proiecte componente

Denumire proiect	Descriere succinta
Proiect 1.1 Entitati nano- si micro-structurate pentru aplicatii biomedicale specifice <i>Dr. L. Clima, CS III</i>	Dezvoltarea de componente nanometrice, versatile si biomimetice. Obtinere de nanosisteme cu functionalitate multipla, care sa poata fi dirijate catre o tinta, capabile sa transporte mai multe principii active si/sau a caror actiune, generatoare de efecte terapeutice, sa poata fi modulata prin intermediul diferitor stimuli externi.
Proiect 1.2 Sisteme supramoleculare micro- si nanostructurate: proiectare, sinteza si aplicatii <i>Dr. A. Rotaru, CS II</i>	Dezvoltarea de strategii de asamblare supramoleculare a sistemelor nano- si microstructurate cu ajutorul unitatilor organice functionale, macromoleculilor, biomoleculilor si a derivatilor acestora.
Proiect 1.3 Senzori electrochimici: de la materiale nanostructurate electroactive pana la aplicatii specifice pentru sanatate si mediu <i>Dr. A. Arvinte, CS III</i>	Integrarea materialelor nanostructurate cu traductoare electronice in scopul dezvoltarii senzorilor electrochimici sensibili si specifici pentru analiti de interes. Proiectarea si dezvoltarea sistemelor redox nanostructurate anorganice care sa functioneze ca agenti de transport ai medicamentelor, sa aiba activitate catalitica, sa ofere un semnal masurabil specific senzorilor sau sa fie capabile sa genereze ori sa inactiveze diferite specii reactive.
Proiect 1.4 Materiale (bio)polimere si arhitecturi nanostructurate multifunctionale pentru aplicatii specifice <i>Dr. D. Rosu, CS I</i>	Obtinerea unor materiale (bio)polimere din resurse regenerabile pentru acoperiri ecologice, durabile si inovatoare, destinate protectiei diferitelor suprafete impotriva actiunii factorilor de mediu. Sinteza unor materiale hibride nanostructurate care includ micro- si nanoparticule metalice si oxizi metalici, pentru aplicatii speciale. Studiul proceselor degradative prin metode fizico-chimice si biologice.

PROIECT 1.1. Entitati nano- si micro-structurate pentru aplicatii biomedicale specifice**Director proiect, dr. Lilia CLIMA, CSIII**

Nr.crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1	Dr. Lilia CLIMA	Director proiect 1.1	CSIII	1
2	Dr. Ioan CIANGA	Membru proiect 1.1	CSI	1
3	Dr. Mariana PINTEALA	Membru proiect 1.1	CSI	0,5
4	Dr. Luminita CIANGA	Membru proiect 1.1	CSIII	1
5	Dr. Dragos PEPTANARIU	Membru proiect 1.1	CS	1
6	Dr. Cristina AL-MATARNEH	Membru proiect 1.1	CS	1
7	Dr. Anca BENDREA	Membru proiect 1.1	CS	1
8	Dr. Andrei DASCALU	Membru proiect 1.1	AC	1
9	Dr. Adina COROABA	Membru proiect 1.1	AC	0,5
10	Dr. Bogdan Florin CRACIUN	Membru proiect 1.1	AC	1
11	Dr. Tudor VASILIU	Membru proiect 1.1	AC	1

12	Biochim. Isabela SANDU	Membru proiect 1.1	AC	1
13	Drd. Petru TARNOVAN	Membru proiect 1.1	Drd	1

Total norme AC-CSI: CS I: 1,5; CS II: 0; CSIII: 2; CS: 3; AC: 4,5 = **11.5**; **Alte categorii:** drd: **1**

Scopul proiectului

Medicina moderna se gaseste intr-o febrila cautare de noi cai, tehnici si „unelte” care sa ii permita atat diagnosticarea si tratarea unei game de afectiuni in continua extindere, cat si terapia unora dintre maladiile rare sau deosebit de agresive, pentru care nu exista inca principii curative in plan farmacologic ori chirurgical. Sistemele de livrare a substantelor medicamentoase de noua generatie se bazeaza pe materiale personalizate multivalente, cu un grad ridicat de biocompatibilitate si biodegradabilitate, care livreaza medicamentul catre situsuri specifice din tesuturi, organe, celule si organe subcelulare, fara a dauna organismului, in formulari care sunt usor de utilizat si agreabile pentru pacienti. Din acest motiv, medicina moderna apeleaza la domenii stiintifice in care cercetarea se afla inca in stadiul de pionierat. Cautarea de noi metode pentru a controla interactiunile nanomaterialelor cu sistemele biologice, reprezinta unele dintre provocarile recente pentru transpunerea acestor tehnologii in terapii. Cercetari recente urmaresc dezvoltarea unor sisteme de livrare a principiilor active, bazate pe nanotehnologie, ce au ca obiective: (i) studiul fezabilitatii proceselor, fiind posibila aducerea rapida de tehnici terapeutice inovatoare pentru piata; (ii) posibilitatea de a obtine sisteme multifunctionale care sa indeplineasca simultan multiple cerinte biologice si terapeutice; si (iii) cresterea eficientei de orientare a nanosistemelor, conditie in care sa fie respectate standardele internationale pentru toxicologie si biocompatibilitate.

Avansarea in domeniul nanotehnologiei depinde in principal de avansarea in conceperea de nanomateriale. In acest context, a fost introdusa notiunea de biomimetism (creare de sisteme de inspiratie biologica), care se manifesta prin doua directii dominante de cercetare, respectiv (i) mimarea structurala si functionala a entitatilor fiziologic ori patologic active, in vederea studierii ex-vivo a mecanismelor viului si (ii) proiectarea si transpunerea inginereasca a unor entitati cu functionalitate strict controlata, cu performante similare celor specifice viului, utile in diagnosticarea, monitorizarea si terapia la nivel celular. Astfel, **scopul si obiectivele proiectului** se incadreaza in cea de-a doua directie mentionata, vizand contributiile la dezvoltarea de componente cu dimensiuni nanometrice si cu versatilitate care tinde sa o mimeze pe cea a sistemelor vii. In acest context, au fost dezvoltate cai diverse de a obtine nanosisteme cu functionalitate multipla (ex. sa poata fi dirijat catre o tinta, sa transporte mai multe principii active sau molecule ce actioneaza sub influenta unor stimuli externi generand efecte terapeutice, etc.), cum ar fi: (i) rute chimice clasice (modificari chimice pe sisteme preformate); (ii) aplicarea metodelor specifice din chimia dinamica constitutionala.

O alternativa in constructia biomaterialelor "vii", capabile sa se integreze perfect, sa coopereze si sa comunice cu sistemele biologice o constituie **polimerii conjugati electroconductori** ce prezinta capabilitati extinse si adaptate diverselor tipuri de **aplicatii biomedicale**, bazate pe **multifunctionalitate**, avand ca rezultat implicit extinderea cunoasterii fundamentale in aria polimerilor sintetici cu aplicatii biomedicale. Directia propusa este una **ambitioasa**, cu un caracter **interdisciplinar**, plasat la granita dintre chimia macromoleculara, biologie, stiinta materialelor si medicina, cu o **dinamica remarcabila** si cu o dezvoltare fara precedent in ultimul deceniu. Propunerea **are un grad redus de risc**, fiind validata de unele rezultate deja publicate ale grupului de cercetare. Dezvoltandu-se **polimeri conjugati electroconductori grefati**, la nivel structural (molecular) se va pastra cu precadere topologia ramificata. **Aceasta asigura un grad inalt de libertate in manipularea proprietatilor materialelor finale**. Proprietatile catenei conjugate rigide (electrice, optice) pot fi modulate prin incatenarea diverselor combinatii de heterocicluri aromatice.

Catenele laterale flexibile, biocompatibile si sau/biodegradabile vor putea fi de lungimi controlate, iar densitatea lor de grefare, cat si tipul de amplasare pe catena vor putea fi manipulate prin tipul de macromonomeri electroactivi folositi, cat si prin metoda de polimerizare aleasa. Vor fi aplicate pentru sinteza si metode de polimerizare recent aparute in domeniul polimerilor conjugati (de ex. *self-acid assisted polymerization*) care vor reduce la minimum sau vor elimina posibilitatea contaminarii polimerilor finali cu resturi de catalizatori sau alte impuritati care sa compromita biocompatibilitatea. Caracterul structural de tip "*rod-coil*" al polimerilor conjugati va permite nanostructurarea prin auto-asamblare in solutie, in masa si in film ("*bottom-up*"). Pe baza experientei anterioare, (T. Uyar, I. Cianga, et al., Mat. Lett., 63, 1639, 2009), biomaterialele obtinute vor putea fi nanostructurate si supuse post-polimerizarii prin metoda "*top-down*", de exemplu prin electrofilare sau, in cazul celor grefati cu catene laterale solubile in medii apoase, prin dizolvare directa, nanoprecipitare sau dializa.

Proiectul propune integrarea strategiei de auto-asamblare cu proprietatile distincte ale polimerilor conjugati (semi)conductori (mai ales conductia mixta electroni-ioni, proprietatile fotofizice) pentru a modula interactiunile cu macromoleculele biologice si/sau cu sistemele vii, avand ca efect direct conferirea de functii noi biomaterialelor obtinute.

Obiective generale

Sinteza pe cale chimica a nanosistemelor cu aplicatii biomedicale implica reactiile din chimia clasica: Proiectarea si sinteza de noi structuri polimerice conjugate, electroconductoare de diverse topologii; Caracterizarea si evaluarea proprietatilor materialelor obtinute pentru aplicatiile pentru care au fost proiectate; Studiul polimerilor conjugati in medii biologice de diverse compozitii (*in vitro* - proteine, enzime, celule; *in vivo*); Validarea aplicabilitatii polimerilor conjugati in diverse arii biomedicale (de ex. ingineria tesuturilor, biosenzori, diagnosticare si terapie).

Sinteza si studiul de nanosisteme prin chimie dinamica constitutională (chimie supramoleculara) cu punerea in aplicare in mod sinergetic de reactii covalente reversibile la nivel molecular cat si a interactiunilor intermoleculare necovalente la nivel supramolecular. Auto-asamblarea componentelor in arhitecturi bine definite, controlate de afinitatile constitutionale, va asigura fluxul de informatii structurale de la nivel molecular la nivel nanometric. Biomateriale nanostructurate 2D/3D, aplicand reactiile reversibile intre componentele constitutive ale sistemului nanometric, se vor obtine ca o solutie viabila post-sintetica pentru sistemele asamblate.

Dezvoltarea vectorilor non-virali pentru terapia genica. pentru corectarea efectelor induse de catre genele mutante, prin inlocuirea lor cu „exemplare” functionale, ori prin introducerea in genom a unor gene suplimentare, care sa compenseze, sa controleze ori sa corecteze efectele prezentei in celule a genelor ce se exprima aberant, ori maladiv.

Obiective specifice

- Proiectarea si generarea unor entitati nano- si micro-structurate, active in tratarea diferitelor afectiuni (cancer, micoze, psoriasis etc.), in terapia genica, in ingineria tisulara, precum si in identificarea unor bioanaliti. Structura si functionalitatea respectivelor entitati vor fi concepute pentru a chemo-, morfo- si bio-mima sistemele vii de vehiculare a purtatorilor de informatie genetica, constituindu-se in vectori genetici nonvirali
- Caracterizarea chimica si morfologica a sistemelor nou constituite
- Incarcarea sistemelor nou create cu principii active specifice aplicatiei dorite (ex. antitumorale, antioxidanti, DNA, fluorofori activi la stimuli externi etc.) si testarea capacitatii de incarcare, precum si a capacitatii de detectie prin fenomenul de recunoastere moleculara
- Testarea citotoxicitatii si a activitatii biologice

- Imbunatatirea randamentului de transfectie prin diverse abordari in sinteza chimica a moleculelor: optimizarea efectului amfifilic, fluorurarea, guanidilarea
- Cresterea specificitatii vectorilor de transfectie prin decorarea cu peptide, aptameri, sau alte structuri chimice

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Echipa proiectului este unitara, formata din 10 membri cu domenii de competenta complementare pentru tema multidisciplinara propusa. Proiectarea, planificarea si monitorizarea implemetarii activitatilor cat si diseminarea rezultatelor proiectului va fi asigurata de catre directorul de proiect si de catre membrii cu expertiza avansata in domeniu (dr. L. Clima, dr. M. Pinteala, dr. I. Cianga). Obtinerea de noi biomateriale inteligente, nanostructurate va fi asigurata de cercetatori experimentati, cu expertiza in sinteza organica si macromoleculara pe diverse clase de compusi (dr. M. Pinteala, Dr. L. Clima, dr. I. Cianga, dr. L. Cianga, dr. A. Dascalu, dr. A. Bendrea, dr. Al-Matarneh, dr. B. Craciun), caracterizarea lor structurala si fizico chimica fiind asigurata de cei implicati in sinteza si completata de cercetatori cu expertiza in metode de caracterizare fizica avansate (dr. A. Coroaba) cat si in modelare computerizata (dr. T. Vasiliu). Investigarea proprietatilor biologice cat si validarea aplicabilitatii noilor nanomateriale in aplicatiile biomedicale preconizate va fi asigurata de membrii echipei cu expertiza adecvata (medic, dr. D. Peptanariu, biochimist I. Sandu).

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Proiectul beneficiaza de infrastructura Intelcentru si a institutului in ansamblu, iar proiectele in derulare (*Retele metal-organice pe baza de liganzi aromatici fluorinati*, PN-III-P1-1.1-PD-2019-1303, 2020-2022, director dr. A. Dascalu, valoarea totala 250.000 lei; *Mimarea mecanismelor viului prin abordari ale chimiei supramoleculare, in cinci dimensiuni*, PN-III-P4-ID-PCCF-2016-0050, 2018 - 2022, director prof. A. LAAKSONEN, valoarea totala 8.450.000 lei) vor asigura o parte din resursele financiare necesare implementarii proiectului.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Colectivul proiectului colaboreaza si va continua colaborarea cu dr. L. Marin (proiectul 3.2), dr. M. Zlatariov, dr. C. Racles (proiect 6.2), dr. C. Cojocar, dr. L. Sacarescu (proiectul 6.3), dr. S. Coseri (proiectul 2.1), dr. G. Fundueanu (programul 5.2).

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Colaborari in tara: **IASI:** UMF; Cememx, UMF; Transcend, IRO; Universitatea Apollonia; Spitalul "Sf. Spiridon"; Spitalul Clinic Militar de Urgenta Dr. Iacob Czihac; **BUCURESTI:** Extreme Light Infrastructure - Nuclear Physics (ELI-NP), Magurele; Institutul de Chimie Organica "C. D. Nenitescu; Institutul de biologie si patologie celulara „Nicolae Simionescu".

Colaboratori internationali: Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg; Universitatea din Florenta; Universitatea de Stat din Moldova, Chisinau; University of Cagliari; Institute of Biotechnology, University of Manchester; Universitatea Politehnica a Cataluniei, Spania; Universitatea Tehnica din Istanbul Turcia; Univeristatea Ege, Izmir, Turcia.

PROIECT 1.2. Sisteme supramoleculare micro- si nanostructurate: proiectare, sinteza si aplicatii

Director proiect, dr. Alexandru ROTARU, CSII

Nr. crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	Dr. Alexandru ROTARU	Director proiect 1.2	CSII	1
2.	Dr. Elena-Laura URSU	Membru proiect 1.2	CSIII	1
3.	Dr. Irina ROSCA	Membru proiect 1.2	CS	0,3
4.	Dr. Narcisa-Laura MARANGOCI	Membru proiect 1.2	AC	1
5.	Dr. Lucian BHRIN	Membru proiect 1.2	AC	1
6.	Dr. Monica SARDARU	Membru proiect 1.2	AC	1
7.	Drd. Razvan GHIARASIM	Membru proiect 1.2	Drd	1

Total norme AC-CSI: CS II: 1; CSIII: 1; CS: 0.3; AC: 3 = 5.3; **Alte categorii:** Drd: 1 = 1

Scopul proiectului

Eforturile actuale pentru imbunatatirea calitatii vietii sunt strans legate de cercetare si inovare, in special in stiinta materialelor. Materialele avansate noi pot avea un impact major asupra problemelor sociale existente cum ar fi calitatea mediului, calitatea serviciilor medicale, economia circulara si siguranta alimentelor. Proiectarea si obtinerea de materiale noi cu proprietati specifice pentru aplicatii directe in domeniile amintite nu pot fi intotdeauna realizate doar prin procedee de sinteza simple. Fabricarea materialelor cu precizii structurale la nivel atomic, molecular, nano si micro devine cruciala pentru obtinerea de materiale optimizate pentru functiile vizate. Microfabricarea si nanofabricarea conventionala nu sunt intotdeauna capabile sa controleze integrarile structurale la nivel molecular. Astfel, dezvoltarea metodelor alternative, cum ar fi aplicarea principiilor chimiei supramoleculare, reprezinta o provocare in proiectarea si prepararea materialelor functionale.

Chimia supramoleculara ofera posibilitati vaste pentru proiectarea moleculelor cu proprietati interactive. Marea varietate de interactiuni supramoleculare disponibile ofera posibilitati infinite pentru construirea diverselor structuri non-covalente cu proprietati si functionalitati controlabile. Astfel de sisteme si-au gasit aplicatii in senzori, materiale luminescente, hidrogeluri, materiale pentru stocarea gazelor, dispozitive cu emisie de lumina, sisteme pentru imagistica biologica si celulara, etc. Chimia supramoleculara s-a extins si si-a gasit aplicarea in multe alte directii de studiu, acest domeniu multidisciplinar facand, printre altele, legaturi intre stiintele chimice, fizice si biologice. In ultimele cateva decenii, acest domeniu s-a extins spre construirea unor arhitecturi mai mari si mai complexe, de exemplu: rotaxanii, retelele metal-organice, polimerii de coordinare, clustere si asamblari complexe ale nanomaterialelor. Un rol important in proiectarea acestor arhitecturi functionale il joaca atat bio-macromoleculele, cat si moleculele mici functionale sau unitatile structurale naturale. Secvente de ADN natural si/sau sintetic, impreuna cu bazele azotate corespunzatoare ca unitati structurale individuale sunt larg utilizate in construirea sistemelor complexe cu aplicatii in cercetarea fundamentala si aplicativa, si ofera posibilitati infinite in dezvoltarea de strategii noi de organizare a materialelor la nivel micro si nano. Precizia asamblarilor moleculelor si a gruparilor functionale cu ajutorul unitatilor enumerate anterior atinge valori de sub 10 nm, ceea ce ofera o proprietate importanta in constructia de materiale noi nanostructurate complexe. De asemenea, unitatile structurale naturale mentionate determina ca ansamblurile finale sa fie biocompatibile, ceea ce le face candidati ideali pentru

construcția sistemelor pentru transportul și eliberarea controlată a medicamentelor, suporturi pentru creșterea celulelor sau pentru realizarea de senzori biomedicali.

În acest context, dezvoltarea de strategii noi și acumularea de cunoștințe avansate în dezvoltarea strategiilor supramoleculare de asamblare a sistemelor nano și microstructurate reprezintă o prioritate a subprogramului prezentat.

Scopul proiectului este de a dezvolta strategii supramoleculare de asamblare a sistemelor nano și microstructurate cu ajutorul unităților organice functionale, macromoleculilor, biomoleculilor și a derivaților acestora și utilizarea sistemelor supramoleculare obținute în diferite domenii de interes.

Obiective generale

Studiul sistemelor supramoleculare noi pe baza de secvențe de ADN natural sau sintetic. Obiectivul propus prevede următoarele: (i) proiectarea și asamblarea sistemelor supramoleculare alcătuite din unități structurale (moleculi organice, nano-obiecte și/sau nanoparticule metalice) cu ajutorul secvențelor de ADN; (ii) caracterizarea (AFM, TEM, SEM, UV-Vis, difracție circulară, etc) și studiul aprofundat structură-proprietate a sistemelor obținute; (iii) identificarea aplicabilităților sistemelor supramoleculare obținute în funcție de proprietățile acestora.

Sistemele supramoleculare pe baza de unități structurale naturale sau sintetice. O serie de molecule sintetice micromoleculare, macromoleculi naturale sau asemănătoare celor din natură sunt capabile să se autoasambleze în structuri supramoleculare complexe. Studiul propus se va axa pe următoarele: (i) funcționalizarea unităților structurale „mici” (moleculi organice sau macromoleculi precum polizaharide ciclice) cu grupuri functionale capabile să creeze rețele supramoleculare; (ii) optimizarea structurii rețelelor supramoleculare prin modificarea rapoartelor unităților functionale; (iii) îmbunătățirea proprietăților sistemelor asamblate structurate prin utilizarea de nanomateriale (materiale carbonice); (iv) studii de aplicabilitate a materialelor supramoleculare obținute.

Obiective specifice

- Obținerea, caracterizarea și testarea sistemelor supramoleculare functionale autoasamblate pe baza de secvențe de biopolimeri (ADN, proteine sau peptide).
- Sinteza moleculelor functionale „mici” capabile de asamblare sau autoasamblare; studiul proprietăților de asamblare ale acestuia.
- Evaluarea proprietăților pentru sistemele supramoleculare obținute în vederea aplicabilității lor specifice.
- Optimizarea structurilor supramoleculare în vederea obținerii materialelor nano și microstructurate optime.
- Testarea aplicabilității sistemelor supramoleculare obținute.

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Dr. Alexandru Rotaru - planificarea activităților proiectului; monitorizarea implementării activităților de cercetare; analiză și interpretarea datelor; diseminarea rezultatelor proiectului.

Dr. Elena-Laura Ursu - proiectarea sistemelor pe baza nanoparticulelor metalice pentru detecția și vizualizarea analitilor cu ajutorul spectroscopiei Raman; analiză de suprafață (AFM, XPS, TEM, Raman), funcționalizarea suprafețelor.

Dr. Irina Rosca - proiectarea și implementarea in vitro a experimentelor de microbiologie.

Dr. Narcisa Marangoci - sinteza organica; complexi de incluziune ai ciclodextrinei/ciclodextrine modificate cu diferite medicamente; studii de eliberare controlata.

Dr. Lucian Bahrin - sinteza organica si caracterizarea precursorilor ansamblurilor supramoleculare; optimizarea protocoalelor sintetice.

Dr. Monica Sardaru - sinteza organica si caracterizarea precursorilor ansamblurilor supramoleculare; optimizarea protocoalelor sintetice.

Razvan Ghiarasim - sinteza organica si caracterizarea precursorilor ansamblurilor supramoleculare; optimizarea protocoalelor sintetice.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Fiecare membru al Proiectului 1.2 va fi incurajat sa depuna aplicatii pentru diferite tipuri de finantari si sa devolve colaborari nationale si internationale. Pentru anul 2021 exista finantare din urmatoarele proiecte in derulare: Proiect H2020-MSCA-RISE – 2019, *Non-biased fluorescent dyes as markers of drugs for optical in cellulo and in vivo imaging*, director dr. Alexandru Rotaru; PN-III-P1-1.1-PD-2019, *Liganzi cu nucleu de [2.2]paraciclofan pentru retele metal organice*, director dr. Lucian Bahrin.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Sunt prevazute colaborari cu Proiectul 3.2 (Dr. Luminita Marin) si Proiectul 6.3 (Dr. Corneliu Cojocaru) in domeniile de eliberare controlata a principiilor active si a aspectelor teoretice privind structura ansamblurilor supramoleculare.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Colaborari cu centre din Romania: Prof. dr. Ramona Danac, Universitatea „Alexandru Ioan Cuza” Iasi, Facultatea de Chimie; dr. Brindusa Dragoi, Institutul Regional de Oncologie, Iasi; dr. George Mihail Vlasceanu, Facultatea de Inginerie Medicala, Universitatea Politehnica din Bucuresti.

Colaborari cu centre din UE: Prof. dr. Andriy Mokhir, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Germania; Prof. dr. Ilko Bald, Universität Potsdam, Germania; dr. Giovanni Nicola Roviello, Institutul de Biostructuri si Bioimagingistica, Napoli, Italia.

PROIECT 1.3. Senzori electrochimici: de la materiale nanostructurate electroactive pana la aplicatii specifice pentru sanatate si mediu

Director proiect, dr. Adina Arvinte, CSIII

Nr. crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	Dr. Adina ARVINTE	Director proiect 1.3	CSIII	1
2.	Dr. Mariana PINTEALA	Membru proiect 1.3	CSI	0,3
3.	Dr. Adrian FIFERE	Membru proiect 1.3	CS	1
4.	Dr. Anca-Roxana PETROVICI	Membru proiect 1.3	CS	0,5
5.	Dr. Irina ROSCA	Membru proiect 1.3	CS	0,4
6.	Dr. Adina COROABA	Membru proiect 1.3	AC	0,3
7.	Dr. Ioana-Andreea TURIN-MOLEAVIN	Membru proiect 1.3	AC	1

8.	Dr. Dana BEJAN	Membru proiect 1.3	AC	1
9.	Dr. Lacramioara LUNGOCI	Membru proiect 1.3	AC	1
10.	Dr. Florica DOROFTEI	Membru proiect 1.3	Ing.	0,5
11.	Drd. Oana RACHITA (CARP)	Membru proiect 1.3	Drd	1
12.	Drd. Alexandra IACOBESCU	Membru proiect 1.3	Drd.	1

Total norme AC-CSI: CS I: 0,3; CS II: 0; CSIII: 1; CS: 1,9; AC: 3,3 = **5,9**

Alte categorii: DRD: 2 ; Ing: 0,5 = **2,5**

Scopul proiectului

Aplicatii ale detectiei electrochimice pentru sanatate si mediu. In zilele noastre exista un interes continuu in abordarea provocarilor legate de monitorizarea precisa si fiabila a biomarkerilor relevanti in procesul de diagnosticare, precum si a numerosilor compusi organici/anorganici indicatori ai calitatii mediului. In acest context, senzorii/biosenzorii electrochimici sunt dezvoltati ca instrumente analitice capabile sa detecteze si sa cuantifice unul sau mai multi analiti, aducand numeroase avantaje comparativ cu alte tehnici conventionale. Electrochimia studiaza raspunsul chimic al unui sistem la un stimul electric, care implica pierderea de electroni (oxidare) sau castigul de electroni (reducere) pe care un material il sufera in timpul stimulării electrice. Aceste reactii de reducere si oxidare (reactii redox) pot oferi informatii despre concentratia, cinetica, mecanismele de reactie, starea chimica si comportamentul unei specii in solutie. Senzorii si biosenzorii electrochimici prezinta numeroase aplicatii in diverse domenii, iar in ultima perioada se inregistreaza o crestere exponentiala a implicarii acestor instrumente analitice in laboratoarele clinice, de mediu, alimentare, farmaceutice si, de asemenea, in majoritatea punctelor de ingrijire medicala. Analiza moleculelor relevante din punct de vedere clinic (biomarkeri) in fluidele biologice reprezinta o noua frontiera in diagnosticarea medicala, deoarece este o modalitate neinvaziva si necostisitoare de a depista anumite boli sau de a monitoriza raspunsul la un anumit tratament. De asemenea, diagnosticul precoce al oricarei boli este important pentru a reduce severitatea si posibilele complicatii, jucand astfel un rol important in a reduce morbiditatea si mortalitatea. Un interes deosebit se acorda dezvoltarii de senzori electrochimici pentru detectarea poluantilor din mediu (sulfurilor, nitritilor, nitratilor, compusilor toxici). Provocarea de a dezvolta metode analitice necostisitoare pentru monitorizarea sensibila si rapida a poluantilor este puternic justificata de necesitatea de a inlocui tehnicile conventionale constisitoare si laborioase cu metode simple, capabile de a realiza analize direct in mediu sau in afara unui laborator specializat.

Sisteme portabile de detectie electrochimica (atasat la smartphone). Integrarea (bio)senzorialor si a tehnologiilor electronice permite dezvoltarea de sisteme portabile capabile sa diagnosticeze si sa monitorizeze patologii prin detectarea biomarkerilor specifici sau sa determine calitatea mediului prin evaluarea nivelului unor poluanti. In ultimii ani, asistenta medicala preventiva a captat din ce in ce mai mult atentia din cauza cresterii numarului de pacienti cu boli legate de stilul de viata si pentru reducerea costurilor medicale presupuse de tratament. In aceste circumstante, este de asteptat ca aparitia pe piata a testelor la punctul de ingrijire (POCT) sa cunoasca o adevarata explozie. Ca platforma pentru teste la punctul de ingrijire, smartphone-ul este un dispozitiv promitator si impune miniaturizarea unui (bio)senzor, precum si a intregului sistem electrochimic. Totodata, miniaturizarea este o tendinta in crestere in domeniul chimiei analitice, iar electrochimia este deosebit de atractiva pentru analiza la scara mica, deoarece sistemele analitice pot fi miniaturizate si multiplexate fara a compromite capacitatile si/sau caracteristicile sale. De asemenea, caracterul portabil si cerintele de energie redusa ale analizorilor electrochimici satisfac nevoia de a efectua masuratori la fata locului si la nivel de sit in cazul unor accidente poluante din mediu. Tehnologiile moderne de microfabricare ne

permit sa inlocuim electrozii traditionali voluminosi si celulele greoaie cu sisteme electrochimice miniaturizate usor de utilizat si conectate cu un smartphone.

Sisteme nanostructurate anorganice cu activitate redox pentru aplicatii biomedicale si ingineresti. Nanoparticulele anorganice au oferit in ultimul timp multiple oportunitati datorita proprietatilor redox, care le permite sa participe in procese asociate cu furnizarea unor semnale de tip senzor, cataliza sau constituindu-se in agenti de livrare a medicamentelor. Proprietatile redox le permit nanoparticulelor anorganice sa interactioneze cu speciile reactive (SR) radicalice, de tipul speciilor reactive de oxigen (SRO) si speciile reactive de nitrogen (SRN), putand functiona atat ca agenti de inactivare a acestora, cat si de generatori de radicali liberi. Obtinerea unor sisteme care sa inactiveze SRO si SRN are o importanta deosebita, avand in vedere ca aceste SR sunt asociate cu patologii multiple, cum ar fi cele cardiovasculare si progresia cancerului. Contrar, optimizarea unor nano-generatori de SR contribuie masiv la imbunatatirea calitatii vietii datorita aplicatiilor in radioterapia cancerului, dezinfectarea dispozitivelor medicale si descompunerea poluantilor. Includerea nanoparticulelor anorganice in matrici organice si organometalice conduce la obtinerea unor nano-dispozitive sofisticate care faciliteaza aplicatiile acestora si permit modularea proprietatilor.

Integrarea materialelor nanostructurate cu traductoare electronice in scopul dezvoltarii senzorilor electrochimici sensibili si specifici pentru analiti de interes. Dezvoltarea microsistemelor electrochimice portabile integrate pentru masuratori analitice in timp real din probe reale. Proiectarea si dezvoltarea sistemelor redox nanostructurate anorganice care sa aiba cel putin una din urmatoarele proprietati: sa functioneze ca agenti de transport ai medicamentelor, sa aiba activitate catalitica, sa ofere un semnal masurabil specific senzorilor sau sa fie capabile sa genereze ori sa inactiveze SR.

Obiective generale

Obiectivul principal al cercetarii pentru urmatoorii ani vizeaza **proiectarea si dezvoltarea senzorilor electrochimici ca instrumente sensibile si specifice pentru masurarea concentratiilor unor analiti de interes pentru domeniul medical si mediu** (de ex. determinarea biomarkerilor specifici bolilor hepatice, precum si pentru monitorizarea calitatii apei si controlul poluarii).

Optimizarea un aparat portabil miniaturizat capabil sa detecteze analiti de interes in afara laboratorului, utilizand senzorii dezvoltati integrati intr-un sistem compact. Principalele module implicate in dezvoltarea unor astfel de dispozitive concentreaza atentia asupra componentelor esentiale ale acestor sisteme pentru a aborda intrebari precum: cum este alimentat dispozitivul? Cum comunica datele masurate? Ce fel de senzori ar putea fi utilizati si ce tip de electronice sunt utilizate. Realizarea acestui obiectiv presupune o stransa colaborare cu specialisti din domeniul electronicii, contribuind astfel la transferul tehnologic de la nivelul cercetarii de laborator catre piata.

Obtinerea sistemelor nanostructurate anorganice cu activitate redox sub forma de nanoparticule si fluide sau retele organice/organometalice cu proprietati catalitice si antioxidante sau capabile sa genereze specii reactive si sa incarce principii active antimicrobiene.

Obiective specifice

- Optimizarea detectiei electrochimice individuale a biomarkerilor specifici bolilor hepatice, (bilirubina, colesterol) si poluantilor (nitriti, nitрати, pesticide)
- Dezvoltarea materialelor cu activitate redox selective pentru analiti de interes

- Optimizarea detectiei electrochimice simultane a doi biomarkeri diferiti (glucoza si insulina); dezvoltarea unui senzor dual
- Optimizarea potentiostatului miniaturizat utilizat in combinatie cu senzorii optimizati; dezvoltarea unui aparat portabil pentru masurarea analitilor in afara laboratorului
- Obtinerea nanoparticulelor conjugate/incarcate cu antioxidanti si/sau medicamente.
- Sinteza nanoparticulelor generatoare de SRO si/sau SRN.
- Proiectarea si sinteza unor suporturi organice sau organometalice (rețele metal-organice MOFs).

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Echipea este alcatuita din cercetatori chimisti, biochimisti, biologi, ingineri cu expertiza in sinteza controlata de nanomateriale electroactive, in caracterizarea diferitelor materiale polimerice sau anorganice, aplicatiile acestora in electrochimie, precum si in dezvoltarea de noi senzori. Realizarea unui aparat portabil utilizand senzorii dezvoltati necesita o stransa colaborare cu parteneri din mediul privat avand expertiza in electronica si realizarea de prototip.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Proiectul va beneficia de infrastructura existenta a ICMPP/IntelCentru, care vor fi completate cu ajutorul unor finantari aduse in cadrul Subprogramului/Proiectului (5DNano, INTERA). Echipea de coordonare a centrului are o politica continua de atragere de noi surse de finantare.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Pentru a realiza o caracterizare completa a materialelor sintetizate va fi necesara colaborarea cu colegi din cadrul altor Subprograme care utilizeaza tehnici de analiza si caracterizare complementare

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

De asemenea, pentru validarea unor rezultate obtinute cu ajutorul senzorilor vor fi necesare investigatii specifice care necesita colaborari cu alte centre de cercetare din tara sau strainatate, exemplu prof D. O'Hare, Imperial College, UK. Testarea si utilizarea sistemelor nanostructurate in domenii de interes necesita colaborarea cu centre de cercetare din tara si din strainatate.

PROIECT 1.4. Materiale (bio)polimere si arhitecturi nanostructurate multifunctionale pentru aplicatii specifice

Director proiect, dr. Dan ROSU, CSI

Nr. crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	<i>Dr. Dan ROSU</i>	<i>Director proiect 1.4</i>	<i>CSI</i>	<i>1</i>
2.	Dr. Mariana PINTEALA	Membru proiect 1.4	CSI	0,2
3.	Dr. Fanica MUSTATA	Membru proiect 1.4	CSI	0,4
4.	Dr. Liliana ROSU	Membru proiect 1.4	CSIII	1
5.	Dr. Carmen-Alice TEACA	Membru proiect 1.4	CSIII	1
6.	Dr. Cristian-Dragos VARGANICI	Membru proiect 1.4	CSIII	1
7.	Dr. Maurusa-Elena IGNAT	Membru proiect 1.4	CS	1

8.	Dr. Leonard IGNAT	Membru proiect 1.4	CS	1
9.	Dr. Irina ROSCA	Membru proiect 1.4	CS	0,3
10.	Dr. Anca-Roxana PETROVICI	Membru proiect 1.4	CS	0,2
11.	Dr. Adina COROABA	Membru proiect 1.4	AC	0,2
12.	Livia ALBU	Membru proiect 1.4	Tehnician	1

Total norme AC-CSI: CS I: 1,6; CSIII: 3; CS: 2,5; AC: 0,2 = 7,3; **Alte categorii:** Tehnician: 1

Scopul proiectului

Proiectul are drept scop obtinerea de materiale (bio)polimere din resurse regenerabile pentru acoperiri ecologice, durabile si inovatoare destinate protectiei diferitelor suprafete impotriva actiunii factorilor de mediu; sinteza unor materiale hibride nanostructurate care includ unitati de tipul micro- si nanoparticulelor metalice si oxizilor metalici pentru aplicatii speciale si studiul procesului de degradare a acestor materiale prin procese fizico-chimice (fotooxidativa, termica, hidrolitica) urmata de procese biologice.

Obiective generale

Obtinerea de nano-/micro- arhitecturi pe baza de particule metalice si oxizi metalici in conditii non-toxice. Obtinerea de materiale compozite nanostructurate multifunctionale cu aplicabilitate in combaterea infectiilor produse de microorganisme (bacterii, levuri, fungi). Degradarea enzimatica a deseurilor de polimeri.

Obiective specifice

- Obtinerea de noi materiale (bio)polimere din resurse regenerabile pentru acoperiri ecologice durabile si inovatoare pentru protectia suprafetelor impotriva actiunii combinate a factorilor fizico-chimici si biologici.
- Obtinerea de micro- si nanoparticule metalice si de oxizi metalici in prezenta unor reactivi de origine biologica si solventi non-toxici.
- Modificarea nanoparticulelor cu formare de materiale nanostructurate multivalente, active biologic si catalitic.
- Realizarea de materiale compozite nanostructurate multifunctionale pentru filme si acoperiri.
- Studii de degradabilitate termica, fotochimica si enzimatica a materialelor sintetizate cu stabilirea mecanismelor si cineticilor aparente.
- Evaluarea posibilitatilor de degradare enzimatica a deseurilor de polimeri.
- Identificarea posibilitatilor de stabilizare la actiunea factorilor de mediu.
- Studii de evaluare a duratei de viata a sistemelor polimerice studiate in conditii de utilizare.

O serie de obiective ale proiectului 1.4 sunt complementare cu obiective propuse in cadrul celorlalte proiecte avansate (1.1. Sinteza pe cale chimica a nanosistemelor cu aplicatii biomedicale; 1.2. Sisteme supramoleculare pe baza de unitati structurale naturale sau sintetice; 1.3. Obtinerea sistemelor nanostructurate anorganice cu activitate redox cu proprietati catalitice si antioxidante; proiectarea si dezvoltarea senzorilor electrochimici), fapt care va contribui la o mai buna interconectare a activitatilor ce urmeaza a fi desfasurate in cadrul Subprogramului 1.

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Proiectul isi propune dezvoltarea grupului interdisciplinar specialist format din chimisti, biologi, biochimisti, fizicieni, cu contributii importante in obtinerea de materiale (bio)polimere din resurse regenerabile pentru acoperiri ecologice, durabile si inovatoare destinate aplicatiilor speciale. Intreaga

echipa de cercetare este implicata activ in dezvoltarea domeniului de cercetare specificat, vizandu-se dobandirea unui nivel inalt de expertiza si recunoastere internationala.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

O atentie deosebita se va acorda cresterii si imbunatatirii gradului de utilizare a infrastructurii de cercetare existente si diversificarii acesteia prin dotarea si dezvoltarea in cadrul ICMPP a unui grup multidisciplinar care va permite studierea stabilitatii (bio)polimerilor cu mijloace moderne de investigatie. Se preconizeaza atragerea de fonduri prin proiecte de cercetare care vor permite achizitionarea de aparatura noua si completarea celei existente astfel incat posibilitatea urmaririi influentei proceselor de degradare asupra materialelor (bio)polimere implicate in diferite domenii de cercetare sa poata fi realizata. Studiile de imbatranire realizate in conditii de simulare a mediului ambiant pot furniza date experimentale esentiale pentru aprecierea duratei de viata a polimerilor si a materialelor (bio)polimere in diferite aplicatii.

Dezvoltarea tematicii de cercetare prezentate si imbunatatirea succesului de publicare a rezultatelor experimentale in reviste stiintifice specializate cu factor de impact semnificativ implica completarea aparaturii existente de analiza termogravimetrica cu un calorimetru diferential cu modul foto (*Photo-DSC*) care va fi utilizat pentru fotoreticularea si fotopolimerizarea materialelor polimerice; monitorizarea tranzitiilor termice si fotochimice in materialele polimerice; cinetica de fotoreticulare si fotopolimerizare; studii modulate DSC pentru separarea tranzitiilor suprapuse. Dispozitivul posedea o sensibilitate superioara si o gama de temperaturi mai largi, fiind creat exclusiv pentru domeniile de cercetare care implica polimeri, esential pentru dezvoltarea tematicii de cercetare.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Se colaboreaza si se va colabora in continuare eficient cu alte colective, fapt exemplificat de elaborarea in comun a unui numar insemnat de lucrari stiintifice publicate in reviste din circuitul international. Cunoasterea mecanismelor reactiilor de modificare, degradare si de stabilizare a polimerilor/biopolimerilor este importanta din punct de vedere stiintific, iar studiile privitoare la viteza de degradare si cele de predictibilitate a duratei de viata au implicatii practice deosebite.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Prof. Nedelcu Dumitru Universitatea Politehnica „Gh. Asachi”, Facultatea de Inginerie Mecanica, Departamentul Tehnologia Constructiilor de Masini; *dr. Sabyasachi Gaan* Laboratory for Advanced Fibers, Empa, Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology, Lerchenfeldstrasse 5, St. Gallen 9014, Switzerland; *dr. Carlos Barreiro*, director of the Institute of Biotechnology of León (INBIOTEC), Spain, and Associate Professor of Biochemistry (University of León, Spain).

LABORATOR POLIADITIE SI FOTOCHIMIE**SUBPROGRAM 2. SINTEZA DE MONOMERI SI POLIMERI PRIN METODE CHIMICE SI FOTOCHIMICE. MATERIALE PENTRU ECO- SI BIO-APLICATII****Director Subprogram 2, dr. Sergiu COSERI, CSI****ECHIPA SUBPROGRAMULUI**

Nr. crt	Nume si prenume	Funcția	Categorie profesionala	Norma
1	Dr. Sergiu COSERI	Director subprogram Director proiect 2.1	CSI	1
2	Dr. Fulga TANASA	Membru proiect 2.1	CS III	1
3	Dr. Violeta MELINTE	Membru proiect 2.1	CS III	1
4	Dr. Andreea Laura SCUTARU	Membru proiect 2.1	CS III	1
5	Dr. Daniela IVANOV	Membru proiect 2.1	CS	1
6	Dr. Mioara MURARIU	Membru proiect 2.1	CS	1
7	Dr. Lenuta STROEA	Membru proiect 2.1	CS	1
8	Dr. Gabriela BILIUTA	Membru proiect 2.1	CS	1
9	Dr. Viorica Elena PODASCA	Membru proiect 2.1	AC	1
10	Raluca Ioana BARON	Membru proiect 2.1	AC	1
11	Drd. Madalina Elena CULICA	Membru proiect 2.1	AC	0,5
12	Drd. Ioana DUCEAC	Membru proiect 2.1	Drd	1
13	Mihaela GHEORGHIU	Membru proiect 2.1	A	1
14	Dr. Stefan OPREA	Director proiect 2.2	CSI	1
15	Dr. Constantin GAINA	Membru proiect 2.2	CS II	0.7
16	Dr. Viorica GAINA	Membru proiect 2.2	CS II	1
17	Dr. Marioara NECHIFOR	Membru proiect 2.2	CS III	1
18	Dr. Luiza Madalina GRADINARU	Membru proiect 2.2	CS	1
19	Dr. Violeta Otilia POTOLINCA	Membru proiect 2.2	CS	1
20	Dr. Oana URSACHE	Membru proiect 2.2	AC	1

Total norme AC-CSI: CS I: 2; CS II: 1.7; CSIII: 4; CS: 6; AC: 3.5 = 17.2**Alte categorii: DRD: 1; A: 1 = 2**

Premizele propunerii

Chimistii au un rol major in transformarea ideilor inovatoare din laborator, in mijloace practice si utile maselor largi de populatie, pentru a oferi alternative superioare generatiilor prezente si viitoare, in ceea ce priveste gestionarea eficienta a resurselor planetei noastre, pentru a gasi resurse mai ieftine si mai curate pentru energie, mediu si sanatate. Chimia materialelor este fundamentala pentru succesul multor industrii care utilizeaza substante chimice si ofera materiale avansate pentru tehnologiile de noua generatie. Ne concentram toata atentia pe legatura dintre structura la nivel atomic, molecular si supramolecular si proprietatile utile ale unui material. Cercetarea noastra cuprinde o gama larga de sisteme de materiale, inclusiv materiale organice si polimeri, materiale 2D, nanomateriale si materiale nanoporoase. Ne aplicam cunostintele pentru a dezvolta noi tehnologii care sunt esentiale pentru a aborda provocarile cheie cu care se confrunta societatea moderna in materie de durabilitate, energie, sanatate si mediu. Pentru aceasta, plecand de la experienta acumulata de cercetatorii nostri de-a lungul anilor, dorim sa implementam noi strategii pentru a include materiile prime „verzi”, tehnologiile nepoluante, solventii benigni in procese care au drept scop final obtinerea unor materiale prin chimie dirijata, capabile sa le inlocuiasca pe cele existente. Reactiile chimice de preparare a unor noi monomeri, reactiile pe polimeri, vor constitui baza acestei strategii, coroborata cu procesele de poliaditie si cele fotochimice, care vor conferi o versatilitate sporita produsilor pe care intentionam sa ii preparam.

Scopul Subprogramului

Un rol cheie in atingerea scopurilor pe care ni le propunem in cadrul acestui subprogram il are **alegerea riguroasa, selectiva a materialelor monomere si polimere, care reprezinta baza cladirii viitoarelor arhitecturi polimerice** realizabila prin intreprinderea cunostintelor ample de chimie organica ale membrilor acestui Subprogram cu deprinderile experimentale necesare pentru explorarea si extinderea ariilor de aplicabilitate ale monomerilor/polimerilor noi sintetizati.

Obiectiv general

Obiectivul general poate fi conturat ca fiind **designul rational prin metodele chimiei organice de noi monomeri si polimeri cu inalta functionalitate si aplicatiile acestora in eco-tehnologii, precum protectia mediului, stocarea de energie si sanatate.**

Obiective specifice

- Ingineria materialelor polimerice, prin reactii chimice efectuate pe polimeri, cum ar fi: oxidarea, grefarea de lanturi alchilice, esterificarea, eterificarea, etc., cu scopul de crea baza (matricea) necesara in aplicatiile ulterioare. Pentru a largi gama de materiale polimerice, vom considera si reactiile chimice de preparare a unor noi monomeri.
- Reactii chimice de functionalizare a nanostructurilor utilizate pentru inglobarea in diverse matrici polimerice, nanostructuri ce includ: nanotuburi de carbon, nanoparticule metalice si de oxizi metalici, in vederea imbunatatirii compatibilizarii dintre acestea si componentele organice si conferirea de proprietati fizice superioare.
- O noua abordare privind prepararea de materiale eficiente in pilele de combustie, prin designul, prepararea si caracterizarea de membrane conductoare de protoni superioare, avand la baza polimerii naturali dopati cu o gama selectata de heterocicluri.
- Sinteza de poliuretani cu structuri ramificate, incorporand bio-componenti, utilizate ca matrici performante pentru umpluturi de materiale naturale (fibre naturale, nano-argile, talc)

Proiecte relevante realizate anterior

Membrii Subprogramului au fost implicati in numeroase proiecte de cercetare ca directori/membri in echipa de cercetare (proiecte tip IDEI, TE, PD, PED, Parteneriate etc.). Mai jos sunt prezentate doar o selectie a proiectelor derulate in ultimii cinci ani de catre membrii subprogramului:

- **Sergiu Coseri**, director de proiect; PN-III-P4-ID-PCE-2016-0349; Ingineria materiilor prime naturale: biointerfete pe baza de celuloza pentru detectia de proteine, **2017-2019**; Valoarea proiectului: 825,000 lei.
- **Sergiu Coseri**, director de proiect; PN-III-P2-2.1-PED-2019-0169; Senzor de mare sensibilitate din resurse naturale, **2020-2022**; Valoarea proiectului: 600,000 lei.
- **Andreea Laura Scutaru**, director de proiect; PN-III-P1-1.1-TE-2019-1245; Noi compozite hibride pe baza de biopolimeri cu nanoparticule de CeO₂: un pas inainte catre materiale fotocatalitice durabile si competitive, **2020-2022**; Valoarea proiectului: 431,900 lei.
- **Violeta Melinte**, director de proiect; PN-III-P1-1.1-TE-2016-1390; Proiectarea si prepararea in conditii prietenoase mediului de acoperiri hibride polimer-metal/oxid metalic avand caracteristici antimicrobiene sau de sigilare previzibile, **2018-2020**; Valoarea proiectului: 450,000 lei.
- **Stefan Oprea**, responsabil partener; 78/02.07.2012; Structuri compozite din rasini matrice biopolimerice sintetizate din uleiuri vegetale rafinate cu fibre liberiene; **2012-2016**; Valoarea proiectului: 720,562 lei.
- **Viorica Podasca**, director de proiect; PN-III-P1-1.1-PD-2016-1718; Compozite hibride pe baza de micro-/nanoparticule de ZnO dopate pentru imbunatatirea fotocatalizei prin iradiere cu lumina UV si vizibila, **2018-2020**; Valoarea proiectului: 250,000 lei.
- **Violeta Melinte, Andreea Laura Scutaru, Viorica Podasca**, membri echipa; PN-II-ID-PCE-2011-3-0164; Conceperea si realizarea unor compozite hibride pe baza de noi structuri polimere pentru aplicatii biomedicale si optice in nanotehnologie; **2011-2016**; Valoarea proiectului: 1,500,000 lei.

Eficienta confirmata in aplicarea rezultatelor obtinute in domeniul specific proiectului

Membrii colectivului Subprogramului 2, in perioada 2015-2020, au publicat un numar de circa 150 lucrari ISI in reviste internationale cu factor de impact ridicat (Coordination Chemistry Reviews, Sensors and Actuators B: Chemical, Dental Materials, Chemical Engineering Journal, Carbohydrate Polymers, Cellulose, Biotechnology Advances, European Polymer Journal).

Expertiza resursei umane implicate

Cercetatorii din acest Subprogram au experienta specializata in sinteza organica, caracterizarea spectrala a compusilor organici, au o mare experienta internationala prin stagiile efectuate si prin colaborarile pe care le-au avut sau le au cu universitati si institute de cercetare prestigioase din Europa, SUA si Canada.

Infrastructura necesara pentru realizarea Subprogramului

Pentru rezolvarea obiectivelor Subprogramului se vor utiliza echipamentele aflate in dotarea Laboratorului de Poliadiite si Fotochimie (reactor cu microunde, lampa UV, lampa Vis, vasozimetru, aparat de testari mecanice, microscop optic, camera de iluminare UV, goniometru, distilator millipore, spectrofluorimetru etc) cat si infrastructura existenta in cadrul institutului.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Subprogramului

In ceea ce priveste resursa umana, se poate aprecia ca Subprogramul 2, privit ca un tot unitar, are o compozitie omogena cu o distributie echilibrata a functiilor, existand 2 pozitii de CSI, 2 pozitii de CSII, 4 pozitii de CSIII, 6 pozitii de CS. Exista si 3.5 norme de AC, inasa si 2 studenti doctoranzi aflati in activitate cu stipendiu, sub conducerea de doctorat a Dr. Sergiu Coseri. Aceasta distributie echilibrata a personalului este completata de specializarile si de pregatirea dintre cele mai diverse ale cercetatorilor implicati in subprogram.

Referitor la resursa materiala, este de apreciat faptul ca in cadrul acestui Subprogram s-au derulat de-a lungul anilor numeroase proiecte de cercetare, lucru care a asigurat in permanenta necesarul de chimicale, solventi, birotica si alte materiale strict necesare pentru desfasurarea in bune conditii a activitatii de cercetare.

Colaborarea cu alte Subprograme din institut

Subprogramul 2 trebuie sa fie privit ca o veriga importanta intr-un angrenaj complex, multivocational, cu o infrastructura la nivel european, reprezentat de Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni”. Este lesne inteles faptul ca nu va activa ca un subprogram independent, izolat, ignorand celelalte subprograme, dimpotriva, printr-o colaborare permanenta cu toate celelate subprograme se vor realiza cu succes obiectivele si sarcinile propuse.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Este deosebit de important rolul pe care colaborarea dintre cercetatori o are in realizarea obiectivelor propuse. Astfel, vom mentine si dezvoltate retelele de colaborare dezvoltate anterior cu cercetatori din cadrul UMF Iasi, ICECHIM Bucuresti, Institutul de Chimie al Academiei Romane din Timisoara, si vom cauta ca ori de cate ori situatia o impune sa fim deschisi spre realizarea de noi colaborari. Suntem pregatiti sa realizam acorduri de cooperare cu alte organizatii de cercetare, nu neaparat din cadrul universitatilor sau institutelor de cercetare, cu referire speciala la mediul privat, partener absolut necesar pentru a reusi sa transpunem in practica roadele stiintifice din laboratoarele noastre.

O insemnatate deosebita o are colaborarea cu partenerii internationali, fie universitati sau institute de cercetare. Avem o traditie lunga in acest domeniu, dorim sa continuam colaborarile pe care le avem incepute cu cercetatorii din Maribor (Slovenia), Graz (Austria), Sophia Antipolis (Franta), Czestochowa (Polonia), Paris (Franta).

Activitati de formare a tinerilor cercetatori: doctoranzi, post-doctoranzi

Unul dintre aspectele cruciale cu privire la activitatea de cercetare pe care o desfasoara orice cercetator, o reprezinta aceea de instruire si formare a tinerilor masteranzi, doctoranzi si post-doctoranzi. In cadrul Subprogramului 2 activeaza pana in prezent un singur conducator de doctorat, care are in indrumare doi doctoranzi, un al treilea finalizandu-si stagiul doctoral prin sustinerea tezei, incadrandu-se deci in categoria post-doctoranzilor. Se mizeaza pe o infuzie de tineri, aflati in stadiul studiilor de master si a celor care doresc sa se inscrie la studii doctorale.

Proiecte componente

Denumire proiect	Descriere succinta
Proiect 2.1 Structuri polimerice dirijate pentru incorporarea de nanoaditivi, cu aplicatii eco-tehnologice, utilizand metode chimice si fotochimice <i>Dr. S. Coseri, CS I</i>	Conceperea, prepararea si caracterizarea unor noi monomeri si structuri polimerice superioare, capabile sa asigure o platforma eficienta pentru incorporarea de componente organice si/sau nanodimensionate, pentru obtinerea unor materiale cu aplicabilitate in tehnologii ecologice.
Proiect 2.2 Materiale poliuretanic ce includ bio-componenti ca perspectiva a chimiei ecologice <i>Dr. S. Oprea, CS I</i>	Abordare ecologica pentru sinteza de noi materiale poliuretanic, sub diferite forme (filme, geluri, compozite, bio-adezivi, etc) cu un continut ridicat de componente naturale. Rolul adaosurilor naturale va fi evaluat prin prisma relatiei structura-proprietati, impactul asupra mediului a noilor materiale fiind evaluat prin studiul proceselor de biodegradare.

PROIECT 2.1. Structuri polimerice dirijate pentru incorporarea de nanoaditivi, cu aplicatii eco-tehnologice, utilizand metode chimice si fotochimice

Director proiect, dr. Sergiu COSERI, CSI

Nr.crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	Dr. Sergiu COSERI	Director proiect 2.1	CSI	1
2.	Dr. Fulga TANASA	Membru proiect 2.1	CSIII	1
3.	Dr. Violeta MELINTE	Membru proiect 2.1	CSIII	1
4.	Dr. Andreea Laura SCUTARU	Membru proiect 2.1	CSIII	1
5.	Dr. Daniela IVANOV	Membru proiect 2.1	CS	1
6.	Dr. Mioara MURARIU	Membru proiect 2.1	CS	1
7.	Dr. Lenuta STROEA	Membru proiect 2.1	CS	1
8.	Dr. Gabriela BILIUTA	Membru proiect 2.1	CS	1
9.	Dr. Viorica Elena PODASCA	Membru proiect 2.1	AC	1
10.	Raluca Ioana BARON	Membru proiect 2.1	AC	1
11.	Drd. Madalina Elena CULICA	Membru proiect 2.1	AC	0.5
12.	Ioana DUCEAC	Membru proiect 2.1	Drd	1
13.	Mihaela GHEORGHIU	Membru proiect 2.1	A	1

Total norme AC-CSI: CS I: 1; CSIII: 3; CS: 4; AC: 2.5 = **10.5**

Alte categorii: DRD: 1; A: 1 = **2**

Scopul proiectului

Progresul societatii umane si interesele industriale cu privire la dezvoltarea tehnologiei materialelor prietenoase mediului au directionat cercetari recente catre utilizarea resurselor naturale ca materii

prime pentru tehnologia polimerilor. Astfel, datorita abordarilor interdisciplinare prin cercetari si inovatii tehnologice in chimie, biotehnologie si inginerie, a fost posibila proiectarea de produse chimice ecologice specializate din resurse naturale regenerabile, abundente in natura, de tipul amidonului, ligninei, celulozei, chitosanului, gelatinei, lanii sau uleiurilor vegetale. Materialele rezultate isi gasesc cu usurinta nenumarate aplicatii industriale cum ar fi in obtinerea de plastifianti, biodiesel, lubrifianti, adezivi, materiale de ambalare biodegradabile, cerneluri tipografice, vopsele sau acoperiri. In plus, procesul de fotopolimerizare ofera beneficii suplimentare in producerea de materiale „eco-friendly”, si anume eficienta, economie de energie, procesare in timp scurt la temperatura camerei, lipsa emisiilor de compusi organici volatili, reducerea deseurilor si controlul facil prin simpla pornire si oprire a iluminarii.

Mai mult decat atat, interesul aratat sintezei de materiale hibride, compuse atat din elemente anorganice, cat si organice, are ca fundament paleta variata de posibilele aplicatii generata de imbunatatirea proprietatilor mecanice, termice, optice sau electrice ale compozitelor hibride comparativ cu omologii de plecare. Distributia omogena si completa a fazei anorganice in matricea organica favorizeaza cresterea suprafetei interfaciale, optimizand astfel interactiunile organo-anorganice responsabile de imbunatatirea semnificativa a proprietatilor finale ale materialelor. In plus, combinarea convenabila a doua sau mai multe tipuri de nanoparticule poate conduce la nanomateriale multifunctionale cu proprietati versatile obtinute nu numai pe seama caracteristicilor fiecarui component ci si din posibilitatea generarii unui efect sinergic cu prefigurarea unui cumul de avantaje, care in tandem cu aspectele derivate din utilizarea structurilor polimere sa furnizeze materiale inovatoare cu proprietati unice.

Obiectiv general

Obiectivul general al acestui proiect este de a concepe, prepara si caracteriza, noi monomeri si structuri polimerice superioare, capabile sa asigure o platforma mai eficienta pentru incorporarea de componente organice si/sau nanodimensionate pentru obtinerea unor materiale cu aplicabilitate in tehnologii ecologice.

Obiective specifice

- Sinteza si caracterizarea de monomeri (met)acrilici/uretan (met)acrilici fotoactivi (fotopolimerizabili, fotoluminescenti, fotoizomerizabili/fotoscindabili) cu structuri si functionalitati specifice pentru obtinerea de materiale cu proprietati ajustabile
- Modificarea chimica a polimerilor naturali si sintetici, prin reactii de functionalizare: oxidare, aminare, esterificare, etc.
- Reactii chimice de preparare si/sau functionalizare a nanostructurilor anorganice, incluzand nanotuburi de carbon, nanoparticule metalice si de oxizi metalici.
- Prepararea si caracterizarea de materiale hibride pe baza de polimeri naturali pentru aplicatii ca membrane conductoare de protoni in pilele de combustibil.
- Obtinerea de polimeri si compozite hibride utilizand diverse tehnici preparative (fotopolimerizare, polimerizare radicalica, ATRP) pentru realizarea de acoperiri flexibile si evaluarea perspectivelor de aplicabilitate in optica, fotocataliza, protectia mediului, ambalaje alimentare sau cosmetica.
- Realizarea de hidrogeluri prin reticulare fotochimica pentru aplicatii in sanatate, industria alimentara, distributia apei potabile, industria farmaceutica, agricultura etc.

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Colectivul de lucru din Proiectului 2.1 include un numar total de 13 persoane (10,375 norme), dupa cum urmeaza: 1 CSI, 3 CSIII, 4 CS, 2.375 AC, 2 doctoranzi si un asistent. Cercetatorii din acest proiect au experienta si abilitatea necesare in cercetarea interdisciplinara dovedite prin publicarea unor lucrari in reviste stiintifice internationale de prestigiu cu factor de impact ridicat sau prin castigarea de proiecte cu finantare nationala. Pentru completarea si dezvoltarea continua a competentelor deja dobandite, se impune perfectionarea profesionala la nivel competitiv, asigurarea unui mediu stiintific corespunzator si stabilirea de conexiuni cu laboratoare din tara/strainatate, iar o parte din cercetatorii din acest proiect colaboreaza cu institute din strainatate (Austria, Franta), efectuand periodic stagii de cercetare in acele institute.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Pentru rezolvarea obiectivelor proiectului se vor utiliza echipamentele aflate in dotarea laboratorului si infrastructura existenta in cadrul institutului. Pentru studii amanuntite vom apela la colaborari interne/externe.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Proiectul nu va functiona ca un program independent, izolat, ci va exista o colaborare permanenta cu toate celelalte subprograme/proiecte din institut pentru a realiza cu succes obiectivele propuse.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Vom mentine colaborarile existente cu institute de cercetare si universitati din tara (INFLPR, ICECHIM, UMF Iasi, UT Iasi) si din strainatate (ICMPE Paris – Franta, Graz, Maribor).

PROIECT 2.2. Materiale poliuretanic ce includ bio-componenti ca perspectiva a chimiei ecologice

Director proiect, dr. Stefan OPREA, CSI

Nr. crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	Dr. Stefan OPREA	Director proiect	CSI	1
2.	Dr. Constantin GAINA	Membru proiect 2	CSII	0,7
3.	Dr. Viorica GAINA	Membru proiect 2	CSII	1
4.	Dr. Marioara NECHIFOR	Membru proiect 2	CSIII	1
5.	Dr. Luiza Madalina GRADINARU	Membru proiect 2	CS	1
6.	Dr. Violeta Otilia POTOLINCA	Membru proiect 2	CS	1
7	Dr. Oana URSACHE	Membru proiect 2	AC	1

Total norme AC-CSI: CS I: 1; CS II: 1.7; CSIII: 1; CS: 2; AC: 1 = 6.7

Scopul proiectului

Proiectul isi propune sinteza si stabilirea relatiei structura-proprietati a unor noi materialele poliuretanic pe baza de bio-componenti care supuse efectelor mediului (radiatii UV, temperatura, umezeala) isi vor pastra performanta materialului. In plus, materialele poliuretanic pe baza de bio-

componenti, dupa epuizarea perioadei de folosire, pot suferi procese de biodegradare, incat impactul lor ca deseuri organice asupra sanatatii umane sa fie cat mai mic. Materialele polimerice pe baza de bio-componenti pot fi functionalizate cu grupari specifice sau include ioni metalici (Ag, Cu) care pot participa la decontaminarea apei si pamintului, purificarea mediului ambiant din cladiri si mijloace de transport, prin folosirea lor ca acoperiri, elastomeri sau placi compozite in componenta utilajelor si dotarilor ambientale. Noile materiale polimerice vor folosi materii prime alternative de tip biomasa necomestibila, ulei de ricin, celuloza, hemiceluloza, lignina ca subprodus din industria celulozei, produse reziduale alimentare (grasimi, uleiuri degradate), produse reziduale industriale (glicerina, furfurool, etc).

Toate aceste cerinte impun **proiectarea acestor materiale in mod creativ cu diversificarea proprietatilor incat sa-si gaseasca utilizari interdisciplinare prin diminuarea cantitatii de componente obtinute prin sinteza chimica**. Aceste materiale necesita o abordare puternic interdisciplinara a cercetarii care pe langa chimisti include cercetatori din domeniul sanatatii, ergonomiei si protectia a mediului. In plus, aceste materiale vor asigura un echilibru intre proprietati si nivelul costurilor si vor permite o reducere semnificativa a impactului asupra mediului oferind acelasi timp performante comparabile cu materialele polimerice conventionale.

Obiective generale

Sinteza de materiale poliuretane cu continut ridicat de componente din resurse naturale. Dezvoltarea de materiale polimerice sub diferite forme (filme, geluri, compozite, bio-adezivi, etc) utilizate cu precadere in ingineria eco- si bio-aplicativa. Cercetarea inter-disciplinara orientata spre cunoasterea proceselor de suprafata si mecanismelor morfologice pentru a imbunatati si largi domeniul de aplicabilitate a materialelor polimerice pe baza de bio-componenti. Identificarea parametrilor optimi pentru alegerea componentilor si a procedurii experimentale pentru maximizarea corelatiei structura-proprietati

Obiective specifice

- Sinteza de poliuretani si compozite poliuretane solubile in apa cu posibilitatea de recuperare a componentelor dupa perioada de utilizare
- Sinteza de materiale polimerice cu structuri heterociclice ce dezvoltă rezistență termo-mecanică îmbunătățită
- Studiarea biodegradabilității materialelor ce contin bio-componenti in mediu cat si in sub actiunea fungilor specifice
- Sinteza de poliuretani obtinuti cu bio-componenti ce prezinta structuri hiperramificate care sunt matrici optime pentru umpluturi de materiale naturale (fibre naturale, nano-argile, talc)

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Colectivul acestui proiect este format din cercetatori deja formati, cu abilitati potrivite in cercetarea interdisciplinara cat si de a lucra ca parte a unei echipe si de a se adapta colaborarii cu specialisti in alte domenii. Cercetatorii acestui proiect dezvoltă parteneriate cu cercetatori din invatamantul superior, alte organisme de cercetare nationale cat si internationale dar si cu entitatile private in cadrul granturilor in desfasurare cat si a celor depuse spre acceptare. Se dorește dezvoltarea de colaborari cu organizatii de cercetare, universitati sau academii la nivel international. In acest scop, se vor incheia acorduri de cooperare cu alte organizatii de cercetare care sa permita schimburi de cercetatori in cadrul programelor internationale de cooperare stiintifica.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Resursele pentru realizarea proiectului sunt asigurate prin dotarile laboratorului generate prin granturile derulate cat si prin infrastructura institutului. Studiile specifice, care necesita o anumita expertiza particulara, le vom realiza in laboratoarele colaboratorilor nostri.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Proiectul va fi condus ca un sistem interrelational cu toate celelalte subprograme/proiecte din institut cu intensitate crescuta cu cele ce realizeaza masuratori si determinari ale proprietatilor materialelor polimerice obtinute.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Vom mentine si dezvolta retelele de colaborare pe care le avem cu Institutul de Biologie, Universitatea de Medicina si Farmacie Iasi, ICPE Bucuresti. Se vor incheia acorduri de cooperare cu alte organizatii de cercetare care sa permita schimburi de idei in dezvoltarea programelor de cooperare stiintifica. In cadrul unei propuneri de grant international din a carui colectiv facem parte vom dezvolta colaborari cu 11 parteneri internationali, unitati de cercetare cat si unitati de productie.

LABORATOR POLICONDENSARE SI POLIMERI TERMOSTABILI**SUBPROGRAM 3. STRUCTURI HETEROCATENARE/HETEROVICLICE.
SINTEZA, CARACTERIZARE, APLICATII PENTRU IMBUNATATIREA
CALITATII VIETII****Director Subprogram 3, dr. Luminita MARIN, CS I****ECHIPA SUBPROGRAMULUI**

Nr. crt.	Nume si prenume	Funcția	Categorie profesionala	Norma
1	Dr. Luminita MARIN	Director subprogram Director proiect 3.1	CS I	1
2	Dr. Daniela AILINCAI	Membru proiect 3.1	CS	1
3	Dr. Manuela Maria IFTIME	Membru proiect 3.1	CS	1
4	Dr. Anda Mihaela CRACIUN	Membru proiect 3.1	CS	1
5	Dr. Andrei BEJAN	Membru proiect 3.1	CS	1
6	Drd. Sandu CIBOTARU	Membru proiect 3.1	AC	0.5
7	Drd. Bianca Iustina ANDREICA	Membru proiect 3.1	AC	0.5
8	Drd. Alexandru ANISIEI	Membru proiect 3.1	AC	0.5
9	Drd. Ramona LUNGU	Membru proiect 3.1	DRD	1
10	Drd. Vera Maria PLATON	Membru proiect 3.1	DRD	1
11	Dr. Corneliu HAMCIUC	Director proiect 3.2	CS I	1
12	Dr. Elena HAMCIUC	Membru proiect 3.2	CS II	1
13	Dr. Tachita VLAD-BUBULAC	Membru proiect 3.2	CS III	1
14	Dr. Diana SERBEZEANU	Membru proiect 3.2	CS	1
15	Dr. Daniela Ionela CARJA	Membru proiect 3.2	CS	1
16	Dr. Alina Mirela IPATE	Membru proiect 3.2	AC	1
17	Dr. Anca FILIMON	Director proiect 3.3	CS III	1
18	Dr. Adina Maria DOBOS	Membru proiect 3.3	CS	1
19	Dr. Elena PERJU	Membru proiect 3.3	CS	1
20	Dr. Mihaela Dorina ONOFREI	Membru proiect 3.3	AC	1
21	Dr. Dumitru POPOVICI	Membru proiect 3.3	AC	1
22	Drd. Oana DUMBRAVA	Membru proiect 3.3	DRD	1

23	Dr. Alina NICOLESCU	Director proiect 3.4	CS III	1
24	Dr. Calin DELEANU	Membru proiect 3.4	CS I	0.5
25	Dr. Mihaela BALAN-PORCARASU	Membru proiect 3.4	AC	1
26	Dr. Gabriela Liliana AILIESEI	Membru proiect 3.4	AC	1
27	Chim. Ana-Maria MACSIM	Membru proiect 3.4	AC	1
28	Chim. Mihaela CRISTEA	Membru proiect 3.4	AC	1
29	Anisoara CONDREA	Membru proiect 3.4	A1	1
30	Liviu Vasilica CRISTEA	Membru proiect 3.4	M3	1

Total norme AC-CSI: CS I: 2.5; CS II: 1; CSIII: 3; CS: 8; AC: 7 = **23**

Alte categorii: DRD: 3; A1:1; M3:1 = **5**

Premizele propunerii

Dezvoltarea industrială rapidă din ultimele decenii a condus la beneficii incontestabile pentru bunăstarea socială, dar în același timp a avut un impact negativ asupra mediului atât prin diminuarea resurselor naturale cât și prin poluarea biosferei, cu repercursiuni dramatice asupra modificărilor climatice și sănătății oamenilor. Aceasta realitate a condus la constientizarea organismelor internaționale cu putere legislativă în vederea lansării unei strategii pe termen lung, care vizează: (i) utilizarea durabilă a resurselor naturale prin promovarea de tehnologii și produse pe baza de materiale provenite din resurse regenerabile, (ii) dezvoltarea de produse care reduc sau elimină generarea de substanțe periculoase și (iii) dezvoltarea de metode pentru evaluarea impactului poluării asupra biosferei [1-5]. În acest sens, a fost lansat conceptul de „green chemistry” care încurajează chimistii să dezvolte produse și procese ecologice [6]. Tema de cercetare propusă în cadrul Subprogramului se încadrează în acest trend sub cele trei aspecte, urmărind dezvoltarea de (i) *produse pe baza de chitosan* (un biopolimer provenit din resurse regenerabile); (ii) compuși cu proprietăți optoelectronice îmbunătățite, solubili în solvenți prietenoși mediului, a căror prelucrare ulterioară sub formă de materiale/produse să limiteze generarea de agenți toxici pentru mediu (ex. *derivati de fenotiazina* solubili în apă, derivati de fenotiazina cu efect de emisie de lumină indusă de agregare, nanocristale și co-cristale cu emisie îmbunătățită de lumină); (iii) materiale/produse pentru purificarea aerului și/sau apelor reziduale (membrane de purificare pe baza de *polisulfone*), (iv) materiale ignifuge prietenoase mediului pe baza de *heterocicluri cu fosfor*; (v) studiul prin metabolomică RMN a unor *matrici naturale complexe* provenite din regnul vegetal, animal și uman în vederea corelării profilului metabolic cu factorii de mediu naturali, poluarea, soiurile naturale și cele modificate genetic, speciile animale, stilul de viață și patologiiile induse sau moștenite. O parte din materialele propuse vor fi obținute prin tehnica electrofilării, o tehnică recunoscută pentru consumul scăzut de energie în vederea generării de materiale cu eficiența dată de suprafața activă a nanofibrelor.

1. European Commission - ETAP (The environment technology action plan): https://ec.europa.eu/environment/ecoap/about-action-plan/etap-previous-action-plan_en; 2. European Commission - The IPPC Directive (Integrated Pollution Prevention and Control): https://ec.europa.eu/environment/archives/air/stationary/ippc/ippc_revision.htm; 3. Healths, Environmental and Climate Change Coalition: <https://www.who.int/globalchange/coalition/en/>; 4. United Nations Framework Convention on Climate Change - The Paris Agreement: <https://unfccc.int/process-and-meetings/the-paris-agreement/the-paris-agreement>; 5. Marteel, A. E.; Davies, J. A.; Olson, W. W.; Abraham, M. A. (2003). "Green Chemistry and Engineering: Drivers, Metrics, and Reduction to Practice". *Annu. Rev. Environ. Resour.* 28: 401; 6.12 Principles of Green Chemistry - American Chemical Society. American Chemical Society. Retrieved 2018-02-16.

Scopul Subprogramului

Scopul principal al Subprogramului 3 este **dezvoltarea unei tematici integrate în jurul conceptului modern de materiale ecologice, și dezvoltarea a patru proiecte concrete de la stadiul de**

cercetare fundamentala, cu cresterea progresiva a nivelului de maturitate tehnologica, care sa permita aplicarea unora dintre produsele si serviciile dezvoltate.

Obiective generale

Obiectivele generale prin care se va urmări atingerea acestui scop pot fi sintetizate astfel: avansarea cunoașterii prin obținerea de informații cu caracter fundamental din domeniul științelor pământului și al științelor vietii; dezvoltarea de materiale ecologice noi; dezvoltarea resursei umane; dezvoltarea bazei materiale de cercetare; dezvoltarea rețelei de colaborări naționale și internaționale.

Obiective specifice

- Sinteză, caracterizarea și optimizarea proprietăților, prin analiză relației structură-proprietăți, a unor compuși ecologici noi
- Prepararea și caracterizarea de materiale noi pe baza compusilor sintetizați
- Construcția de prototipuri de dispozitive la scară de laborator
- Atragerea de noi doctoranzi și formarea doctoranzilor și post-doctoranzilor deja existenți
- Atragerea de fonduri de cercetare extra-plan pentru susținerea cercetării avansate
- Creșterea vizibilității grupului și implicit a institutului și Academiei Române prin diseminarea rezultatelor în publicații cu IF ridicat
- Prezentări la întâlniri științifice tradiționale și tematice, internaționale și naționale, care să permită întâlniri cu specialiști în domeniu și inițierea de noi relații de colaborare științifică în vederea aplicării de proiecte de cercetare comune.

Proiecte relevante realizate anterior

Validarea importanței direcției de cercetare propusă este dată și de atragerea de suport financiar prin proiecte de cercetare extra-plan, în cadrul celor 4 proiecte (vezi prezentarea proiectelor și CV-urile directorilor de proiecte), multe dintre ele cu echipe comune între cele patru grupuri de cercetare. Câteva proiecte relevante pentru tema propusă:

1. PN-III-P2-2.1-PED-2019-5071: Bandaj resorbabil cu eliberare controlată de norfloxacin pentru vindecarea arsurilor (BurnHeal), *L. Marin* – Coordonator, 2020-2022, 600 000 Ron
2. PN-III-P1-1.1-TE-2019-0639: Membrane inovative electrofilate pe baza de polimeri ce conțin fosfor pentru haine de protecție, *D. Serbezeanu* – Director, 2020-2022, 431 900 Ron (*echipa comuna proiectele 2 și 1*)
3. PN-III-P2-2.1-PED-2019-3013: O nouă tehnologie „verde” pentru tratarea apei pe baza de membrane de polisulfone funcționalizate/lichide ionice, *A. Filimon* – Director, 2020-2022, 600 000 RON (*echipa comuna proiectele 3 și 1*)
4. RO-NO-2019-0540: Integrated use of the next generation plant biostimulants for an enhanced sustainability of field vegetable high residue farming systems (STIM4+), *A. Nicolescu* – Director ICMPP (*echipa comuna proiectele 4 și 1*)
5. PN-III-P1-1.2-PCCDI-2017-0569: Inchiderea lanțurilor de valoare din bioeconomie prin obținerea de bioproduse inovative cerute de piață (PROSPER), *C. Deleanu, L. Marin* – responsabili ICMPP (*echipa comuna proiectele 4 și 1*).

Eficiența confirmată în aplicarea rezultatelor obținute în domeniul specific proiectului

Echipa de lucru implicată în îndeplinirea obiectivelor subprogramului are deja experiența în obținerea de materiale din compuși/polimerii propuși. Astfel, în direcția de cercetare implicând **chitosanul**, în cadrul echipei au fost publicate 26 lucrări științifice în jurnale ISI cu vizibilitate bună în comunitatea științifică (ex. *Chem. Comm.* (IF=5.9), *Carbohydr. Polym.* (IF=7.18), *J. Colloid. Interf. Sci.* (IF=7.4));

Ultrason. Sonochem. (IF=6.5); *Int. J. Biol. Macromol.* (IF=5.1)) care au atras un numar important de citari (ex. *Chem. Comm.* 48, 8778-8780, 2012 – 87 citari; *Carbohydr. Polym.* 165, 39-50, 2017 – 45 citari; *Carbohydr. Polym.* 179, 59-70, 2018 – 30 citari; *J. Colloid. Interf. Sci.* 536, 196-207, 2019 – 19 citari; *Carbohydr. Polym.* 223, Art. No. 115040, 2019 – 12 citari). Pe directia de cercetare ce implica studii axate pe derivati de **fenotiazina** au fost publicate 10 lucrari stiintifice in jurnale ca *Dyes Pigments* (IF=4.6); *Mat. Sci. Eng. C* (IF=5.8); *J. Mol. Liq.* (IF= 5.0); *Polym. Chem.* (IF=5.3); *Cryst. Growth Des.* (IF=4.0). Necesitatea dezvoltarii de materiale pe baza de **polimeri rezistenti la flacara incorporand heterocicluri cu fosfor** si expertiza grupului care valideaza continuarea acestei directii de cercetare este confirmata de publicarea de lucrari ISI in jurnale cu factor de impact mare (ex. *J. Mat. Chem. A* (IF=11.3); *Eur. Polym. J.* (IF=3.8), *Composite Communication* (IF=4.9)), care au atras interesul cercetatorilor din domeniu (ex. *J. Mat. Chem. A* 2, 16230-16241, 2014 – 91 citari; *Text. Res. J.* 85, 1763-1775, 2015 – 25 citari; *RSC Adv.* 6, 22764-22776, 2016 – 22 citari), precum si de aplicarea pentru brevetare a unor rezultate. Pe directia de cercetare implicand **polisulfonele si termodinamica proceselor fizico-chimice implicite** au fost deja publicate rezultate in jurnale ISI cu vizibilitate buna (ex. *Compos. B: Eng.* (IF = 7.6); *Carbohydr. Polym.* (IF=7.2); *Pure Appl. Chem.* (IF=5.3)), care au atras atentia comunitatii stiintifice (ex. *J. Appl. Polym. Sci.* 112, 1808-1816, 2009 - 30 citari ; *J. Macromol. Sci., Part B*, 49, 207-217, 2010 -17 citari). Importanta **studiilor structurale si prin metabolomica RMN a matricilor naturale complexe** este confirmata de publicatii importante (ex. *J. Mol. Liq.*, (IF=5.0); *Faraday Discussions* (IF=3.7); *Molecules* (IF=3.2); *PlosOne* (IF=2.7)) si de interesul altor cercetatori fata de aceasta directie de cercetare materializat in numarul mare de citari (ex. *BMJ* 2008;337:a1344 (<https://doi.org/10.1136/bmj.a1344>) – 778 citari)

Expertiza resursei umane implicate

Cercetatorii din cele 4 grupuri implicate in realizarea obiectivelor Subprogramului 3 au expertiza complementara care va fi exploatata constructiv in cresterea eficientei activitatilor si a impactului rezultatelor. Astfel, cercetatori implicati in proiectele 1 si 2 au expertiza in prepararea si caracterizarea de materiale pe baza de biopolimeri; in proiectele 1, 2 si 3 exista experienta in utilizarea polisulfonelor pentru obtinerea de materiale si o buna intelegere a fenomenelor specifice organizarii supramoleculare (ex. starea de cristal lichid, fenomene de organizare in solutie); in proiectul 3 exista expertiza in studiul interactiunilor in solutie si in stare solida; in proiectul 4 exista expertiza in caracterizarea structurala de compusi mic-moleculari, polimeri si materiale (hidrogeluri, nanoparticule), si a interactiunilor intermoleculare prin metoda spectroscopiei RMN.

Infrastructura necesara pentru realizarea Subprogramului

Implementarea obiectivelor stiintifice ale Subprogramului 3 implica atat sinteza de noi compusi cat si prepararea de materiale pe baza lor. Pentru sinteza si purificarea de noi compusi, in laboratoare exista infrastructura necesara (vezi descriere proiecte). Principalele echipamente necesare obtinerii de materiale exista deja in laboratoarele in care isi desfasoara activitatea cele 4 grupuri (ex.: 2 sisteme de electrofilare; un dispozitiv de turnare filme de tip „spin-coater”, dispozitiv de turnare filme, liofilizator, glove box, sonda de ultrasonare disponibila prin colaborare).

Baza materiala specifica RMN este asigurata la un nivel foarte bun in institut, iar echipamentele si accesoriile RMN vor fi folosite in toate proiectele componente ale Subprogramului. In plus, un acord de colaborare permite folosirea serverelor firmei Bruker-Biospin din Germania pentru procesarea *on-line* a spectrelor RMN si determinarea profilului metabolic.

In ceea ce priveste caracterizarea materialelor, in momentul de fata se afla in curs de achizitie un microscop cu lumina polarizata care va fi util pentru investigarea starii de organizare a tuturor

materialelor mentionate, iar in cadrul proiectului PN-III-P1-1.1-TE-2019-0639 este programata achizitia unui echipament pentru determinarea rezistentei la flacara (anul 2021). Pentru studiul optic si de organizare in solutie exista acces la echipamentele din cadrul Subprogramului 1 (Spectrometru UV si de fluorescenta, DLS). Pentru studiile de investigare a activitatii biologice (proprietati antimicrobiene, biocompatibilitate *in vitro*) exista o colaborare foarte buna cu membrii Subprogramului 1 si cu USAMV Iasi. Pentru studii preclinice *in vivo* (biocompatibilitate, eliberare controlata de medicamente, tratarea arsurilor) exista o colaborare foarte buna cu UMF Iasi, consolidata si prin derularea unui proiect de cercetare extra-plan comun (PN-III-P2-2.1-PED-2019-5071). Toti cercetatorii implicati in realizarea activitatilor subprogramului au acces la metode de caracterizare existente in institut (FTIR, XRD, SEM, AFM, DSC, TGA).

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Subprogramului

Echipamente existente: Fiecare din cele 4 echipe ale celor 4 proiecte propuse in cadrul acestui subprogram beneficiaza de echipamente specifice, care vor fi folosite de catre toti membrii subprogramului. De ex. microscopul in lumina polarizata care se achizitioneaza in cadrul proiectului 1 este necesar si pentru a determina particularitatile compozitelor/blendurilor preparate in proiectele 1-3; cele 2 echipamente functionale pentru electrofilare existente in Proiectele 1 si 2 vor fi de asemenea utilizate de membrii echipei proiectului 3; echipamentul pentru depunere de filme din cadrul proiectului 1 va fi utilizat si de membrii echipelor 2 si 3 pentru prepararea de filme subtiri.

Consumabile de laborator: In acest moment, fiecare din cele 4 echipe deruleaza cel putin un proiect de cercetare extra-plan din care se asigura consumabilele de laborator necesare. Cele 4 echipe planuiesc ca in viitor sa se sustina reciproc, atat in atragerea de fonduri extrabugetare cat si in procurarea de consumabile de laborator pentru indeplinirea obiectivelor propuse.

Resursa umana: Membrii celor 4 echipe au atat expertiza comuna (ex. obtinere de nanofibre prin tehnica electrofilarii) cat si complementara (expertiza in studiul de interactiuni in solutie, expertiza in obtinere de materiale compozite, expertiza in caracterizare structurala) si planuiesc sa se sustina reciproc pentru cresterea calitatii informatiei extrasa din caracterizarea materialelor investigate in vederea imbunatatirii designului pentru directionarea catre aplicatii.

Colaborarea cu alte Subprograme din institut

Indeplinirea obiectivelor subprogramului necesita investigatii ce vor fi efectuate in cadrul altor Subprograme, prin colaborari stiintifice deja bine stabilite.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Membrii celor 4 echipe au deja o retea de colaborari la nivel national si international care va fi exploatata si largita pe viitor, pentru ca toti membrii echipei subprogramului sa poata beneficia de ea, in vederea depunerii de proiecte de cercetare comune pe viitor.

Activitati de formare a tinerilor cercetatori: doctoranzi, post-doctoranzi.

In cadrul subprogramului exista 2 coordonatori de doctorat cu expertiza in domeniile de cercetare derulate in cele 4 proiecte, si 6 doctoranzi. In viitor, la nivelul subprogramului se planuieste extinderea resursei umane, in special in proiectele 2 si 3, prin formarea de noi cercetatori (cel putin cate 2 noi cercetatori in urmatoorii 6 ani) prin studii de doctorat. In acest sens, anul acesta un student masterand voluntar isi va realiza teza de disertatie in cadrul proiectului 2 in vederea angajarii pentru studii doctorale din toamna anului viitor.

Proiecte componente

Denumire proiect	Descriere succinta
Proiect 3.1 Derivati de chitosan si/sau fenotiazina: sinteza, obtinere de materiale, formulare, investigare <i>Dr. L. Marin, CS I</i>	Sinteza de derivati de chitosan si/sau fenotiazina si prepararea de materiale ecologice pe baza acestora, pentru aplicatii in biomedicina, agricultura, protectia mediului si optoelectronica.
Proiect 3.2 Materiale polimerice continând fosfor, sulf sau azot pentru filme, membrane sau acoperiri <i>Dr. C. Hamciuc, CS I</i>	Proiectarea și sinteza unor materiale polimerice conținând fosfor, sulf sau azot, care să prezinte o serie de proprietăți performante, în vederea dezvoltării de materiale multifuncționale ecologice pentru aplicații în protecția mediului, biomedicină, etc.
Proiect 3.3 Materiale hibride pe baza de polisulfone <i>Dr. A. Filimon, CS III</i>	Obtinerea de materiale compozite prin combinarea de polisulfone functionalizate cu polimeri de origine naturala, cu scopul imbunatatirii si controlului proprietatilor specifice materialelor pentru aplicare in domenii ecologice.
Proiect 3.4 Corelarea factorilor de mediu si stres cu studii structurale si de metabolomica RMN in regnul vegetal si animal <i>Dr. A. Nicolescu, CS III</i>	Aplicarea metabolomicii RMN la matrici naturale complexe provenite din regnul vegetal si animal, urmarind corelarea profilului metabolic cu factorii de mediu naturali, poluarea, soiurile naturale si modificate genetic, specii. O serie de compusi noi de sinteza cu potentiala activitate biologica vor fi caracterizati structural si studiatii din punct de vedere al efectelor macroscopice asupra plantelor si al modificarilor metabolomului vegetal.

PROIECT 3.1. Derivati de chitosan si/sau fenotiazina: sinteza, obtinere de materiale, formulare, investigare**Director proiect, Dr. Luminita MARIN, CS I**

Nr.crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	Luminita MARIN	Director proiect 3.1	CS I	1
2.	Dr. Daniela AILINCAI	Membru proiect 3.1	CS	1
3.	Dr. Manuela Maria IFTIME	Membru proiect 3.1	CS	1
4.	Dr. Anda-Mihaela CRACIUN	Membru proiect 3.1	CS	1
5.	Dr. Andrei BEJAN	Membru proiect 3.1	CS	1
6.	Drd. Sandu CIBOTARU	Membru proiect 3.1	AC	0.5
7.	Drd. Bianca Iustina ANDREICA	Membru proiect 3.1	AC	0.5
8.	Drd. Alexandru ANISIEI	Membru proiect 3.1	AC	0.5
9.	Drd. Ramona LUNGU	Membru proiect 3.1	Drd	1
10.	Drd. Vera Maria PLATON	Membru proiect 3.1	Drd	1

Total norme AC-CSI: CS I: 1; CS: 4, AC: 1.5= 6.5; Alte categorii: DRD: 2

Scopul proiectului

Proiectul de cercetare ce urmeaza sa fie derulat in urmatoorii 6 ani propune **dezvoltarea de materiale prietenoase mediului, in principal pe baza de chitosan si /sau fenotiazina**, in vederea aplicarii lor in domenii de interes in lume: biomedicina, agricultura, protectia mediului, opto-electronica. Caracteristica comuna a materialelor proiectate consta in lipsa lor de toxicitate, sau cel putin minimizarea toxicitatii lor fata de mediul inconjurator.

Obiective generale

Utilizarea chitosanului, un biopolimer obtinut din resurse regenerabile, **pentru obtinerea de materiale cu aplicabilitate in biomedicina, agricultura, protectia mediului si optoelectronica;**

Utilizarea fenotiazinei, un heterociclu cu caracter puternic electrono-donor, si activitate biologica bogata, **pentru crearea de materiale cu performante ridicate, prietenoase mediului, pentru aplicare in biomedicina si optoelectronica.**

Obiective specifice

- Sinteza de noi derivati de chitosan solubili in apa, prin grefare de grupari laterale care sa perturbe legaturile de hidrogen intermoleculare intre lanturile de chitosan;
- Sinteza de hidrogeluri pe baza de chitosan si aldehide cu proprietati biologice specifice (ex. proprietati antimicrobiene) pentru a crea materiale functionale cu aplicare tintita;
- Obtinere de nanofibre pe baza de chitosan prin metoda electrofilarii si functionalizarea acestora prin reactia de iminare cu aldehide biologice active pentru aplicare tintita;
- Obtinere de formulari (utilizand ca matrice hidrogelurile si nanofibrele de chitosan bioactive obtinute la ob. 2 si 3) pentru eliberare controlata de principii active, matricea avand rol de potentare a activitatii sau atingerea unui sinergism cu principiul activ;
- Obtinerea de formulari de medicamente (eritromicina, acetaminofen) sub forma de nanoparticule pe baza de chitosan pentru diminuarea efectelor secundare a acestora;
- Obtinerea de derivati PEG-ilati de fenotiazina solubili in apa;
- Obtinerea de derivati de fenotiazina cu performante optoelectronice imbunatatite prin proiectarea de molecule cu emisie indusa de agregare;
- Obtinere de materiale pe baza derivatilor de fenotiazina sintetizati: nanocristale, co-cristale, amestecuri si compozite, pentru imbunatatirea ulterioara a performantelor pentru aplicare in dispozitive de tip OLED.

Modul de utilizare a resursei umane, competente

In realizarea obiectivelor specifice ale proiectului vor fi implicati 5 cercetatori si 5 doctoranzi. **D. Ailincai, M. Iftime, A. Craciun**, au o vechime in cercetare mai mare de 6 ani si deprinderi bine formate in obtinerea si caracterizarea de hidrogeluri si formulari pe baza de chitosan. **B. Andreica**, desi doctorand in primul an, a acumulat deja 2 ani de experienta in cercetare in cadrul laboratorului nostru, timp in care s-a familiarizat cu obtinerea si caracterizarea de hidrogeluri pe baza de chitosan si a inceput sa lucreze pe directia sintezei de noi derivati de chitosan solubili in apa, subiect care constituie tema tezei sale de doctorat. **A. Anisie**, doctorand in anul I, lucreaza in cadrul laboratorului nostru de aprox. 2 ani, timp in care s-a familiarizat cu obtinerea de fibre de chitosan prin metoda electrofilarii si functionalizarea acestora prin reactia de iminare tintind aplicatii specifice, in special tratarea ranilor. **Drd. V. Platon**, s-a alaturat echipei noastre incepand cu 1.11.2020. Cu o licenta in farmaceutica, ea vine cu cunostinte solide in domeniul medicamentelor, motiv pentru care va fi implicata in obtinerea de formulari ale eritromicinei, pentru cresterea eficientei si scaderea efectelor secundare. **Drd. R. Lungu**,

de asemenea proaspat alaturata grupului in 2020, va fi implicata in realizarea obiectivelor alaturi de cei trei cercetatori experimentati. **A. Bejan** are deja o experienta de 6 ani in sinteza si caracterizarea de derivati de fenotiazina cu proprietati optoelectronice, incluzand derivati de imino-chitosan. **S. Cibotaru**, doctorand in anul II, a acumulat deja experienta in sinteza si caracterizarea de derivati de fenotiazina PEG-ilati solubili in apa, care constituie subiectul tezei sale de doctorat. Directorul de proiect **L. Marin**, cu o experienta in cercetare de aprox. 20 de ani, a acumulat expertiza in domeniul propunerii de proiect avand competenta sa supervizeze indeplinirea planului de activitate propus.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Implementarea planului de cercetare implica in principal resurse materiale existente in cadrul laboratorului/institutului. Desi inca tanara (media de varsta 30 ani), echipa implicata in realizarea proiectului a dovedit o buna capacitate de atragere de fonduri extrabugetare (in momentul de fata echipa implementeaza 6 proiecte: 1 PED, 2PD, 2PCCDI, 1 HORIZON-2020 de tip RISE) ca sursa alternativa pentru procurarea de consumabile de laborator si echipamente mici. Noutatea si utilitatea studiilor intreprinse in cadrul proiectului creeaza premise bune ca rezultatele obtinute vor constitui un bun suport pentru aplicarea de proiecte nationale si internationale viitoare.

Modul de monitorizare a activitatilor Proiectului

Gradul de realizare a activitatilor proiectului va fi monitorizat prin realizarea unui raport stiintific care va include rezultatele obtinute (incluzand indicatorii de performanta propusi/realizati) la sfarsitul fiecarui an. In functie de performantele realizate, se vor stabili obiectivele si activitatile pentru etapa urmatoare.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

In decursul ultimilor ani, echipa a stabilit deja relatii de colaborare cu alte Subprograme/Proiecte din institut, care si-au dovedit eficienta in cresterea valorii studiilor de cercetare prin cresterea factorului de impact al jurnalelor in care au fost publicate lucrari in colaborare. Astfel, echipa colaboreaza cu membri ai Subprogramul 1 (dr. Dragos Peptanariu, Isabela Sandu - teste de citotoxicitate; dr. Irina Rosca – investigatii antimicrobiene; dr. Adina Coroaba - analize XPS; dr. Laura Ursu – analize AFM si Raman, dar si discutii stiintifice pe teme comune), dr. Simona Morariu (Subprogramul 7) - studii de reologie; dr. Sergiu Shova (Subprogramul 6) – studii de difractie de raze X pe monocristal, dr. Adrian Bele (Subprogramul 6) – studii de adsorbție de vapori; dr. Irina Stoleru, dr. Daniela Pamfil (Subprogramul 8) – determinarea unghiului de contact; dr. Florica Doroftei (Subprogramul 9) investigatii SEM, colaborari care vor fi mentinute si in viitor.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Echipa de cercetare a dezvoltat numeroase colaborari cu alte centre academice dar si firme mici si mijlocii din tara si strainatate, care se regasesc in evolutia cresterii gradului de intelegere a fenomenelor din spatele performantelor materialelor obtinute si dezvoltarea designului catre performante necesare aplicarii. Astfel, echipa are colaborari cu Universitatea de Medicina si Farmacie Gr. T. Popa, Iasi (Profesor Liliana Mititelu Tartau – teste de biocompatibilitate si eliberare de medicamente *in vivo*); Universitatea de Stiinte Agricole si Medicina Veterinara Iasi (Profesor Mihai Mares - teste antifungice *in vivo*; Profesor Valentin Nastasa – teste antitumorale *in vivo*); IRO Iasi (CSII Brindusa Dragoi –teste MRI); Universitatea „Al. I. Cuza” Iasi (Dr. Dalila Belei, Dr. Ramona Danac-sinteză organica); Universitatea „St. cel Mare” Suceava (Dr. A. Rotaru – realizare de dispozitive OLED); Universitatea „Ghe. Asachi” Iasi (Profesor Maricel Agop – studii de modelare matematica a eliberării de

medicamente); Sanimed Bucuresti (Profesor Angheloiu – proiecte comune pentru aplicarea formularilor); Instituto per lo Studio delle Macromolecole Milan (Dr. William Porzio – studii de difracție de raze X; Dr. Silvia Destri, Dr. Chiara Botta – studii optice); Tyndall National Institute, Cork, Irlanda (Profesor Maria Bardosova – interes comun pentru derivati de chitosan); Wuhan Technologic Institute, China (Profesor Xinjian Cheng – dezvoltare de chemosenzori pe baza de chitosan).

PROIECT 3.2. Materiale polimerice care contin fosfor, sulf sau azot pentru obtinerea de filme, membrane sau acoperiri

Director proiect, Dr. Corneliu HAMCIUC, CS I

Nr.crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	Dr. Corneliu HAMCIUC	Director Proiect 3.2	CS I	1
2.	Dr. Elena HAMCIUC	Membru proiect 3.2	CS II	1
3.	Dr. Tachita VLAD-BUBULAC	Membru proiect 3.2	CS III	1
4.	Dr. Diana SERBEZEANU	Membru proiect 3.2	CS	1
5.	Dr. Daniela Ionela CARJA	Membru proiect 3.2	CS	1
6.	Dr. Alina Mirela IPATE	Membru proiect 3.2	AC	1

Total norme AC-CSI: CS I: 1; CS II: 1; CS III: 1; CS: 2; AC: 1 = 6

Scopul proiectului

Proiectul isi propune obtinerea de rezultate stiintifice si tehnologice in domeniul materialelor polimerice ecologice, ignifuge, cu proprietati speciale, avand potentiale aplicatii in industrie (electronica, electrotehnica, constructii, etc), medicina si protectia mediului. Realizarea unor materiale care sa raspunda cerintelor actuale, atat ale celor legate de performantele stiintifice cat si ale celor impuse de protectia mediului, reprezinta un domeniu de interes atat la nivel national cat si international. Obtinerea de noi materiale multifunctionale cu rezistenta la foc imbunatatita, utilizand aditivi ecologici pe baza de compusi cu fosfor, constituie o oportunitate de diversificare a ofertei de materiale inteligente care respecta noile cerinte impuse de protejarea mediului inconjurator si pentru care exista o cerere exponentiala pe piata [<https://www.grandviewresearch.com/industry-analysis/personal-protective-textile-market>; <https://www.businesswire.com/news/home/20200626005373/en/Smart-Personal-Protective-Equipment-PPE-Market-2020-2024>].

In acest context, scopul planului de cercetare propus pentru anii 2021-2027 vizeaza obtinerea de materiale polimerice care contin fosfor deoarece acestea, spre deosebire de cele care contin halogeni, nu emit gaze toxice in caz de incendiu. Structurile chimice ale polimerilor vor fi proiectate astfel incat sa nu contina atomi de halogen care ar conduce la un grad ridicat de toxicitate. Unele structuri vor contine si atomi de azot, sulf, siliciu, bor etc. ceea ce va permite realizarea unor sinergisme cu atomul de fosfor, conducand la sporirea performantei de rezistenta la foc. In plus, structurile propuse vor avea un caracter aromatic pronuntat si un continut ridicat de fosfor, care va conduce la obtinerea unor aditivi antinflama ecologici cu eficienta ridicata.

Se vor proiecta si sintetiza noi monomeri si polimeri care contin fosfor si pe baza acestora, se vor prepara materiale multifunctionale avansate. Structura polimerilor va fi atent proiectata pentru a conduce la produci cu solubilitate buna, capacitate de formare a filmelor/membranelor/acoperirilor/

fibrelor, si o serie de proprietati specifice, cum ar fi proprietati mecanice, proprietati de rezistenta la flacara etc. Pentru a obtine noi membrane din nanofibre pe baza de compusi care contin fosfor, sulf sau azot, se va utiliza procedeul de electrofilare. De asemenea, se vor prepara materiale hibride prin introducerea simultana de nanoparticule anorganice si ignifuganti care contin fosfor intr-o matrice polimera pentru a dezvolta nanomateriale cu rezistenta la foc imbunatatita.

Obiectiv general

Obiectivul general al proiectului consta in **realizarea unor noi materiale multifunctionale avansate, pe baza de compusi care contin fosfor, sulf sau azot** (polimeri, amestecuri de polimeri, compozite polimerice) **ecologice, caracterizate prin rezistenta la foc si proprietati specifice** (termice, optice, electrice, magnetice etc.) **pentru utilizare in diferite domenii.**

Obiective specifice

- Sinteza si studiul unor noi ignifuganti ecologici, compusi mic-moleculari si polimeri continand fosfor, compatibili cu mediu, care vor putea fi utilizati ca aditivi cu eficienta ridicata si toxicitate redusa pentru imbunatatirea comportarii la foc a polimerilor produsi la scara industriala (rasini epoxidice, alcool polivinilic, etc).
- Corelarea proprietatilor fizico-chimice ale ignifugantilor obtinuti cu structura lor chimica si conformationala, precum si evaluarea eficientei acestora in vederea identificarii unor aplicatii si posibilitati de valorificare.
- Dezvoltarea de sisteme polimerice ecologice (polimeri, amestecuri de polimeri si nanocompozite polimerice) sub forma de acoperiri, filme subtiri, nanofibre cu proprietati speciale (comportare la foc imbunatatita, activitate antimicrobiana, proprietati electrice, optice, magnetice, etc) avand potentiale utilizari in industrie, medicina si protectia mediului.
- Prepararea de hidrogeluri si aerogeluri polimerice cu aplicatii in protectia mediului sau in domeniul biomedical pentru eliberare controlata de medicamente.
- Membrane din micro- si nanofibre pe baza de compusi cu fosfor, cu proprietati ignifuge.

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Echipa de lucru implicata in realizarea proiectului este alcatuita din 6 membri, care au competente si expertiza necesare pentru indeplinirea obiectivelor prevazute. Echipa de implementare a proiectului detine o experienta bogata in domeniul chimiei organice si macromoleculare, cum ar fi sinteza si caracterizarea unei game variate de monomeri si polimeri, prelucrarea polimerilor sub forma de filme subtiri, acoperiri sau fibre, polimeri continand fosfor cu proprietati de rezistenta la flacara si/sau de cristal lichid, materiale polimerice compozite si nanocompozite pe baza de diferiti compusi anorganici. Expertiza membrilor din echipa este dovedita prin numarul mare de articole stiintifice publicate in reviste de prestigiu cotate ISI, prin numeroasele participari la manifestari stiintifice, cat si prin implicarea in proiecte de cercetare ca directori/responsabili sau membri in echipa.

Proiecte relevante realizate anterior

1. *Synthesis and study of phosphorus-containing polymers, with high performance properties for applications in advanced technologies and/or biomedical applications*, Contract nr. 152/PN-II-RU-PD_657/10.08.2010, Director de proiect: dr. Tachita Vlad-Bubulac.

2. *Phosphorus-containing polymers for high performance materials used in advanced technologies and/or biomedical applications*, PN-II-RU-TE-2012-3-0123, Director de proiect: dr. Diana Serbezeanu.

3. *Retea wireless de senzori pasivi de hidrogen de tip flex-on-chip pe baza de OLC-uri (onion-like carbon) manipulate cu ajutorul dielectroforezei (H2Sense)*. Proiect PN-II-PT-PCCA-2013-4-1086; contract nr. 43/2014, Responsabil de proiect: dr. Corneliu Hamciuc.

4. *Membrane inovative electrofilate pe baza de polimeri ce contin fosfor pentru haine de protectie*, PN-III-P1-1.1-TE-2019-0639, Contract nr. 89/03.09.2020, Director de proiect: dr. Diana Serbezeanu.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Echipa de cercetare dispune de spatii moderne dotate cu toate echipamentele necesare pentru sinteza compusilor organici si a compusilor macromoleculari: nisa cu ventilatie, aparat de electrofilare, balanta analitica, mantale de incalzire, agitatoare mecanice, etuve, pompe de vid, sticlaria de laborator, aparat pentru determinarea punctului de topire etc; de asemenea, exista calculatoare, scanner si imprimanta, care vor fi folosite in realizarea obiectivelor propuse in cadrul Proiectului. Institutul de Chimie Macromoleculara "Petru Poni" dispune de echipamente proprii necesare derularii proiectului propus: spectrometru FTIR - Bruker Vertex 70, spectrometre RMN Bruker Avance NEO 400 si 600 MHz, sistem de analiza termica - cuplat cu spectrometru de masa si FTIR, aparat pentru determinarea unghiului de contact, calorimetru cu scanare diferentiala - Pyris Diamond DSC Perkin Elmer, aparat de analiza termogravimetrica, spectrometru dielectric (Novocontrol GmbH Germania), Microscop Electronic de Baleiaj tip Quanta 200 cu sistem de analiza elementala EDAX, etc. Aceste aparate vor permite caracterizarea intermediarilor, a ignifugantilor, precum si a materialelor polimerice.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Se va colabora cu specialistii din alte Subprograme/Proiecte din Institutul de Chimie Macromoleculara „Petru Poni”, cu scopul extinderii studiului proprietatilor termice, mecanice, optice, electrice, etc. ale polimerilor si ale materialelor ce vor fi sintetizate. De asemenea, colaborarea va fi necesara pentru caracterizarea structurala si morfologica a compusilor si materialelor obtinute in cadrul Proiectului.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Colaborarile deja initiate la nivel national cu alte institute din tara, vor fi pastrate in viitor, ex.: Universitatea Tehnica "Gh. Asachi" din Iasi, Facultatea de Inginerie Chimica si Protectia Mediului "Cristofor Simionescu", Facultatea de Inginerie Electrica; Universitatea "Al. I. Cuza" Facultatea de Chimie, Iasi; Facultatea de Medicina Veterinara, Iasi; Universitatea de Medicina si Farmacie "Gr. T. Popa", Facultatea de Farmacie, Iasi; Academia de Politie "Alexandru Ioan Cuza", Facultatea de Pompieri, Bucuresti.

De asemenea, se va colabora in continuare cu institute din strainatate, precum: Institute of Catalysis, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria (dezvoltarea materialelor polimerice pe baza de zeoliti); Empa, Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology, St Gallen, Switzerland (in scopul caracterizarii complexe a comportarii la foc a materialelor).

PROIECT 3.3. Materiale hibride pe baza de polisulfone**Director proiect, Dr. Anca FILIMON, CS III**

Nr. crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	<i>Dr. Anca FILIMON</i>	<i>Director proiect 3.3</i>	<i>CS III</i>	<i>1</i>
2.	Dr. Adina Maria DOBOS	Membru proiect 3.3	CS	1
3.	Dr. Elena PERJU	Membru proiect 3.3	CS	1
4.	Dr. Mihaela Dorina ONOFREI	Membru proiect 3.3	AC	1
5.	Dr. Dumitru POPOVICI	Membru proiect 3.3	AC	1
6.	Drd. Oana DUMBRAVA	Membru proiect 3.3	DRD	1

Total norme AC-CSI: CS III: 1; CS: 2; AC:2 = 5; Alte categorii: DRD: 1= 1**Scopul proiectului**

Dezvoltarea de materiale polimere membranare concepute pentru dispozitive multifunctionale performante, reprezinta o abordare inovatoare si promitatoare cu rol esential in solutionarea cerintelor ecologice, si in acelasi timp, cu influenta semnificativa asupra imbunatatirii tehnologiilor de depoluare. Acest fapt ne motiveaza sa urmarim si sa dezvoltam activitati de cercetare privind proiectarea, formularea, investigarea si testarea unor noi materiale polimere capabile sa genereze suprafete/membrane cu o gama de structuri, chimii si caracteristici controlate, in scopul cresterii functionalitatii, durabilitatii, selectivitatii si stabilitatii. Pentru acest scop am ales ca precursor polisulfonele (PSF), o clasa de polimeri termoplastici utilizati in multe domenii ale vietii datorita proprietatilor de inalta performanta: stabilitate termica, rezistenta mecanica, stabilitate hidrolitica si la actiunea unei game largi de reactivi chimici, stabilitate sub actiunea radiatiilor. Cercetari stiintifice in domeniul tehnologiei membranelor au evidentiat potentialul polisulfonelor pentru obtinerea de materiale membranare, datorita solubilitatii bune in solventi aprotici dipolari si posibilitatii de a fi modificate chimic in vederea imbunatatirii proprietatilor specifice. In plus, obtinerea de materiale compozite/amestecuri prin amestecarea PSF cu diferiti polimeri (cum ar fi, derivatii naturali) s-a dovedit o alternativa de succes pentru proiectarea de noi materiale cu performante imbunatatite, prin combinarea proprietatilor componentelor individuale. In acest context, proiectul propune dezvoltarea de materiale membranare hibride prin combinarea PSF cu polimeri de origine naturala, in vederea cresterii eficientei si selectivitatii suprafetelor obtinute, concomitent cu cresterea biocompatibilitatii si biodegradabilitatii. Noutatea proiectului consta in obtinerea de compozite "verzi", care datorita proprietatilor fizice si chimice imbunatatite permit dezvoltarea de materiale avansate (filme/membrane/fibre) cu o mai buna fiabilitate, calitate si eficienta pentru aplicatii practice adresate sanatatii omului si mediului.

Obiectiv general

Datele mentionate justifica lansarea unei noi directii de cercetare, cu obiectivul general de a **dezvolta si testa materiale membranare noi si de a transforma rezultatele fundamentale in noi tehnologii cu aplicabilitate in domenii de specializare ecologica.**

Obiective specifice

- Modificarea chimica controlata a polisulfonei cu diferite grupari functionale reactive.
- Formularea/proiectarea rationala a unor compozite/amestecuri pe baza de polisulfone

- functionalizate cu proprietati optime in eco-tehnologii;
- Caracterizarea compozitelor/amestecurilor obtinute prin stabilirea corelatiei dintre structura chimica si proprietatile specifice;
- Modelarea si optimizarea proprietatilor fizico-chimice in vederea obtinerii de filme/fibre/membrane in functie de aplicatia vizata;
- Testari specifice ale filmelor/membranelor/fibrelor in vederea identificarii/evaluarii potentialului aplicativ in domenii ecologice.

Se are in vedere modificarea chimica controlata a PSF, cu scopul principal de a elimina inconvenientul hidrofobicitatii ridicate a polisulfonei care ii limiteaza aplicarea. Strategia de sinteza implica controlul flexibilitatii si a mobilitatii lantului polimeric prin incorporarea de grupe functionale reactive, generand structuri care prezinta: reactivitate marita, solubilitate buna si abilitate de a forma filme/fibre/membrane - proprietati favorabile scopului urmarit. Solubilitatea imbunatatita a polisulfonelor functionalizate va permite prelucrarea acestora din solventi prieteni mediului, limitand astfel cantitatea de reziduuri toxice. Pasul urmator in atingerea obiectivului general propus consta in combinarea PSF functionalizate (cu structura controlata, stabilitate chimica si mecanica, etc.) cu derivati naturali (cu hidrofilicitate si flexibilitate ridicata, transparenta, rezistenta la tractiune, etc). Proprietatile compozitelor obtinute vor fi studiate in solutie, pentru a obtine informatii privind structura, compatibilitatea, interactiunile la distanta scurta si lunga, interactiunile inter- si intramoleculare. Aceste aspecte cu caracter fundamental permit corelatii structura-proprietati, care mai departe conduc la trasarea de modalitati de optimizare a compozitiei materialelor in vederea cresterii eficientei pentru aplicare. Astfel, optimizarea rezultatelor obtinute prin studii in solutie va permite stabilirea compozitiilor optime ale amestecurilor de polimeri utilizati pentru realizarea de filme/membrane/fibre cu porozitate controlata. Proprietatile specifice principale ale materialelor compozite obtinute care vor fi urmarite sunt: porozitatea si hidrofilicitatea. Porozitatea va fi determinata prin teste specifice: microscopie (AFM, SEM, microscopie optica), studii de permeabilitate, etc. Hidrofilicitatea sistemului, un parametru esential pentru evaluarea comportamentului suprafetei si functionalitatea materialelor in aplicatii practice, va fi determinata in vederea directionarii materialelor catre aplicatii specifice din domeniul sanatatii si mediului.

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Echipa de lucru are competente interdisciplinare. Ea este compusa din 5 cercetatori si 1 doctorand, cu specializari in chimie, fizica, biofizica, ingineria mediului, microbiologie, cu cunostinte si abilitati adecvate obiectivelor propuse. Pe baza competentelor profesionale, reflectate in rezultatele stiintifice publicate anterior, in noul plan de cercetare propus, **E. Perju** impreuna cu **Drd. O. Dumbrava** se vor implica in realizarea reactiilor de functionalizare a PSF, si impreuna cu **A.M. Dobos** vor participa la prelucrarea acestora sub forma de materiale si caracterizarea fizico-chimica. Experienta in cercetare dobandita in timp de catre **A.M. Dobos** si **M.D. Onofrei**, va fi valorificata in realizarea experimentelor vascozimetrice si reologice, analiza si interpretarea rezultatelor privind conformatia, configuratia si interactiunile specifice. **D. Popovici** va realiza simulari matematice ale rezultatelor particulare obtinute (tinand cont de structura materialelor studiate si interactiunile din sistem) utilizand metode statistice de studiu ale lanturilor izolate si metode de optimizare molecular dinamice. Ca urmare a studiilor finalizate in domeniul ingineriei chimice si protectia mediului, **M.D. Onofrei** va fi de asemenea implicata in cercetari destinate testarilor specifice privind resursele de apa. **O. Dumbrava** (conducator stiintific dr. habil. Luminita Marin, 1.11.2020) cu studii finalizate in domeniul microbiologiei, detine cunostinte solide in acest domeniu, motiv pentru care va fi implicata si in activitati privind testarea materialelor membranare ca potentiali agenti antimicrobieni fata de diferite

tipuri de bacterii din mediu, dar si in obtinerea materialelor propuse si in stabilirea relatiei structura-proprietati microbiologice. Directorul de proiect, a acumulat expertiza in domeniul propunerii de proiect avand competenta sa asigure indeplinirea planului de activitate propus.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Echipa de cercetare dispune de resurse materiale care permit implementarea proiectului propus: echipamente (Viscozimetru automat, Osmometru cu membrane, Multimetru –Electrospining), materiale de laborator si reactivi, software de simulare. De asemenea, prin proiectul 310PED/2020 (PN-III-P2-2.1-PED-2019-3013) care se afla in derulare, va fi asigurata achizitionarea de reactivi, consumabile, etc. In plus, se are in vedere extinderea infrastructurii de cercetare prin achizitii de echipamente necesare realizarii, controlului si caracterizarii filmelor/membranelor (etuva cu vid, aparat automat de realizare a filmelor/membranelor), care vor fi utile in implementarea obiectivelor temei propuse. Accesul la infrastructura imbunatatita a institutului va permite transformarea rezultatelor fundamentale in noi tehnologii cu aplicabilitate in diferite domenii de specializare inteligenta, iar rezultatele stiintifice obtinute vor constitui fundamentul pentru dezvoltarea unor noi directii de cercetare prin accesarea de noi surse de finantare.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institute.

Membrii echipei colaboreaza cu cercetatori din alte Subprograme/Proiecte din institut pentru a analiza anumite aspecte legate de activitatile de cercetare si de a gasi solutii la o gama larga de provocari: dr. Adina Coroaba, Dr. Laura Ursu (Subprogramul 1) - analize XPS, AFM; dr. Luiza Gradinaru (Subprogramul 2) – evaluarea/determinarea unghiului de contact; dr. Niculae Olaru (Subprogramul 5) – studii privind proiectarea si obtinerea de fibre; dr. Alexandra Bargan (Subprogramul 6) – studii privind capacitatea de absorbtie a vaporilor in regim dinamic; dr. Florica Doroftei, dr. Iuliana Stoica (Subprogramul 9) - investigatii morfologice (SEM, AFM); colaborari ce vor fi mentinute si in viitor.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

In decursul timpului, echipa de cercetare a stabilit/dezvoltat colaborari cu alte centre de cercetare din tara. Astfel, echipa colaboreaza cu Institutului de Chimie "Coriolan Dragulescu" Timisoara (Dr. Adriana Popa, Dr. Aurelia Visa); Universitatea Politehnica Timisoara (Conf. univ. dr. ing. Lavinia Lupa); Universitatea "Al. I. Cuza" Iasi, Facultatea de Biologie/Catedra de Microbiologie (Prof. dr. Simona Dunca). Aceste colaborari sunt mentinute si continua si in prezent fiind consolidate prin proiectul parteneriat 310PED/2020 in derulare, urmarindu-se extinderea cercetarii catre TRL4 (realizarea si testarea modelului demonstrativ in tehnologie validata in laborator).

PROIECT 3.4. Corelarea factorilor de mediu si stres cu studii structurale si de metabolomica RMN in regnul vegetal si animal

Director proiect, Dr. Alina NICOLESCU, CS III

Nr. crt.	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	Alina NICOLESCU	Director proiect 3.4	CS III	1
2.	Dr. Calin DELEANU	Membru proiect 3.4	CS I	0.5
3.	Dr. Mihaela BALAN-PORCARASU	Membru proiect 3.4	AC	1
4.	Dr. Gabriela Liliana AILIESEI	Membru proiect 3.4	AC	1
5.	Chim. Ana-Maria MACSIM	Membru proiect 3.4	AC	1
6.	Chim. Mihaela CRISTEA	Membru proiect 3.4	AC	1
7.	Anisoara CONDREA	Membru proiect 3.4	A1	1
8.	Liviu Vasilica CRISTEA	Membru proiect 3.4	M3	1

Total norme AC-CSI: CS I: 0,5; CSIII: 1; AC: 4 = 5,5

Alte categorii: A1: 1; M3: 1 = 2

Scopul proiectului

Scopul proiectului este pe de o parte **corelarea unor markeri chimici cu raspunsul la diverse tipuri de stres metabolic** si, pe de alta parte, **corelarea efectului administrarii unor compusi de sinteza asupra metabolismului vegetal si animal.**

Elementele de noutate includ studii structurale avansate ale unor compusi noi cu substructuri naturale, evidentierea efectelor metabolice ale administrarii unor compusi exogeni asupra organismelor studiate, precum si studiul alterarii profilului metabolic sub efectul unor metaboliti endogeni de tip intoxicatie interna si al unor factori de stres de mediu. Pana la patrunderea tehnicilor RMN in domeniul stiintelor vietii si al stiintelor pamantului, efectele stresului asupra organismelor vegetale si animale era urmarit doar prin semnele macroscopice si prin cativa markeri preselectati de o anumita tehnica analitica.

Progresele facute in ultimii ani in spectroscopia RMN au creat premisele inceperii cursei pentru descifrarea completa a metabolomului, ca un pas logic dupa progresele facute in ultimele decade in descifrarea genomului si proteomului, care, desi mult mai simple decat metabolomul, inca se afla in plina dezvoltare ca domenii de sine statatoare.

In mod concret, in paralel cu studiile structurale, proiectul isi propune sa studieze prin metabolomica RMN matrici naturale complexe provenite din regnul vegetal, animal si uman. Se va urmari corelarea profilului metabolic cu factorii de mediu naturali, poluarea, soiurile naturale si cele modificate genetic, speciile animale, stilul de viata si patologii induse sau mostenite.

O serie de compusi noi de sinteza cu potentiala activitate biologica vor fi caracterizati complet din punct de vedere structural, iar dintre acestia unii reprezentanti vor fi studiati din punct de vedere al efectelor macroscopice asupra plantelor si a modificarilor metabolomului vegetal.

Proiectul are o abordare integrata implicand activitati specifice domeniilor stiintelor naturale (studii structurale, chimie analitica instrumentala), stiintelor pamantului (ecologie, agronomie, agricultura, viticultura) si al stiintelor vietii (biologie, medicina umana si veterinara).

Obiective generale

Studiul metabolomului vegetal in conditii normale si de stres; studiul metabolomului animal si uman in conditii normale si de stres; studii structurale la compusi de sinteza cu potentiala activitate biologica.

Obiective specifice

- studiul structurii unor compusi de sinteza;
- caracterizarea unor materiale de origine naturala (*in colaborare cu Proiectul 3.1*);
- studiul efectelor administrarii unor compusi de sinteza asupra dezvoltarii plantelor si a metabolomului vegetal (*in colaborare cu Proiectul 3.1*);
- studiul metabolomului vegetal si identificarea unor particularitati asociate cu specii, soiuri si mutatii genetice;
- studiul metabolomului animal si identificarea unor particularitati asociate cu specii si rase;
- studiul efectelor ecologice de mediu (temperatura, sol, seceta) asupra metabolomului vegetal;
- studiul efectelor ecologice de poluare asupra metabolomului vegetal si uman;
- studiul efectelor erorilor metabolice rare de tip autointoxicare asupra metabolomului uman.

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Echipa are competente in domeniul spectroscopiei RMN si a analizelor structurale. Astfel, dr. Calin Deleanu si dr. Alina Nicolescu au experienta anterioara in toate directiile necesare pentru prezentul proiect (determinari de structura, interactiuni intermoleculare si incluziuni, metabolomica, aplicatii medicale si aplicatii in stiintele alimentare), dr. Mihaela Balan Porcarasu are experienta in analiza structurala, in studiul complexilor de incluziune si in studiul probelor vegetale, dr. Gabriela Ailiesei si Ana-Maria Macsim au experienta in analiza structurala si in studiul probelor vegetale, Mihaela Cristea are experienta in studiul probelor vegetale si medicale. Personalul auxiliar asista cercetatorii in toate tipurile de activitati.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Baza materiala specifica proiectului (RMN si aparatura mica de laborator) este asigurata la un nivel foarte bun in institut. De asemenea salarizarea de baza este asigurata constant de catre AR. Un acord de colaborare permite folosirea serverelor firmei Bruker-Biospin din Germania pentru procesarea on-line a spectrelor RMN si determinarea profilului metabolic. Consumabilele, fondurile pentru diseminare si alte activitati specifice vor fi asigurate prin participarea la competitii de proiecte de cercetare cu tematica complementara.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Propunerea de proiect are in vedere colaborari specifice tematicii proiectului, in principal cu dr. Luminita Marin (*Proiectul 3.1*), dr. Sergiu Sova si dr. Mariana Pinteala si cu proiectele din care acestia fac parte. Prin natura activitatilor zilnice de tip suport colaborez cu majoritatea cercetatorilor din institut la diverse subiecte de cercetare si putem identifica subiecte care pot deveni de interes comun.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Pentru realizarea proiectului se au in vedere colaborari traditionale ale colectivului nostru, in tara cu Centrul de Chimie Organica Bucuresti, USAMV Iasi, ICECHIM Bucuresti, UMF Cluj, Spitalul Clinic Judetean Craiova, UAIC Iasi si in strainatate cu Institutul Mamei si Copilului din Chisinau, R. Moldova si Colectivele de Aplicatii si Cercetare ale firmei Bruker Biospin din Rheinstetten, Germania.

LABORATOR POLIMERI FUNCTIONALI „MIHAI DIMA”**SUBPROGRAM 4. POLIMERI IONICI SINTETICI SI NATURALI.
MATERIALE COMPOZITE MULTIFUNCTIONALE****Director Subprogram 4, dr. Marcela MIHAI, CS II****ECHIPA SUBPROGRAMULUI**

Nr. crt.	Nume si prenume	Functia	Categorie profesionala	Norma
1	<i>Dr. Marcela MIHAI</i>	<i>Director subprogram 4 Director proiect 4.1</i>	<i>CS II</i>	<i>1</i>
2	Dr. Florin BUCATARIU	Membru proiect 4.1	CS III	1
3	Dr. Silvia VASILIU	Membru proiect 4.1	CS III	1
4	Dr. Stefania RACOVITA	Membru proiect 4.1	CS	1
5	Dr. Diana Felicia LOGHIN	Membru proiect 4.1	AC	1
6	Dr. Marius Mihai ZAHARIA	Membru proiect 4.1	AC	1
7	Melinda Maria BAZARGHIDEANU	Membru proiect 4.1	AC	1
8	Larisa Maria PETRILA	Membru proiect 4.1	AC	1
9	Ana-Lavinia VASILIU	Membru proiect 4.1	AC	1
10	Marin Aurel TROFIN	Membru proiect 4.1	DRD	1
11	Angela PELIN	Membru proiect 4.1	M2	1
12	Ioan TESCU	Membru proiect 4.1	A1	1
13	<i>Dr. Maria Valentina DINU</i>	<i>Director proiect 4.2</i>	<i>CS II</i>	<i>1</i>
14	Dr. Ecaterina Stela DRAGAN	Membru proiect 4.2	CS I	0,5
15	Dr. Claudiu-Augustin GHIORGHITA	Membru proiect 4.2	CS	1
16	Dr. Adrian-Ionel DINU	Membru proiect 4.2	CS	1
17	Dr. Irina RASCHIP	Membru proiect 4.2	CS	1
18	Dr. Marinela Maria LAZAR	Membru proiect 4.2	AC	1
19	Dr. Ana-Irina COCARTA	Membru proiect 4.2	AC	1
20	Martha MARCU	Membru proiect 4.2	A1	1

Total norme AC-CSI: CS I: 0,5; CS II: 2; CSIII: 2; CS: 4; AC: 7 = 15,5**Alte categorii: DRD: 1; A1: 2, M2: 1= 4****Premizele propunerii**

Materialele compozite multifunctionale pe baza de polimeri ionici sintetici si naturali constituie o solutie tot mai des adoptata in realizarea unor structuri performante, cu aplicabilitate in numeroase

ramuri industriale. Implementarea acestora in diverse domenii – uneori ca alternative avantajoase ale materialelor clasice, sau pentru noi aplicatii, altfel greu sau imposibil de realizat – ridica insa si o serie de probleme generate de structura complexa a acestora si de diversele posibilitati de obtinere, de comportamentul inca insuficient cunoscut la diversi stimuli externi.

Polimerii ionici, sintetici si naturali, au cunoscut o dezvoltare impresionanta in ultimele decenii, cu un control fara precedent asupra proprietatilor si arhitecturilor macromoleculare. Prin activitate multidisciplinara, polimerii ionici sintetici si naturali pot furniza materiale ecologice, durabile, mai sigure, mai eficiente si/sau mai putin costisitoare, potrivite pentru aplicatii si procese specifice. Subprogramul propus se concentreaza pe fenomene fundamentale si aplicatii practice derivate din diferite interactiuni ionice in stiinta polimerilor. Proiectele componente ale Subprogramului pun accentul pe sinteza si exploatarea polimerilor ionici pentru dezvoltarea de noi materiale, procese si/sau aplicatii care ar putea avea cu siguranta o influenta pozitiva asupra cautarii continue de materiale noi pentru diferite domenii de aplicatii.

Scopul Subprogramului

Scopul Subprogramului 4 il reprezinta dezvoltarea stiintifica intr-un domeniu de varf cum este cel al **materialelor (compozite) multifunctionale**, prin **sinteza si utilizarea unei game largi de polimeri ionici sintetici si naturali, cu functiuni si arhitecturi prestabilite**. Cercetarile se vor concentra pe *intelegerea fundamentala a principiilor care guverneaza sinteza, autoasamblarea si organizarea ierarhica a materialelor si utilizarea acestei intelegeri pentru a proiecta noi materiale cu aplicatii diverse*. Garantia realizarii acestui scop o constituie activitatea anterioara a colectivului Subprogramului, sustinuta prin publicarea, pe baza cercetarilor efectuate, a numeroase articole in reviste cu factor de impact ridicat, cele mai multe fiind bazate pe o abordare interdisciplinara.

Obiective generale

Aprofundarea si extinderea cunostintelor din domeniul polimerilor ionici sintetici si naturali; Dezvoltarea de noi directii de cercetare implicand metode si tehnologii moderne; Directionarea activitatii de la cercetare fundamentala catre cercetare cu rezultat aplicativ si stabilirea de colaborari cu mediul de afaceri public/privat; Cresterea competitivitatii si vizibilitatii pe plan national si international a Subprogramului si, implicit, a institutului.

Obiective specifice

Obtinerea de polimeri (multi)functionali ionici: Obtinerea de polimeri (zwitter)ionici liniari, grefati si reticulati; Modificarea polimerilor naturali si/sau sintetici prin reactii polimer analoage, pentru introducerea de noi grupari functionale.

Dezvoltarea de materiale (compozite) complexe nanostructurate: Materiale (zwitter)ionice sub forma de (micro)particule sau filme; Materiale polimerice compozite "hard-soft" pe baza de compusi anorganici naturali/sintetici si polimeri ionici, cu selectivitate crescuta pentru anumite specii moleculare si/sau ionice; Compozite cu enzime imobilizate in partea "soft" a materialului compozit; Materiale functionale poroase, structurate criogenic, pe baza de polimeri naturali si/sau sintetici si molecule bioactive (enzime, proteine, agenti antioxidanti); Dezvoltarea de noi arhitecturi supramoleculare multifunctionale obtinute prin asocierea fizica sau chimica a unor sisteme auto-asamblate pe baza de bloc-copolimeri amfifili.

Utilizarea materialelor (compozite) complexe in medicina: Materiale cu activitate antimicrobiana intrinseca; Sisteme de dozare si eliberare controlata a medicamentelor.

Utilizarea materialelor (compozite) complexe in protectia mediului si (bio)cataliza: Sorbenti specializati/specifici pentru indepartarea unor poluanti prioritari, organici si anorganici, din ape simulate si din ape reale; Reutilizarea (bio)sorbentilor in noi aplicatii cu valoare adaugata ridicata si "minimizarea deseurilor".

Proiecte relevante realizate anterior

- 26 PCCDI/2018, Dr. M. Mihai, *Procese integrate si sustenabile de depoluare a mediului, reutilizare a apelor uzate si valorificare a deseurilor, PC2: Eficientizarea proceselor de tratare a apei si dezvoltarea de materiale inovative pentru eliminarea poluantilor prioritari*, 2018-2021
- 117 TE/2018, Dr. M. V. Dinu, *Proiectarea de biocompozite nepoluante cu proprietati chelatizante selective pentru indepartarea si recuperarea ionilor metalelor grele din apele contaminate*, 2018-2020
- 224 ERA.Net RUS/2018, Dr. M. Mihai, *Lego-style approach for problematic water streams treatment*, 2018-2021
- IB-RA-172, Dr. M. Mihai, *Intelligent Sorption Materials for Water Treatment*, 2018-2020
- 1 PD/2018, Dr. D.F. Loghin, *Proiectarea unor noi perle chitosan/amidon amidoximat pentru aplicatii in purificarea apelor*, 2018-2021
- 521 PED/2020, Dr. F. Bucatariu, *Microparticule compozite nisip/polielectrolit cu capacitate ridicata de incarcare/eliberare de compusi anorganici/organici din ape poluate*, 2020-2022
- 137 PD/2020, Dr. M. Zaharia, *Decontaminarea apelor de ionii metalelor grele prin intermediul schimbatorilor de ioni: cazul poluarii de la mina inchisa de la Tanita*, 2020-2022
- 5948/20.08.2018, Dr. M. V. Dinu, Dr. M. Cazacu, Contract prestari servicii *Materiale polimerice hidrofobe, poroase adecvate utilizarii ca suport pentru catalizatori de platina*, Beneficiar: INCD pentru Tehnologii Criogenice si Izotopice ICSI Rimnicu Valcea

Expertiza resursei umane implicate

Echipele Subprogramului 4 au experienta in domeniul tematicii propuse. Activitatea de cercetare se desfasoara in cadrul Laboratorului de Polimeri Functionali, Laborator recunoscut la nivel intern dar si national si international pentru contributiile aduse la sinteza, caracterizarea si aplicatiile polielectrolitilor liniari, grefati si reticulati, ale complexilor inter-polielectrolitici, precum si la modificarea suprafetelor, in retele interpenetrate, hidrogeluri/criogeluri compozite, compozite organice-anorganice, sisteme auto-asamblate pe baza de bloc-copolimeri amfifili.

Eficienta confirmata in aplicarea rezultatelor obtinute in domeniul specific proiectului

Indicatori scientometrici acumulati de echipa Subprogramului in perioada 2015-2020: 107 lucrari publicate in reviste cotate ISI (FIC = 271), 4 volume editate, 19 capitole de carte, 138 participari la manifestari stiintifice.

Tinand cont de media de 7,8 norme a Subprogramului, in perioada 2015-2020, s-a obtinut o medie de 12 lucrari ISI/norma de cercetare, FIC ~ 35/norma de cercetare.

Infrastructura necesara pentru realizarea Subprogramului

In dotarea Laboratorului de Polimeri Functionali se afla urmatoarele echipamente, care vor fi utilizate in rezolvarea obiectivelor subprogramului:

- *Morphologi G3*: forma, dimensiunea, transparenta si concentratia particulelor in diferite medii (suspensii, emulsii, pulberi uscate), preluare imagini in timp real si procesare date

- *Shimadzu Testing Machine EZTest*: teste de intindere si compresie pentru materiale moi (capacitate maxima de incarcare 500 N).
- *Particle charge detector Mutek PCD-03*: determinare concentratie solutii polimeri ionici solubili in apa si a punctului de sarcina zero
- *Spectrofotometre UV-Vis (SPECORD 200 Plus si SPEKOL 1300)*: determinarea concentratiei compusilor bioactivi (medicamente, ioni metalici, proteine, coloranti etc)
- *Rotary coater Nadetech tip NDR*: depunere filmele multistrat pe suprafete plane
- *CC1-K6 Huber Cryostat, -25 °C ÷ +200 °C*: sinteza hidrogelurilor sub temperatura de inghet a apei (criogeluri)
- Etuve de vid, rotaevaporatoare, centrifugi, pH-metre, si alte echipamente mici necesare pentru sinteza, purificarea si uscarea polimerilor/materialelor polimerice

Pentru rezolvarea cu succes a obiectivelor Subprogramului *ar mai fi necesara achizitionarea urmatoarelor echipamente*:

- *Statie de reactie multi-pozitii*, care poate functiona simultan cu pana la sase baloane de reactie (50 - 250 ml), complet echipata. Pret estimat: 25000 €
- *Sistem bazat pe goniometru* care permite determinari de difuzia luminii in dispersie la diferite unghiuri (DLS/SLS). Pret estimat: 60000 €
- *Nanoparticle Tracking Analysis (NTA)*, pentru caracterizare nanoparticule in solutie in domeniul 10 nm – 1000 nm. Pret estimat: 20000 €
- *Sistem Bio-SEC* de purificare si analiza nanocompartimente incarcate cu compusi bioactivi (enzime, proteine, polifenoli), complet echipat. 30000 €

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Subprogramului

Resursa umana: *Cresterea numarului de doctoranzi in cadrul Subprogramului, prin: angajarea studentilor masteranzi sau a tinerilor absolventi, pe perioada limitata de timp, pe proiecte de cercetare, si stagii de practica a unor studenti masteranzi din Universitatile din Iasi, care sa contribuie la pregatirea practica a tezei de masterat.*

Atragerea de surse de finantare extrabugetare: *Stimularea si motivarea colectivului pentru participarea la proiecte stiintifice nationale si international. Directorii de Proiecte din cadrul Subprogramului se vor ocupa de informarea colectivului cu privire la oportunitatile de finantare nationale si internationale, de consiliere in initierea, pregatirea si derularea unor proiecte/granturi de cercetare finantate prin programe de cercetare nationale si internationale*

Infrastructura de cercetare

Intrucat institutul dispune de *aparatura noua, in unele cazuri unicat la nivel regional/ national*, se vor depune eforturi pentru *specializarea colectivului de cercetare* in scopul utilizarii eficiente a infrastructurii Subprogramului/Institutului.

Se va dezvolta un sistem de tip "intranet" in cadrul Subprogramului, care sa faciliteze programarea eficienta a experimentelor/analizelor la echipamentele din Laborator, si schimbul de informatii la nivel intern.

Va fi realizat un plan financiar anual intern (pe baza finantarilor din proiectele in derulare) prin care sa se asigure resursele necesare pentru functionarea si intretinerea echipamentelor, precum si pentru achizitia de echipamente necesare intregului Subprogram, evitand dublarea inutila a unora sau sustinand din mai multe proiecte achizitia celor de interes major pentru Subprogram.

Colaborarea cu alte Subprograme

Colaborarea cu alte Subprograme din institut se va realiza in ambele sensuri:

De la colectivul nostru catre alte Subprograme/Proiecte: prin utilizarea echipamentelor aflate in gestiunea Laboratorului, a expertizei echipei Subprogramului

De la alte Subprograme/Proiecte catre colectivul nostru: in special pentru caracterizarea avansata a materialelor obtinute prin (1) continuarea colaborarilor existente – de ex. RMN, SEM, AAS, TG, XPS, AFM-Raman, si altele; (2) demararea unor noi colaborari, de exemplu pentru teste de activitate antimicrobiana, simulare moleculara.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Directorii celor doua Proiecte componente ale Subprogramului si membrii echipei vor actiona constant pentru a initia si dezvolta noi colaborari si pentru a consolida colaborarile existente, precum cele *din tara:* Prof. C. Teodosiu, Prof. I. Volf (UTI), Prof. F. Manea (UP Timisoara), A. Popa (IC Timisoara), Prof. D. Humelnicu, Prof. G. Drochioiu si Prof. R. Gradinaru (UAIC), C. Aprotosoiaie (UMF) sau *internationale:* Dr. F. Simon (IPF Dresda), Prof. S. Pispas (HNRF, Atena), O. Soilova si N. Manolova (IP-ASB, Sofia), Prof. A. Rodriguez (UCM, Madrid), Prof. W. Meier (UniBas, Basel), Dr. J. Sirc (ICM, Praga), Prof. A. Trochimczuk (UTW, Wroclaw), Prof. N. Bruns (U. Strathclyde, UK).

Ideile, conceptiile exprimate mai sus sunt perfectibile, deschise la tot ceea ce este nou, la eventualele sugestii ale colegilor din Subprogram si vor putea fi realizate doar impreuna cu acestia intr-un climat de incredere, relaxat, colegial.

Proiecte componente

Denumire proiect	Descriere succinta
Proiect 4.1 Polimeri (zwitter)ionici liniari si reticulati: sinteza, materiale, aplicatii <i>Dr. M. Mihai, CS II</i>	Obtinere de <i>noi structuri macromoleculare (zwitter)ionice</i> , si crearea de <i>materiale (compozite) complexe</i> care au in vedere <i>aplicatii in protectia mediului</i> (sorbenti cu activitate specifica si/sau selectivitate, reutilizabili) <i>si medicina</i> (dispozitive biomedicale, care pot actiona ca sisteme specializate antimicrobiene si/sau purtatoare de medicamente).
Proiect 4.2 Sisteme polimerice multifunctionale cu arhitectura 3D controlata: sinteza, si potentiale aplicatii <i>Dr. M. V. Dinu, CS II</i>	Obtinerea de <i>noi sisteme polimerice multifunctionale cu arhitecturi tridimensionale controlate</i> utilizand polimeri sintetici, naturali, sau amestecuri ale acestora cu particule anorganice, stabilizate prin reticulari fizice sau chimice (<i>hidrogeluri/criogeluri</i>), sau prin auto-asamblarea bloc-copolimerilor amfifili (<i>micele, polimerozomi</i>).

PROIECT 4.1. Polimeri (zwitter)ionici liniari si reticulati: sinteza, materiale, aplicatii

Director proiect, dr. Marcela MIHAI, CS II

Nr. crt.	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1	Dr. Marcela MIHAI	Director proiect 4.1	CS II	1
2	Dr. Florin BUCATARIU	Membru proiect 4.1	CS III	1
3	Dr. Silvia VASILIU	Membru proiect 4.1	CS III	1
4	Dr. Stefania RACOVITA	Membru proiect 4.1	CS	1
5	Dr. Diana Felicia LOGHIN	Membru proiect 4.1	AC	1
6	Dr. Marius Mihai ZAHARIA	Membru proiect 4.1	AC	1
7	Ana-Lavinia VASILIU	Membru proiect 4.1	AC	1
8	Melinda Maria BAZARGHIDEANU	Membru proiect 4.1	AC	1
9	Larisa Maria PETRILA	Membru proiect 4.1	AC	1
10	Marin Aurel TROFIN	Membru proiect 4.1	DRD	1
11	Angela PELIN	Membru proiect 4.1	M2	1
12	Ioan TESCU	Membru proiect 4.1	A1	1

Total norme AC-CSI: CS II: 1; CSIII: 2; CS: 1; AC: 5 = 9

Alte categorii: DRD: 1; A1: 1, M2: 1= 3

Scopul proiectului

Proiectul isi propune abordarea unei solutii integrate de cercetare – **sinteza** polimeri functionali, obtinere de **materiale** polimerice (multi)functionale complexe si testarea lor in **aplicatii** specifice domeniilor mediu si medicina – atat prin valorificarea cunostintelor acumulate si a competentelor membrilor echipei in **sinteza de polimeri ionici si functionalizarea** unor polimeri sintetici/naturali, obtinerea de **sisteme complexe multicomponente** cu aplicatii in diferite domenii cat si prin abordarea unui domeniu nou pentru grupul de cercetare, cel al **zwitterionilor**.

Necesitatea dezvoltarii de noi **materiale cu proprietati antimicrobiene**, care sa limiteze sau sa elimine dezvoltarea microbiana, prezinta un interes major in ultima perioada. Polimerii zwitterionici au in structura lor atat sarcini pozitive cat si negative, ceea ce le face extrem de hidrofile, cu proprietati intrinseci de protejare a suprafetelor impotriva depunerilor (*antifouling*). Astfel, aceste materiale au potential aplicativ in domeniile biologic si medical, cum ar fi in acoperiri ale implanturilor biomedicale sau a senzorilor care intra in contact cu sangele si in transportul de medicamente in organism. Datorita capacitatii excelente de *antifouling*, polimerii zwitterionici pot evita recunoasterea rapida de catre sistemul imunitar si pot creste timpul de utilizare a materialelor respective. In plus, este de asteptat ca prezenta grupurilor cuaternare de amoniu in structura materialelor polimerice zwitterionice sa confere acestora proprietati antimicrobiene. Astfel, **materialele zwitterionice liniare, reticulate sau grefate**, proiectate in asa maniera incat sa posede proprietati antimicrobiene adecvate, pot reprezenta o solutie pentru rezolvarea unor probleme de actualitate, de interes major pentru comunitatea stiintifica si cu potential aplicativ ridicat.

Materiale pentru decontaminarea mediului inconjurator de diversi poluanti este a doua directie importanta de aplicatie a tipurilor de materiale sintetizate in proiect. Gasirea unor metode eficiente si economice pentru indepartarea ionilor metalici si a unor poluanti organici din ape de suprafata sau ape

uzate reprezinta o directie prioritara la nivel mondial. Schimbatorii de ioni cu structura (zwitter)ionica si materialele compozite cu functionalitate multipla reprezinta materiale adecvate pentru indepartarea diferitilor contaminanti, eficiente atat la pH alcalin cat si acid, cu selectivitate pentru anumiti poluanti prioritari. Prin urmare, materialele obtinute in cadrul proiectului, care combina sorbtia rapida cu posibilitatea de imobilizare a unor cantitati mari de poluanti, prezinta un interes practic extraordinar, in special in tratarea apelor. Controlul compozitiei chimice a suprafetelor la scara nanometrica si crearea de grupari functionale specifice pe suprafete solide pentru interactiuni moleculare ulterioare este esentiala nu numai in purificarea apei, dar si in proiectarea senzorilor, eliberarea controlata a medicamentelor, fotocataliza, cromatografie etc. – aplicatii, de asemenea, de interes pentru proiect.

Obiectivul general

Obtinerea de **noi structuri macromoleculare (zwitter)ionice**, folosind proceduri de preparare eficiente, ieftine, si astfel crearea de **materiale (compozite) complexe** care au in vedere **aplicatii in protectia mediului** (sorbenti cu activitate specifica si/sau selectivitate, reutilizabili) **si medicina** (dispozitive biomedicale, care pot actiona ca sisteme specializate antimicrobiene si/sau purtatoare de medicamente). In consecinta, proiectul isi propune elucidarea rolului componentelor initiale (monomeri, reticulanti, etc.) si a influentei diferitilor parametri de sinteza asupra structurii si morfologiei noilor materiale, conducand la dezvoltarea de noi materiale/sisteme specializate cu structuri (zwitter)ionice.

Obiective specifice

Dezvoltarea unor materiale (zwitter)ionice cu aplicatii in medicina si protectia mediului

Grup de lucru: **S. Vasiliu (co)**, S. Racovita, D. Loghin, M. Zaharia, M. Trofin, L. Petrila, M. Mihai

- **Sinteza si caracterizarea unor polimeri (zwitter)ionici liniari** prin reactii de transformare polimer-analoage
- **Sinteza si caracterizarea unor polimeri grefati** prin (a) grefarea de monomeri pe polizaharide (chitosan, gelan, xantan, hialuronan de sodiu, amidon) sau (b) grefarea de macromolecule (de ex. zeina, amidon) pe microparticulele (zwitter)ionice reticulate, direct in sinteza sau ulterior
- **Sinteza si caracterizarea unor polimeri (zwitter)ionici reticulati**, sub forma de microparticule, prin tehnica polimerizarii in suspensie apoasa, noi tipuri de schimbatori de ioni
- **Obtinerea de materiale (compozite) complexe** sub forma de (micro)particule sau filme
- **Testari in vederea aplicatiilor in medicina**: (a) retinerea unor principii biologice active, (b) studii cinetice de eliberare *in vitro* a acestora, (c) determinarea activitatii antimicrobiene
- **Utilizarea materialelor (zwitter)ionice** in studii de sorbtie/desorbtie, in regim static si dinamic, a unor poluanti prioritari, organici si anorganici, din ape simulate si din ape reale

Dezvoltarea unor materiale polimerice compozite "hard-soft" pentru protectia mediului si (bio)cataliza

Grup de lucru: **F. Bucatariu (co)**, M. Zaharia, D. Loghin, M. Bazarghideanu, L. Vasiliu si M. Mihai

- **Obtinerea de microparticule multifunctionale compozite "hard-soft"** pe baza de oxizi anorganici naturali/sintetici (de ex. silice, CaCO₃) si polimeri ionici, **prin depunere directa** (sorbtiie in monostrat, depunere strat-cu-strat, depunere precipitativa, etc.) avand in vedere: (a) **diversificarea performantelor functionale** prin modificare multiparametru (conditii de depunere, natura polielectrolitilor si suportului, sinteza compozite CaCO₃/polimeri, metoda de stabilizare, etc.) in diverse faze de constructie; (b) **introducerea de grupe reactive pe suprafate solide** prin diferite tehnici de depunere de policationi si/sau polianioni si/sau modificarea ulterioara a acestor functionalitati;

(c) *imobilizarea de liganzi specifici* (coloranti, proteine, enzime) in partea "soft" a compozitelor, pentru interactiuni specifice cu specii tinta dizolvate in medii apoase

- **Testarea compozitelor "hard-soft" in retinerea de poluanti organici/anorganici din ape simulate, uzate sau de suprafata:** (a) testarea in experimente statice si dinamice de sorbtie/desorbtie singulara/multicomponent de ioni ai metalelor tranzitionale; (b) testarea in experimente de incarcare/descarcare de poluanti organici (coloranti, medicamente, pesticide, acizi humici, etc.); (c) testarea in experimente de sorbtie/desorbtie a amestecurilor de poluanti organici/anorganici dizolvati in ape simulate si ape reale; (d) testarea in experimente de cromatografie pe coloana prin schimb ionic sau de afinitate.

- **Obtinerea de compozite "hard-soft" cu enzima** (lizozima, pepsina, catalaza, tripsina, etc.) imobilizata in partea "soft" a materialului compozit, **pentru cataliza in regim dinamic.**

Indeplinirea obiectivelor acestui proiect va genera mai multe **rezultate specifice:** (1) metode noi/imbunatatite de sinteza polimeri (zwitter)ionici, cu arhitecturi complexe; (2) dezvoltarea de noi protocoale de sinteza cu contributii asupra materialelor (zwitter)ionice; (3) consolidarea echipei de cercetare si dezvoltarea cunostintelor lor prin dezvoltarea unei noi linii de cercetare; (4) promovarea cercetarii interdisciplinare si dezvoltarea unei noi generatii de cercetatori cu experienta in domeniul proiectului; (5) publicarea de lucrari stiintifice in reviste ISI, indeosebi in zonele Q1 si Q2; (6) produsele obtinute sunt brevetabile (vor rezulta minim doua brevete).

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Indeplinirea obiectivelor specifice se bazeaza pe expertiza echipei in sinteza si caracterizarea materialelor si rezultatele stiintifice anterioare ale membrilor echipei, astfel: *Marcela MIHAI* – sisteme complexe multicomponente bazate pe poliioni naturali si sintetici: sinteza, caracterizare, aplicatii; *Florin BUCATARIU* – compozite *hard-soft*, absorbtia/desorbtia compusilor bioactivi; *Silvia VASILIU* – microparticule reticulate cu grupe ionice: sinteza, caracterizare, aplicatii; *Stefania RACOVITA* – microparticule poroase pe baza de polimeri naturali/sintetici; *Diana LOGHIN* – copolimeri grefati ai amidonului, hidrogeluri si compozite ionice; *Marius ZAHARIA* – schimbatori de ioni reticulati pe baza de polimeri sintetici. Colectivul include doi doctoranzi (*Lavinia VASILIU* si *Marin TROFIN*) si doua tinere AC (*Melinda BAZARGHIDEANU* si *Larisa PETRILA*, angajate in institut la finalul anului 2020), care isi vor desfasura activitatea in cele doua subteme principale ale proiectului, sub indrumarea directorului de proiect, a coordonatorilor de teme si a celorlalti colegi din cadrul colectivului, vizandu-se integrarea acestora in colectiv si in tematica proiectului.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Proiectul demareaza prin sustinerea financiara extraplan a unor proiecte de cercetare castigate prin competitie (1 PCCE, 1 PED si 2 PD), ceea ce va facilita indeplinirea cu succes a obiectivelor specifice asumate in primii ani ai proiectului. Membrii echipei vor continua activitatea de depunere de cereri de finantare la competitii nationale/internationale, in colectiv si in colaborare cu grupuri cu expertiza complementara din tara si strainatate.

Colaborare cu colegi din alte Subprograme/Proiecte din institut

Colaborarea se va realiza in special pentru caracterizarea avansata a materialelor obtinute prin (1) continuarea colaborarilor existente – de ex. RMN (A. Nicolescu, A. Macsim), AAS (M. Ignat. E. Marlica), TG (D. Ionita), XPS (A. Coroaba), AFM-Raman (L. Ursu), si altele; (2) demararea unor noi colaborari, de exemplu pentru teste de activitate antimicrobiana sau simulare moleculara.

Colaborari deja stabilite cu alte centre academice

In tara: Prof. C. Teodosiu (TUIASI) – teste de sorbtie poluanti organici/anorganici, Prof. F. Manea (UP Timisoara) – solutii tehnologice pentru purificare ape, Prof. G. Drochioiu (UAIC) – sinteza zeina, Prof. R. Gradinaru (UAIC) – cromatografie pe coloana, cataliza in regim dinamic.

Internationale: Dr. F. Simon (IPF Dresda) – XPS si studii electrocinetice; Prof. S. Pispas (NHRF, Atena) – polimeri bloc si grefati, interactiuni in solutie, structuri supramoleculare; Prof. O. Soilova si Prof. N. Manolova (IP-BAS, Sofia) – materiale compozite pe baza de polimeri ionici sintetici si naturali.

Directorul de proiect si membrii echipei vor actiona constant pentru consolidarea colaborarilor existente si pentru a initia si dezvolta noi colaborari.

PROIECT 4.2. Sisteme polimerice multifunctionale cu arhitectura 3D controlata: sinteza si potentiale aplicatii**Director proiect, dr. Maria Valentina DINU, CSII**

Nr. crt.	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1	Maria Valentina DINU	Director proiect 4.2	CS II	1
2	Ecaterina Stela DRAGAN	Membru proiect 4.2	CS I	0.5
3	Claudiu Augustin GHIORGHITA	Membru proiect 4.2	CS	1
4	Ionel Adrian DINU	Membru proiect 4.2	CS	1
5	Irina Elena RASCHIP	Membru proiect 4.2	CS	1
6	Ana-Irina COCARTA	Membru proiect 4.2	AC	1
7	Maria Marinela LAZAR	Membru proiect 4.2	AC	1
8	Martha MARCU	Membru proiect 4.2	A1	1

Total norme AC-CSI: CS I: 0.5; CS II: 1; CS: 3; AC: 2 = **6.5**

Alte categorii: A1: 1 = **1**

Scopul proiectului

Scopul acestui proiect consta in **extinderea cunostintelor stiintifice din domeniul materialelor polimerice multifunctionale** cu aplicabilitate in protectia mediului, medicina, biotehnologie si industria ambalarii produselor alimentare.

Tinand cont de tendinta actuala de a obtine noi biomateriale pe baza de (co)polimeri functionalizati cu grupe ligand selective pentru anumite specii moleculare si/sau ionice (coloranti, enzime, proteine, medicamente, agenti antioxidanti, pesticide, ioni metalici), vor fi abordate **noi strategii de modificare a polimerilor naturali si/sau sintetici** sau de functionalizare a suporturilor macromoleculare prin reactii polimer analoage.

Procesul de "**minimizare a deseurilor**" va fi utilizat la obtinerea si dezvoltarea de materiale noi, precum **biosorbenti specifici, catalizatori, suporturi antimicrobiene sau senzori**, utilizand combinatia dintre versatilitatea fizica si chimica a biopolimerilor (chitosan, alginat, dextran, xantan) si afinitatea lor ridicata pentru ionii metalici. Astfel, biosorbentii incarcati cu ioni metalici vor fi reutilizati la retinerea sau identificarea altor contaminanti (anioni anorganici, coloranti, pesticide), la degradarea catalitica a acestora sau la obtinerea de materiale cu proprietati antimicrobiene.

Pentru a proteja moleculele bioactive impotriva degradarii, acestea vor fi immobilizate/incapsulate in **arhitecturi polimerice auto-asamblate de tip vezicule sau micle** cu rol de compartimente sau transportori polimerici - *domeniu nou pentru tematica grupului*. Structurile supramoleculare vor fi formate prin asocierea bloc-copolimerilor amfifili in medii apoase, functionalizate prin incapsularea de enzime, antioxidanti, coloranti, si utilizate drept nanoreactoare, sisteme de eliberare controlata sau sisteme de detectie.

Ca urmare, proiectul vizeaza cercetarea aprofundata a sintezei componentelor polimerice, prepararea arhitecturilor tridimensionale prin reticulare sau auto-asamblare si analiza proprietatilor acestora, precum si **identificarea factorilor care influenteaza functionalitatea si aplicatiile** lor in diferite domenii (mediu, medicina, biotehnologie si industria alimentara).

Obiectivul general

Obiectivul general al proiectului este de a proiecta si dezvolta **noi sisteme polimerice multifunctionale cu arhitecturi tridimensionale controlate** utilizand polimeri sintetici, naturali, sau amestecuri ale acestora cu particule anorganice, stabilizate prin reticulari fizice sau chimice (*hidrogeluri/criogeluri*), sau prin auto-asamblarea bloc-copolimerilor amfifili (*micle, polimerozomi*). **Proprietatile** acestor arhitecturi vor fi **controlate** fie prin modificarea conditiilor de sinteza in cazul sistemelor de tip gel, fie prin selectarea proprietatilor intrinseci ale bloc-copolimerilor amfifili folositi la prepararea in solutii apoase a veziculelor si micelilor.

Obiectivele specifice

Proiectarea de noi materiale functionale poroase, structurate criogenic, avand potentiale aplicatii in protectia mediului, biotehnologie si medicina

Grup de lucru: M.V. Dinu, E.S. Dragan, I.E. Raschip, C.A. Ghiorghita, I.A. Dinu, M.M. Lazar si I.A. Cocarta

- **Obtinerea si caracterizarea unor criogeluri compozite pentru protectia mediului:** (i) criogeluri bogate in azot si ioni metalici; (ii) testarea capacitatii de sorbtie selectiva a oxianionilor in functie de structura criogelurilor compozite.
- **Prepararea si caracterizarea unor criogeluri pe baza de polimeri naturali si/sau sintetici si molecule bioactive** (enzime, proteine, polifenoli, uleiuri esentiale), sub forma de filme, prin tehnica inghet-dezghet.
- **Obtinerea si caracterizarea unor hidrogeluri bioactive**, prin incorporarea de nanocompartimente (micle, polimerozomi) incarcate cu compusi bioactivi, si evaluarea potentialului aplicativ al acestora drept sisteme inovatoare de etichetare a securitatii si protejarii produselor impotriva falsificarii.
- **Studii de immobilizare/eliberare in vitro a speciilor bioactive din matricile poroase si evaluarea proprietatilor mecanice** ale biomaterialelor structurate criogenic in vederea identificarii potentialelor **aplicatii in medicina** (eliberarea controlata de medicamente, ingineria tesuturilor).

Dezvoltarea de noi materiale compozite organic-anorganice cu selectivitate crescuta pentru anumite specii moleculare si/sau ionice (coloranti, enzime, proteine, medicamente, agenti antioxidanti, pesticide, ioni metalici)

Grup de lucru: M.V. Dinu, C.A. Ghiorghita, I.A. Dinu, M.M. Lazar, I.A. Cocarta si I.E. Raschip

- **Modificarea polimerilor naturali si/sau sintetici prin reactii polimer-analoage pentru introducerea de noi grupari functionale de tip ligand** (tiouree, timina, acizi aminopolicarboxilici).
- **Obtinerea si caracterizarea unor noi compozite organic-anorganice** pe baza de polimeri functionalizati, incorporand diverse particule anorganice: (i) *Compozite ionice* pe baza de polimeri naturali si/sau sintetici si aluminosilicati *cu rezistenta superioara*, destinate studiilor de

sorptie/desorptie, in regim static si dinamic, a unor contaminanti din solutii apoase sintetice si/sau industriale; (ii) *Reutilizarea biosorbentilor incarcati cu ioni metalici in noi aplicatii cu valoare adaugata ridicata*. Astfel, combinatia dintre versatilitatea fizica si chimica a biopolimerilor (chitosan, alginat, dextran, xantan) si afinitatea lor ridicata pentru ionii metalici va fi utilizata in continuare in procesul de "minimizare a deseurilor" prin crearea si dezvoltarea de materiale noi, incluzand biosorbenti specifici, catalizatori, suporturi antimicrobiene sau senzori.

Dezvoltarea de noi arhitecturi supramoleculare multifunctionale cu potentiale aplicatii in biotehnologie si medicina

Grup de lucru: M.V. Dinu, I.A. Dinu, I.E. Raschip, C.A. Ghiorghita si M.M. Lazar

- ***Sinteza si caracterizarea unor bloc-copolimeri amfifili*** prin polimerizare ionica si radicalica controlata (ATRP, RAFT).
- ***Auto-asamblarea bloc-copolimerilor amfifili in solutii apoase*** si incorporarea de antioxidanti, coloranti si medicamente.
- ***Prepararea unor vezicule (polimerozomi) sau micle polimerice*** cu rol de compartimente protectoare a moleculelor bioactive, precum si evaluarea functionalitatii sistemelor auto-asamblate si a activitatii moleculelor incorporate/incapsulate.

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Realizarea **obiectivelor specifice** este garantata atat de activitatea sustinuta a tuturor membrilor echipei in domeniul sintezei si caracterizarii **materialelor polimerice multifunctionale**, cat si de rezultatele stiintifice anterioare ale acestora: *Maria Valentina DINU* – sisteme polimerice multicomponente macro- si nanostructurate bazate pe polimeri sintetici, naturali si compozite ale acestora cu particule anorganice sau compusi bioactivi: sinteza, caracterizare, aplicatii; *Ecaterina Stela DRAGAN* – polimeri ionici, hidrogeluri compozite sensibile la stimuli, schimbatori de ioni, arhitecturi ionice de tip multistrat; *Claudiu Augustin GHIORGHITA* – filme nanostructurate sensibile la stimuli, grefare/functionalizare polimeri, nanoparticule de Ag, interactiuni cu specii ionice; *Ionel Adrian DINU* – polielectroliti, floculanti, bloc-copolimeri amfifili, functionalizare polimeri, nanoparticule si arhitecturi polimerice sensibile la stimuli externi; *Irina Elena RASCHIP* – hidrogeluri biocompatibile si biodegradabile cu proprietati antioxidante si antimicrobiene, sisteme auto-asamblate de tip micle; *Maria Marinela LAZAR* – hidrogeluri/criogeluri compozite, aplicatii in protectia mediului (indepartare de ioni metalici, coloranti); *Ana-Irina COCARTA* – hidrogeluri/criogeluri, aplicatii in eliberarea controlata de medicamente. Colectivul include si un tehnician (*Martha MARCU*) cu expertiza in tehnici de purificare monomeri/polimeri si metode de analiza (viscozimetrie, titrimetrie, porozimetrie).

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Membrii echipei vor participa cu propuneri de proiecte in competitii nationale si internationale pentru obtinerea de resurse financiare necesare achizitionarii de echipamente, asigurarii mentenantei aparaturii existente, si desfasurarii in bune conditii a activitatii proiectului.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Nicusor FIFERE - analiza structurala utilizand absorbtia luminii UV-Vis si spectroscopia de fluorescenta pentru identificarea proprietatilor catalitice ale materialelor sintetizate in cadrul proiectului; Maria IGNAT – determinari AAS; Mirela DOROFTEI, Lavinia VASILIU – analiza SEM; Cristian VARGANICI – TG/DTG; Iuliana SPIRIDON – obtinere de compusi bioactivi (polifenoli) necesari pentru incorporarea in matricele de tip hidrogel/criogel; Raluca DARIE-NITA – studii de reologie; Luminita GHIMICI – indepartare de pesticide.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Centre academice din tara: UAIC, Iasi - Doina HUMELNICU – studii de sorbtie a unor contaminanti organici si/sau anorganici; UMF, Iasi – Clara APROTOSOAIE – extracte pe baza de uleuri esentiale si evaluarea proprietatilor antioxidante si antimicrobiene; UTI, Iasi – Irina VOLF – extracte din coaja de molid; CDIC, Timisoara - Adriana POPA – functionalizare copolimeri stiren-divinilbenzen; INCD pentru Tehnologii Criogenice si Izotopice ICSI Rimnicu Valcea – Gheorghe IONITA - suporturi catalitice hidrofoabe de tipul copolimerilor organici

Centre academice din strainatate: UCM, Madrid, Prof. Dr. Araceli Rodriguez – studii de sorbtie/cataliza pe zeoliti; UniBas, Basel, Prof. Dr. Wolfgang Meier - bloc-copolimeri amfifili; ICM, Praga, Dr. Jakub Sirc – hidrogeluri biocompatibile pentru ingineria tesuturilor; UTW, Wroclaw, Prof. Dr. Andrzej W. Trochimczuk – studii de rezonanta paramagnetica de electroni (EPR); University of Strathclyde, UK, Prof. Dr. Nico Bruns – nanoreactoare.

Parteneri industriali: SC Rombat SA, Bistrita, Ilioara BRESFELEAN – ape reziduale din industria bateriilor; Exella Europe SRL, Cluj Napoca, Dario ROSSINI – ape reziduale din fotogravura chimica.

LABORATOR POLIMERI NATURALI, MATERIALE BIOACTIVE SI BIOCOMPATIBILE**SUBPROGRAM 5. POLIMERI NATURALI/SINTETICI PENTRU MATERIALE BIOACTIVE, BIOCOMPATIBILE, BIOMIMETICE****Director Subprogram5, dr. Gheorghe FUNDUEANU-CONSTANTIN, CS I****ECHIPA SUBPROGRAMULUI**

Nr. crt	Nume si prenume	Funcția	Categorie profesionala	Norma
1	<i>Dr. Gheorghe FUNDUEANU-CONSTANTIN</i>	<i>Director subprogram 5 Director proiect 5.1</i>	<i>CS I</i>	<i>1</i>
2	Dr. Marieta FUNDUEANU-CONSTANTIN	Membru proiect 5.1	CS II	1
3	Dr. Dana Mihaela SUFLET	Membru proiect 5.1	CS III	1
4	Dr. Irina POPESCU	Membru proiect 5.1	CS III	1
5	Dr. Irina Mihaela PELIN	Membru proiect 5.1	CS	1
6	Dr. Sanda-Maria BUCATARIU	Membru proiect 5.1	AC	1
7	Drd. Bogdan Paul COSMAN	Membru proiect 5.1	DRD	1
8	Tinca BUNIA	Membru proiect 5.1	A	1
9	<i>Dr. Marieta NICHIFOR</i>	<i>Director proiect 5.2</i>	<i>CS I</i>	<i>1</i>
10	Dr. Maria BERCEA	Membru proiect 5.2	CS I	1
11	Dr. Simona MORARIU	Membru proiect 5.2	CS II	1
12	Dr. Luminita GHIMICI	Membru proiect 5.2	CS II	1
13	Dr. Magdalena-Cristina STANCIU	Membru proiect 5.2	CS	1
14	Dr. Cristina-Eliza BRUNCHI	Membru proiect 5.2	CS	1
15	Dr. Mirela TEODORESCU	Membru proiect 5.2	CS	1
16	Drd. Ioana-Alexandra PLUGARIU	Membru proiect 5.2	DRD	1
17	<i>Dr. Aurica CHIRIAC</i>	<i>Director proiect 5.3</i>	<i>CS I</i>	<i>1</i>
18	Dr. Loredana NITA	Membru proiect 5.3	CS I	1
19	Dr. Fonica MUSTATA	Membru proiect 5.3	CS I	0.6
20	Dr. Diana CIOLACU	Membru proiect 5.3	CS II	1
21	Dr. Alina RUSU	Membru proiect 5.3	CS	1
22	Dr. Alina GHILAN	Membru proiect 5.3	AC	1

23	Dr. Raluca NICU	Membru proiect 5.3	AC	1
24	Drd. Alexandra CROITORU	Membru proiect 5.3	DRD	1
25	Drd. Alina SANDU	Membru proiect 5.3	DRD	1
26	Constanta MUNTEANU	Membru proiect 5.3	A	1
27	Dr. Iuliana SPIRIDON	Director proiect 5.4	CSI	1
28	Dr. Niculae OLARU	Membru proiect 5.4	CS I	1
29	Dr. Catalin Narcis ANGHEL	Membru proiect 5.4	CS	1
30	Dr. Anca Giorgiana GRIGORAS	Membru proiect 5.4	CS	1
31	Dr. Anca Roxana PETROVICI	Membru proiect 5.4	CS	0.3
32	Drd. Irina APOSTOL	Membru proiect 5.4	DRD	1
33	Drd. Alexandra DIMOFTE	Membru proiect 5.4	DRD	1

Total norme AC-CSI: CS I: 7.6; CS II: 4; CSIII: 2; CS: 7.3; AC: 3 = **23.9**

Alte categorii: DRD: 6; A: 2 = **8**

Premizele propunerii

Una din nazuintele esentiale a societatii umane a fost si ramane imbunatatirea calitatii vietii care presupune in primul rand mentinerea sanatatii indivizilor si in al doilea rand aducerea tehnologiei in viata de zi cu zi. Dezvoltarea stiintei polimerilor si versatilitatea acestora a dus la o larga utilizare in domeniul biomedical si biotehologic atat al polimerilor naturali cat si a celor sintetici. Combinarea proprietatilor polimerilor naturali cu cele ale polimerilor sintetici a dus la obtinerea unor materiale cu caracteristici superioare. In acest context, in cadrul acestui subprogram se vor concepe si realiza matrici hibride multicomponente, retele semi- sau inter-penetrante, polimeri grefati, bloc copolimeri, polimeri sensibili la stimuli externi, polimeri cu amfilie variabila, polimeri cu amprenta moleculara, polimeri biomimetici ce vor cumula proprietatile celor doua tipuri de polimeri. Mai mult, compusii naturali, in special polizaharidele, vor fi modificati chimic prin strategii neconventionale in materiale polimerice multifunctionale, cu structuri si functiuni complexe.

O deosebita atentie se va acorda obtinerii de materiale polimerice avansate din resurse naturale regenerabile (celuloza regenerata). Materialele polimerice obtinute se vor utiliza sub forma de suporturi macromoleculare (micro- si nanoparticule/capsule) pentru retinerea si eliberarea controlata de medicamente, pentru trimiterea dirijata "la tinta" a medicamentelor, suporturi "inteligente" pentru eliberarea cu autoreglare a principiilor active, hidrogeluri biomimetice pentru ingineria (regenerarea) diferitelor tesuturi (osos, muscular, epitelial, etc), sau pentru alte aplicatii biomedicale si biotehnologice (floculari, purificari, imobilizari enzime, etc.). De asemenea, avand in vedere impactul nefavorabil al materialelor plastice asupra mediului se vor dezvolta noi materiale biodegradabile din compusi ai biomasei vegetale, prin modificarea chimica, in prezenta lichidelor ionice sau prin modificarea enzimatica a polimerilor.

Scopul Subprogramului

Scopul principal al proiectului este **continuarea cercetarilor in domeniul sintezei si caracterizarii de noi polimeri cu structuri controlate, modificarea chimica a polimerilor naturali si transformarea acestora in materiale cu arhitecturi complexe** sub forma de hidrogeluri biomimetice, matrici hibride cu interfete nanostructurate sau micro- si nano-particule. Aceste materiale vor contribui la imbunatatirea calitatii vietii atat in ceea ce priveste sanatatea (medicamente polimerice, eliberare controlata de principii active, ingineria diferitelor tesuturi), cat si mediul (purificari ape, floculari).

Obiective generale

Conceperea, realizarea si testarea de noi polimeri/matrici polimerice cu structuri complexe pentru aplicatii biomedicale si biotehnologice. Aplicarea inteligentei artificiale pentru predictia sistemelor cu capacitate de structurare supramoleculara, in directa corelare cu functionalitatea structurilor polimerice. Imbunatatirea recunoasterii nationale si internationale a grupului de cercetare prin publicarea rezultatelor cercetarii in reviste nationale si internationale de prestigiu cu factor de impact ridicat.

Obiective specifice

- Obtinere de polimeri sintetici si naturali modificati chimic, cu arhitecturi complexe, pentru eliberarea controlata a medicamentelor, pentru trimiterea dirijata "la tinta" a medicamentelor, ca suporturi biomimetice pentru ingineria (regenerarea) diferitelor tesuturi (osos, muscular, epitelial, etc.) sau pentru alte aplicatii biomedicale si biotehnologice (floculari, purificari, imobilizari enzime, etc.).
- Obtinerea si caracterizarea unor noi derivati ai polizaharidelor cu grupe ionice/hidrofobe/termosensibile.
- Studiul interactiei in solutie apoasa a unor polimeri sintetici/naturali, precum si a interactiei acestora cu obiecte de interes biomedical (suprafete/microparticule/nanoparticule).
- Studiul obtinerii de noi derivati polimerici ionici sau neionici, liniari sau reticulati, cu amfilie variabila si caracterizarea acestora prin metode specifice.
- Studii teoretice de corelare a structurii chimice a polimerilor cu proprietatile lor in solutie sau in stare solida, cu capacitatea lor de a se organiza in structuri supramoleculare, cu mecanismul de interactiune cu alti polimeri sau cu substante cu molecule mica, sau cu stabilitatea lor in timp.
- Dezvoltarea unor noi materiale biodegradabile din compusi ai biomasei vegetale prin modificarea chimica, in prezenta lichidelor ionice sau prin modificare enzimatica a polimerilor cu aplicatii in medicina, protectia mediului, industria alimentara, industria cosmetica.

Proiecte relevante realizate anterior

Directorii de proiecte si cercetatorii din cadrul subprogramului au realizat cercetari importante in domenii similare temei propuse si au o experienta indelungata in utilizarea polimerilor naturali si sintetici sub diferite forme pentru aplicatii biomedicale sau biotehnologice. Astfel, directorul de subprogram si proiect 5.1. (Gheorghe Fundueanu-Constantin) a dezvoltat mai multe proiecte de cercetare nationale si internationale in domeniul sistemelor inteligente de eliberare controlata a medicamentelor („Micro si nanoparticule inteligente pe baza de polimeri sensibili la stimuli externi si/sau polimeri cu amprenta moleculara ca sisteme cu eliberare cu autoreglare a medicamentelor” PCE-ID-989, (2009-2012); „Terapii inteligente pentru boli non-comunicabile, bazate pe eliberarea controlata de compusi farmacologici din celule incapsulate dupa manipulare genetica sau bionanoparticule vectorizate”, PN-III-P1-1.2-PCCDI-2017-0697(2018-2021)).

Directorul de proiect 5.2. (Marieta Nichifor) a condus numeroase proiecte de cercetare in domeniul sintezei de biomateriale. Astfel, s-au obtinut copolimeri bloc amfilii din dextran si poliesteri biodegradabili ai acidului deoxicolic, care se pot auto-asambla in mediu apos cu formare de micle sferice, cilindrice sau vezicule capabile sa incapsuleze medicamente cu hidrofobie variabila si sa le elibereze in mod controlat („Micle si vezicule nanostructurate din copolimeri bloc amfilii cu polizaharide drept blocuri hidrofile. O directie versatila pentru obtinerea de noi biomateriale”, PN-II-ID-PCE-2011-3-0622 (2011-2016)). Dr. Maria Bercea, membru in acest proiect, a condus un proiect in

domeniul materialelor inteligente („Materiale polimere inteligente”, PN-II-ID-PCE-2011-3-0199 (2011-2016)).

Directorul proiectului 5.3. (Aurica Chiriac) si membrii proiectului 5.3. (Loredana Nita) au condus o serie de proiecte de cercetare in domeniul hidrogelurilor polimere pentru aplicatii biomedicale („Sinteza de noi hidrogeluri cu caracteristici de biodegradabilitate si functionalitate 3D bine definite pentru bioaplicatii”, PNII-RU-TE-2014-4-029) sau matrici tridimensionale biomimetice pentru repararea diferitelor tesuturi („Suporturi magnetice biomimetice ca strategie alternativa pentru ingineria si repararea tesutului osos”, PN II – Parteneriate in Domeniile Prioritare – PCCA– Tip 2, Contract nr.132/2014).

Directorul proiectului 5.4 (Iuliana Spiridon) a condus diferite proiecte nationale si internationale in domeniul modificarii chimice a polimerilor naturali din biomasa sau in sinteza de formulari medicamentoase pe baza de principii active de natura vegetala („Biomasa vegetala utilizata pentru obtinerea unor substante chimice in vederea realizarii unui produs fitoterapeutic cu actiune asupra sistemului nervos central (SNC) si transferul tehnologic al bioprocesului”, CEEEX 3/6.10.2005 (2005-2008); „Forest biorefineries: Added-value from chemicals and polymers by new integrated separation, fractionation and upgrading technologies”, CP-IP 228589-2 AFORE (2009-2013); „Research Infrastructure for Circular Forest Bioeconomy ERIFORE”, Grant agreement No 654371 (2016-2017)).

Eficienta confirmata in aplicarea rezultatelor obtinute in domeniul specific proiectului

Rezultatele obtinute au fost publicate in reviste internationale de prestigiu cu factor de impact ridicat sau cu un numar mare de citari:

- M. Constantin, S. Bucatariu, F. Doroftei, G. Fundueanu; *Smart composite materials based on chitosan microspheres embedded in thermosensitive hydrogel for controlled delivery of drugs*; Carbohydr. Polym. 157, 493-502 (2017) (IF = 7.18).
- Popescu, I. Pelin, G. Ailiesei, D. Ichim, D. Suflet, *Amphiphilic polysaccharide based on curdlan: Synthesis and behaviour in aqueous solution*, Carbohydr. Polym. 224, Article Number: 115157 (2019) (IF=7.18).
- M. C. Stanciu, M. Nichifor, G. Mocanu, C. Tuchilus, G. L. Ailiesei. *Block copolymers containing dextran and deoxycholic acid polyesters. Synthesis, self-assembly and hydrophobic drug encapsulation*. Carbohydr. Polym. 223, Article number 115118 (2019) (IF = 7.18).
- S. Morariu, M. Bercea, L.M. Gradinaru, I. Rosca, M. Avadanei, *Versatile poly(vinyl alcohol)/clay physical hydrogels with tailorable structure as potential candidates for wound healing applications*, Mat. Sci. Eng. C 109, Article number 110395 (2020) (IF = 5.88).
- Neamtu, A.G. Rusu, A. Diaconu, L. Nita, A.P. Chiriac, *Basic concepts and recent advances in nanogels as carriers for medical applications*, Drug Delivery, 24(1), 539–557 (2017) (98 citari).
- L. Nita, A.P. Chiriac, M. Bercea, M. Asandulesa, B.A. Wolf, *Self-assembling of poly(aspartic acid) with bovine serum albumin in aqueous solutions*. Int. J. Biol. Macromol. 95, 412–420 (2017) (IF = 5.16).
- Spiridon, K. Leluk, A.M. Resmerita, R.N. Darie, *Evaluation of PLA-lignin bioplastics properties before and after accelerated weathering*, Composites Part B-Eng. 69, 342-349 (2015) (93 citari).

Expertiza resursei umane implicate

Directorii de proiecte si membrii acestora au o vasta experienta in conceperea, sinteza si caracterizarea polimerilor sau a suporturilor polimerice pentru aplicatii biomedicale si biotehnologice. **Proiect 5.1.** Sinteza polimerilor cu diferite grupe functionale (G. Fundueanu, M. Constantin, I. Popescu), modificarea polimerilor naturali (M. Constantin, D. Suflet), obtinerea matricilor polimere, hidrogeluri, micro- si nanoparticulelor (G. Fundueanu, S. Bucatariu, I. Pelin, D. Suflet), studiul polimerilor in solutie (I.

Popescu, I. Pelin), teste farmaceutice si farmacologice (G. Fundueanu, M. Constantin, S. Bucatariu, I. Pelin). **Proiect 5.2.** Sinteza si caracterizarea structurala si morfologica de polimeri prin polimerizare radicalica, policondensare, modificare chimica (M. Nichifor, S. Morariu, M.C. Stanciu); elaborare si caracterizare de hidrogeluri, retele polimere interpenetrare sau materiale care raspund la stimuli exteriori (M. Bercea, M. Nichifor, M. Teodorescu); studiul proceselor de autoasamblare in solutie (M. Nichifor, M. Bercea, M.C. Stanciu); Studii termodinamice si reologice ale polimerilor in solutie, suspensie, in stare de gel (M. Bercea, S. Morariu, C. E. Brunchi); proprietatile dinamice ale polimerilor ionici in solutie si aplicatiile acestora (L. Ghimici). **Proiect 5.3.** Prepararea de structuri hibride, incepand cu sinteza si modificarea compusilor macromoleculari naturali/ sintetici (A. Chiriac, L. Nita, A. Ghilan), prepararea structurilor polimerice hibride, (semi)-interpenetrare, a retelelor tri-dimensionale hidrofile, si respectiv caracterizarea acestora (Chiriac, L. Nita, A. Rusu, D. Ciolacu), sinteza reticulantilor (F. Mustata), incorporarea de componente (bio)active in matricele polimerice obtinute, inclusiv cu evaluarea eficientei structurilor hibride realizate in domenii variate inclusiv in domeniul biomedical (toti membrii). **Proiect 5.4.** Procesarea biomasei si valorificarea componentelor biomasei ca atare sau modificate chimic/enzimatic in diverse materiale cu aplicatii biomedicale (I. Spiridon, N. Anghel, A. Grigoras), compozite pe baza de polimeri naturali (celuloza, lignina) si oxizi metalici (I. Spiridon, N. Olaru).

Infrastructura necesara pentru realizarea Subprogramului

Laboratorul posedă infrastructura, echipamentele și facilitățile necesare pentru realizarea obiectivelor: reactoare de sticlă sau oțel pentru prepararea sau modificarea chimică a polimerilor, baine termostate, baine cu ultrasunete (Sonorex), sonde cu ultrasunete și agitatoare de mare viteză (Ultraturax), centrifuga universală, liofilizator, dispozitive pentru studiul eliberării controlate a medicamentelor, aparate pentru măsurarea concentrației medicamentelor în fluidele fiziologice simulate (HPLC, spectrofotometru UV-Vis), pH-metre, conductometre, turbidimetre, instalație de ultradiafiltrare, reometre, osmometre, Zetasizer Nano ZS, Mastersizer -Malvern, analizor electrocinetic SurPASS, microscop optic cu lumină polarizată LEICA DM2500, Texture Analyzer. Pentru celelalte analize (RMN, FT-IR, DSC, TEM, SEM, AFM), vom folosi infrastructura institutului. Pentru analize care depășesc competența institutului vom colabora cu institute, facultăți sau alte instituții complementare din țară și străinătate cu care avem deja colaborări.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Subprogramului

Reușita propunerii de proiect de cercetare este garantată de competența cercetătorilor din subprogram, de facilitățile tehnice prezente în laborator și în institut, cât și de colaborările naționale și internaționale deja existente. De asemenea, grupurile de cercetare au proiecte în derulare iar pentru suplimentarea necesarului de echipamente și chimicale vor fi depuse noi proiecte naționale sau internaționale organizate în intervalul 2021-2027. Se va încuraja întinerirea grupului de cercetare prin admiterea de noi doctoranzi care să rămână în continuare în cadrul laboratorului.

Colaborarea cu alte Subprograme din institut

Colectivul de la Centrul pentru cercetări avansate pentru bionanoconjugate și biopolimeri – Dr. Mariana Pinteala; Colectivul de la laboratorul de chimie – fizică a polimerilor – Dr. Raluca Nicoleta Darie-Nita; Subprogramele 8, 9, caracterizare prin FTIR, RMN, UV-vis, fluorescență, AFM, XRD; Subprogramul 2, Dr. Luiza Gradinaru, Poliuretani termosensibili; Subprogramul 3, Dr. Luminita Marin, Materiale ecologice pe baza de chitosan; Subprogramul 9, Dr. Magdalena Aflori, director proiect POINGBIO.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Colaborari cu centre academice din tara: UMF Iasi, Fac. Farm.; UAIC Iasi, Fac. Chim.; Univ. Polit. Bucuresti; Univ. Cluj-Napoca, Fac. Chim. Ing. Chim.; Institut. Biol. Patol. Cel. „N. Simionescu”, Bucuresti; Institut. Nat. C-D Fiz. Teh. Iasi, Univ. Teh. „G. Asachi” Iasi

Colaborari cu centre academice din strainatate: Univ. Porto, Portugalia; Henan Normal Univ., Xinxiang, Henan, China; Johannes Gutenberg-Univ. Mainz, Germany; Centre de Mise en Forme des Matériaux, Sophia Antipolis, France; Institut für Physikalische Chemie, Johannes Gutenberg-Universität, Mainz, Germania; Université catholique de Louvain, Belgia; Centre de Mise en Forme des Matériaux, Sophia Antipolis, Franta; Universitatea din Barcelona, Barcelona, Spania; NorBioLab Research Infrastructure, Norvegia, Universita Roma Tre, Italia.

Proiecte componente

Denumire/director proiect	Descriere succinta
Proiect 5.1 Suporturi macromoleculare adaptive pentru aplicatii biomedicale <i>Dr. G. Fundueanu, CS I</i>	Obtinere de polimeri cu sensibilitate la stimuli, modificare chimica a polizaharidelor si realizare de structuri tridimensionale adaptive (hidrogeluri inteligente) pentru aplicatii biomedicale (eliberare controlata de medicamente, regenerare de tesuturi, etc.)
Proiect 5.2 Polimeri amfifili si sisteme polimerice complexe pe baza de compusi naturali si sintetici <i>Dr. M. Nichifor, CS I</i>	Obtinerea de sisteme polimerice cu activitate biologica intrinseca (antimicrobieni, hipolipemianti cu autovindecare), si/ sau sensibile la stimuli exteriori: sinteza, caracterizare structurala, auto-asamblare, corelare structura-proprietati, evaluare aplicabilitate biologica si in purificarea apelor
Proiect 5.3 Sisteme polimerice hibride structurate de reticulanti functionali specifici <i>Dr. A. Chiriac, CS I</i>	Obtinerea de sisteme polimerice hibride pe baza de polimeri sintetici/naturali si noi reticulanti de masa moleculara mica. Realizarea de retele tridimensionale generate de prezenta reticulantilor, cu capacitate crescuta de legare de structuri (bio)active pentru transport si/sau eliberare controlata dar si interactiunea controlata si adaptativa cu mediul.
Proiect 5.4 Valorificare biomasa vegetala. Procedee neconventionale de separare si functionalizare <i>Dr. I. Spiridon, CS I</i>	Separarea componentelor din biomasa folosind procedee neconventionale; valorificarea acestor componente in materiale compozite "bioactive" si „inteligente" cu diverse aplicatii (mediu, biomedicina, bioambalaje); valorificarea biomasei vegetale/ deseuri biomasa pentru biosinteza unor principii active (polizaharide, etc).

PROIECT 5.1. Suporturi macromoleculare adaptive pentru aplicatii biomedicale

Director proiect, dr. Gheorghe FUNDUEANU-CONSTANTIN, CS I

Nr. crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	Gheorghe FUNDUEANU-CONSTANTIN	Director proiect 5.1	CSI	1
2.	Marieta FUNDUEANU-CONSTANTIN	Membru proiect 5.1	CS II	1
3.	Dana Mihaela SUFLET	Membru proiect 5.1	CS III	1
4.	Irina POPESCU	Membru proiect 5.1	CS III	1
5.	Irina Mihaela PELIN	Membru proiect 5.1	CS	1
6.	Sanda-Maria BUCATARIU	Membru proiect 5.1	AC	1
7.	Bogdan-Paul COSMAN	Membru proiect 5.1	DRD	1
8.	Tinca BUNIA	Membru proiect 5.1	A	1

Total norme AC-CSI: CS I: 1; CS II: 1; CSIII: 2; CS: 1; AC: 1 = 6

Alte categorii: DRD: 1; A: 1 = 2

Scopul proiectului

Imbunatatirea calitatii vietii a fost si ramane unul din dezideratele esentiale ale omului. Sanatatea umana joaca un rol primordial in evolutia societatii, iar mentinerea ei este un factor decisiv in calitatea vietii. Dezvoltarea spectaculoasa a stiintei polimerilor si a metodelor de caracterizare a acestora a dus la utilizarea pentru aplicatii biomedicale atat a polimerilor naturali, cat si a celor sintetici. Din punct de vedere biologic, polimerii naturali sunt mult mai avantajosi decat de cei sintetici. Astfel, polimerii naturali sunt degradati prin actiunea enzimelor specifice care se gasesc in organismele vii. Produsele de degradare ca aminoacizii, zaharurile, etc., sunt usor metabolizate in organism si sunt complet netoxice. Din punct de vedere al structurii chimice, polimerii sintetici par sa aiba un avantaj clar fata de cei naturali. Astfel, acestia sunt usor si ieftin de obtinut in cantitati mari, cu structuri complexe, multifunctionale. De asemenea, sunt mai robusti si au o mai mare stabilitate fizica si chimica. Combinarea polimerilor naturali cu cei sintetici sub forma de matrici hibride multicomponente, retele semi- sau inter-penetrante, polimeri grefati, bloc copolimeri, polimeri sensibili la stimuli externi, polimeri cu amprenta moleculara, polimeri biomimetici/adaptivi va cumula proprietatile celor doua tipuri de polimeri. Mai mult, polimerii naturali vor fi transformati prin reactii chimice in materiale polimerice multifunctionale cu structuri complexe. Materialele polimerice obtinute se vor utiliza sub forma de suporturi macromoleculare (micro-, nano-particule/capsule) pentru retinerea si eliberarea controlata de medicamente, pentru trimiterea dirijata "la tinta" a medicamentelor, suporturi "inteligente" pentru eliberarea cu autoreglare a principiilor active, pentru imobilizarea enzimelor, ca suporturi biomimetice pentru ingineria (regenerarea) diferitelor tesuturi (osos, muscular, epitelial, etc) sau pentru alte aplicatii biotehnologice.

Obiective generale

Conceperea, realizarea si testarea de noi polimeri/matrici polimerice (polimeri naturali/sintetici sau materiale hibride) cu structuri complexe folosite pentru aplicatii biomedicale; Imbunatatirea recunoasterii internationale a grupului de cercetare prin publicarea rezultatelor cercetarii in reviste nationale si internationale de prestigiu cu factor de impact ridicat; Consolidarea colaborarilor deja

existente si dezvoltarea de noi colaborari cu echipe de cercetare din alte domenii pentru a conferi cercetarii un caracter inter- si trans-disciplinar; Integrarea unor noi cercetatori pentru formarea unui colectiv tanar, specializat pe tematica proiectului; Valorificarea rezultatelor cercetarii sub forma de patente sau transferul rezultatelor cu potential aplicativ in industrie.

Obiective specifice

- Obtinerea de polimeri sintetici si naturali modificati chimic, cu arhitecturi complexe, pentru eliberarea controlata a medicamentelor sau ca suporturi biomimetice pentru ingineria (regenerarea) diferitelor tesuturi (osos, muscular, epitelial, etc) sau pentru alte aplicatii biotehnologice;
- Sisteme cu livrare controlata a medicamentelor cu autoreglare, pe baza de polimeri sensibili la stimuli exteriori, care sa elibereze medicamentul atunci cand conditiile fiziologice normale sunt perturbate;
- Micro- si nanoparticule pe baza de polimeri naturali si/sau sintetici pentru trimiterea la tinta a medicamentelor;
- Obtinerea si caracterizarea unor noi derivati ai polizaharidelor cu grupe ionice/hidrofobe/termosensibile;
- Studiul interactiei in solutie apoasa a unor polimeri sintetici/naturali, precum si a interactiei acestora cu obiecte de interes biomedical (suprafete/microparticule/nanoparticule);
- Obtinerea de materiale compozite pe baza de polizaharide/derivati ai acestora - ortofosfati de calciu cu aplicatii in inginerie tisulara.

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Echipa proiectului 5.1. este formata din 6 cercetatori cu experienta in domeniul sintezei de noi polimeri cu structuri complexe, multifunctionale, in modificarea chimica a polimerilor naturali si in sinteza de suporturi macromoleculare tridimensionale (hidrogeluri, micro/nano-particule, retele hibride) pentru aplicatii biomedicale. Sinteza polimerilor cu diferite grupe functionale (G. Fundueanu, M. Constantin, I. Popescu), modificarea polimerilor naturali (M. Constantin, D. Suflet), obtinerea matricilor polimere, hidrogelurilor, micro- si nanoparticulelor (G. Fundueanu, S. Bucatariu, I. Pelin, D. Suflet, M. Constantin), studiul polimerilor in solutie (I. Popescu, I. Pelin), teste farmaceutice si farmacologice (G. Fundueanu, M. Constantin, S. Bucatariu, I. Pelin). Doctorandul va fi implicat in toate activitatile grupului, inclusiv in redactarea proiectelor de cercetare.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Grupul de cercetare poseda infrastructura, echipamentele si facilitatile necesare pentru realizarea obiectivelor: reactoare de sticla sau otel pentru prepararea sau modificarea chimica a polimerilor, bai termostatate, bai cu ultrasunete (Sonorex), sonde cu ultrasunete si agitatoare de mare viteza (Ultraturax), centrifuga universala, liofilizator, dispozitive pentru studiul eliberarii controlate a medicamentelor, aparate pentru masurarea concentratiei medicamentelor in fluidele fiziologice simulate (HPLC, spectrofotometru UV-Vis), pH-metre, conductometre, turbidimetre, instalatie de ultradiafiltrare, Zetasizer Nano ZS, Texture Analyzer. Pentru celelalte analize (RMN, FT-IR, DSC, TEM, SEM, AFM), vom folosi infrastructura institutului. Pentru analize care depasesc competenta institutului vom colabora cu institute, facultati sau alte institutii complementare din tara si strainatate tinand cont de relatiile de colaborare pe care le-au stabilit deja cercetatorii din acest proiect

De asemenea, membrii proiectului 5.1. au 3 proiecte de cercetare in derulare iar pentru suplimentarea necesarului de echipamente si chimicale vor fi depuse noi proiecte nationale sau internationale

organizate in intervalul 2021-2027. Se va incuraja intinerirea grupului de cercetare prin admiterea de noi doctoranzi care sa ramana in continuare in cadrul laboratorului.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Colectivul de la Centrul pentru cercetari avansate pentru bionanoconjugate si biopolimeri – Dr. Mariana Pinteala; Subprogramele 8 (8.1, 8.2), 9 (9.2, 9.3), caracterizare prin FTIR, RMN, UV-Vis, fluorescenta, AFM, XRD; Subprogramul 9, Dr. Magdalena Aflori, director proiect POINGBIO; Subprogramele S1, S3 (3.3), S4 si S6 (6.2, 6.3).

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

UMF Iasi, Fac. Bioing. Med.; UAIC Iasi, Fac. Chim.; Univ. Polit. Bucuresti; Institut. Biol. Patol. Cel. „N. Simionescu”, Bucuresti; Universitatea Apollonia, Iasi; Universitatea tehnica „Gh. Asachi”, Iasi;

Universita Roma Tre, Italy; Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Structures, INSA de Lyon, France; Marta Socka, Centre of Molecular and Macromolecular Studies, Polish Academy of Sciences, Lodz, Polan

PROIECT 5.2. Polimeri amfili si sisteme polimere complexe pe baza de compusi naturali si sintetici

Director proiect, dr. Marieta NICHIFOR, CS I

Nr. crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	Marieta NICHIFOR	Director proiect 5.2	CS I	1
2.	Maria BERCEA	Membru proiect 5.2	CS I	1
3.	Simona MORARIU	Membru proiect 5.2	CS II	1
4.	Luminita GHIMICI	Membru proiect 5.2	CS II	1
5.	Magdalena-Cristina STANCIU	Membru proiect 5.2	CS	1
6.	Cristina-Elena BRUNCHI	Membru proiect 5.2	CS	1
7.	Mirela TEODORESCU	Membru proiect 5.2	CS	1
8.	Ioana-Alexandra PLUGARIU	Membru proiect 5.2	DRD	1

Total norme AC-CSI: CS I: 2; CS II: 2; CS: 3 = 7

Alte categorii: DRD: = 1

Scopul proiectului

Scopul principal al proiectului este extinderea cercetarilor in domeniul sintezei, caracterizarii si aplicabilitatii polimerilor naturali si sintetici, prin dezvoltarea de noi materiale multifunctionale cu structuri si proprietati prestabilite, utilizand metode traditionale si/sau ecologice. Materialele obtinute pot contribui la imbunatatirea calitatii vietii, cu impact asupra sanatatii ca medicamente, pansamente, sisteme de eliberare controlata a medicamentelor sau in regenerarea tisulara) si a mediului (reducerea poluarii). Se va pune accent pe utilizarea de materii prime naturale, de exemplu polizaharide (dextran, pullulan, celuloza, chitosan, amidon, pectine, xantan) ca atare sau modificate chimic, singure sau in amestec cu alti polimeri, dar si proteine, acizi biliari, agenti fitoterapeutici. Se va acorda o atentie deosebita studiilor teoretice de corelare a structurii chimice a polimerilor cu

proprietatile lor in solutie sau in stare solida, cu capacitatea lor de a se organiza in structuri supramoleculare, cu mecanismul de interactiune cu alti polimeri sau cu substante cu molecule mica, sau cu stabilitatea lor in timp.

Obiective generale/obiective specifice

Obtinerea de polimeri amfifili cu activitate biologica intrinseca; evaluarea activitatii biologice

- Polimeri cu activitate antimicrobiana, pe baza de polizaharide sau/si acizi biliari, cu grupe cuaternare de amoniu (biocizi externi) sau grupe pendante de amino acizi (inlocuitori de antibiotice). Sinteza de polimeri amfifili, evaluarea activitatii antimicrobiene pe celule de bacterii si fungi.
- Sechestranti selectivi pentru molecule implicate in anumite boli: acizi biliari (hiperlipidemie); ioni fosfat (hiperfosfatemie); lipide (obezitate). Sinteza de hidrogeluri amfifile, testarea *in vitro* a capacitatii de retinere a moleculelor tinta, studii *in vivo* pe animale model.

Sisteme polimere multicomponente pentru bio-aplicatii

- Conceperea, caracterizarea si testarea unor materiale hibride pe baza de polimer/ compus natural (argile, proteine, compusi cu molecula mica, agenti fitoterapeutici, etc.)
- Investigarea unor hidrogeluri si materiale polimere multifunctionale (materiale poroase, cu raspuns la stimuli externi, cu autovindecare, etc.)

Purificarea apelor reziduale sau de suprafata pentru reducerea continutului de contaminanti de natura anorganica si organica (pesticide, coloranti)

- Utilizarea polielectrolitilor cationici ca flocculanti ai contaminantilor din dispersii preparate artificial
- Utilizarea unor metode combinate (floculare/adsorptie) in prezenta de polimeri in forma solubila si/sau hidrogel

Corelatie structura-proprietati

- Autoasamblarea polimerilor amfifili in solutie (DLS, TEM, fluorescenta) si corelarea lor cu activitatea antimicrobiana
- Comportarea in solutie a polielectrolitilor sintetizati pe baza de polizaharide: corelatii intre structura chimica, proprietati dinamice si abilitatea de a interactiona cu diferite particule
- Studii termodinamice ale fenomenelor de autoasamblare, tranzitie de faza, micelizare pentru sisteme polimere multicomponente pe baza de compusi naturali si sintetici
- Corelarea caracteristicilor termodinamice si reologice cu performantele polimerilor in aplicatiile vizate
- Elaborarea raspunsului constitutiv al polimerilor si al materialelor polimere in diferite conditii de curgere

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Echipa proiectului este formata din 4 cercetatori (2 CS I, 2 CS II) cu experienta bogata in domeniile de studiu preconizate, precum si 3 CS, cu doctorate sustinute in domeniile respective. Competentele acopera toate cerintele de realizare a obiectivelor proiectului.

M. Nichifor si *M.C. Stanciu*: sinteza de polimeri prin polimerizare radicalica, policondensare, modificare chimica; caracterizare structurala a polimerilor prin RMN, FTIR, DSC, SEC, HPLC; obtinere de agregate prin auto-asamblare in mediu apos si caracterizarea acestora prin metode specifice (fluorescenta, DLS, TEM).

M. Bercea: caracteristici termodinamice si reologice ale polimerilor in solutie, suspensie, in stare de gel; studiul proceselor de autoasamblare in solutie; elaborare si caracterizare de hidrogeluri, retele polimere interpenetrante sau materiale care raspund la stimuli externi.

S. Morariu: sinteza de polimeri si copolimeri prin polimerizare radicalica, caracterizare structurala si morfologica a polimerilor si materialelor polimere prin RMN, FTIR, SEM, SEC, SAXS, TEM, RAZE X, termodinamica si reologie solutii, dispersii, geluri.

L. Ghimici: Proprietatile dinamice ale polimerilor ionici in solutie si aplicatiile acestora.

C. E. Brunchi: investigatii termodinamice si structurale ale polizaharidelor in solutie si sisteme polimere multicomponente.

M. Teodorescu: hidrogeluri si filme pe baza de sisteme polimere multicomponente, agenti fitoterapeutici: extractie, purificare si incorporare in materiale polimere.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Membrii echipei dispun de aparatura, chimicale si sticlaria utilizate la sinteza si prelucrarea polimerilor, precum si de cateva aparate esentiale pentru atingerea obiectivelor: kit pH metru-conductometru, instalatie de ultradiafiltrare, HPLC, turbidimetru, reometru, osmometru. Pentru suplimentarea necesarului de echipamente si materii prime, vor fi depuse proiecte la competitii nationale organizate in intervalul 2021-2027. Vor fi incurajati in special cercetatorii mai tineri sa redacteze astfel de proiecte (PED, PCE, TE). Se vor extinde colaborarile deja existente cu centre universitare si de cercetare din tara si din strainatate si se vor stabili noi colaboarari care vor permite crearea de consortii pentru participarea la competitii nationale/UE.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Subprogramele 8 si 9, caracterizare prin FTIR, RMN, UV-vis, fluorescenta, AFM, XRD. Subprogramul 2, Dr. Luiza Gradinaru, Poliuretani termosensibili. Subprogramul 3.2, Dr. Luminita Marin, Materiale ecologice pe baza de chitosan. Subprogramul 9, Dr. Magdalena Aflori, director proiect POINGBIO

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Colaborari cu centre academice din tara: UMF Iasi, Fac. Farm. (Teste microbiologice, Conf. C. G. Tuchilus); UAIC Iasi, Fac. Chim. (Materiale pe baza de proteine si polipeptide, Conf. R. Gradinaru); Univ. Polit. Bucuresti, Grupul REOROM (Reologia fluidelor complexe, Prof. C. Balan si Prof. D. Broboana); Univ. Cluj-Napoca, Fac. Chim. Ing. Chim. (Reologia materialelor polimere, Conf. A. L. Miclaus)

Colaborari cu centre academice din strainatate: Dep. Chem. Biochem., Fac. Sci., Univ. Porto, Portugalia, Prof. M. Bastos (titrari calorimetrice); Sch. Chem. Chem. Eng., Henan Normal Univ., Xinxiang, Henan, China, Prof. G. Bai (interactiuni polimer-agenti tensioactivi, lipozomi); Inst. Physik. Chem. Johannes Gutenberg-Univ. Mainz, Germany, Prof. B. A. Wolf, Studii teoretice si experimentale in domeniul termodinamicii; Mines Paristech, Centre de Mise en Forme des Matériaux, Sophia Antipolis, France, Prof. P. Navard, Studii teoretice si experimentale in domeniul reologiei.

PROIECT 5.3. Sisteme polimerice hibride structurate cu reticulanti functionali specifici

Director proiect, dr. Aurica CHIRIAC, CS I

Nr. crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	Aurica CHIRIAC	Director proiect 5.3	CS I	1
2.	Loredana NITA	Membru proiect 5.3	CS I	1
3.	Fanica MUSTATA	Membru proiect 5.3	CS I	0.6
4.	Diana CIOLACU	Membru proiect 5.3	CS II	1
5.	Alina RUSU	Membru proiect 5.3	CS	1
6.	Alina GHILAN	Membru proiect 5.3	AC	1
7.	Raluca NICU	Membru proiect 5.3	AC	1
8.	Alexandra CROITORU	Membru proiect 5.3	DRD	1
9.	Alina SANDU	Membru proiect 5.3	DRD	1
10.	Constanta MUNTEANU	Membru proiect 5.3	A	1

Total norme AC-CSI: CS I: 2.6; CS II: 1; CSIII:0; CS: 1; AC: 2 = **6.6**

Alte categorii: DRD: 2; A: 1 = **3**

Scopul proiectului

Progresele recente din domeniul chimiei polimerilor faciliteaza cuplarea precisa dintre compusii macromoleculari si componente biologice sau anorganice derivate in entitati supramoleculare pentru constructia de noi materiale functionale. Evolutia inregistrata in caracterizarea si intelegerea proceselor intervenite in structura si proprietatile materialelor au permis proiectarea materialelor multicomponente si organizarea in suprastructuri cu proprietati adaptate a constituentilor individuali. Valorificarea potentialului materialelor hibride polimerice impune un efort suplimentar pentru realizarea intelegerii detaliate a interactiunii dintre sinteza, prelucrarea, structura si performanta acestora. Structurile supramoleculare hibride, polimerii nanostructurati functionali, receptivi, reglabili si programabili ofera un potential mare de aplicabilitate inclusiv prin preluare de functii specifice. Ajustarea arhitecturii, functionalitatii, autoasamblarii si nano-structurarii polimerilor, prin strategii de sinteza noi, cu utilizarea de reticulanti cu masa moleculara mica (LMMGs), si controlul interactiunilor fizice sunt procese care asigura obtinerea de structuri supramoleculare cu functionalitati si destinatii specifice, dar si intelegerea corelarii dintre structura moleculara, functionalitatea interfetei si materialul macroscopic cu proprietatile care il recomanda. Utilizarea LMMGs, care se pot (auto)asambla/asocia, forma (hidro)geluri pentru diverse aplicatii, este un domeniu de mare actualitate. Combinarea compusilor macromoleculari cu LMMGs poate genera structuri supramoleculare cu topologie si proprietati cu potential de reticulare tranzitoriu sau dinamic, si respectiv dispersabilitate, conectivitate si stabilitate termodinamica in noul compus.

Una dintre cele 3 prioritati de consolidare ale Europei este crestere inteligenta prin economie bazata pe cunoastere si inovatie, iar propunerea de proiect are in vedere combinarea cercetarii fundamentale si aplicative care sa se concretizeze in obtinerea de structuri inovatoare bazate pe interactiuni multivalente si raspunsuri adaptative, cu schimbare de paradigma in chimia supramoleculara. Se propune studiul si realizarea de sisteme macromoleculare hibride cu interfete nanostructurate functionale. Aspectele inovative constau in (a) utilizarea copolimerizarii, autoasamblarii,

interpenetrării, și a rețelilor 3D cu compusi LMMGs, pentru obținerea de structuri supramoleculare multicomponente și multivalentă controlată pentru interacțiuni eficiente și aplicații ulterioare specifice, (b) reducerea deficitului în înțelegerea interacțiunii și dinamicii multivalente între compuşii macromoleculari și LMMGs în vederea (c) reglării fine a structurilor supramoleculare pentru interacțiuni și ținte specifice.

Obiective generale

Colectivul își propune **realizarea de sisteme polimerice hibride cu interfețe nanostructurate functionale**, care se înscrie în domeniul cercetărilor efectuate până în prezent inclusiv în cadrul a 6 proiecte castigate prin competiție. Desfășurarea cu succes a proiectului subsumează următoarele **obiective generale**:

(i) Dezvoltarea de concepte de sinteză inovatoare pentru realizarea de (a) structuri macromoleculare (natural & sintetic) tridimensionale functionale ((hidro)geluri) și (b) materiale (nano)hibride prin strategii complexe de proiectare moleculară, inclusiv prin proiectarea și prepararea de noi compusi reticulanti de masă moleculară mică, care să asigure obținerea de sisteme cu proprietăți sinergice prin multifunctionalizare, respectiv prin controlul punctelor de legătură (reglarea lungimii acestora inclusiv în cazul LMMGs) conceput de la nivel nano- la macroscopic în funcție de aplicațiile considerate.

(ii) Aprofundări în înțelegerea corelării dintre structura moleculară și supramoleculară, topologie și proprietăți în sisteme polimerice interpenetrante, respectiv reticulate, în special pe sisteme de polimeri – natural/sintetic – cu mai multe componente polimerizabile.

(iii) Realizarea de materiale polimerice care să interacționeze cu mediul într-o manieră controlată și adaptativă – sisteme senzitive – și care să asigure inclusiv cuplarea, transportul și/sau eliberarea controlată de substanțe active.

(iv) Dezvoltarea de strategii de încapsulare – sensibil la stimuli – și eliberare controlată de substanțe active, în directă corelare cu natura și funcționalitatea sistemelor/rețelilor de polimeri realizate, respectiv domeniul de aplicabilitate preconizat.

(v) Aplicarea inteligenței artificiale pentru predicția sistemelor cu capacitate de structurare supramoleculară, respectiv de gelificare crescută și timp de procesare scăzut în directă corelare cu funcționalitatea structurilor polimerice și natura LMMGs.

Obiective specifice

Obiectivele generale prezentate conduc nemijlocit la următoarele **obiective specifice** derivate:

(a) Obținerea de sisteme supramoleculare hibride organic – organic (compuşii macromoleculari naturali/sintetici), respectiv organic – anorganic (inclusiv prin strategii biomimetice de mineralizare).

(b) Obținerea de noi LMMGs pe baza de resurse naturale (uleiuri vegetale modificate prin epoxidare, esterificare sau eterificare, aducti cu anhidride ciclice, acizi grași, acizi dicarboxilici sau hidroxi acizi sau acizi rezinici modificați prin reacții Diels Alder).

(c) Obținerea de structuri tip gel pe baza de sisteme polimerice natural și/sau sintetic și reticulanti specifici, inclusiv mic moleculari (LMMGs).

(d) Utilizarea hidrogelurilor pe baza de polimeri naturali pentru obținere de plasturi resorbabili capabili de absorbție de limfă și de eliberare a unor principii terapeutice (antioxidanți, antimicrobieni, antifungici), respectiv în obținerea unor implanturi biocompatibile pentru sistemul osos și articular (în vederea osteointegrării).

(e) Obținerea de nanosisteme hibride pe baza de compuşii polimerici și biomacromolecule (structuri peptidice).

(f) Utilizarea inteligenței artificiale pentru modelarea

proprietatilor materialelor prin algoritmi generati de relatia structura calitativa / proprietate / activitate (QSPR / QSAR).

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Colectivul implicat in proiect detine o experienta recunoscuta atat in obtinerea de compusi macromoleculari si structuri inovative complexe, caracterizarea acestora, dar si directionarea spre aplicabilitate concreta, in principal in domeniul biomedical ceea ce confirma multidisciplinaritatea si complementaritatea propunerii. Din echipa fac parte cercetatori cu experienta care prin expertiza lor vor asigura coordonarea si monitorizarea stiintifica generala, si persoane aflate la inceputul carierei 3 post-doc si 2 drd care vor contribui prin entuziasm si munca dedicata la indeplinirea obiectivelor planului de cercetare propus. Colectivul detine infrastructura necesara pentru sinteza structurilor polimerice pe care se angajeaza sa le obtina, cat si pentru caracterizarea preliminara a acestora. Alte proiecte in care este implicata echipa vor contribui suplimentar la realizarea propunerii prin dezvoltarea infrastructurii sau cresterea vizibilitatii rezultatelor obtinute prin participarea la manifestari stiintifice. Colaborarile in care suntem implicati vor putea furniza de asemenea, informatiile suplimentare necesare in caracterizare si potentiala utilizare.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Realizarea propunerii este garantata de expertiza echipei atat in domeniul prepararii de structuri auto-asamblate hibride cat si in caracterizarea acestora, de echipamentele prezente in institut si in dotarea grupului de lucru respectiv (i) Zetasizer Nano ZS si Mastersizer, Malvern; (ii) Analizor electrocinetic SurPASS, Anton Paar; (iii) NIR-CI, SISUCHEMA; (iv) analiza termica/spectrofotometrica FT-IR si de masa (TG/DTG/DSC/MS/FTIR) simultana; (v) Congelator ARCTIKO ULUF 60, Centrifuga HETTICH, Microscop optic cu lumina polarizata, LEICA DM2500. prin colaborarile existente. Este important de precizat Proiectele nationale si internationale in derulare si precizate in Anexa 2 asigura cofinantarea, dar si colaborarea in caracterizarea si potentiala aplicabilitate a noilor compusi realizati.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

(i) Laborator polimeri electroactivi si plasmochimie–Dr. M. Bercea; (ii) Centrul pentru cercetari avansate pentru bionanoconjugate si biopolimeri – Dr. M. Pinteala, Dr. A.R. Petrovici, Dr. I. Rosca, Dr. N. Simionescu; (iii) Laboratorul de chimia–fizica a polimerilor – Dr. R. N. Darie-Nita; *Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate*

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

(i) Universitatea Gr. T. Popa Iasi: Prof. L. Verestiuc si Conf. L. Tartau; (ii) Universitatea Gh. Asachi Iasi,: Prof. V.I. Popa, Prof. M.I. Popa si Prof. M. Popa; (iii) INCDFI Iasi: Prof. H. Chiriac; (iv) Centrul de cercetari biologice, Piatra Neamt: Dr. E. Gille; (v) Institut für Physikalische Chemie, , Mainz, Germania: Prof. B.A. Wolf; (vi) Université catholique, Louvain-la-Neuve, Belgia: Prof. S. Melinte; (vii) Mines ParisTech, CEMEF, Sophia Antipolis, Franta: Dr. T. Budtova; (viii) Universitatea Maribor, Slovenia: Dr. S. Gorgieva; (ix) Universitatea Barcelona, Spania: Prof. J.F. Pastor; (x) NorBioLab Research Infrastructure, Norvegia: Dr. G. Chinga Carrasco.

PROIECT 5.4. Valorificare biomasa vegetala. Procedee neconventionale de separare si functionalizare

Director proiect, dr. Iuliana SPIRIDON, CS I

Nr. crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	<i>Iuliana SPIRIDON</i>	<i>Director proiect 5.4</i>	<i>CSI</i>	<i>1</i>
2.	Niculae OLARU	Membru proiect 5.4	CS I	1
3.	Catalin Narcis ANGHEL	Membru proiect 5.4	CS	1
4.	Anca Giorgiana GRIGORAS	Membru proiect 5.4	CS	1
5.	Anca Roxana PETROVICI	Membru proiect 5.4	CS	0,3
6.	Irina APOSTOL	Membru proiect 5.4	DRD	1
7.	Alexandra DIMOFTE	Membru proiect 5.4	DRD	1

Total norme AC-CSI: CS I: 2; CS: 2.3 = **4.3**

Alte categorii: DRD: 2

Scopul proiectului

In ultimii ani a crescut tot mai mult gradul de constientizare a publicului privind schimbarile climatice si necesitatea reducerii impactului activitatii umane asupra mediului inconjurator. In contextul bioeconomiei circulare, productia de biocombustibili, bioplastice si alte substante chimice reprezinta o alternativa pentru actuala criza de combustibili fosili. La nivel european, strategia in domeniul bioeconomiei si Planul de actiune aferent vizeaza o societate mai inovatoare, mai eficienta din punct de vedere al utilizarii resurselor si mai competitiva, care reconciliaza securitatea alimentara cu utilizarea sustenabila a resurselor regenerabile, luand in considerare si aspecte legate de protectia mediului. La nivel national, bioeconomia circulara nu este inclusa explicit in cadrul sub-domeniilor de specializare inteligenta dar, avand in vedere faptul ca cererea de biomasa va creste dramatic in deceniile urmatoare, exista un interes deosebit pentru abordarea integrata si interconectata a bioresurselor. Pe de alta parte, ponderea sectoarelor bioeconomice care produc plus-valoare semnificativa, cu impact major asupra calitatii vietii este redusa la nivelul Romaniei. Iata de ce, proiectul propus are ca scop cresterea calitatii si competitivitatii grupului prin abordarea de noi directii de cercetare a biomasei si formarea de tineri specialisti in acest domeniu.

Obiective generale

Cresterea performantelor cercetarii stiintifice prin dezvoltarea proiectelor de cercetare inter/trans-disciplinare, prin activitati de inovare si transfer al cunoasterii in domenii de interes pentru societate;

Orientarea rezultatelor obtinute in laborator catre implementarea de materiale noi cu impact crescut in viata economico-sociala (protectia mediului, ambalaje, cosmetica, medicina, etc) prin cresterea progresiva a nivelului de maturitate tehnologica

Obiective specifice

- Dezvoltarea resursei umane prin corelarea activitatilor de cercetare stiintifica si de inovare cu programele doctorale;
- Valorificarea biomasei vegetale/deseuri biomasa la biosinteza de compusi bioactivi;
- Separarea componentelor biomasei si functionalizarea acestora pentru compatibilizare cu diverse

- matrici polimere;
- Proiectarea de noi materiale functionale si durabile pe baza de polimeri naturali si sintetici pentru diverse aplicatii;
- Investigarea acestor materiale si identificarea perspectivelor de aplicare in domenii de varf.

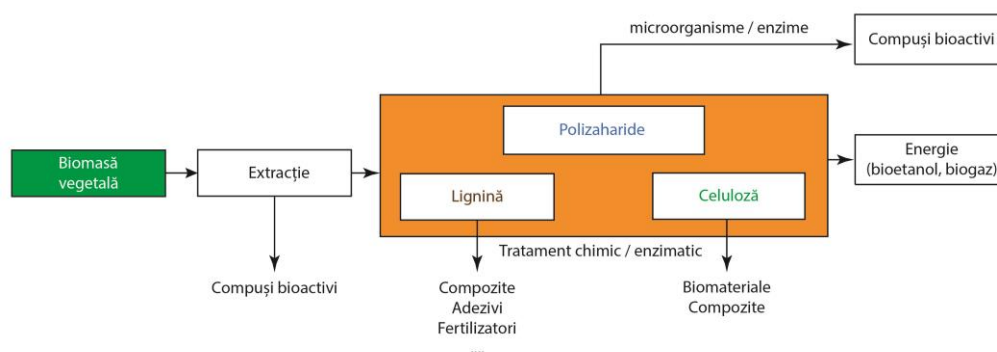
Modul de utilizare a resursei umane, competente

Grupul are competente in procesarea biomasei vegetale (I. Spiridon, N. Anghel), biosinteza de polizaharide (A. Petrovici), degradarea enzimatica a biomasei si a componentelor (I. Spiridon, N. Anghel, A. Petrovici), reactii de modificarea a componentelor biomasei (N. Anghel, N. Olaru), precum si in valorificarea componentelor biomasei ca atare sau modificate chimic/enzimatic in diverse materiale (I. Spiridon, N. Anghel, N. Olaru, A. Grigoras). Echipa a fost implicata in numeroase proiecte nationale care vizau valorificarea biomasei vegetale. Se mentioneaza si implicarea unor cercetatori in proiecte EU, dedicate aceluasi subiect. Cateva din proiectele echipei sunt prezentate mai jos.

Proiecte nationale: Modificarea chimica a polimerilor naturali din biomasa prin reactii enzimatic (B12), contract 5052/1999, perioada 1999-2000; Potentialul chimic al fitomasei in dezvoltarea durabila contract 5052/17.11.1999, perioada 1999-2001; Caracterizarea unor principii bioactive de origine vegetala si fungica, cu actiune citostatica, imunomodulatoare, metabolica si neurotrofa si valorificarea lor in alimentatia functionala, CEEEX 15/3.10.2005, perioada 2005-2007; Biomasa vegetala utilizata pentru obtinerea unor substante chimice in vederea realizarii unui produs fitoterapeutic cu actiune asupra sistemului nervos central (SNC) si transferul tehnologic al bioprocesului, CEEEX 3/6.10.2005, perioada 2005-2008; Conceperea, dezvoltarea si transferul tehnologiei de obtinere a unei formule medicamentoase originale, practic netoxica, cu eficienta deosebita in terapia antiinflamatoare, bazata pe principii active de natura vegetala, contract 17/2007, perioada 2007-2010.

Proiecte internationale: Forest biorefineries: Added-value from chemicals and polymers by new integrated separation, fractionation and upgrading technologies, CP-IP 228589-2 AFORE, perioada 2009-2013; Research Infrastructure for Circular Forest Bioeconomy ERIFORE, Grant agreement No 654371, perioada 2016-2017.

Pe baza experientei acumulate in ultimii ani, strategia de dezvoltare a proiectului se va orienta pe urmatoarele aspecte: (i) continuarea cercetarilor privind separarea componentelor din biomasa folosind procedee neconventionale; (ii) valorificarea acestor componente in materiale compozite "bioactive" si „inteligente” cu diverse aplicatii (mediu, bioambalaje); (iii) valorificarea biomasei vegetale/deseuri biomasa pentru biosinteza unor principii active (polizaharide, etc).



Modul de utilizare a resursei umane, competente

Competenta echipei este confirmata de indicele Hirsh si numarul de citari inregistrate in baza de date ISI. Grupul contribuie cu 2 unitati la indicele Hirsch al institutului, cu lucrari publicate pe tematica proiectului: Thermal degradation of various lignins by TG-MS/FTIR and Py-GC-MS, in *J. Anal. Appl. Pyrol.* 104, 531-539 (2013); Evaluation of PLA-lignin bioplastics properties before and after accelerated weathering, in *Compos. Part B - Eng.* 69, 342-349 (2015).

Nume si prenume	Indice Hirsh	Nr total de citari / fara autocitari
Iuliana Spiridon	22	1420/1310
Niculae Olaru	15	638/548
Narcis Catalin Anghel	6	220/216
Anca Giorgiana Grigoras	7	154/145

Infrastructura existenta

HPLC Shimadzu cu detector UV, RI (identificare polifenolii si flavonoide); acces la bioreactor din cadrul S1 (studii de valorificare a unor surse/deseuri de biomasa la biosinteza unor compusi bioactivi); statie Brabender (obtinere amestecuri polimer natural-polimer sintetic); aparat pentru determinarea rezistentei la tractiune; aparat pentru determinarea rezistentei la impact; aparat pentru determinarea rezistentei la abraziune; camera de clima (imbatranire accelerata in conditii controlate de umiditate si temperatura si UV).

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institute

Grupul colaboreaza cu colegi din alte subprograme in vederea caracterizarii biomasei si a componentelor sale, precum si a materialelor dezvoltate (S1, S4, S6, S9). De asemenea, exista colaborari cu Universitatea „Gh. Asachi” Iasi, Universitatea de Stiinte Agricole si Medicina Veterinara "Ion Ionescu de la Brad" si cu Facultatea de Bioinginerie Medicala din cadrul Universitatii de Medicina si Farmacie "Grigore T. Popa" Iasi.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Relatiile cu colegi din Universitatea din Wroclaw si din alte echipe de cercetare care activeaza in cadrul actiunilor COST 18224 si 19124 in care membrii grupului sunt implicati creeaza premiza dezvoltarii unor parteneriate de cercetare pe subiectul propus.

LABORATOR POLIMERI ANORGANICI**SUBPROGRAM 6. POLIMERI ELEMENT-ORGANICI, COMPLECSI METALICI SI MATERIALE ORGANIC/ANORGANICE****Director Subprogram6, dr. Maria CAZACU, CS I****ECHIPA SUBPROGRAMULUI**

Nr. crt	Nume si prenume	Funcția	Categorie profesionala	Norma
1	Dr. Maria Cazacu	Director subprogram 6 Director proiect 6.1	CS I	1
2	Dr. Carmen RACLES	Membru proiect 6.1	CS I	1
3	Dr. Sergiu SHOVA	Membru proiect 6.1	CS II	1
4	Dr. Mihaela DASCALU	Membru proiect 6.1	CS III	1
5	Dr. Mirela-Fernanda ZALTARIOV	Membru proiect 6.1	CS	1
6	Dr. Codrin TUGUI	Membru proiect 6.1	CS	1
7	Dr. Alexandra BARGAN	Membru proiect 6.1	AC	1
8	Dr. George STIUBIANU	Membru proiect 6.1	AC	1
9	Dr. Alina SOROCEANU	Membru proiect 6.1	AC	1
10	Dr. Adrian BELE	Membru proiect 6.1	AC	1
11	Dr. Mihai IACOB	Membru proiect 6.1	AC	1
12	Roxana SOLOMON	Membru proiect 6.1	A	1
13	Drd. Georgiana-Oana TURCAN-TROFIN	Membru proiect 6.1	DRD	1
14	Drd. Bianca-Iulia CIUBOTARU	Membru proiect 6.1	DRD	1
15	Drd. Madalin DAMOC	Membru proiect 6.1	DRD	0,5
16	Drd. Alexandru-Constantin STOICA	Membru proiect 6.1	DRD	1
17	Dr. Liviu SACARESCU	Director proiect 6.2	CSI	1
18	Dr. Valeria HARABAGIU	Membru proiect 6.2	CSI	0.15
19	Dr. Gheorghe ROMAN	Membru proiect 6.2	CS II	1
20	Dr. Rodinel ARDELEANU	Membru proiect 6.2	CS II	1
21	Dr. Corneliu COJOCARU	Membru proiect 6.2	CS II	1
22	Dr. Gabriela SACARESCU	Membru proiect 6.2	CS III	1
23	Dr. Mihaela SIMIONESCU	Membru proiect 6.2	CS III	1
24	Dr. Petrisor SAMOILA	Membru proiect 6.2	CS III	1

25	Dr. Maria IGNAT	Membru proiect 6.2	CS III	0,5
26	Dr. Cristian PEPTU	Membru proiect 6.2	CS	0,5
27	Dr. Maria Emiliană FORTUNA	Membru proiect 6.2	CS	1
28	Dr. Andra Cristina HUMELNICU	Membru proiect 6.2	AC	1
29	Dr. Razvan ROTARU	Membru proiect 6.2	AC	1
30	Dr. Marius SOROCEANU	Membru proiect 6.2	AC	0,6
31	Drd. Laurentiu BALTAG	Membru proiect 6.2	AC	0,5
32	Drd. Diana BLAJ	Membru proiect 6.2	AC	0,5
33	Drd. Elvira MAHU	Membru proiect 6.2	DRD	1
34	Drd. Ionela GRECU	Membru proiect 6.2	DRD	1
35	Drd. Diana DIACONU	Membru proiect 6.2	DRD	1
36	Drd. Bogdan Constantin CONDURACHE	Membru proiect 6.2	DRD	1
37	Elena MARLICA	Membru proiect 6.2	Ref. sp. IA	0,5
38	Andra Catalina BUTNARU	Membru proiect 6.2	A	1

Total norme AC-CSI: CS I: 3.15; CS II: 4; CSIII: 4.5; CS: 3.5; AC: 8.6 = **23.75**

Alte categorii: DRD: 8; Referent sp.: 0.5; A: 2 = **10.5**

Premizele propunerii

Polimerii anorganici având catena formată din alte elemente decât carbon au început să fie folosiți pe scară largă în anii 1950, când, în industria aeronautică și aerospațială, a apărut cererea de materiale noi care să reziste la condițiile extreme din spațiu. Aceasta, i-a determinat pe cercetători să exploreze posibilitatea de a prepara compusi/materiale anorganice pentru a înlocui polimerii organici cunoscuți. Cele mai cunoscute exemple de polimeri anorganici includ în principal polisiloxani, polisilani și polifosfazene.

Primele două categorii au constituit subiectul cercetărilor în cadrul Laboratorului de Polimeri Anorganici încă de la începutul anilor 1970. Echipa laboratorului, singură cu aceste preocupări din România, a dezvoltat metode și tehnologii de laborator și în unele cazuri la nivel pilot pentru sinteza de monomeri, polimeri, și produse siliconice, fiind implicată în multe programe naționale prioritare (electrotehnică, aeronautică, autoturisme, nucleară, etc.) unde performanța materialelor siliconice este de mare utilitate. Polidimetilsiloxanul stă la baza mării majorități a produselor siliconice care și-au găsit utilizare în aproape toate domeniile activității umane, de la cosmetice la industria nucleară sau aerospațială.

Deși anul acesta comunitatea științifică a marcat 80 de ani de la sinteza directă în siliconi, aceștia se bucură încă de un mare interes, atât din punct de vedere științific cât și aplicativ. Versatilitatea chimiei siliconilor permite modificarea chimică a acestora pentru a le conferi noi capacități menținând în același timp proprietățile lor unice, utile. Dar, așa cum se știe, polimerii siliconici sunt constituiți din catena anorganică formată din alternanță atomilor de siliciu și oxigen (polisiloxani) sau repetarea atomilor de siliciu (polisilani) având atasate la atomii de siliciu grupe organice (cel mai adesea metil) ceea ce le conferă acestor polimeri și materialelor pe baza lor un caracter hibrid organic-anorganic și proprietăți mult diferite de a celor organici, de mare interes științific și aplicativ.

Conceptul de materiale hibride organic-anorganice poate fi aplicat în prezent la o mare varietate de abordări, inclusiv celor constând în încapsularea funcționalităților organice în matricile anorganice și invers. Aceasta se poate face prin căile convenționale sol-gel, procesele hidro- și solvotermale, dispersia-asamblarea nanoblocurilor de construcție și intercalarea chimică, sau sinteze integrative combinând aceste cai cu diferite procese și agenți templat. În oricare dintre abordări, interfata dintre componente

devine aspectul critic de luat in considerare in activitatile de cercetare cu acest tip de materiale. Intelegerea si imbunatatirea acestor interactiuni este cheia pentru obtinerea de materiale „personalizate” cu structura organizata la scara nano, mezo, micro sau macro. Proprietatile de material ale hibridilor rezultati pot fi reglate prin modificarea compozitiei la scara moleculara pentru a produce materiale inteligente. Abordarile „cross-cutting” pentru a cupla sinergic ingineria si procesarea moleculara, permit adaptarea sistemelor hibride complexe de diferite forme, cu control perfect asupra dimensiunii, compozitiei, functionalitatii si morfologiei facilitand proiectarea tehnologiilor moderne specifice.

Materialele hibride functionale sunt considerate platforme potentiale pentru aplicatii in domenii extrem de diverse, cum ar fi optica, micro-electronica, transportul, sanatatea, diagnosticul, energia si stocarea de energie, acoperiri, mediu si domeniul extrem de relevant al „Internet of Things” (IoT). Comunitatea stiintifica implicata in chimia polimerilor anorganici (in principal siliconi), siliconilor este una relativ restransa astfel incat activitatea si rezultatele cercetarilor noastre pot avea ecou.

Scopul Subprogramului

Scopul subprogramului este acela de a exploata potentialul pe care il reprezinta compusii anorganici ca platforma de derivatizare pentru dezvoltarea de compusi, polimeri si materiale organic-anorganice functionale, cu impact in comunitatea stiintifica si potential aplicativ imediat ca senzori, actuatori electromecanici, magnetici sau optici si generatori de energie electrica (foto)catalizatori, sorbenti, materiale magneto/electro/opto-active, materiale pentru utilizari biomedicale. Pentru aceasta, s-a mobilizat o masa critica de personal de cercetare cu expertize de baza complementare, insotita de suportul logistic si de competente pe care le detine si ofera institutia gazda.

Obiective generale

Dezvoltarea de cercetari de frontiera care sa conduca la materiale inovative, avansate, materiale multifunctionale si materiale inteligente si sustenabile

Fundamentarea teoretica si practica a cercetarilor pentru obtinerea compusilor si materialelor propuse si cunoasterea aprofundata a parametrilor cheie care stau la baza obtinerii si comportarii lor

Valorizarea rezultatelor cercetarilor prin publicarea in reviste stiintifice de nivel ridicat, prezentarea la manifestari stiintifice, si, daca este aplicabil, brevetare si depasirea stadiului de material spre dispozitiv, cu demonstrarea functionalitatii

Consolidarea echipei de cercetare prin antrenarea personalului existent, cooptarea, cand bugetul permite, de personal cu competente crescute si atragerea de tineri in formare care sa se specializeze pe domeniu

Initierea in cadrul proiectelor de teme de succes care sa permita elaborarea de proiecte competitive la nivel national si international capabile sa atraga fonduri suplimentare pentru imbunatatirea bazei materiale a laboratorului si asigurarea de salarii motivante pentru membrii echipei.

Obiective specifice

- Elaborarea strategiei si programului experimental pentru fiecare tip de compus/polimer/material propus
- Crearea bibliotecilor de compusi anorganici (oxizi metalici), organici (cetone α,β -nesaturate, acizi carboxilici, compusi heterociclici, etc.) si organic-anorganici (polidiorganosiloxani si polidiorganosilani) necesari pentru dezvoltarea materialelor hibride

- Prepararea categoriilor de materiale hibride propuse: siliconi si compozite silicon-organice sau silicon-anorganice termoplastice si/sau sensibile la stimuli, compozite polimerice fotosensibile, compozite magnetice (spinelice), sorbenti hibridi
- Caracterizarea avansata a produsilor si evaluarea proprietatilor lor
- Evaluarea capabilitatilor si demonstrarea acestora
- Modelarea si simularea structurilor moleculare si a sistemelor/proceselor investigate
- Diseminarea rezultatelor prin publicare si prezentare in comunitatile stiintifica si de afaceri.

Proiecte relevante realizate anterior

Echipele subprogramului a implementat un numar mare de proiecte (peste 40), dintre care, in ultimii cinci ani 16 (de circa 8.000.000 lei si 400.000 EUR), fie europene, fie nationale, de diferite tipuri (proiecte din fonduri structurale, proiecte de cercetare exploratorie, proiecte complexe, experimental-demonstrative, parteneriate/consortii, postdoctorale, tinere echipe, de mobilitati). Majoritatea dintre acestea au fost pe tematici care au creat contextul propunerii de fata, in sensul dezvoltarii competentelor, nivelului de intelegere, coerenței echipei si infrastructurii adecvate. Reprezentative sunt: 1. Retele metal-organice cu hidrofobicitate fin controlata utilizand chimia siliconilor, SilMOFs, UEFISCDI PN-III-P4-ID-PCE-2016-0642, Contract 114/2017/M. Cazacu/2017-2019/1.125.000 lei/180.000 EUR; 2. New mechanisms and concepts for exploiting electroactive Polymers for Wave Energy Conversion, PolyWEC, FP7 Research and Innovation Framework Programme of European Commission, GA309139/Maria Cazacu/2012-2016/ 400.000 EUR; Proiecte implementate in cadrul acestei echipe cu mai bine de cinci ani in urma dar care au deschis calea catre proiectul de fata sunt: 3. Synthesis and study of the polymeric metallosiloxanes – new materials for catalysis and nanosciences, POLISILMET, POS CCI-A2-O2.1.2-2009-2, Contract ANCS, 129/2010, Fonduri Structurale/6.000.000 lei/1.500.000 EUR/2010-2013; 4. Strengthening the Romanian research capacity in Multifunctional Polymeric Materials (STREAM); FP 7 REGPOT no. 264115 (2011-2014)/dr. V. Harabagiu, dr.L. Sacarescu/ 2,800,000 EUR.

In ultimii cinci ani, membrii echipei sunt autori la 416 articole din care 180 in cadrul subprogramului, 116 in colaborare cu alte subprograme si 120 articole in colaborare cu alte centre de cercetare din tara si din strainatate. De asemenea, au mai fost publicate 12 capitole de carte si sase brevete.

Expertiza resursei umane implicate

Resursa umana angajata in implementarea proiectului propus, cu diferite grade de calificare, de la tehnicieni la asistenti de cercetare, CS, CSIII, CSII si CSI, posedă competentele necesare realizării acestor obiective, de la chimie organica, anorganica si coordinativa, chimia si ingineria siliconilor, la exploatarea echipamentelor necesare pentru caracterizarea si evaluarea compusilor si materialelor obtinute. Proiectarea moleculara va fi utilizata impreuna cu tehnici avansate de caracterizare (HPLC-MS, MALDI-TOF, AAS, TOC, UV-Vis, FTIR, TEM, DRX, SAXS) in scopul evidentierii particularitatilor structurale si a interactiunilor inter- si intra-moleculare. Din echipa proiectului fac parte, printre altii, un specialist CSII in cristalografie recunoscut la nivel international, un cercetator CSI cu expertiza bogata in sinteza si modificarea chimica a polisiloxanilor si auto-asamblarea lor ca si in sinteza de nanoparticule organic-anorganice, un CSI cu experienta bogata in polisilani, un cercetator CS cu expertiza in analiza spectrala (IR, UV-Vis, fluorescenta) doi cercetatori cu experienta in testari mecanice, electrice si electromecanice a elastomerilor, cercetatori cu experienta in obtinerea si valorizarea materialelor organic-anorganice nanostructurate si cataliza, etc. Doi dintre membrii echipei sunt conducatori de doctorat ceea ce face ca in echipa sa fie implicati si doctoranzi, in numar variabil, in functie de ritmul in care acestia se inscriu la doctorat si sustin teza. La acest moment, in

echipa sunt 10 doctoranzi. Temele pe care acestia le abordeaza, care se incadreaza in tematica subprogramului, si termenele stabilite in cadrul planului de doctorat confera un grad sporit de dinamism activitatii echipei.

Infrastructura necesara pentru realizarea Subprogramului

Institutul are o infrastructura de top (detalii disponibile la www.erris.gov.ro) care acopera mai multe directii de cercetare, cu acces liber pentru toti cercetatorii. Echipa are spatii de lucru (laboratoare cu nise si mese de lucru complet utilizate, birouri, camere echipamente) si instalatii de sinteza (sticlaria, echipamente de incalzire, racire, agitare, omogenizare, multireactor, reactor si baie cu ultrasunete, reactor cu microunde, fotoreactor, linie Schelnk, etuve, cuptoare, soba hidrotermala, digester) si analiza rapida (microscopie optice, punct de topire) si deserveste direct (spectrometre IR, UV-Vis, fluorescenta, DVS, tensiometru, difractometru de raze X pe monocristal, TEM, HPLC-MS, MALDI-TOF, *magnetometru*, analizor pentru determinarea Carbonului Organic Total si Azotului Total) sau are acces la echipamentele strict necesare pentru prezentul proiect (SEM, HR-SEM, AFM, RMN, DLS, analizor termogravimetric si DSC, DMA, spectrometru dielectric, echipamente laser, etc.)

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Subprogramului

Resursele necesare pentru desfasurarea proiectului constau in principal in asigurarea spatiului si conditiilor corespunzatoare de lucru dar si salarizarea resursei umane si asigurarea necesarului de reactivi, solventi, sticlaria, materiale, utilitati care ar urma sa fie asigurate din finantarea subprogramului. Suplimentarea fondurilor pentru toate capitolele se va face din surse extrabugetare, in special prin proiecte de cercetare finantate din surse nationale, internationale si prin prestarea de servicii catre terti. Asa cum au procedat si pana acum, membrii echipei subprogramului vor participa la competitii de proiecte nationale si internationale pentru atragerea de fonduri suplimentare care sa permita asigurarea necesarului de materiale si consumabile, intretinerea echipamentelor si achizitia unora noi conform cerintelor care vor aparea. De asemenea prin acestea s-ar putea facilita participarea membrilor echipei la manifestari stiintifice pentru prezentarea rezultatelor catre comunitatea stiintifica, si nu numai. De asemenea, s-ar asigura motivarea resursei umane, in special a celei tinere prin asigurarea de salarii decente care sa asigure confortul necesar canalizarii energiilor spre activitatea de cercetare. Tinand cont de faptul ca una din directiile abordate in acest proiect este cea a compusilor de coordonare s-ar impune achizitionarea unui echipament nou pentru analiza prin difractie de raze X pe monocristal cu performante superioare celui de care grupul dispune la momentul de fata. De asemenea, s-ar impune achizitia unui analizor de elemente, strict necesar pentru caracterizarea compusilor micromoleculari si complexilor metalici.

Colaborarea cu alte Subprograme din institut

Colaborari pentru efectuarea de analize de baza/rutina necesare pentru buna desfasurare a activitatilor de cercetare in virtutea principiului egalitatii in drepturi in ceea ce priveste accesul facil si nelimitat al tuturor cercetatorilor la infrastructura institutului.

Colaborare pe aspecte punctuale cu cercetatori cu pregatire/competente diferite pentru obtinerea de compusi si materiale noi, originale, caracterizarea complexa a acestora, si punerea in evidenta a performantelor acestora pentru aplicatii tinta. Astfel, se va colabora cu Laboratoarele Intelcentru, Fotochimie si poliaditie, Fizica si Chimia fizica a materialelor polimere, Polimeri electroactivi si plasmochimie, etc.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Se va continua politica de colaborare cu echipe de cercetare din tara (UAIC, UTI, UB, POLIB, ICECHIM, ICT-AR, ICSI) si strainatate (Institutul de Chimie Anorganica din Viena, Laboratorul de Campuri Magnetice inalte din Grenoble, Universitatea Taras Sevchenko din Kiev, Institutul de Chimie din Republica Moldova, CEMEF-Sofia Antipolis, Franta, Institute for Advanced Energy Technology "Nicola Jordani", Messina, Italia, Institutul de Chimie Anorganica de pe langa Academia R. Belarus, Minsk, Belarus, etc.) care posedea experienta complementara, in vederea dezvoltarii de tematici cu evident caracter interdisciplinar si mai ales aplicativ.

Activitati de formare a tinerilor cercetatori: doctoranzi, post-doctoranzi.

Directiile de cercetare care vor fi abordate vizeaza dezvoltari multiple spre domenii de granita astfel incat se impune ca, pentru implementarea proiectului, sa se intareasca echipa prin infuzie de personal in special tanar care sa preia din experienta grupului, sa se formeze si sa dezvolte. De aceea, se prevede:

- Selectarea de tineri absolventi valorosi, bine pregatiti si antrenarea prin motivarea lor, atat din punct de vedere al salarizarii cat si al dezvoltarii carierei, in proiecte de cercetare interesante cu finantare extrabugetara;
- Incurajarea membrilor echipelor subprogramului sa se mobilizeze prin activitatile desfasurate si rezultatele obtinute pentru a accede la nivele profesionale superioare atunci cand apar astfel de oportunitati; aceasta va ajuta la stabilizarea resursei umane valoroase;
- Incurajarea tinerilor, in special a doctoranzilor si postdoctoranzilor sa participe, in masura ofertelor si posibilitatilor, la scoli de pregatire sau stagii in strainatate pe durate determinate pentru a acumula cunostinte si capata expertize pe care, la intoarcere, sa le foloseasca si sa le dezvolte;
- Efectuarea de stagii in strainatate pe proiectele de mobilitati H2020 in curs de implementare de catre echipa subprogramului.

Proiecte componente

Denumire/director proiect	Descriere succinta
Proiect 6.1 Compusi, polimeri si materiale organic-anorganice cu proprietati adaptive <i>Dr. M. Cazacu, CS I</i>	Dezvoltarea de materiale organic-anorganice active, capabile sa raspunda la diferiti stimuli (mecanici, electrici, magnetici, optici si de mediu) utile pentru constructia de sisteme adaptive prin derivatizarea polimerilor siliconici, abordari clasice dar si neconventionale.
Proiect 6.2 Compozite polimer-anorganice si materiale nanostructurate cu aplicatii in fotodetectie, cataliza si protectia mediului <i>Dr. L. Sacarescu, CS I</i>	Dezvoltare interdisciplinara de teme de cercetare avansata: (i) structuri polimere silico-organice conjugate; (ii) particule oxidice nanostructurate si in special cele cu proprietati magnetice; (iii) materiale polimere cu proprietati adsorbante; (iv) materiale inovatoare pentru protectia mediului si metode avansate de purificare.

PROIECT 6.1. Compusi, polimeri si materiale organic-anorganice cu proprietati adaptive

Director proiect, dr. Maria Cazacu CSI

Nr. crt	Nume si prenume	Funcția	Categorie profesionala	Norma
1	<i>Dr. Maria Cazacu</i>	<i>Director subprogram 6 Director proiect 6.1</i>	<i>CSI</i>	<i>1</i>
2	Dr. Carmen RACLES	Membru proiect 6.1	CS I	1
3	Dr. Sergiu SHOVA	Membru proiect 6.1	CS II	1
4	Dr. Mihaela DASCALU	Membru proiect 6.1	CS III	1
5	Dr. Mirela-Fernanda ZALTARIOV	Membru proiect 6.1	CS	1
6	Dr. Codrin TUGUI	Membru proiect 6.1	CS	1
7	Dr. Alexandra BARGAN	Membru proiect 6.1	AC	1
8	Dr. George STIUBIANU	Membru proiect 6.1	AC	1
9	Dr. Alina SOROCEANU	Membru proiect 6.1	AC	1
10	Dr. Adrian BELE	Membru proiect 6.1	AC	1
11	Dr. Mihai IACOB	Membru proiect 6.1	AC	1
12	Roxana SOLOMON	Membru proiect 6.1	A	1
13	Drd. Georgiana-Oana TURCAN-TROFIN	Membru proiect 6.1	Drd	1
14	Drd. Bianca-Iulia CIUBOTARU	Membru proiect 6.1	Drd	1
15	Drd. Madalin DAMOC	Membru proiect 6.1	Drd	0,5
16	Drd. Alexandru-Constantin STOICA	Membru proiect 6.1	Drd	1

Total norme AC-CSI: 11; CS I: 2; CS II: 1; CSIII: 1; CS: 2; AC: 5,5 = **11,5**

Alte categorii: DRD: 4; A: 1 = 5

Scopul proiectului

Cercetarile propuse sunt axate in principal pe materiale siliconice si vizeaza trecerea de la siliconi pasivi la unii activi care sa poata fi reciclati, reparati si sa isi poata modifica reversibil si in mod repetat una sau mai multe caracteristici (forma, dimensiune, culoare) sub actiunea unui stimul extern, cum ar fi schimbarea temperaturii, presiunea, aplicarea un camp electric, magnetic, optic, schimbarea umiditatii sau a polaritatii mediului. Pe langa modificarea chimica a polimerului de baza prin atasarea de grupe functionale adecvate si adaugarea de filleri conventionali, se va aborda o strategie originala constand in folosirea ca adaosuri de structuri de coordonare cu auto-compatibilizare.

In functie de natura metalului, a ligandului si de modul de coordonare, compusii pot prezenta proprietati magnetice, electrice sau optice, proprietati pe care le pot transfera materialului compozit rezultat prin incorporarea lor intr-o matrice siliconica. Aceasta din urma fiind una inerta, moale si flexibila este o gazda perfecta pentru acomodarea filler-ului activ. Compozitele astfel obtinute vor fi utile pentru dezvoltarea de senzori, actuatori electromecanici, magnetici sau optici si generatori de energie electrica. De asemenea, astfel de materiale sunt de interes pentru constructia de sisteme adaptive pentru o gama larga de aplicatii in sectoarele auto, tehnologie medicala, bunuri albe, inginerie mecanica si sectoare de consum etc.

Obiective generale

Dezvoltarea prin abordari originale, eficiente, de materiale siliconice sau derivate (compusi mici moleculari, polimeri si materiale) cu raspuns la diferiti stimuli;

Fundamentarea teoretica si practica a cercetarilor propuse pentru obtinerea de noi materiale functionale si durabile si dezvoltarea unei cunoasteri aprofundate a parametrilor cheie care stau la baza acestor procese;

Orientarea spre aplicatii directe ale compusilor si materialelor obtinute pentru a valoriza mai bine rezultatele cercetarii;

Intarirea competentelor pe domeniul proiectului si consolidarea echipei prin infuzia de resursa umana tanara, bine pregatita si antrenarea acesteia pe domeniul proiectului dar cu deschidere spre abordare de teme noi, adaptate cerintelor actuale;

Valorificarea rezultatelor cercetarii prin elaborarea de lucrari stiintifice de nivel ridicat, care sa fie prezentate in comunitati stiintifice specializate si sa poata fi publicate in reviste de impact inalt contribuind la cresterea vizibilitatii echipei si institutului.

Patentarea rezultatelor de interes aplicativ imediat.

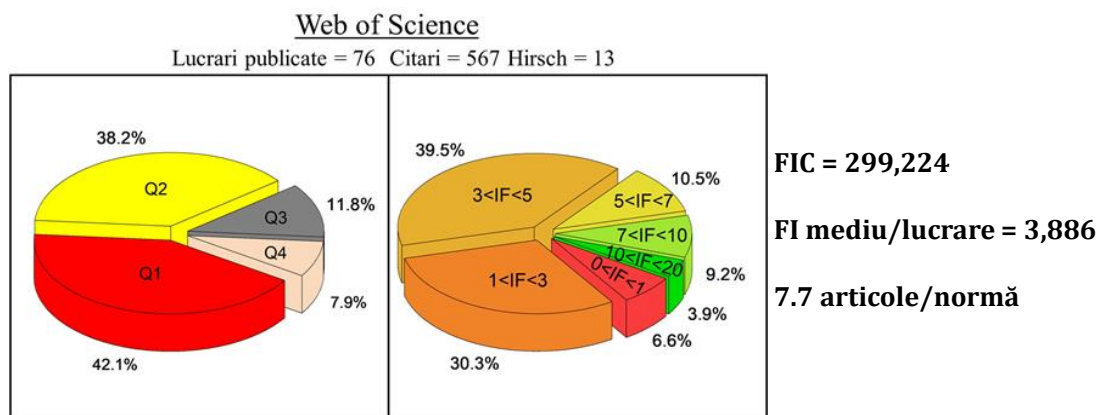
Obiective specifice

- Elaborarea strategiei si programului experimental pentru modificarea chimica a monomerilor, oligomerilor si polimerilor siloxanici pentru obtinerea de liganzi si polimeri functionalizati;
- Crearea bazei de substraturi siliconice care sa permita modificarile ulterioare;
- Modificarea chimica a substraturilor siliconice prin atasarea de grupe capabile sa induca functionalitati specifice si crearea de biblioteci de astfel de compusi;
- Caracterizarea avansata a produsilor si evaluarea proprietatilor lor;
- Evaluarea capabilitatilor lor in ceea ce priveste raspunsul la diferiti stimuli;
- Fabricarea de dispozitive la nivel de laborator pentru demonstrarea, acolo unde este cazul, a functionalitatii (senzori, actuatori, generatori, etc.).

Modul de utilizare a resursei umane

Echipei proiectului poseda competentele necesare realizarii acestor obiective, de la chimie organica, anorganica si coordinativa, chimia si ingineria siliconilor, la exploatarea echipamentelor necesare pentru caracterizarea si evaluarea compusilor si materialelor obtinute. Din echipa proiectului fac parte, printre altii, un specialist CSII in cristalografie recunoscut la nivel international, un cercetator CSI cu expertiza bogata in sinteza si modificarea chimica a polisiloxanilor ca si in sinteza de nanoparticule organic-anorganice, un cercetator CS cu expertiza in analiza spectrala (IR, UV-Vis, fluorescenta), doi cercetatori cu experienta in testari mecanice, electrice si electromecanice a elastomerilor, etc.

Rezultatele echipei din ultimii cinci ani se regasesc in 239 articole publicate din care: in colectiv: 85 (76 pe web of science, in reviste de nivelul prezentat in figura de mai jos), cu alte colective - 46; interinstitutional - 108; participari conferinte - 148; Proceedings - 3; Brevete acordate - 5; Trei imagini pe copertele revistelor; teze sustinute - 5.



Tot personalul de cercetare, de la postdoctoranzi/AC pana la CSI va fi mobiliza permanent pentru initierea de proiecte noi si aplicarea pentru gasirea de surse de finantare din fonduri nationale, internationale sau cu mediul privat.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Resursele necesare pentru desfasurarea proiectului constau in principal in asigurarea spatiului si conditiilor corespunzatoare de lucru. Salarizarea resursei umane, si asigurarea necesarului de reactivi, solventi, sticlurie, materiale, utilitati care ar urma sa fie asigurate din finantarea proiectului. Suplimentarea fondurilor pentru toate capitolele se va face din surse extrabugetare, in special proiecte de cercetare finantate din surse nationale, internationale si prin prestarea de servicii catre terti. Echipa proiectului deserveste sau are acces la echipamentele strict necesare pentru prezentul proiect: spectrometre IR, RMN, UV-Vis, de fluorescenta, ESI-MS, difractometre cu raze X monocristal si pulbere, magnetometru, TEM, SEM, AFM, DLS, DVS, spectrometru dielectric, tensiometru, echipamente de testare mecanica, instalatii laser, etc.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Activitatile proiectului impun colaborari cu mai multe grupe de cercetare din institut in vederea aprofundarii unor analize si caracterizari sau tratamente specifice ale materialelor:

- Laboratorul de chimie fizica a polimerilor
- Laboratorul de fizica polimerilor si materiale polimere
- Centrul de cercetari avansate pentru bionanoconjugate si biopolimeri, Intelcentru

Deoarece structura si organigrama institutului sunt bine intocmite, echipa proiectului va colabora cu toate structurile administrative.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Se va continua politica de colaborare cu echipe de cercetare din tara (UAIC, UTI, UB, POLIB, ICT-AR) si strainatate (Institutul de Chimie Anorganica din Viena, Laboratorul de Campuri Magnetice inalte din Grenoble, Universitatea Taras Sevchenko din Kiev, Institutul de Chimie din Republica Moldova, etc.) care poseda experienta complementara, in vederea dezvoltarii de tematici cu evident caracter interdisciplinar si mai ales aplicativ.

PROIECT 6.2. Compozite polimer-anorganice si materiale nanostructurate cu aplicatii in fotodectie, cataliza si protectia mediului

Director proiect, dr. Liviu SACARESCU, CS I

Nr. crt	Nume si prenume	Funcția	Categorie profesionala	Norma
1	Dr. Liviu SACARESCU	Director proiect 6.2	CSI	1
2	Dr. Valeria HARABAGIU	Membru proiect 6.2	CSI	0.15
3	Dr. Gheorghe ROMAN	Membru proiect 6.2	CS II	1
4	Dr. Rodinel ARDELEANU	Membru proiect 6.2	CS II	1
5	Dr. Corneliu COJOCARU	Membru proiect 6.2	CS II	1
6	Dr. Gabriela SACARESCU	Membru proiect 6.2	CS III	1
7	Dr. Mihaela SIMIONESCU	Membru proiect 6.2	CS III	1
8	Dr. Petrisor SAMOILA	Membru proiect 6.2	CS III	1
9	Dr. Maria IGNAT	Membru proiect 6.2	CS III	0,5
10	Dr. Cristian PEPTU	Membru proiect 6.2	CS	0,5
11	Dr. Maria Emiliană FORTUNA	Membru proiect 6.2	CS	1
12	Dr. Andra Cristina HUMELNICU	Membru proiect 6.2	AC	1
13	Dr. Razvan ROTARU	Membru proiect 6.2	AC	1
14	Dr. Marius SOROCEANU	Membru proiect 6.2	AC	0,6
15	Drd. Laurentiu BALTAG	Membru proiect 6.2	AC	0,5
16	Drd. Diana BLAJ	Membru proiect 6.2	AC	0,5
17	Drd. Elvira MAHU	Membru proiect 6.2	Drd	1
18	Drd. Ionela GRECU	Membru proiect 6.2	Drd	1
19	Drd. Diana DIACONU	Membru proiect 6.2	Drd	1
20	Drd. Bogdan Constantin CONDURACHE	Membru proiect 6.2	Drd	1
21	Elena MARLICA	Membru proiect 6.2	Ref. sp. IA	0,5
22	Andra Catalina BUTNARU	Membru proiect 6.2	tehnician	1

Total norme AC-CSI: CS I: 1.125; CS II: 3; CSIII: 3.5; CS: 1.5; AC: 3.6 = **12.75**

Alte categorii: DRD: 6; Referent: 0.5 = **6.5**

Scopul proiectului

Investigarea materialelor compozite care includ polimeri anorganici si componente organice pentru obtinere de materiale cu valoare daugata mare si utilizari multiple (senzori cu detectie prin fluorescenta, (foto)catalizatori, sorbenti, materiale magneto/electro/opto-active, materiale pentru utilizari biomedicale).

Obiectivele proiectului

Compozite polimerice fotosensibile pentru senzori si biosenzori

- *Sisteme fluorescente pe baza de structuri silico-organice conjugate:* studiul comportarii optice (absorbție, emisie) a acestor sisteme in absenta si in prezenta de cationi metalici, anioni, compusi organici si/sau anorganici, compusi biologici.
- *Compusi organici/anorganici:* Sinteza de compusi organici (intermediari si compusi tinta de tipul derivatilor aminometilati, cetonelelor α,β -nesaturate, acizilor carboxilici, compusilor heterociclici),

anorganici si hibridi organici-anorganici cu proprietati optice specifice si studiul interactiunilor intra- si intermoleculare in relatie cu alte sisteme electrono-actieve (electrono-donoare sau electrono-acceptoare).

Compozite magnetice (spinelice) pentru aplicatii in (foto)cataliza si/sau imagistica RMN.

- *Ferite nanodimensionate pentru oxidarea catalitica a poluantilor organici:* proiectarea si dezvoltarea de materiale oxidice cu eficienta superioara in procese de tip CWPO (catalytic wet hydrogen peroxide oxidation);
- *Materiale compozite continand particule magnetice cu aplicatii in fotocataliza:* Sinteza si caracterizarea de materiale compozite anorganice/hibride pentru decontaminarea eficienta a apelor uzate prin procese de fotodegradare a contaminantilor organici.

Materiale polimere si hibride pentru depoluarea apelor contaminate

- *Materiale polimere si hibride cu proprietati adsorbante:* prepararea si caracterizarea materialelor adsorbante; studiul performantelor in aplicatii de adsorbție (retentie coloranti, specii ionice si hidrocarburi); studii de adsorbție pentru stabilirea parametrilor cinetici, de echilibru (izoterme) si termodinamici.
- *Membrane polimere si hibride pentru ultrafiltrare:* prepararea si caracterizarea membranelor polimere/hibride cu morfologie poroasa; studii de evaluare a permeabilitatii si selectivitatii; studiul performantelor membranelor in aplicatii de ultrafiltrare (eliminarea coloranti si specii ionice din ape contaminate).

Modelarea si simularea structurilor moleculare si a sistemelor/proceselor investigate

- Simularea structurilor moleculare si a interactiilor prin tehnici de chimie computationally (mecanica si andocare moleculara, explorarea structurilor electronice prin tehnici semiempirice si/sau teoria densitatii de functional DFT);
- Modelarea si optimizarea sistemelor experimentale sau a proceselor investigate prin tehnici de regresie multipla.

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Colectivul proiectului are o experienta notabila in directiile de cercetare ce urmeaza sa fie abordate in cadrul proiectului. Astfel, se poate mentiona experienta acumulata in domeniul polimerilor silico-organici fotosensibili, in particular in domeniul polisilanilor. Studiile noastre recente in acest domeniu au scos in evidenta posibilitatea utilizarii polisilanilor in detectia prin fluorescanta. In acest fel, se pot realiza modificari structurale si studii ale interactiunilor polisilanilor cu diversi compusi micromoleculari in scopul amplificarii semnalului fluorescent si/sau a deplasarii acestuia in zona vizibila a spectrului. La acestea se adauga rezultatele anterioare ale grupului in domeniul materialelor oxidice nanostructurate, rezultate care vor fi exploatate in scopul obtinerii unor materiale polimere in care proprietatile magnetice ale feritelor spinelice sa se combine cu cele de fluorescanta.

Utilizarea unor astfel de compozite poate eficientiza procesele de diagnoza si tratament in domeniul medical. In acelasi sens se va exploata si experienta grupului in sinteza de siloxani (inclusiv functionali), obtinerea de materiale carbonice si poroase si folosirea lor in procesele de depoluare. Proiectarea moleculara va fi utilizata impreuna cu tehnici avansate de caracterizare (HPLC-MS, MALDI-TOF, AAS, TOC, UV-Vis, FTIR, TEM, DRX, SAXS) in scopul evidentierii particularitatilor structurale si interactiunilor inter- si intra-moleculare.

Un obiectiv particular al proiectului implica si dezvoltarea de materiale inovatoare pentru protectia mediului care, impreuna cu metodele avansate de purificare, vor asigura rezultate de inalta performanta. Aceasta directie de investigare va implica: (1) dezvoltarea de materiale avansate (materiale polimere si

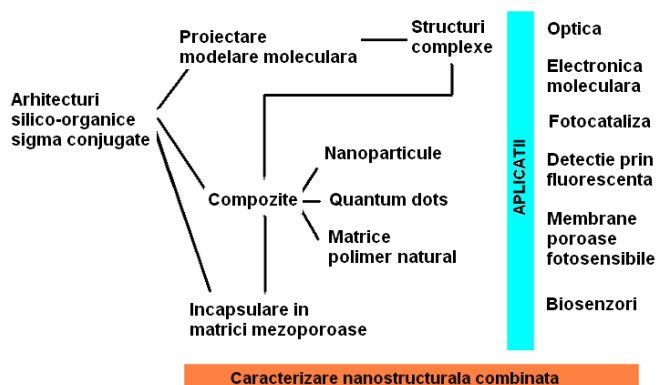
hibride pentru aplicatii de (foto)cataliza, adsorbție și ultrafiltrare); (2) exploatarea tehnicilor de modelare-simulare asistate de calculator pentru optimizarea condițiilor experimentale, cât și pentru detalierea interacțiunilor specifice și a relațiilor de tip structura-proprietate.

Pentru alte competențele necesare dezvoltării proiectului se vor iniția colaborări cu cercetători din cadrul departamentului și/sau din celelalte departamente din institut.

Totii cei 6 doctoranzi vor fi antrenati în activitățile de sinteză și caracterizare necesare dezvoltării proiectului, lucrările lor de doctorat fiind incluse în obiectivele acestui proiect.

Dinamica resursei umane funcție de obiectivele enumerate se va stabili la momentul oportun corelat cu cerințele proiectului.

Obiectivele generale sunt corelate în obiective specifice interconectate pe tematicile enunțate. Diagrama de mai jos redă o imagine de ansamblu a planului de dezvoltare științifică distribuit pe tematici. O astfel de abordare este dinamică, are avantajul că asigură propagarea exponențială a elementelor de noutate și vizează în același timp atât aspecte fundamentale cât și aplicative.



Proiectul corelează într-un mod interdisciplinar teme de cercetare avansată din domeniile: (i) structuri polimerice silico-organice (polisiloxani și polisilani); (ii) particule oxidice și carbonice nanostructurate/nanodimensionate; (iii) polimeri și compozite cu multiple utilizări. Această abordare asigură progresul științific pe fiecare direcție iar rezultatele obținute astfel contribuie în final la realizarea obiectivului principal.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

- materiale*: reactivi, solvenți, sticlărie de laborator, tehnica de calcul.
- financiare: conform contractului cu Academia Română și prin accesarea de surse de finanțare extraplan.

*Resursele materiale necesare sunt asigurate din etapele parcurse anterior (proiecte de cercetare, colaborări interdepartamentale, colaborări cu centre de cercetare RO, cu universități RO, din servicii către terți) și utilizând bugetele proiectelor extra-plan derulate de echipa proiectului

O preocupare continuă a grupului de cercetare o constituie participarea la competiții pe plan național/internațional și european în scopul obținerii resurselor necesare dezvoltării de proiecte de cercetare care să valorifice rezultatele științifice obținute.

Infrastructura

a) disponibilă în laborator: Reactor cu microunde CEM; Sistem de ultrasonare; instalații uzuale de laborator; Digestor SpeedWave Berghof; Cuptor de calcinare Nabertherm; TEM HT7700; SAXS Bruker

NanostarU; GPC WGE 3000; UV-VIS Shimadzu 1700; Fotoreactor complet echipat; Analizor pentru determinarea Carbonului Organic Total si Azotului Total Multi N/C 3100 (CLD); Spectrofotometru cu Sursa Continua (flacara si cuptor) ContrAA 800 D;

b) accesibila prin colaborare: Fluorimetru; SEM/AFM; spectrometru RMN; FT-IR; ATG/DSC; ZETASIZER; HR-SEM; HPLC-MS; MALDI-TOF.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institutie

(i) cu alte Subprograme/Proiecte din institut: Intelcentru; Fotochimie si poliaditie; Fizica si Chimia fizica a matrialelor polimere; Polimeri electroactivi si plasmochimie. **(ii)** colaboratori nationali: UAIC, UTI, ICECHIM, ICSI; **(iii)** colaboratori internationali: CEMEF (Sofia Antipolis, Franta), Institute for Advanced Energy Technology "Nicola Jordani" (Messina, Italia), Institutul de Chimie Anorganica de pe langa Academia R. Belarus (Misk, Belarus).

LABORATOR: POLIMERI ELECTROACTIVI SI PLASMOCHIMIE**SUBPROGRAM 7. ARHITECTURI POLIMERE PENTRU APLICATII IN OPTO-ELECTRONICA SI ENERGIE****Director Subprogram 7, dr. Mariana-Dana DAMACEANU, CS I****ECHIPA SUBPROGRAMULUI**

Nr. crt.	Nume si prenume	Functia	Categorie profesionala	Norma
1.	Dr. Mariana-Dana DAMACEANU	Director subprogram 7 Director proiect 7.1	CS I	1
2.	Dr. Ion SAVA	Membru proiect 7.1	CS I	1
3.	Dr. Radu-Dan RUSU	Membru proiect 7.1	CS III	1
4.	Dr. Irina BUTNARU	Membru proiect 7.1	CS	1
5.	Dr. Catalin-Paul CONSTANTIN	Membru proiect 7.1	CS	1
6.	Dr. Andra-Elena BEJAN	Membru proiect 7.1	AC	1
7.	Dr. Stefan CHISCA	Membru proiect 7.1	AC	1
8.	Drd. Adriana-Petronela CHIRIAC	Membru proiect 7.1	AC	1
9.	Andra-Ionela GAVRIL	Membru proiect 7.1	DRD	1
10.	Dr. Andrei HONCIUC	Director proiect 7.2	CS II	1
11.	Mircea GRIGORAS	Membru proiect 7.2	CS I	1
12.	Aurica FARCAS	Membru proiect 7.2	CS II	1
13.	Ana-Maria RESMERITA	Membru proiect 7.2	CS III	1
14.	Ana-Maria SOLONARU	Membru proiect 7.2	CS	1
15.	Mihai ASANDULESA	Membru proiect 7.2	CS	1
16.	Oana-Iuliana NEGRU	Membru proiect 7.2	AC	1
17.	Loredana VACAREANU	Membru proiect 7.2	AC	1
18.	Oltica TESCU	Membru proiect 7.2	A	1

Total norme AC-CSI: CS I: 3; CS II: 2; CS III: 2; CS: 4; AC: 5 = 16**Alte categorii: Drd.: 1; A: 1 = 2****Premizele propunerii**

Subprogramul 7 se aliniaza la ariile tematice de interes ale Uniunii Europene, respectiv Innovation, Plastics, Energy si Key Enabling Technologies si isi propune sa raspunda provocarilor stiintifice si

tehnologice din domenii ca nanotehnologie, materiale avansate sau energie. Nanotehnologia conduce la produse cu proprietati considerabil imbunatatite datorita posibilitatii de a controla si manipula materia la scara nanometrica, prin incorporarea nanostructurilor si nanoproceselor in inovatiile tehnologice. Implementarea cu succes a proceselor nanotehnologice in industria electronica, optoelectronica, tehnologia informatiei sau domeniul energetic poate schimba paradigmele tehnologiilor contemporane si revolutiona business-uri de miliarde de dolari. Materialele polimerice pot fi aplicate sub variate forme in electronica, optoelectronica sau energie, atat ca si componente pasive, cat si ca elemente active.

Combinarea proprietatilor interesante ale polimerilor cu functionalitatea (opto)electronica a demonstrat ca materialele macromoleculare pot fi *inima* unei game largi de dispozitive (opto)electronice, cum ar fi diodele emitatoare de lumina, celulele solare sau dispozitivele electrocrome. Polimerii utilizati in asemenea aplicatii trebuie sa fie solubili in solventi organici si prelucrabili prin tehnici simple care permit acoperirea unor suprafete mari. De asemenea, este necesar ca filmele polimere sa fie flexibile si rezistente mecanic pentru a permite utilizarea lor in dispozitive electronice flexibile. Nu in ultimul rand, organizarea supramoleculara in structuri bine definite de dimensiuni nanometrice, cat si senzitivitatea acestora la variatia unor stimuli externi (camp electric, temperatura, solvent) pot fi exploatate pentru fabricarea de dispozitive electronice performante.

Deoarece multe dispozitive (opto)electronice sunt inca ineficiente si au probleme de stabilitate, sunt necesare imbunatatiri. Acestea pot fi atinse prin proiectarea inteligenta de straturi active, printr-un control riguros al ordonarii si morfologiei acestora si ingineria de interfete din dispozitiv pentru a diminua problema transportului de sarcina.

Tematica Subprogramului propus se afla la granita dintre chimie, fizica, stiinta materialelor si electronica. Premizele propunerii rezida atat in educatia si experienta membrilor echipei de cercetare in domeniul polimerilor electro-optic activi si a materialelor conexe, cat si in rezultatele anterioare/recente ale membrilor Subprogramului care demonstreaza expertiza si potentialul existent in domeniul propunerii. Prin publicatii de inalt prestigiu, participari la manifestari stiintifice, implementare de proiecte de cercetare sau colaborari cu membrii comunitatii academice de profil, echipa Subprogramului a demonstrat profesionalism atat in ceea ce priveste sinteza si caracterizarea de noi sisteme/arhitecturi polimere cu proprietati electro- si optic active cat si pentru aplicatiile acestora in nanotehnologii, cu precadere in (opto)electronica si energie.

Scopul Subprogramului

consta in modernizarea directiilor de cercetare si stimularea inovarii in domeniul polimerilor electro- si optic activi si a (nano)materialelor obtinute pe baza lor prin controlul arhitecturii moleculare/structurii supramoleculare a materialului astfel incat acesta sa raspunda cerintelor impuse de aplicatiile de inalta tehnologie din electronica, optoelectronica sau energie.

Obiective generale

Largirea si dezvoltarea expertizei existente spre domenii aplicative de inalta tehnologie, abordarea unor teme de maxima actualitate/necesitate, aliniata la standardele UE

Intensificarea colaborarilor cu parti interesate din tara si strainatate avand preocupari complementare/interdisciplinare si includerea in retele de cercetare nationale si internationale dedicate nanotehnologiilor si materialelor avansate

Conturarea unui profil de cercetare competitiv in domeniul polimerilor electro- si optic activi care sa contribuie la cresterea vizibilitatii institutului pe plan national si international

Contributia la formarea unei noi generatii de specialisti, cu cunostinte solide in domeniu, pregatita sa fie competitiva pe piata muncii din comunitatea europeana/accesare de fonduri europene

Obiective specifice

- Sinteza de noi structuri macromoleculare cu topologii diverse: lineara, ramificata, hiper-ramificata si evidentierea influentei design-ului structural asupra proprietatilor fizico-chimice
- Sinteza de polimeri semiconductori sub forma de noi arhitecturi multifunctionale ca nanoparticule Janus sau structuri asimetrice/amfifile cu prelucrabilitate imbunatatita care sa permita extinderea potentialului aplicativ spre inzeestrarea suprafetelor/interfetelor cu proprietati opto-electronice, formarea de supra-structuri, optimizarea fenomenelor interfaciale si de adeziune, compatibilizarea compozitelor/blendurilor semiconductoare, etc.
- Dezvoltarea de structuri supramoleculare prin incluziunea lanturilor polimerice in cavitati de tip eter coroana, rotaxan, etc. si explorarea proprietatilor relevante pentru aplicatii (opto)electronice
- Diversificarea si optimizarea metodelor de sinteza a unor polimeri (hetero)aromatici conjugati/cu unitati flexibile, cu structura bine definita, prin combinarea metodelor clasice de sinteza (ex. policondensare) cu cele moderne, pe baza de sisteme catalitice (ex. Suzuki, Stille, etc.)
- Efectuarea de polimerizari in diverse sisteme (solutie, dispersie, emulsie) sau asistata de prezenta unor fileri anorganici sau pe baza de carbon pentru obtinere de materiale micro/nanostructurate
- Prelucrarea polimerilor in diverse tipuri de material: acoperiri, filme, particule, geluri, membrane
- Obtinerea de materiale compozite/amestecuri cu proprietati dielectrice sau conductoare
- Caracterizarea structurala, morfologica si investigarea materialelor polimerice cu privire la proprietatile termice, mecanice, optice, electrice, dielectrice, reologice, electrochimice, etc.
- Evaluarea potentialului aplicativ si testarea in dispozitive electronice la nivel de prototip (TRL 4)

Proiecte relevante realizate anterior

Echipa Subprogramului a implementat/implementeaza mai multe tipuri de proiecte (IDEI, TE, PCE, PED, Parteneriate etc.) pe diverse directii de cercetare orientate spre sinteza/studiul de noi (nano)materiale si aplicatiile lor in dispozitive opto(electronice), cum ar fi cele fotovoltaice, electroluminescente, electrocrome, etc. Cateva proiecte reprezentative sunt redate in continuare:

1. Noi structuri de polimeri conjugati pentru celule solare organice cu eficienta inalta (ID-PCE-2011-3-0274)/ 2012-2016, director proiect M. Grigoras
2. Celula fotovoltaica cu noi cromofori de tip fenotiazinic/fenoxazinic obtinuti prin inginerie moleculara (PN-III-P2-2.1-PED-2016-0510)/2017-2018, director proiect M. D. Damaceanu
3. Ingineria de ultima generatie a unor dispozitive electrocrome polimerice cu functionare la tensiune joasa destinate economisirii de energie (PN-III-P2-2.1-PED-2019-3520)/2020-2022, director proiect C. P. Constantin
4. Dispozitive polimerice emitatoare de lumina imbunatatite prin metode chimice (PN-III-P2-2.1-PED-2019-3993)/2020-2022, director proiect R. D. Rusu

Eficienta confirmata in aplicarea rezultatelor obtinute in domeniul specific proiectului

Expertiza membrilor Subprogramului in domenii relevante acestei propuneri (Arhitecturi polimerice pentru aplicatii in opto-electronica si energie) este confirmata de o serie de indicatori scientometrici, ca publicatii stiintifice, brevete, citari, indice Hirsh, etc. Directorul de Subprogram/ Proiect 1 a publicat 90 de lucrari stiintifice in reviste de profil (dintre care 87 indexate ISI) si alte 29 in volume de manifestari stiintifice (dintre care 10 indexate ISI), este co-autor a unui brevet, are 1128 citari (738 fara autocitari) si H-index = 21. Directorul Proiectului 2 a publicat 32 de lucrari stiintifice in reviste de profil (indexate ISI), 1 carte (autor unic, acceptata spre publicare in 2021 de Editura Elsevier), 1 capitol de carte

(Editura Springer), este autor a peste 40 de patente/aplicatii de patente, are 623 citari si H-index = 17. Alti membrii ai Subprogramului care au adus contributii relevante/consistente la dezvoltarea domeniului sunt: M Grigoras - co-autor a 187 de publicatii (104 internationale, 72 romanesti), 2 patente, 5 carti/capitole de carte (1329 citari, H-index: 19); I Sava - co-autor a 138 publicatii ISI, 20 patente, 8 carti/capitole de carte (703 citari, H-index: 19); A Farcas - co-autor a 63 de publicatii ISI, 2 carti editate, 6 capitole de carte, 3 patente, 342 de citari; AM Resmerita - co-autor a 31 lucrari ISI si 3 capitole de carte (H-index: 12, 1549 de citari); RD Rusu - co-autor a 38 publicatii ISI (30 articole+8 proceedings) si a 1 cerere brevet (226 citari, H-index: 11).

Expertiza resursei umane implicate

Echipa Subprogramului cuprinde 16 norme de cercetare, respectiv 3 CSI, 2 CSII, 2 CSIII, 4 CS si 5 AC. De asemenea, grupul contine 2 doctoranzi AR si isi propune sa atraga cel putin inca 3 doctoranzi. Doi membrii AC se afla la nivel de postdoc. Toti membrii echipei sunt creativi si competitivi, cu un background solid in diferite arii tematice, fiind inalt calificati pentru a indeplini cu succes atat obiectivele generale, cat si pe cele specifice propuse. Majoritatea au beneficiat de instruire, au efectuat numeroase stagii/lucrat la centre de cercetare/universitati/companii din strainatate. De exemplu, directorul de Subprogram/Proiect 1 a beneficiat de o bursa Marie Curie prin proiectul „Research Training Network-EUROFET (European Organic Field-Efect Transistors)” la Universitatea Bicocca/Istituto per lo Studio delle Macromolecole-CNR, Milano-Italia si a efectuat numeroase stagii de cercetare la Institute of Thin Films and Microsensorics Technology, Teltow-Germania. Directorul Proiectului 2 a primit titlul de doctor la The University of Alabama, USA si a efectuat un stagiu Postdoc la Chemical Engineering Department, University of Colorado at Boulder, USA. De asemenea, a fost beneficiarul unei burse Alexander von Humboldt la Friedrich-Alexander University, Germania, manager R&D la BASF SE, Ludwigshafen, Germania si profesor/lider de grup la Institute of Chemistry & Biotechnology, University of Applied Sciences (ZHAW), Zurich-Elvetia. Astfel, in cadrul grupului exista o competenta stiintifica, atat fundamentala cat si aplicativa multidisciplinara, si anume in chimia organica, chimia polimerilor, chimie-fizica, inginerie chimica, fizica si stiinta materialelor. Membrii Subprogramului vor efectua activitati de la sinteza organica de monomeri, polimeri, arhitecturi polimere si nanostructuri multifunctionale, la investigarea structurala/fizico-chimica a acestora si prelucrarea lor sub forma de materiale (filme, particule, compozite, blenduri). Caracterizarea avansata a materialelor si testarea acestora in opto(electronica) sau energie va fi realizata atat de membrii grupului, cat si prin intermediul colaborarilor nationale si internationale.

Infrastructura necesara pentru realizarea Subprogramului

Subprogramul va beneficia in primul rand de infrastructura de cercetare existenta la nivel de laborator, si anume echipamente si reactivi necesari efectuarii de sinteze de compusi organici/macromoleculari, centrifuga, bai de ultrasonare, galvanostat-potentisostat pentru studii electrochimice, spectrometre UV-Vis si de fluorescenta pentru investigatii optice, microscop optic in lumina polarizata pentru studii morfologice, spin-coater pentru depunere de filme, surse de curent/tensiune, multimetre pentru masurarea caracteristicilor electrice. Alte investigatii vor fi efectuate cu echipamentele existente in institut. Astfel, se vor folosi atat echipamente pentru caracterizare structurala, ca GPC, MALDI-TOF, FTIR, RAMAN, RMN, MS, UV-Vis-NIR, cat si aparatura pentru studii fizico-chimice, cum ar fi echipamente de analiza termica - TGA/DSC, microscopie AFM, SEM, TEM, de fluorescenta, difractometru cu raze X, elipsometru, spectrometru dielectric, instrumente pentru masuratori mecanice, a tensiunii de suprafata, al unghiului de racord, etc.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Subprogramului

Subprogramul 7 are resursa umana necesara pentru implementarea proiectului pe diferite categorii profesionale. Directorul de Subprogram are dreptul de conducere de doctorat, iar directorul Proiectului 2 isi propune obtinerea abilitarii si a dreptului de a conduce doctorate, ceea ce va permite largirea echipei Subprogramului cu noi membri prin programe de doctorat/post-doctorat. Resursele materiale vor fi asigurate prin proiecte nationale si internationale, aflate in derulare sau care vor fi ulterior depuse in diverse competitii. Se are in vedere si atragerea de fonduri prin parteneriat public-privat sau prin proiecte de mobilitate sau infrastructura. In prezent, Subprogramul implementeaza 2 proiecte de tip PED si 1 proiect de tip PD (ca mentor). Alte 3 proiecte de tip PCE depuse in competitia 2020 sunt in curs de evaluare.

Colaborarea cu alte Subprograme din institut

Subprogramul nu se poate derula fara o colaborare stransa cu alte Subprograme, deoarece directiile de cercetare prevazute necesita multidisciplinaritate. In special este vizata colaborarea cu membrii subprogramelor responsabili cu functionarea echipamentelor pentru realizarea investigatiilor structurale (RMN, FTIR, MALDI-TOF, GPC) si fizico-chimice ale polimerilor (ATG, DSC, UV-Vis, PL, BDS, XRD, SEM, AFM, TEM, XPS, etc). Dar, se are in vedere si colaborarea cu cercetatori din alte Subprograme cu competente complementare, in special prin intermediul proiectelor de cercetare. O alta modalitate de colaborare va consta in activitati de mentorat a unor cercetatori postdoc aflati in alte subprograme sau in interschimbul de doctoranzi/postdoctoranzi intre subprograme prin intermediul proiectelor TE. Avand in vedere specificul Subprogramului de sinteza de noi tipuri de materiale, acestea pot fi oferite spre investigatii aprofundate acolo unde exista interes, astfel contribuind la o colaborare sustinuta cu cercetatorii altor subprograme.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

De-a lungul timpului, membrii Subprogramului au realizat legaturi stiintifice stranse cu specialisti din tara/strainatate cu preocupari similare/complementare, in vederea aprofundarii domeniului si accesarii de fonduri extrabugetare. O parte din acestea vor fi continuate, dupa cum urmeaza:

Colaborari nationale: Institutul National pentru Cercetare - Dezvoltare in Microtehnologie- IMT Bucuresti, Institutul National de Fizica Materialelor, Bucuresti-Magurele, Universitatea Tehnica "Gh. Asachi" Iasi, Facultatea de Inginerie Chimica si Protectia Mediului, Universitatea "Al. I. Cuza", Iasi, Facultatea de Fizica si Centrul de Cercetare Avansata in Plasma (IPARC).

Colaborari internationale: Institute of Thin Films Technology and Microsensors, Teltow- Germania; Centre of Polymer and Carbon Materials, Zabrze-Polonia; Center for Low-Temperature Plasma Sciences, Nagoya University, Japonia; University Bremen; Université de Cergy-Pontoise; University College London; Zurich University of Applied Sciences, University of Basel, Russian Academy of Science; Universite Claude Bernard Lyon 1, etc.

Activitati de formare a tinerilor cercetatori: doctoranzi, post-doctoranzi.

Unul dintre obiectivele generale ale Subprogramului urmareste cresterea calitatii pregatirii tinerilor cercetatori la nivel de doctorat si postdoctorat, precum si largirea echipei. In echipa Subprogramului exista deja un conducator de doctorat, si se preconizeaza ca inca un membru va sustine teza de abilitare si va primi dreptul de conducere de doctorat in urmatorii ani. Acest lucru va permite antrenarea atat a doctoranzilor, cat si a postdoctoranzilor pe directiile de cercetare ale Subprogramului propus, contribuind astfel la formarea de viitori specialisti in domeniul arhitecturilor

polimere cu proprietati electro- si optic active. Acest obiectiv general va fi atins prin aplicarea pentru burse doctorale la Academia Romana sau pentru sprijin financiar prin intermediul proiectelor. Integrarea si perfectionarea tinerilor cercetatori se va realiza in primul rand prin programe de doctorat si proiecte PD, cursuri de perfectionare, stagii in tara/strainatate si participari la manifestari stiintifice. In al doilea rand tinerii vor fi instruiti prin activitati practice de sinteza de laborator sau investigare pe echipament de catre membrii proiectelor componente, dar si prin intalniri periodice/seminare/sustineri de referate, unde vor avea ocazia sa-si prezinte rezultatele proprii si sa discute cu cercetatori mai experimentati pe temele abordate.

Proiecte componente

Denumire/director proiect	Descriere succinta
Proiect 7.1 Polimeri hetero(aromatici) pentru filme subtiri si acoperiri destinate unor aplicatii din opto(electronica) si energie <i>Dr. D. Damaceanu, CS I</i>	Dezvoltarea de polimeri (hetero)aromatici cu stabilitate termica ridicata, prelucrabilitate imbunatatita si caracteristici noi care sa raspunda provocarilor stiintifice si tehnologice din electronica organica si domeniul energetic axat pe captarea, stocarea si economisirea energiei.
Proiect 7.2 Polimeri semiconductori/amfifili cu aplicatii opto-electronice <i>Dr. A. Honciuc, CS II</i>	Strategii inovative pentru obtinerea de arhitecturi multifunctionale pe baza de polimeri semiconductori/amfifili sub forma de nanoparticule, structuri amfifile, retele supramoleculare, destinate utilizarii ca interfete si straturi active sau auto-asamblate in dispozitive optoelectronice si materiale/ sisteme cu proprietati electro-optice.

PROIECT 7.1. Polimeri (hetero)aromatici pentru filme subtiri si acoperiri destinate unor aplicatii din (opto)electronica si energie

Director proiect, dr. Mariana-Dana DAMACEANU, CS I

Nr. crt.	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	<i>Dr. Mariana-Dana DAMACEANU</i>	<i>Director proiect 7</i>	<i>CS I</i>	<i>1</i>
2.	Dr. Ion SAVA	Membru proiect 7.1	CS I	1
3.	Dr. Radu-Dan RUSU	Membru proiect 7.1	CS III	1
4.	Dr. Irina BUTNARU	Membru proiect 7.1	CS	1
5.	Dr. Catalin-Paul CONSTANTIN	Membru proiect 7.1	CS	1
6.	Dr. Andra-Elena BEJAN	Membru proiect 7.1	AC	1
7.	Dr. Stefan CHISCA	Membru proiect 7.1	AC	1
8.	Drd. Adriana-Petronela CHIRIAC	Membru proiect 7.1	AC	1
9.	Andra-Ionela GAVRIL	Membru proiect 7.1	DRD	1

Total norme AC-CSI: CS I: 2; CSIII: 1; CS: 2; AC: 3 = **8**

Alte categorii: DRD: **1**

Scopul proiectului

Proiectul isi propune dezvoltarea capacitatii de cercetare in sfera polimerilor (hetero)aromatici de inalta performanta, pe directia materialelor avansate si a nano-tehnologiilor, cu impact in (opto)electronica si energie. Astfel, se urmareste abordarea unor concepte structurale noi prin care materialele de inalta performanta sa fie inzestrate cu caracteristici specifice cerintelor tehnologice contemporane, directiilor de cercetare ale Institutului si instrumentelor de cercetare si dezvoltare nationale (PNCDIII) si internationale (HORIZON 2020) orientate catre specializarea inteligenta eco-nano-tehnologii si materiale avansate. Se are in vedere o modificare conceptuala prin trecerea de la "clasica" axare pe mentinerea proprietatilor fizico-chimice si mecanice conventionale la temperaturi inalte, la obtinerea de materiale inovative, cu caracteristici noi - electronice, optice, de asemenea stabile la temperaturi inalte si o revigorare a cercetarii in domeiu prin orientarea catre tehnologii avansate, in special nanotehnologii. Proiectul 7.1 isi propune sa raspunda provocarilor stiintifice si tehnologice din electronica organica/plastica si domeniul energetic axat pe captarea, stocarea si economisirea de energie folosind metode sustenabile, simple si profitabile din punct de vedere economic.

Obiective generale

Abordarea prioritara a unor teme de cercetare de maxima actualitate in domeniul de specializare inteligenta eco-nano-tehnologii si materiale avansate.

Consolidarea aptitudinilor si cunostintelor dobandite pentru orientarea temelor de cercetare catre aplicatii de interes industrial

Modernizarea competentelor existente in domeniu, precum si stimularea inovarii in arii adiacente pentru o mai buna interdisciplinaritate

Dobandirea de noi aptitudini, cunostinte si competente complexe cu privire la activitatea de cercetare dedicata polimerilor (hetero)aromatici printr-o instruire permanenta

Conturarea unui profil de cercetare competitiv care sa conduca la dezvoltarea si o mai buna vizibilitate a Institutului pe plan national si international

Obiective specifice

- Stimularea inovarii de materiale pe baza de polimeri (hetero)aromatici **pentru aplicatii in electronica si opto-electronica**. Se au in vedere arhitecturi polimerice noi, cu elemente structurale bine definite, ca imida, 1,3,4-oxadiazol, fenoxazina, fluoren, trifenilamina, trifenilmetan, azobenzen, etc. pentru utilizare fie ca materiale active in dispozitive electroluminescente, electrocrome, de "memorie", fie ca materiale pasive (dielectrics, suporturi flexibile/alungibile, interstraturi) pentru electronica organica/plastica.
- Proiectarea si sinteza unor arhitecturi polimerice noi pentru **aplicatii ce vizeaza reducerea consumului de energie** (ex. membrane pentru separarea gazelor si capatarea/stocarea de CO₂ - CCS technology) cu impact asupra problemelor de mediu.
- Dezvoltarea de materiale polimerice/oligomere continand diversi heterocicli (fenoxazina, fenotiazina, carbazol, tiofen, naftilimida, perilenimida etc.) **pentru domeniul energetic**: i) in capatarea de energie (celule fotovoltaice), ii) stocarea de energie (supercondensatori).
- Investigarea capacitatii de detectie a unor arhitecturi (hetero)aromatici complexe **pentru aplicatii ca biosenzori, senzori chimici, senzori de umiditate** etc.

- **Implementarea conceptului "inteligent"** in domeniul polimerilor (hetero)aromatici prin dezvoltarea de materiale poliimidice cu raspuns la actiunea unor stimuli externi (radiatia luminoasa, curent electric, compus biologic activ).
- **Diversificarea metodelor de preparare** a materialelor pe baza de oligomeri/polimeri (hetero)aromatici: sinteza organica fina, polimerizare electrochimica, policondensare asistata de catalizatori/umpluturi pe baza de carbon sau anorganice.

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Proiectul propus va fi dezvoltat de o echipa formata din 9 membri, dintre care 2 CSI, 1 CSIII, 2CS, 3AC (dintre care 1 doctorand AC) si 1 doctorand AR. Resursa umana implicata in proiect are competente in chimia organica si a heterociclorilor, chimia polimerilor, chimie-fizica, inginerie chimica si fizica. Membrii proiectului vor acoperi diferite arii de competenta, de la sinteza organica fina de monomeri/oligomeri la sinteza de polimeri si caracterizarea acestora din punct de vedere structural si fizico-chimic. Studiile preliminare sau la nivel de prototip (TRL4) privind aplicatiile materialelor obtinute vor fi efectuate in cadrul proiectului in limita resurselor disponibile. Ulterior, studiile aplicative vor fi efectuate in colaborare cu cercetatori din institutii nationale sau internationale cu preocupari similare.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Resursa umana este asigurata de o echipa omogena, bine sudata, care acopera intreg palierul de grade stiintifice (de la CS1 la AC). In plus se prevede cresterea echipei prin atragerea de masteranzi si doctoranzi care vor fi specializati pe directiile de cercetare propuse. Resursele financiare sunt si vor fi asigurate prin atragerea de fonduri extrabugetare, publice sau private, prin participarea activa la implementarea de proiecte de cercetare, formare profesionala, mobilitate etc. sau incheiere de contracte de cercetare-dezvoltare cu mediul privat.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Proiectul se va realiza in parteneriat cu cercetatori din alte subprograme/proiecte ale Institutului cu scopul de a adauga noi competente activitatilor proiectului, de a exploata la maxim infrastructura ICMPP si de a extinde gradul de complexitate si interdisciplinaritate al studiilor polimerilor (hetero)aromatici si a materialelor realizate pe baza acestor. Astfel, se prevede o colaborare stransa in special cu membrii proiectelor/subprogramelor dedicate investigarii structurale si fizico-chimice a polimerilor si materialelor polimere. De asemenea, se intrevevede o colaborare sustinuta cu membrii Proiectului 2 al Subprogramului atat pe directia de sinteza de polimeri, cat si pe directia de noi (nano)materiale si aplicatii.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Pentru o buna implementare a Proiectului, se prevede o cooperare fructuoasa cu departamente de cercetare din tara si strainatate, pentru completarea competentelor existente si formarea/consolidarea de parteneriate in vederea elaborarii si implementarii de proiecte, astfel:

Colaborari nationale: Institutul National pentru Cercetare - Dezvoltare in Microtehnologie- IMT Bucuresti, Institutul National de Fizica Materialelor, Bucuresti-Magurele, Universitatea Tehnica "Gh. Asachi" Iasi, Facultatea de Inginerie Chimica si Protectia Mediului, Universitatea "Al. I. Cuza", Iasi, Facultatea de Fizica, Centrul de Cercetare Avansata in Plasma (IPARC)

Colaborari internationale: Institute of Thin Films Technology and Microsensors, Teltow-Germania, Centre of Polymer and Carbon Materials, Zabrze-Polania, Center for Low-Temperature Plasma Sciences, Nagoya University, Japonia

PROIECT 7.2. Polimeri semiconductori/amfifili cu aplicatii opto-electronice

Director proiect, dr. Andrei HONCIUC, CS II

Nr. crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	<i>Andrei HONCIUC</i>	<i>Director proiect 7.2</i>	<i>CS II</i>	<i>1</i>
2.	Mircea GRIGORAS	Membru proiect 7.2	CS I	1
3.	Aurica FARCAS	Membru proiect 7.2	CSII	1
4.	Ana-Maria RESMERITA	Membru proiect 7.2	CSIII	1
5.	Ana-Maria SOLONARU	Membru proiect 7.2	CS	1
6.	Mihai ASANDULESA	Membru proiect 7.2	CS	1
7.	Oana-Iuliana NEGRU	Membru proiect 7.2	AC	1
8.	Loredana VACAREANU	Membru proiect 7.2	AC	1
9.	Oltica TESCU	Membru proiect 7.2	A	1

Total norme: CS I: 1; CS II: 2; CSIII: 1; CS: 2; AC: 2 = 8

Alte categorii: A: 1

Scopul proiectului

Dispozitivele de baza din electronica organica, cunoscute si sub denumirea de dispozitive stratificate sunt constituite din filme subtiri electroactive dispuse intre doi electrozi metalici. O problema semnificativa in calea miniaturizarii, cat si a evolutiei dispozitivelor organice dincolo de dispozitivele stratificate uzuale este prelucrabilitatea dificila a polimerilor clasici semiconductori. Urmatoarea decada va fi marcata de concentrarea eforturilor pentru descoperirea unor arhitecturi multifunctionale pe baza de polimeri semiconductori ce va permite pe de o parte miniaturizarea dispozitivelor, cat si fabricarea unor elemente opto-electronic active de sine statatoare sau unor entitati inteligente ca rezultat al unor procese de auto-asamblare capabile sa reactioneze la schimbarile mediului inconjurator.

Scopul acestui proiect consta in dezvoltarea unor structuri moleculare si supra-moleculare bazate pe noi concepte arhitecturale, cum ar fi: retele polirotaxanice reticulate tri-dimensionale, polimeri conjugati amfifili, nanoparticule Janus multifunctionale, etc. Prin abordarea unor strategii inovative pentru sinteza de polimeri semiconductori sub forma de noi arhitecturi multifunctionale se urmareste imbunatatirea prelucrabilitatii lor, dar si extinderea domeniului lor de aplicabilitate spre formarea de supra-structuri prin auto-asamblare, optimizarea fenomenelor interfaciale si de adeziune in dispozitive metal/organice, compatibilizarea compozitelor/blendurilor semiconductoare, etc. Aceste noi arhitecturi bazate pe polimeri conjugati pot fi aplicate atat ca elemente active in dispozitive optoelectronice si imprimate, dar si ca facilitatori de tehnologie cu rol in functionalizarea suprafetelor si interfetelor si inzeestrarea lor cu proprietati optice si electronice.

Obiective generale

Dezvoltarea unui grup de cercetare competent, recunoscut atat pe plan national, cat si international in domeniul polimerilor semiconductori/amfifili si nanomaterialelor multifunctionale cu aplicabilitate atat in electronica organica, cat si in inzeistrarea suprafetelor si interfetelor cu proprietati opto-electronice;

Abordarea unor strategii inovative pentru sinteza de polimeri semiconductori sub forma de noi arhitecturi multifunctionale, cum ar fi nanoparticule, structuri asimetrice/amfifile, retele supramoleculare, etc., cu prelucrabilitate imbunatatita care sa permita extinderea potentialului aplicativ spre inzeistrarea suprafetelor/interfetelor cu proprietati opto-electronice, formarea de suprastructuri, optimizarea fenomenelor interfaciale si de adeziune, compatibilizarea compozitelor/blendurilor semiconductoare, etc. Explorarea potentialului de comercializare/brevetare a unor nanomateriale multifunctionale.

Obiective specifice

- Sinteza de nanoparticule polimere omogene si de tip Janus amfifile dotate cu polimeri semiconductori pentru extinderea domeniului de aplicabilitate al acestora din urma catre domeniile tipice compusilor tensioactivi, cum ar fi: generare de emulsii Pickering, polimerizari in emulsii, generare de spume solide, structuri auto-asamblate, membrane de sine statatoare, etc., ce pot rezulta in noi materiale/elemente active pentru opto-electronica;
- Sinteza de polimeri semiconductori/amfifili constituiti din blocuri hidrofile/hidrofobe cu prelucrabilitate imbunatatita si capacitate de autoasamblare ce pot genera structuri supramoleculare utilizabile ca elemente electroactive autonome si filme subtiri pentru inzeistrarea interfetelor/suprafetelor cu proprietati electro-optic active sau imbunatatirea fenomenelor de interfata in dispozitivele metal/organice din electronica organica;
- Studiul proprietatilor conductoare/dielectrice ale unor materiale compozite pe baza de polimeri semiconductori/amfifili si grafene, nanotuburi, fulerene sau nanoparticule metalice si evidentierea fenomenelor de transport a purtatorilor de sarcina, cum ar fi polarizarea interfaciala sau interactiunea dintre lanturile polimere ale unor structuri complexe;
- Dezvoltarea unor metode noi de masurare a conductivitatii unor filme ultra-subtiri auto-asamblate de polimeri si nanoparticule multifunctionale, precum si a unor metode de imprimare de circuite electronice si dispozitive pe baza de polimeri conjugati sau nanoparticule semiconductoare;
- Sinteza, caracterizarea fotofizica, optimizarea si testarea in dispozitive electronice a unor noi structuri complexe de tip pseudopolirotaxanic si polirotaxanic pe baza de cucurbituril ca molecule gazda si polimeri semiconductori/amfifili oaspete si compararea performantelor cu cele ale semiconductoarelor neincapsulate.

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Proiectul propus abordeaza o tema interdisciplinara ce necesita specialisti cu competente atat in sinteza organica/de polimerizare, cat si in analiza fizico-chimica a materialelor obtinute. Competentele cheie necesare pentru indeplinirea obiectivelor generale si specifice sunt satisfacute atat de cercetatori experimentati, cat si de cercetatori tineri, care acopera intreaga plaja de functii de cercetare, de la CSI la AC, dupa cum urmeaza: *Dr. A. Honciuc* este specializat in sinteza si caracterizarea de nanoparticule Janus si compusi tensioactivi, in modificarea si functionalizarea suprafetelor si interfetelor si masurarea conductivitatii polimerilor semiconductori; *Dr. M. Grigoras* are o experienta vasta,

recunoscuta pe plan national si international, in sinteza si design-ul polimerilor semiconductori si aplicatiile acestora in dispozitive electronice organice; *Dr. A. Farcas* are aptitudini recunoscute in sinteza, caracterizarea fotofizica si testarea polimerilor semiconductori cu arhitecturi pseudo- si polirotaxanice ca materiale emisiv/fotovoltaice in dispozitive opto-electronice; *Dr. A.-M. Resmerita* este specializata in sinteza organica, macromoleculara si supramoleculara, precum si in testarea retelelor supramoleculare complexe cu aplicabilitate in optoelectronica sau ca actuatori; *Dr. A.-M. Solonaru* este specializata in sinteza si caracterizarea polimerilor conjugati semiconductori, in special din clasa polianilinelor, dar si a nanoparticulelor polimere omogene si de tip Janus semiconductoare; *Dr. M. Asandulesa* are experienta in caracterizarea proprietatilor fizico-chimice ale polimerilor semiconductori si nanoparticulelor multifunctionale, dar si in dezvoltarea de noi metode de masurare a proprietatilor electro-optice, in special de conductivitate a unor arhitecturi nano, filme subtiri sau filme monomoleculare; *Dr. O. Negru* este specializata in sinteza si caracterizarea polimerilor conjugati semiconductori din clasa poliarilaminelor, polifluorenelor, dar si a nanoparticulelor polimere de tip Janus multifunctionale; *Dr. L. Vacareanu* este specializata in sinteza si caracterizarea electrochimica a polimerilor semiconductori si a nanoparticulelor semiconductoare omogene si de tip Janus pe cale electrochimica.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Se va urmari colaborarea cu grupuri din alte subprograme ale ICMPP, atat pentru analiza de rutina, dar si pentru explorarea aprofundata a polimerilor si materialelor obtinute prin tehnici de laborator ce necesita o pregatire la nivel inalt de specializare. De asemenea se are in vedere colaborarea cu grupuri din ICMPP pentru largirea ariei de expertiza atat in sinteza, cat si in identificarea precursorilor chimici, monomerilor, polimerilor sau utilizarea ca intermediar a materialelor sintetizate in cadrul diferitelor laboratoare.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Se vor continua colaborarile deja existente cu grupuri din institutii de cercetare/universitati, cum ar fi: University Bremen, Université de Cergy-Pontoise, University College London, Institutul National de Cercetare-Dezvoltare pentru Fizica Materialelor, Facultatea de Fizica, Universitatea "Al. I. Cuza" Iasi, Zurich University of Applied Sciences, University of Basel, Russian Academy of Science; Swiss Federal Institute of Technology in Zurich (ETH), University of Hull Universite Claude Bernard Lyon 1, etc.

LABORATOR CHIMIA FIZICA A POLIMERILOR**SUBPROGRAM 8. CHIMIA FIZICA A MATERIALELOR MULTICOMPONENTE IN SOLUTIE SI IN FAZA SOLIDA****Director Subprogram 8, dr. Anton AIRINEI, CS I****ECHIPA SUBPROGRAMULUI**

Nr. crt	Nume si prenume	Funcția	Categorie profesionala	Norma
1.	<i>Dr. Anton AIRINEI</i>	<i>Director subprogram 8 Director proiect 8.1</i>	<i>CS I</i>	<i>1</i>
2.	Dr. Mihaela AVADANEI	Membru proiect 8.1	CS III	1
3.	Dr. Mihaela HOMOCIANU	Membru proiect 8.1	CS III	1
4.	Dr. Petronela PASCARIU	Membru proiect 8.1	CS III	1
5.	Dr. Nicusor FIFERE	Membru proiect 8.1	CS	1
6.	Dr. Radu Ionut TIGOIANU	Membru proiect 8.1	AC	1
7.	Dr. Carmen GHERASIM	Membru proiect 8.1	AC	1
8.	Dr. Dragos Lucian ISAC	Membru proiect 8.1	AC	1
9.	Dorel URSU	Membru proiect 8.1	A	1
10.	Roxana IRIMIA	Membru proiect 8.1	A	1
11.	Daniela ACATINCAI	Membru proiect 8.1	A	1
12.	<i>Dr. Mihai Adrian BREBU</i>	<i>Director proiect 8.2</i>	<i>CS II</i>	<i>1</i>
13.	Dr. Raluca Nicoleta DARIE-NITA	Membru proiect 8.2	CS II	1
14.	Dr. Elena STOLERU	Membru proiect 8.2	CS	1
15.	Dr. Vasile Cristian GRIGORAS	Membru proiect 8.2	CS	1
16.	Dr. Daniela PAMFIL	Membru proiect 8.2	CS	1
17.	Dr. Raluca Petronela DUMITRIU	Membru proiect 8.2	AC	1
18.	Dr. Anamaria IRIMIA	Membru proiect 8.2	AC	1
19.	Dr. Elena BUTNARU	Membru proiect 8.2	AC	1
20.	Dr. Catalina Natalia CHEABURU YILMAZ	Membru proiect 8.2	AC	1
21.	Ing. Tudor ARDELEANU	Membru proiect 8.2	Insp. Spec.	1
22.	<i>Dr. Andreea Irina BARZIC</i>	<i>Director proiect 8.3</i>	<i>CS III</i>	<i>1</i>
23.	Dr. Raluca Marinica ALBU	Membru proiect 8.3	CS	1
24.	Dr. Iuliana STOICA	Membru proiect 8.3	CS	1

25.	Dr. Luminita Ioana BURUIANA	Membru proiect 8.3	AC	1
26.	Dr. Simona NICA	Membru proiect 8.3	AC	1
27.	Dr. Marius SOROCEANU	Membru proiect 8.3	AC	0,4
28.	Dr. Cristina Maria POPESCU	Director proiect 8.4	CS II	1
29.	Dr. Daniel Timpu	Membru proiect 8.4	CS II	1
30.	Dr. Carmen Mihaela POPESCU	Membru proiect 8.4	CS II	1
31.	Dr. Doina BEJENARU	Membru proiect 8.4	CS II	1
32.	Dr. Daniela FILIP	Membru proiect 8.4	CS II	1
33.	Drd. Bianca Ioana DOGARU	Membru proiect 8.4	AC	1

Total norme AC-CSI: CS I: 1; CS II: 7; CSIII: 4; CS: 6; AC: 10,4 = **28,4**

Alte categorii: A1: 3; Insp. Spec.: 1 = **4**

Premizele propunerii

Atat in domeniul stiintelor naturii, cat si in medicina se impune utilizarea de noi materiale polimerice care sa corespunda standardelor impuse de progresul tehnologic din ultimii ani. Preocuparile in aceste domenii s-au concentrat pe materiale polimerice multicomponente cu proprietati fizico-chimice avansate. Majoritatea publicatiilor stiintifice sunt inca axate pe cercetari privind corelatia morfologiei de faza cu caracteristicile finale ale materialelor ca instrument pentru controlul performantei sistemelor polimerice. Prin urmare, investigarea amanuntita a interactiunilor materialelor polimerice cu anumiti micro/nano-aditivi sau cu radiatii electromagnetice poate oferi noi solutii in design-ul unor sisteme cu functionalitate sporita si care pot conduce la un progres considerabil in numeroase arii de cercetare, cum ar fi micro/nano-tehnologii pentru senzori, eco-tehnologii pentru protectia mediului si valorificarea biomasei, biomateriale pentru agricultura si materiale hibride pentru industrie.

Scopul Subprogramului

Scopul Subprogramului il reprezinta studiul fenomenelor care rezida din imbinarea mai multor componente care alcatuiesc un sistem in stare solida sau in solutie include analiza proprietatilor fizico-chimice ale sistemelor multicomponente in strinsa corelare cu compozitia, structura chimica si supramoleculara, specifice fiecarui sistem. In principiu, se urmaresc atat interactiunile de natura chimica sau fizica, intramoleculare, dar mai ales intermoleculare la suprafetele de delimitare, atat intre componente, faze sau cu mediul inconjurator. In baza acestor aspecte se evalueaza interactiunea sistemelor studiate asupra altor medii sau sisteme, care se doresc a fi controlate sau modificate, dar si efectele factorilor de constrangere externi, care pot afecta proprietatile si structura sistemelor multicomponente, pentru stabilirea aplicabilitatii acestora. Se are in vedere descrierea calitativa a fenomenelor care determina predictibilitatea intuitiva a interconectarii dintre structura si proprietatile sistemelor multicomponente, precum si impactul lor asupra mediului care le contin. Totodata, in urma descrierii calitative a fenomenelor se urmareste studiul legatilor cantitative care le guverneza prin stabilirea relatiilor de proportionalitate ale parametrilor intrinseci, specifici sistemului, in stransa dependenta cu parametrii extrinseci, specifici mediului care le contin, sporind gradul de predictibilitate in ceea ce priveste design-ul sistemului multicomponent raportat la proprietatile, dar si la posibilitatile de aplicare.

Obiective generale

Studiul proprietatilor de absorbtie si emisie ale unor materiale fotoactive in vederea utilizarii acestora ca sisteme de detectie sau in fotocataliza;

Dezvoltarea si aprofundarea nivelului de cunoastere la interfata/interfaza in sisteme polimerice multicomponente;

Impactul factorilor externi asupra structurii si interactiunilor in materiale multicomponente;

Obtinerea si investigarea unor materiale multicomponente cu proprietati optice si electrice imbunatatite;

Evaluarea proprietatilor fizico-chimice ale unor bio(nano)compozite prietenoase mediului cu aplicatii in medicina, agricultura.

Obiective specifice

- Testarea comportarii fotofizice si fotochimice a sistemelor hibride complexe sub influenta factorilor fizici si chimici;
- Investigarea mecanismelor de stingere a fluorescentei utilizand spectroscopia in regim static si dinamic;
- Determinarea structurii electronice a unor sisteme moleculare in stare fundamental sau excitata prin studii teoretice;
- Obtinerea de materiale din sisteme multicomponente cu proprietati antimicrobiene/antioxidante, materiale cu proprietati de suprafata speciale, bio(nano)compozite;
- Cinetica, mecanismele de degradare si compozitia produselor de degradare sub influenta diferitilor factori de mediu (abiotici sau biotici);
- Prepararea de materiale multicomponente utilizand matrici polimere ranforsate cu micro-/nano-particule, cristale lichide, etc.
- Analiza morfologica si reologica a interactiunilor dintre agentul de ranforsare si matricea polimera;
- Adeziunea materialelor polimere conductoare la diferite materiale in functie de gradul de ranforsare si studiul proprietatilor mecanice ale acestor sisteme;
- Functionalizari de suprafata si stabilizarea materialelor compozite multifunctionale;
- Migrarea controlata a principiilor active din matrici polimere;
- Stabilizarea emulsiilor prin influentarea interactiunilor dintre faze;
- Analiza structurala si morfologica a unor noi sisteme (nano)compozite obtinute prin metode prietenoase mediului;
- Evaluarea proprietatilor de sorbtie si a cineticii de sorbtie a vaporilor de apa in matrici compozite.

Proiecte relevante realizate anterior

1. Improving food safety through the development and implementation of active and biodegradable food packaging systems, ACTIBIOSAFE, Program EEA-JRP-RO-NO, Proiect 1SEE/30.06.2014; 2014-2017
2. Joint innovative training and teaching/learning program in enhancing development and transfer knowledge of application of ionizing radiation in materials processing, Proiect Erasmus + TL-IRMP 2014-1-PL01-KA203-003611; 2014-2017
3. Innovative and eco-sustainable processing and packaging for safe and high quality organic berry products with enhanced nutritional value, EcoBerries, ERA NET project 2014-2018
4. New approaches in designing polymer surfaces with controllable pattern for applications in biomedicine and high technologies, nr. 256/1.10.2015, PNII-RU-TE-2014-4-2976, 2015-2017,
5. Innovative strategies to reduce optical losses through shielding polymer materials for more efficient photovoltaics, nr. TE 83/1.09.2020, PN-III-P1-1.1-TE-2019-1878, 2020-2022,

6. Compozite pe baza de nanoargila, nanoceluloza si MIP pentru formulari microbiene prietenoase mediului, Proiect COFUND_M-ERA.NET II-COMPIO, 2017-2020

Eficienta confirmata in aplicarea rezultatelor obtinute in domeniul specific proiectului

Activitatea de cercetare desfasurata in perioada 2015-2020 de catre membrii subprogramului S8 s-a concretizat in publicarea a peste 265 lucrari stiintifice in reviste cu factor de impact, din care peste 65 in reviste cu factor de impact mai mare decat 4. Parte din lucrari se bucura de o vizibilitate buna pe plan international acumuland peste 700 citari. De asemenea, au fost editate un numar de 7 carti in edituri din strainatate (Elsevier, Springer, CRC Press) si publicate 12 carti la edituri din tara. In cadrul subprogramului au fost elaborate un numar de 8 brevete de inventie si un brevet international (WO 201818117885A1 2018).

Expertiza resursei umane implicate

Echipele subprogramului este formata din 1 CS I, 6 CS II, 4 CS III, 6 CS, 11 AC si 3 A1. In cadrul subprogramului isi desfasoara activitatea chimisti, fizicieni, biochimisti, bioingineri cu competente specifice in obtinerea de materiale adecvate proiectelor propuse, functionalizari de suprafata si volum, spectroscopie moleculara, fotochimie, caracterizare structurala si morfologica a materialelor multicomponente, reologie, materiale compozite multifunctionale receptive la stimuli externi, analiza termica, piroliza materialelor polimere, materiale biodegradabile, interactiuni in sisteme multicomponente.

Infrastructura necesara pentru realizarea Subprogramului

Subprogramul detine infrastructura necesara indeplinirii obiectivelor descrise in fiecare proiect component: echipamente: spectrometru de absorbtie in UV/viz Specord 200+, spectrometru de luminescenta LS55 Perkin Elmer, spectrometru de fotoluminescenta FLS980, spectrometru pentru masurarea absorbtiei in timp real LP980, cromatograf de gaze GC-MSP/FID Agilent 6890N, reometru Anton Parr Physica MCR301, goniometru KSV CAM200, aparat pentru determinarea permeabilitatii la gaze, aparat de solutie Agilent 708-DS cuplat cu spectrometru UV/viz Cary 60, spectrometru NIR portabil, spectrometru FTIR Alpha Bruker, conductometru Keithley, refractometru DRMA, polarimetru Euromex, etc.

Acces la alte echipamente din institut: SEM, TEM, difractometru de raze X, spectrometru dielectric, spectrometru Raman, magnetometru, spectrometru RES, aparat de metalizare, pe baza de colaborari cu colegii de la celelalte subprograme/proiecte.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Subprogramului

Subprogramul detine infrastructura necesara indeplinirii tuturor obiectivelor descrise in fiecare proiect, aceasta constand in: (a) consumabile: substante chimice (reactivi, solventi, etc.) si ustensile de laborator (sticlari, spatule, echipamente de protectie, etc.); (b) echipamente: spectrometru UV/Vis Cary 60, spectrometru pentru masurarea absorbtiei in timp real LP980, spectrometru de fotoluminescenta FLS980, spectrofotometru UV-VIS SPECORD 210 PLUS, cromatograf de gaze cuplat cu spectrometru de masa Agilent 6890N Inert XL, reometru MCR301, goniometru KSV CAM 200, conductometru Keithley, refractometru DRM4, polarimetru Euromex, , unitate de titrare TitroLine, spectrometru Alpha Bruker FT-IR, spectrometru NIR portabil, tester de permeabilitate a gazelor L100-5000 Systech, tester de permeabilitate a oxigenului PERMETM OX2/231, viscozimetru Schott CT52, , multimetru de laborator INOLAB 740; (c) resurse informativale: acces la baze de date de literatura stiintifica in domeniu si la internet.

Colaborarea cu alte Subprograme din institut

Subprogramul 8 isi propune o cooperare deplina cu toate Subprogramele din institut, atat prin asigurarea accesului la infrastructura, cat si prin mentinerea/extinderea colaborarilor stiintifice inerente activitatilor de cercetare propuse. Astfel, se are in vedere colaborarea cu celelalte proiecte din cadrul subprogramului S8 si cu membrii unor proiecte din subprogramele S9, S6, S5, S7, S1.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Membrii subprogramului au deja stabilite o serie de colaborari dintre care mentionam: cu INCD pentru Microtehnologie (IMT) Bucuresti; INCD pentru Textile si Pielarie, Institutul de Cercetare Pielarie-Incaltaminte, Bucuresti; Facultatea de Inginerie Electrica si Stiinta Calculatoarelor, Universitatea Stefan cel Mare din Suceava; Facultatea de Chimie, Universitatea Al. I. Cuza" din Iasi; Facultatea de Fizica, Universitatea Al. I. Cuza" din Iasi; Facultatea de Inginerie Chimica si Protectia Mediului, Facultatea de Constructii de Masini si Management Industrial, Universitatea Tehnica "Gh. Asachi" Iasi; Universitatea de Medicina si Farmacie Iasi; Institutul de Cercetari Biologice din Iasi; Ege University, Izmir, Turcia; Wroclaw University of Technology, Polonia; Center of Materials Technology and Photonics, Hellenic Mediterranean University, Heraklion, Crete, Greece; University of Tsukuba, Nagoya University, Japonia; Luleå University of Technology, Sweden; Edinburgh Napier University, UK; Budapest University of Economics and Technology, Ungaria; Universidad de Alcalá, Spania; HNE Ebeswalde, Germania.

Activitati de formare a tinerilor cercetatori: doctoranzi, post-doctoranzi

In cadrul Subprogramului vor fi sustinute in curand 3 teze de abilitare. De asemenea, se vor finaliza si tezele de doctorat ale tinerilor cercetatori coordonati in colaborare cu alte Subprograme. In vederea dezvoltarii abilitatilor si a extinderii cunostintelor in aria temei de cercetare vizate, tinerii cercetatori vor putea participa la seminarii, cursuri sau stagii de formare la alte universitati/institute de cercetare, in limita disponibilitatii acestora in mediul online sau in limita posibilitatilor financiare asigurate de proiectele de cercetare.

Proiecte componente

Denumire/director proiect	Descriere succinta
Proiect 8.1 Interactiuni fizico-chimice in sisteme fotosensibile <i>Dr. A. Airinei, CS I</i>	Studiul interactiunilor fizico-chimice sub actiunea radiatiilor optice mediate de sisteme fotosensibile generatoare de specii excitate fotoactive sau cu reactivitate ridicata, cu aplicatii in protectia mediului sau modularea de semnal pentru detectie spectrometrica.
Proiect 8.2 Interactiuni si proprietati in sisteme polimerice complexe <i>Dr. M. Brebu, CS II</i>	Reglarea interactiunilor la interfaza/interfata pentru stabilizarea sistemelor polimerice multicomponente si pentru fixarea/imobilizarea compusilor cu functii specifice in matrici polimerice. Evaluarea modificarilor induse in materiale polimere sub actiunea factorilor externi.
Proiect 8.3 Materiale polimere. Corelatii structura/morfologie/proprietati optice si electrice <i>Dr. A. I. Barzic, CS III</i>	Obtinerea si analiza proprietatilor optice, electrice si de suprafata (adeziune, morfologie, chimia suprafetei) ale unor materiale polimerice multicomponente cu performanta imbunatatita, care pot fi utilizate in realizarea de straturi pentru afisaje de tip LCD (liquid crystal display) sau OLED (organic light emitting diode).

Proiect 8.4 Bio(nano)compozite. Compatibilitate, studii cinetice si de degradare <i>Dr. M.-C. Popescu, CS II</i>	Studii cinetice si termodinamice asupra proprietatilor fizico-chimice ale unor materiale complexe bio(nano)compozite si intelegerea proceselor care au loc la nivel molecular ca urmare a modificarii unor factori fizico-chimici (temperatura, pH, radiatii ionizante, concentratie, degradare, grad de reticulare) si a actiunii agentilor biotici si de mediu.
---	---

PROIECT 8.1. Interactiuni fizico-chimice in sisteme fotosensibile

Director proiect, dr. Anton AIRINEI, CS I

Nr. crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	<i>Dr. Anton AIRINEI</i>	<i>Director proiect 8.1</i>	<i>CS I</i>	<i>1</i>
2.	Dr. Mihaela AVADANEI	Membru proiect 8.1	CS III	1
3.	Dr. Mihaela HOMOCIANU	Membru proiect 8.1	CS III	1
4.	Dr. Petronela PASCARIU	Membru proiect 8.1	CS III	1
5.	Dr. Nicusor FIFERE	Membru proiect 8.1	CS	1
6.	Dr. Radu Ionut TIGOIANU	Membru proiect 8.1	AC	1
7.	Dr. Carmen GHERASIM	Membru proiect 8.1	AC	1
8.	Dr. Dragos Lucian ISAC	Membru proiect 8.1	AC	1
9.	Dorel URSU	Membru proiect 8.1	A1	1
10.	Roxana IRIMIA	Membru proiect 8.1	A1	1
11.	Daniela ACATINCAI	Membru proiect 8.1	A1	1

Total norme AC-CSI: CS I: 1; CS III: 3; CS: 1; AC: 3 = **8**

Alte categorii: A1: 3 = **3**

Scopul proiectului

Studiul interactiunilor fizico-chimice sub actiunea radiatiilor optice mediate de sisteme fotosensibile generatoare de specii excitate fotoactive sau cu reactivitate ridicata, cu aplicatii in protectia mediului sau modularea de semnal pentru detectie spectrometrica.

Obiectivele generale

Evaluarea proprietatilor optice de absorbtie ale materialelor fotosensibile prin studiul tranzitiilor electronice in solutie sau in stare solida. Determinarea pragului de absorbtie si a tipului de tranzitie electronica din masuratori de transmitanta, absorbanta sau reflexie difuza utilizand modele de calcul specific sau prelucrarea matematica a spectrelor.

Studiul proprietatilor de emisie in materiale fotoactive prin evaluarea formei si intensitatii spectrului de emisie in functie de lungimea de unda de excitare, a randamentului cuantic si a timpului de viata a speciilor excitate. Optimizarea metodelor de sinteza si preparare a compusilor fotoactivi in vederea imbunatatirii caracteristicilor de emisie in functie de domeniul de aplicare.

Studiul interactiunilor fotofizice pentru aplicarea materialelor fotosensibile ca senzori pentru identificarea diversilor analiti cu interactiuni avand ca efect stingerea/amplificarea fluorescentei.

Studiul proceselor fotochimice in sisteme fotoactive studiate cu generarea de specii reactive sau cu rol in inhibarea acestora. Obtinerea de catalizatori fotosensibili constand in semiconductori anorganici de dimensiune nanometrica si inglobarea lor in matrici polimere;

Descrierea structurii electronice a unor sisteme moleculare in stare fundamentala si excitata prin studii teoretice si corelarea rezultatelor obtinute cu diferite proprietati fizico-chimice a sistemelor analizate.

Obiective specifice

- Studiul unor materiale cu absorbtie in domeniul ultraviolet-vizibil in diverse medii. Corelatii structura-factori de mediu in vederea stabilirii domeniului de aplicare - fotocatalizator sau senzor;
- Ingineria benzii interzise prin crearea de stari permise in interiorul ei atat prin dopare cat si prin controlul morfologiei materialului ca alternativa la modificarea largimii benzii interzise;
- Evaluarea mecanismelor de tranzitie electronica care duc la modificarea randamentului cuantic si a intensitatii de emisie in functie de compozitia sistemului si a mediului de emisie, atat prin optimizarea caracteristicilor absorptive, cat si prin controlul cineticii de dezexcitare neradiativa in functie de mediul studiat: solvent - cu polaritate diferita sau alte tipuri de interactiuni; stare solida - in functie de matricea in care se afla cromoforul/fluoroforul sau modul de dopare in cazul nanoparticulelor semiconductoare oxidice, aici incluzandu-se si dispersiile in medii lichide;
- Analiza mecanismelor fotofizice care duc la scaderea intensitatii emisiei si a cresterii timpului de viata al starilor excitate, mai ales in materiale semiconductoare anorganice cu rol de catalizator. Optimizarea metodelor de obtinere si a compozitiei pentru crearea de stari electronice izolate in banda interzisa cu rol in captarea si stabilizarea electronilor excitati pentru imbunatatirea proceselor de transfer electronic la nivel superficial cu moleculele adsorbite;
- Analiza interactiunilor de stingere a emisiei in corelatie cu valorile obtinute pentru randamentul cuantic si durata de viata in conditii statice sau dinamice ale procesului de transfer de energie la rezonanta, pentru evaluarea sensibilitatii si selectivitatii sistemului fotosensibil investigat;
- Optimizarea caracteristicilor senzorilor de fluorescanta prin identificarea mecanismelor de stingere utilizand modele cinetice de interactiune fotofizica pentru a calcula parametrii cinetici prin aplicarea ecuatiilor specifice fiecarui sistem analizat
- Analiza efectului matricii polimere in care este inglobat catalizatorul semiconductor asupra eficientei fotocatalizei prin gradul de absorbtie a solventului, afinitatea fata de colorant, dar si stabilitatea la diferite valori de pH;
- Elucidarea caracteristicilor tranzitiilor electronice specifice formarii de specii reactive la suprafata nanocatalizatorului prin corelarea datelor structurale si morfologice cu cele de spectroscopie de absorbtie si emisie;
- Analiza proceselor de fotodegradare a colorantilor sau a altor compusi de interes prin modificarea parametrilor de reactie (concentratie, mediu). Studiul modelelor cinetice prin evaluarea ecuatiilor matematice care au in vedere parametrii cinetici si fotocinetici, dar si caracteristicile speciilor chimice in stare fundamentala si excitata, pentru cresterea gradului de predictibilitate si control al activitatii fotochimice;
- Compozite polimerice fluorescente care contin complecsi metalici cu lantanide si liganzi de tip baza Schiff

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Echipa proiectului este formata din: 1 CS I, 3 CS III, 1 CS, 3 AC si 3 asistenti A1. Membrii echipei au publicat in ultimii sase ani peste 80 lucrari stiintifice in reviste cu factor de impact ridicat, dovedind astfel ca poseda experienta si pregatirea necesara abordarii tematicii proiectului. De altfel, in cadrul

proiectului isi desfasoara activitatea chimisti si fizicieni specializati in obtinerea de materiale nanostructurate pe baza de semiconductori anorganici si studierea caracteristicilor spectrale de absorbtie sau emisie ale acestora. Abordarea obiectivelor proiectului se bazeaza pe asocierea diferitelor expertize ale membrilor echipei (chimie-fizica, spectroscopie moleculara, fotochimie, stiinta nanomaterialelor) pentru investigarea si intelegerea proceselor induse radiativ si a interactiunilor specifice. Activitatea sustinuta a echipei in cadrul proiectului va duce la imbunatatirea recunoasterii internationale a grupului, contribuind la dezvoltarea literaturii de specialitate in domeniu.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea proiectului

Resursele necesare realizarii obiectivelor proiectului exista in cadrul colectivului: spectrometru de absorbtie in UV/viz SPECORD 210 PLUS, spectrometru de luminescenta LS55 Perkin Elmer, spectrometru pentru masurarea absorbtiei in timp real LP980, spectrometru de fotoluminescenta FLS980, etc. Se are in vedere folosirea cat mai eficienta a unor resurse disponibile din alte proiecte de cercetare deja incheiate sau in curs de desfasurare, dar si prin colaborarea cu colegii din alte subprograme pentru rezolvarea problemelor specifice care vor aparea si mentinerea in parametri corespunzatori a resurselor existente in institut (echipamente), relevante pentru desfasurarea proiectului.

Colaborarea cu alte subprograme/proiecte din institut

Se are in vedere colaborarea cu colegi din subprogramul S6, subprogramul S5, subprogramul S9, subprogramul S1, subprogramul S4 pentru rezolvarea in comun a unor aspecte aparute pe parcursul investigatiilor sau pentru utilizarea de aparatura de care nu dispune colectivul proiectului.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Se vor continua colaborarile deja aflate in desfasurare cu INCD pentru Microtehnologie (IMT) Bucuresti; INCD pentru Textile si Pielarie, Institutul de Cercetare Pielarie-Incaltaminte, Bucuresti; Facultatea de Inginerie Electrica si Stiinta Calculatoarelor, Universitatea Stefan cel Mare din Suceava; Facultatea de Chimie, Universitatea Al. I. Cuza" din Iasi; Facultatea de Fizica, Universitatea Al. I. Cuza" din Iasi; Center of Materials Technology and Photonics, Hellenic Mediterranean University, Greece.

PROIECT 8.2. Interactiuni si proprietati in sisteme polimerice complexe

Director proiect, dr. Mihai BREBU, CS II

Nr. crt.	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	Dr. Mihai Adrian BREBU	Director proiect 8.2	CS II	1
2.	Dr. Raluca Nicoleta DARIE-NITA	Membru proiect 8.2	CS II	1
3.	Dr. Elena STOLERU	Membru proiect 8.2	CS	1
4.	Dr. Vasile Cristian GRIGORAS	Membru proiect 8.2	CS	1
5.	Dr. Daniela PAMFIL	Membru proiect 8.2	CS	1
6.	Dr. Raluca Petronela DUMITRIU	Membru proiect 8.2	AC	1
7.	Dr. Anamaria IRIMIA	Membru proiect 8.2	AC	1
8.	Dr. Elena BUTNARU	Membru proiect 8.2	AC	1
9.	Dr. Catalina Natalia CHEABURU YILMAZ	Membru proiect 8.2	AC	1

Total norme AC-CSI: CS II: 2; CS: 3; AC: 4 = 9

Scopul proiectului

Suprafata, interfata si interfaza sunt notiuni care fac referire la zonele de delimitare ale materialelor sau ale diferitelor componente din acestea. Daca suprafata se refera la stratul exterior prin care obiectele sunt percepute, aceasta este in acelasi timp si zona prin care, in general, obiectele interactioneaza.

Interfata este considerata ca fiind zona bidimensionala de demarcare intre doua zone de compozitie sau microstructura diferite din material, in care are loc o schimbare brusca a proprietatilor. In schimb, interfaza este zona tridimensionala in care interactiunile intre componente (in sisteme multicomponente) sau intre zone diferite din material (in materiale multifazice) duc la modificari graduale ale proprietatilor la trecerea de un component la altul sau de la o faza la alta. In zona de interfaza componentele diferite compozitional, structural sau morfologic interactioneaza prin legaturi primare sau, in special, secundare.

Interfaza in sisteme polimerice multicomponente sau multifazice consta in zone ale lanturilor macromoleculare ce sunt perturbate datorita interactiunilor ce cauzeaza gradientul de proprietati la trecerea intre faze. Complexitatea creste in sisteme multicomponente precum materialele compozite ce contin adaosuri (plastifianti, agenti de dispersare, surfactanti, umpluturi, etc.).

Proprietatile materialelor multifazice/multicomponente depind determinant de interactiunile la interfata/interfaza. Acest aspect are un impact mult mai mare atunci cand sistemele contin componente la nivel nanometric, pentru care proprietatile la interfata/interfaza domina proprietatile in masa. In acest context, studiile privind stabilirea corelatiilor intre fenomene si proprietati reprezinta un element cu impact esential in directionarea performantelor materialelor.

Scopul temei de cercetare 8.2 este structurat pe doua directii: *i)* reglarea interactiunilor la interfaza/interfata pentru stabilizarea sistemelor polimerice multicomponente si pentru fixarea/imobilizarea compusilor cu functii specifice in matrici polimerice; *ii)* evaluarea modificarilor induse in materiale polimere sub actiunea factorilor externi.

Noutatea consta in abordarea multidisciplinara a fenomenelor de la interfata/interfaza, atat prin selectia componentelor sistemelor polimerice complexe cat si prin utilizarea tehnicilor experimentale de modificare si control a interactiunilor dintre acestea.

Obiective generale

Obiectivul principal al temei de cercetare 8.2 este dezvoltarea si aprofundarea nivelului de cunoastere a fenomenelor la interfata/interfaza in sisteme polimerice multifazice / multicomponente solide si semi-solide si a proprietatilor locale si in volum generate de acestea. Obiectivul secundar este stabilirea de colaborari cu parteneri interni si externi pentru schimburi de experienta valoroase si crearea unor consortii viabile pentru propuneri de proiecte.

Obiective specifice

Obiectivele stiintifice specifice ale temei de cercetare considera atat aspectele fenomenologice cat si cele aplicative legate de interactiunile la interfata/intefaza in sisteme polimerice:

Evaluarea fenomenelor si proprietatilor generate la interfata/interfaza in sisteme polimerice multicomponente/multifazice

- *Corelatiile intre interactiunile ce apar la interfata/interfaza si proprietatile asociate vor fi studiate prin metode generale si specifice, dupa cum urmeaza: modificarile in tranzitiile termice – prin analiza termica: DSC si DMTA; tranzitia sol-gel (sisteme solide moi), comportarea viscoelastica*

(emulsii, sisteme coloidale, topituri, compatibilitate/miscibilitate in amestecuri), comportarea tixotropa (formulari pentru acoperiri) –prin *reologie*; umectabilitatea, energia libera de suprafata si componentele acesteia (polar/nepolar) – prin *goniometrie*; acumularea de sarcini electrice la interfata solid/lichid – prin *potentialul zeta*.

- *Stabilitatea sistemelor polimerice multifazice* va fi evaluata prin metode specifice precum *spectrometrie UV-VIS si FTIR, microscopie optica, difuzia dinamica a luminii (DLS), potential zeta, microscopie electronica prin transmisie (TEM), DSC*.

Manipularea interactiunilor la interfata/interfaza pentru inducerea de proprietati dorite

- *Functionalizarea suprafetelor si stabilizarea sistemelor polimerice multicomponente* va fi obtinuta prin tehnici conventionale, precum functionalizarea cu reactivi chimici sau biochimici, si prin metode energetice (uscate), precum tratamente cu radiatii. In mod particular, se va urmari imbunatatirea adeziunii la interfata pentru stabilizarea sistemelor polimerice solide multicomponente (ex. compozite).
- *Protectia si transportul substantelor active susceptibile la degradare sau cu solubilitate redusa* se va realiza prin imobilizare/incorporare in matrici polimerice multicomponente.
- *Stabilizarea emulsiilor prin influentarea interactiunilor intre faze* se va realiza controland tensiunea interfaciala dintre componente prin tehnologii conventionale (ex. agenti tensioactivi) si neconventionale (ex. vibratii mecanice la frecvente mari).

Modificarea interactiunilor in materiale polimerice sub actiunea factorilor externi

- *Stabilitatea si degradarea termica la temperaturi inalte* vor fi studiate prin tehnici precum TG-FTIR/MS si Py-GC-MS, ce ofera informatii despre cinetica/mecanismele de degradare termica si despre compozitia produsilor de degradare.
- *Tratarea si valorificarea termica* a materiilor polimerice (ex. deseuri) vor fi abordate prin piroliza si upgradare catalitica pentru conversia in produse solide, lichide si gaze utile. (POC F V) Compozitia amestecurilor complexe lichide va fi determinata prin GC-MSD/FID.
- *Degradarea sub influenta factorilor de mediu* va fi testata in prezenta factorilor abiotici (ex. radiatiile UV, temperatura, umiditatea) sau biotici (actiunea microorganismelor in medii naturale sau simulate – ex. respirometrie).
- *Efectul de protectie oferit de sistemele polimerice continand principii active asupra materialelor sensibile la factori de mediu* (ex. alimente) va fi evaluat prin spectrometrie UV-VIS, teste oxido-reducatoare, inhibare microbiana. Compozitia principiilor active din diverse amestecuri sau formulari polimerice va fi determinata prin GC-MSD/FID.

Studiile si evaluarile se vor efectua pe sisteme polimerice multicomponente solide/semisolidе precum amestecuri si compozite, geluri, emulsii, sisteme coloidale, materiale cu suprafete functionalizate. Se vor considera sisteme pe baza de polimeri naturali/polimeri sintetici sau sisteme hibride de polimeri naturali cu functii diferite continand micro/nano particule si fibre de tip organic/anorganic sau principii active. Materiale vegetale diverse vor fi utilizate ca surse de principii active. Se va considera de asemenea tratarea si valorificarea deeurilor din materiale si amestecuri de polimeri sintetici si/sau naturali.

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Resursa umana a temei de cercetare 8.2 consta in 8 cercetatori (2 CS II, 3 CS, 3 AC) cu specializari complementare (chimisti, biochimisti, bioingineri, fizicieni) ce au competente specifice in directii de cercetare si in tehnici experimentale sau de analiza precum: functionalizari de suprafata si in volum (tratare in plasma rece, iradiere cu radiatii gamma, tratament chimic sau enzimatic), materiale compozite multifunctionale (receptive la stimuli, antimicrobiene, antioxidante), fixari/imobilizari in

matrici polimerice, materiale biodegradabile; goniometrie (umectabilitate, energii libere de suprafata), migrarea principiilor active fixate in matrici polimerice (cinetici de eliberare), evaluarea biodegradarii, reologie, evaluarea proprietatilor mecanice, analiza termica (TG-FTIR/MS, DSC), cromatografie (GC-MSD/FID/TCD), tratare/valorificare materiale polimerice (piroliza/torefactie/upgradare catalitica).

Membrii echipei vor colabora pentru imbinarea competentelor in vederea dezvoltarii profesionale individuale si a grupului precum si pentru participarea la competitii de proiecte. De asemenea va fi puternic incurajata promovarea pe pozitii superioare (CSIII, CSII, CSI).

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea proiectului

Echipea de lucru dispune de spatii de cercetare si de echipamente/aparatura specifice necesare pentru realizarea activitatilor (A-C), dupa cum urmeaza: 1 laborator (186) pentru experimente de piroliza/upgradare catalitica, analiza GC-MSD/FID/TCD, bidistilator (C1, C2); 1 laborator (183) pentru experimente privind manipularea interactiunilor in sisteme multicomponente, teste de dizolutie (B1, B2, B3, A2), 1 laborator (182) pentru experimente generale, pregatiri de probe/usuari in vid, extractii, viscozimetri, electropulverizare, evaluari manometrice si chemometrice de permeabilitate la gaze, liofilizare (C3, C4); 1 camera (180) cu un birou pentru trei cercetatori si o incapere pentru reologie, microscopie optica si goniometrie (A1), o camera (184) pentru un cercetator, participari on-line la intalniri in cadrul proiectelor si simpozioanelor, microscopie inversa de fluorescenta (A2), o camera (185) pentru patru cercetatori si viitori doctoranzi.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Grupul colaboreaza cu cercetatori din alte subprograme cu interese stiintifice complementare si pentru efectuarea de analize/teste pe aparatura ce nu este disponibila in laborator.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Membrii echipei de cercetare au colaborari cu Universitatile din Iasi (UAIC, UMF, UTI), Institutul de Cercetari Biologice Iasi, Universitatea Politehnica Bucuresti, USAMV Bucuresti, precum si centre academice din strainatate precum Okayama University (Japonia), Wroclaw University of Technology (Polonia), University of Maribor (Slovenia), Ege University (Izmir, Turcia).

PROIECT 8.3. Materiale polimere. Corelatii structura/morfologie/proprietati optice si electrice

Director proiect, dr. Andreea Irina BARZIC, CS III

Nr. crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	Dr. Andreea Irina BARZIC	Director proiect 8.3	CS III ²	1
2.	Dr. Raluca Marinica ALBU	Membru proiect 8.3	CS	1
3.	Dr. Iuliana STOICA	Membru proiect 8.3	CS	1
4.	Dr. Luminita Ioana BURUIANA	Membru proiect 8.3	AC	1
5.	Dr. Simona NICA	Membru proiect 8.3	AC	1
6.	Dr. Marius SOROCEANU	Membru proiect 8.3	AC	0.4

Total norme AC-CSI: CSIII: 1; CS: 2; AC: 2,4 = 5,4

Scopul proiectului

Interactiunea radiatiilor electromagnetice cu materialele polimere reprezinta un subiect de actualitate in domeniul fizicii solidelor, fotofizicii si stiintei materialelor. Viteza si directia de propagare, precum si starea de polarizare a radiatiilor, sunt afectate de proprietatile fizice ale mediului pe care il parcurg (indice de refractie, permitivitate, permeabilitate, absorbtivitate, conductivitate, grad de anizotropie). Toate aceste proprietati sunt esentiale pentru realizarea de componente pentru dispozitive emitatoare de radiatii optice si infrarosii. Scopul proiectului consta in obtinerea si analiza proprietatilor optice, electrice si de suprafata (adeziune, morfologie, chimia suprafetei) ale unor materiale polimerice multicomponente cu performanta imbunatatita, care pot fi utilizate in realizarea de straturi pentru afisaje de tip LCD (liquid crystal display) sau OLED (organic light emitting diode).

Investigatiile propuse vor aduce la urmatoarele elemente de noutate, care pot avansa stadiul actual al cunoasterii, prin: (1) obtinerea de materiale multicomponente printr-o noua asociere de materiale (polimeri, micro/nano-particule) care permit controlul indicelui de refractie si a transparentei, si care implicit pot reduce pierderile optice, (2) elaborarea unor tehnici originale de texturare a suprafetei materialelor polimere in scopul maririi adeziunii la interfata si realizarii unui management adecvat al luminii in dispozitivele LCD sau OLED, (3) studiul unor noi aspecte fizico-chimice derivate din (a) dispersia luminii in materiale polimere multicomponente in diverse conditii si (b) orientarea agentului de ranforsare (ex. nanotuburi de carbon) in prezenta altor nanoparticule introduse in matricea polimerica sau functie de anizotropia indusa, avand impact pozitiv asupra conductivitatii electrice/termice.

Toate aceste aspecte nu sunt solutionate in literatura de specialitate, insa investigarea lor deschide noi perspective in realizarea de componente cu proprietati optice, de suprafata si/sau electrice, care conduc la dispozitive emitatoare de radiatii optice cu performanta si fiabilitate imbunatatite in termeni de propagare a semnalelor optice si a adeziunii elementelor constituate.

Obiective generale

Prepararea si caracterizarea unor materiale polimerice multicomponente care reduc pierderile optice prin intermediul indicelui de refractie si a texturii generate pe suprafata

Obtinerea si investigarea unor materiale polimerice multicomponente cu conductivitate adecvata realizarii de electrozi flexibili cu transparenta variabila

Elaborarea de noi tehnici de texturare a suprafetei prin aplicarea de forte mecanice si/sau radiatii electromagnetice, evidentiindu-se modificarile fizico-chimice produse de adaptarea suprafetei

Investigarea unor noi aspecte fizico-chimice privind (a) dispersia luminii in materiale polimere multicomponente in functie de gradul de ranforsare, temperatura sau solvent, si (b) conductivitatea electrica/termica in polimeri ranforsati avand anizotropie variabila generata prin deformari mecanice si/sau expunere in campuri electromagnetice.

Obiective specifice

- Prepararea de materiale multicomponente pornind de la matrici polimerice transparente ranforsate cu polimeri cu polarizabilitate mare, micro/nano-particule, sau cristale lichide polimerice
- Analizarea reologica prin care se monitorizeaza interactiunile agentului de ranforsare cu matricea polimerica, dar si corelarea proprietatilor de curgere cu metodele de procesare sub forma de straturi cu grosime uniforma
- Formularea si testarea unor noi tehnici de texturare a suprafetei prin (a) frecare uni/multi-

- directionala cu materiale de duritate diferita, urmata de intindere mecanica, (b) amestecare cu polimeri in faza liotropa forfecati si supusi ulterior la diferite grade de intindere pe directii diferite, (c) intindere mecanica uni/multi-directionala, urmata de expunere laser. Pentru imbunatatirea adeziunii interfaciale, probele modificate prin metodele propuse pot fi sau nu tratate in plasma
- Investigarea transparentei si refractiei in materialele polimerice preparate, in functie de frecventa radiatiei electromagnetice incidente, temperatura, solvent, compozitia sistemului
 - Evaluarea pierderilor optice determinate de absorbtie si reflexie la interfata probelor cu elementele din dispozitivul LCD sau OLED
 - Examinarea efectelor induse de texturarea creata asupra pierderilor optice si respectiv asupra adeziunii probelor cu materialele adiacente din dispozitivul LCD sau OLED
 - Studiul conductivitatii electrice in functie de orientarea agentului de ranforsare (ex. nanotuburi de carbon) in conditiile inserarii altor nanoparticule in polimer sau in functie de anizotropia indusa sistemului. Proprietatile de conductivitate a suprafetei la nivel macroscopic vor fi corelate cu studii de microscopie de forta electrica, care vor indica distributia sarcinilor pe suprafata probei la scala nanometrica
 - Determinarea conductivitatii termice in materiale polimere multicomponente cu compozitie variabila si diferite grade de anizotropie
 - Analiza adeziunii materialelor polimerice conductoare cu diferite materiale in functie de procentul de ranforsare si evaluarea proprietatilor mecanice ale probelor cu rol de electrod flexibil.

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Resursa umana care sta la baza echipei este formata din fizicieni si un bioinginer cu experienta in caracterizarea reologica, optica, electrica, spectrala, morfologica, structurala, modelare moleculara, dar si in tehnici de modificare a suprafetelor polimerice prin metode mecanice, plasma sau metalizare.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Resursele necesare pentru desfasurarea proiectului sunt asigurate prin resursa materiala existenta (a) in laborator: compusi chimici, refractometru, conductometru, microscop optic, reometru, instalatie de plasma, si (b) in institut: spectrometru UV-VIS, AFM, SEM, spectrometru dielectric, dispozitiv laser, aparat de metalizare.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Se va colabora cu: Laboratorul 8 - Proiectul 8.1 pentru masuratori UV-VIS; Laboratorul 7 pentru investigatii dielectrice; Laboratorul 6 pentru ultrasonarea agentilor de ranforsare, testari mecanice si metalizarea suprafetelor; Laboratorul 9 pentru analize FTIR, AFM, SEM si XRD.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Se va colabora cu *Grupul de cercetare a sistemelor complexe, autoorganizare, spectroscopie si laseri* din cadrul Facultatii de Fizica - Universitatea "Al. I. Cuza" din Iasi si *Departamentul de Fizica*, Facultatea de Constructii de Masini si Management Industrial - Universitatea Tehnica "Gh. Asachi" din Iasi

PROIECT 8.4. Bio(nano)compozite. Compatibilitate, studii cinetice si de degradare

Director proiect, dr. Maria-Cristina POPESCU, CS II

Nr. crt	Nume si prenume	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1	Dr. Cristina Maria POPESCU	Director proiect 8.4	CS II	1
2	Dr. Daniel Timpu	Membru proiect 8.4	CS II	1
3	Dr. Carmen Mihaela POPESCU	Membru proiect 8.4	CS II	1
4	Dr. Doina BEJENARU	Membru proiect 8.4	CS II	1
5	Dr. Daniela FILIP	Membru proiect 8.4	CS II	1
6	Drd. Bianca Ioana DOGARU	Membru proiect 8.4	AC	1

Total norme AC-CSI: CS II: 5; AC: 1 = 6

Scopul proiectului

Este stiut ca proprietatile materialelor polimere sunt influentate de structura moleculara si supramoleculara si mobilitatea moleculara; cunoasterea acestora permitand designul si modificarea controlata. Mai mult, proprietatile fizico-chimice ale materialelor polimere dicteaza domeniile de aplicabilitate, stabilitatea, durabilitatea si degradabilitatea acestora si elaborarea solutiilor pentru minimizarea impactului noilor materiale asupra mediului ambiant.

Scopul acestui proiect este: (i) **obtinerea de informatii stiintifice noi** ce au la baza **studiile cinetice si termodinamice** asupra **proprietatilor fizico-chimice** (*interactiuni inter- si intramoleculare, compatibilitate intre componentii materialelor sau intre materiale si substrat, stabilitate pe termen scurt si lung, adeziune, tranzitii de faza, sorbtia de vapori*) ale unor materiale multicomponente nou sintetizate si (ii) **intelegerea proceselor** care au loc in aceste materiale **la nivel molecular** ca urmare a modificarii unor factori fizico-chimici (*temperatura, pH, radiatii ionizante, concentratie, grad de reticulare*) si a actiunii agentilor biotici si de mediu. De asemenea, combinarea **metodelor experimentale** (*spectroscopice, sorbtie, etc*) cu **metode matematice avansate** (*PCA, HCA, PLS, 2D-COS*) va permite elucidarea unor aspecte imposibil de determinat prin metode conventionale. Pentru atingerea scopului propus se vor folosi materiale multicomponente cum ar fi amestecuri si hidrogeluri pe baza de biopolimeri si nano filler cu aplicatii in agricultura; materiale polimere naturale/sintetice ce includ solventi eutectici si extracte vegetale cu aplicatii in domeniul medical; si materiale nanostructurate, cu proprietati specifice, (super)hidrofobe, antimicrobiene cu aplicatii in industria de prelucrare a lemului si a derivatilor din lemn.

Obiective generale

Obiectivul principalul este acela de a identifica solutii tehnice si stiintifice pentru evaluarea proprietatilor fizico chimice (*interactiuni inter- si intramoleculare, compatibilitate intre componentii materialelor sau intre materiale si substrat, stabilitate pe termen scurt si lung, adeziune, tranzitii de faza, sorbtia de vapori*) ale unor noi sisteme multicomponente prietenoase mediului si identificarea oportunitatilor si obstacolelor pentru aplicabilitatea in arii tematice specifice: agricultura, industria de prelucrare a lemului si a derivatilor din lemn, medicina.

Astfel se vor urmari: (1) *obtinerea si evaluarea proprietatilor fizico-chimice* ale unor noi formulari prietenoase mediului folosind biopolimeri (k-caragenan, chitosan, carboximetil celuloza, gelatina,

colagen, caseina, etc) solubili in apa si *nano filler* (CNC, argile, NPAg, etc) cu aplicatii in agricultura; (2) *obtinerea si evaluarea unor materiale polimere naturale si sintetice* ce includ *solventi eutectici* cu aplicatii in domeniul medical; (3) folosind combinarea principiilor nanotehnologiei cu o abordare inovatoare se vor *sintetiza* (prin polimerizarea in *emulsie Pickering* si *proces sol-gel*) si *evalua noi materiale nanostructurate*, cu proprietati specifice, (*super*)*hidrofobe, antimicrobiene, cu compatibilitate si rezistenta ridicate* in mediu pentru acoperiri material organic (lemn, hartie, textile).

Obiective specifice

- Obtinerea si evaluarea structurala, morfologica si a proprietatilor fizico-chimice ale unor noi sisteme multicomponente bio(nano)compozite prietenoase mediului pe baza de biopolimeri
- Studii termodinamice si cinetice privind evaluarea interactiunilor si compatibilitatii intre componentii sistemelor, a tranzitiilor de faza, a influentei gradului de reticulare si a naturii componentilor
- Evaluarea proprietatilor de sorbtie a vaporilor de apa si identificarea interactiunilor dintre matrice si moleculele de apa si cinetica de sorbtie
- Evaluarea compatibilitatii, stabilitatii si a durabilitatii pe termen scurt si lung dintre sistemul multicomponent si substrat (lemn, hartie, textile, seminte de plante)
- Studiul cinetic al eliberarii controlate a compusilor bioactivi din formulari multicomponente continand agenti bioactivi
- Evaluarea activitatii antimicrobiene si a interactiunii cu mediile biologice ale unor hidrogeluri bioactive si ale unor polimeri naturali si sintetici ce includ solventi eutectici si/sau extracte vegetale
- Evaluarea cinetica a proceselor si mecanismelor de degradare sub influenta diferitilor factori de mediu si biotici

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Echipei proiectului este formata atat din cercetatori (fizicieni si chimisti) cu experienta, cat si din tineri doctoranzi, masteranzi sau studenti. Dr. *Maria-Cristina Popescu* (directorul de proiect), Dr. *Carmen-Mihaela Popescu* si Drd. *Bianca-Ioana Dogaru* au experienta in caracterizarea structurala si morfologica a unor sisteme polimere multicomponente prin metode spectroscopice, microscopice, termice; evaluarea interactiunilor prin legaturi covalente si legaturi fizice si a tranzitiilor de faza; evaluarea compatibilitatii substrat de acoperire/suport; evaluarea proprietatilor de sorbtie a vaporilor de apa si identificarea interactiunilor dintre matricea polimera si moleculele de apa si cinetica de sorbtie; evaluarea cinetica a proceselor si mecanismelor de degradare sub influenta factorilor de mediu si biotici; stabilitatea in apa; evaluarea proceselor de reticulare utilizand reticulanti chimici. Am contribuit la dezvoltarea tehnicii 2D-COS, prin aplicarea acesteia la diferite materiale (amestecuri polimer/cristal lichid, dendrimeri, polimeri naturali, sau sisteme polimer sintetic/biopolimer) pentru elucidarea interactiunilor intermoleculare, cristalizarea/topirea, tranzitiilor de faza, sau ordinea in care se modifica structura materialelor ca rezultat al actiunii factorilor degradativi. Suntem singurele care a utilizat si dezvoltat aceasta tehnica in tara noastra. Dr. *Carmen-Mihaela Popescu* si Drd. *Bianca-Ioana Dogaru* au experienta si in sinteza unor formulari (*super*)*hidrofobe* prin *emulsie Pickering* si *proces sol-gel* pentru acoperiri lemn si hartie, obtinere si modificare de cristale de nanoceluloza prin sinteza verde, obtinere de formulari bio(nano)compozite. *In cadrul acestui proiect ele vor fi responsabile cu obtinerea unor formulari bio(nano)compozite cu utilizare in tratatea semintelor sau a solului in agricultura si a unor formulari (super)hidrofobe pentru acoperire lemn si hartie si cu caracterizarea acestora utilizand tehnici de analiza precum spectroscopie FTIR, NIR, UV-Vis, SEM, 2D-COS, sorbtie de vapori de apa, TG.*

Dr. *Doina Bejenaru* si Dr. *Daniela Filip* au experienta in sinteza de poliuretani si a altor sisteme polimere multicomponente cu arhitecturi si aplicatii in domeniul biomedical. *In cadrul proiectului vor fi responsabile cu sinteza unor noi materiale prietenoase mediului folosind solventi eutectici, implementare de extracte vegetale in materiale polimere si obtinerea de hidrogeluri bioadezive pentru cavitatea bucala.*

Dr. *Daniel Timpu* are experienta in caracterizarea morfologica de suprafata si de volum prin AFM si XRD. *In cadrul proiectului se va ocupa de caracterizarea materialelor prin aceste doua tehnici.*

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Pentru realizarea obiectivelor proiectului grupul dispune de un spectrometru NIR portabil, un spectrometru in domeniul IR mediu, echipat cu 3 module (modul ATR, modul transmisie si modul reflexie difuza), un spectrometru UV-Vis echipat cu sistem in transmisie si cu sistem cu fibra optica pentru monitorizarea reactiilor *in situ*, centrifuga, baie de ultrasunete, autoclava, etuva, 2 dispozitive Ultra-turax, plite magnetice, balanta analitica, pH-metru, sticlaria de laborator. De asemenea, grupul dispune de programe de calcul (Origin, Matlab) cu licenta. Materialele necesare vor fi achizitionate din proiectul aflat in derulare, precum si din alte proiecte viitoare (2 proiecte in curs de evaluare).

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Pentru realizarea obiectivelor proiectului se va colabora in special cu membrii din celelalte proiecte ale subprogramului 8 (pentru analize reologice, masurarea unghiului de contact, etc). Materialele evaluate in cadrul proiectului vor fi obtinute atat in cadrul grupului, cat si prin colaborare cu subprogramele 2 si 3.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Membrii proiectului au deja stabilite colaborari cu: Dr. *Dongyang Sun*, Edinburgh Napier Univ., UK; Dr. *Claudia Preininger* si *Ursula Sauer*, AIT, Austria; Dr. *Einav Kulbak*, Melodea Ltd, Israel; *Sems Yonsel*, Simbiyotek, Turcia; Prof. *Heinz Siesler*, Univ. Duisburg-Essen, Germania; Prof. *Antonella Dalla Cort*, Univ. La Sapienza, Italia; Prof. *Emilia Csiszár*, Budapest Univ. of Economics and Technology, Ungaria; Prof. *Gilles Sèbe*, Univ. of Bordeaux, Franta; Prof. *Zeki Candan*, Istanbul Univ., Turcia; Dr. *Åsa Östlund*, RISE, Suedia; Prof. *Jalel Labidi*, Univ. del Pais Vasco, Spania; Dr. *Eduard Fron*, si Prof. *Wim Thielemans*, KU Leuven, Belgia; Prof. *I. Noda*, Univ. of Delaware, USA; Prof. *Young-mee Jung*, Kangwon National Univ., Coreea de Sud; Prof. *Rafael Gómez* si Prof. *Francisco Javier De La Mata*, Univ. de Alcalá, Spania; Prof. *Parviz Navi*, BFH, Elvetia; Prof. *Eiichi Obataya*, Univ. of Tsukuba si Prof. *Miyuki Matsuo-Ueda*, Prof. *Tetsuya Inagaki*, Nagoya Univ., Japonia; Dr. *Magdalena Broda*, Polonia; Dr. *Dennis Jones* si Prof. *Dick Sandberg*, Luleå Univ. of Technology, Sweden; Prof. *Miha Humar*, Univ. of Ljubljana, Slovenia; Dr. *Erik Larnoy*, Dr. *Katrin Zimmer* si Dr. *Andreas Treu*, NIBIO, Norvegia; Prof. *Holger Miltz*, Georg August Univ., Germania; Prof. *Callum Hill* si Dr. *Graham Ormondroyd* Bangor Univ., UK; Dr. *Electra Papadopoulou*, CHIMAR Hellas S.A., Grecia; Prof. *Mark Hughes* si Prof. *Lauri Raurkari*, Aalto Univ., Finlanda; Dr. *Alexander Pfriem*, HNE Ebeswalde, Germania; Conf. *Emilia Salca*, Univ. Transilvania, Brasov; Dr. *Petronela Gradinariu*, Inst. de Biologie, Iasi; Prof. *Vasile Stoleru*, USAMV, Iasi; Dr. *Gladiola Tintaru*, Dr. *Carmen Gafitanu*, UMF, Iasi; Dr. *Laura Bulgariu*, Dr. *Gabriela Lisa* si Dr. *Maricel Danu*, UTI Iasi; precum si Dr. *Mirela Goanta*, UAIC Iasi. Dovada colaborarii este evidentiata prin lucrari publicate si propuneri de proiecte depuse in colaborare.

LABORATOR FIZICA POLIMERILOR SI A MATERIALELOR POLIMERE**SUBPROGRAM 9. CARACTERIZARE vs. SINTEZA. ABORDARE HOLISTICA IN STUDIUL MATERIALELOR POLIMERE****Director Subprogram 9, Acad. Bogdan C. SIMIONESCU, CS I****ECHIPA SUBPROGRAMULUI**

Nr. crt	Nume si prenume	Functia	Categorie profesionala	Norma
1	Acad. Bogdan C. SIMIONESCU	Director subprogram 9 Membru proiect 9.1	CS I	0,5
2	Dr. Mariana CRISTEA	Director proiect 9.1	CS II	1
3	Dr. Constantin GAINA	Membru proiect 9.1	CS II	0,3
4	Dr. Mihaela SILION	Membru proiect 9.1	CS III	1
5	Dr. Daniela IONITA	Membru proiect 9.1	CS	1
6	Dr. Cristian PEPTU	Membru proiect 9.1	CS	0,5
7	Dr. Valentina-Elena MUSTEATA	Membru proiect 9.1	AC	1
8	Dr. Vlad HURDUC	Membru proiect 9.1	Ing.	1
9	Dorina ANGHEL	Membru proiect 9.1	Ref.	1
10	Elena MARLICA	Membru proiect 9.1	Ref.	0,5
11	Iulian OCEANU	Membru proiect 9.1	A1	1
12	Dr. Magdalena AFLORI	Director proiect 9.2	CS II	1
13	Dr. Mihaela OLARU	Membru proiect 9.2	CS III	1
14	Dr. Gabriela HITRUC	Membru proiect 9.2	CS	1
15	Dr. Mioara DROBOTA	Membru proiect 9.2	CS	1
16	Dr. Cristian URSU	Membru proiect 9.2	CS	1
17	Dr. Bogdan-George RUSU	Membru proiect 9.2	CS	1
18	Andrei-Victor OANCEA	Membru proiect 9.2	AC	1
19	Drd. Daniela RUSU	Membru proiect 9.2	AC	1
20	Dr. Florica DOROFTEI	Membru proiect 9.2	Ing.	0,5
21	Dr. Maricel DANU	Membru proiect 9.2	Ing.	0,5

Total norme AC-CSI: CS I: 0,5; CS II: 2,3; CSIII: 2; CS: 5,5; AC: 3 = 13,3**Alte categorii: Ing.: 2; Ref.: 1,5; A1:1 = 4,5**

Premizele propunerii

Secolul XX a fost numit epoca polimerilor datorita folosirii pe scara larga a polimerilor pentru satisfacerea cerintei de materiale a societatii. Stiinta polimerilor a devenit o arie multidisciplinara. Traseul monomer – macromolecula – material/produs polimeric functional include numeroase discipline: chimie, cataliza, termodinamica, reologie, ingineria reactiilor macromoleculare, proiectarea si prelucrarea produsului final. Reusita crearii unui material sau a unui produs polimeric nou/cu proprietati vizibil ameliorate presupune o abordare integrata a circuitului sinteza – caracterizare – optimizare - sinteza.

Subprogramul 9 isi propune o noua abordare fata de directia pe care s-a orientat in Planul de cercetare ICMPP 2015-2020 (Relatii structura-proprietati la polimeri si materiale polimere). Daca in subprogramul 2015-2020 colaborarea cercetatorului analist cu cercetatorul responsabil de obtinere a polimerilor era o *colaborare de tip sincretic*, in prezent s-au creat conditiile in institut pentru o *colaborare de tip sintetic*. Pe de o parte, in institut exista posibilitatea accesului direct al sintezistului la instrumentele de caracterizare, datorita imbunatatirii fara precedent a infrastructurii institutului. Pe de alta parte, nivelul de intelegere (teorie si practica) a metodelor de investigare de catre cercetatori este net superior fata de perioada 2000-2015, existand necesitatea fluidizarii activitatilor de cercetare.

In acest sens grupurile de cercetare ale Subprogramului 9 s-au reorganizat cu scopul de a exploata la un alt nivel experienta in investigarea polimerilor prin colaborarea directa cu cercetatori cu experienta in sinteza.

Scopul Subprogramului 9 este extinderea ariei de cercetare in domeniul fizicii polimerilor prin studiul fenomenelor moleculare ale unor polimeri si materiale polimere mai putin investigate din acest punct de vedere datorita noutatii lor. De asemenea, se vizeaza stabilirea unei legaturi proprietati fizico-chimice/structura chimica si morfologica pentru materialele micro si nanostructurate functionale. Aceste materiale vor fi obtinute plecand de la structuri hibride anorganice-organice, de la polimeri functionalizati prin metode neconventionale sau prin tehnica de depunere prin ablatie laser pulsata (PLD) sub forma de filme semiconductoare.

Obiective generale

Abordarea unor noi teme de cercetare prin exploatarea expertizei deja existente in cadrul Subprogramului.

Dezvoltarea unor module de caracterizare noi, folosite in mod curent in institute de top in cercetarea polimerilor.

Stabilirea unui alt tip de colaborare cercetator sintezist-cercetator specializat in caracterizare.

Implicarea cercetatorilor in derularea experimentelor de baza pentru caracterizarea compusilor propria.

Obiective specifice

Obtinerea sistemelor destinate studiilor proceselor fizice

- Obtinerea de polimeri pe baza de PLA, polimeri de tip vitrimeri (functionalizati cu maleimide si furfuril)
- Prepararea unui nou material nanostructurat cu unitati silesquioxanice (POSS), metacrilat si fluor, sub forma unei acoperiri functionale active din punct de vedere chimic pentru protectia artefactelor de ceramica
- Dezvoltarea sistemelor bicomponente micro- si nanostructurate din polimeri (poliimide, PMMA)

functionalizati prin metode neconventionale (tratate in plasma, microunde, UV, laseri)

- Obținerea prin tehnica de depunere prin ablatie laser pulsata (PLD) de materiale fotocatalitice sub forma de filme semiconductoare nanostructurate de ZnO, poroase, de inalta performanta

Investigatii aprofundate ale fenomenelor fizice specifice sistemelor de polimeri si materialelor micro/nanostructurate de tip polimeric sau oxizi metalici

- Studiul fenomenelor de mobilitate moleculara in sistemele polimerice obtinute
- Studiul procesului de separare de faza si al formarii de structuri ierarhice in materialele de tip POSS
- Eficientizarea procesului de fotocataliza prin imbunatatirea proprietatilor intrinseci ale fotocatalizatorului, ameliorarea caracteristicilor de interfata cu mediul reactiv si monitorizarea mediului de crestere a filmului semiconductor (plasma produsa prin ablatie laser)
- Utilizarea DSC modulat (MDSC) si a HiRes TGA in separarea fenomenelor fizice succesive si suprapuse caracteristice polimerilor

Proiecte relevante realizate anterior

Membrii Subprogramului au propus proiecte de cercetare pentru finantare si au participat la proiecte de cercetare.

Mariana Cristea

- PN-II-Capacitati-183CPI-CENTER, *Centru de evaluare a performantelor termoreologice ale materialelor polimerice de la sinteza la produs final* (2008-2010), director de proiect
- EPNOE CSA NMP3-SA-2012-290496, Expanding EPNOE leadership towards food and health related materials and increasing industrial participation (2012-2015), responsabil tehnico-stiintific
- PN-III-P1.2-PCCDI-2017-0428, 40PCCDI/2018; *Nanotehnologii inovative pe baza de polimeri pentru obtinerea de noi materiale avansate* (NAPOLI 19); responsabil ICMPP PC5: Noi materiale durabile pe baza de polimeri regenerabili pentru imprimare 3D

Magdalena Aflori

- IDP_40_443, contract 86/8.09.2016, SMIS 105689, *Partnerships for knowledge transfer in the field of polymer materials used in biomedical engineering*, co-financed by European Regional Development Fund by the Competitiveness Operational Programme 2014-2020, Axis 1 Research, Technological Development and Innovation in support of economic competitiveness and business development, Action 1.2.3 Knowledge Transfer Partnerships, director de proiect
- ID POSDRU/89/1.5/S/55216 (2010-2013) Fondul Social European – Program de burse postdoctorale „Cristofor I. Simionescu”, membru in echipa de management, responsabil diseminare

Mihaela Olaru

- ID POSDRU/89/1.5/S/55216 (2010-2013) Fondul Social European – Program de burse postdoctorale „Cristofor I. Simionescu”, manager proiect

Eficienta confirmata in aplicarea rezultatelor obtinute in domeniul specific proiectului

Publicatii reprezentative:

- *Dynamic mechanical analysis investigations of PLA-based renewable materials: how are they useful* (review). M. Cristea, D. Ionita, M. M. Iftime; **Materials** 13 (2020)
- *Preparation and characterization of electrospun collagen based composites for biomedical applications*. M. Drobeta, L. M. Gradinaru, S. Vlad, A. Bargan, M. Butnaru, M. Angheloiu, M. Aflori; **Materials** 13, 3961 (2020)

- *Functional silesquionane-based hierarchical assemblies for antibacterial/antifungal coatings.* I.-E. Bordianu, G. David, B. Simionescu, M. Aflori, C. Ursu, A. Coroaba, G. Hitruc, C. Cotofana, M. Olaru; **J. Mat. Chem. B** 3, 723 (2015)
- *Sequential PLD in oxygen/argon gas mixture of Al-doped ZnO thin films with improved electrical and optical properties.* T. Coman, D. Timpu, V. Nica, C. Vitelaru, A. P. Rambu, G. Stoian, M. Olaru, C. Ursu; **Appl. Surf. Sci.** 418, 456 (2017)
- *Tailoring the hard domain cohesiveness in polyurethane by interplay between the functionality and the content of the chain extender.* D. Ionita, C. Gaina, M. Cristea, D. Banabic; **RSC Adv.** 5, 76852 (2015)
- *Cyclodextrins tethered with oligolactides – green synthesis and structural assessment.* C. Peptu, M. Balan-Porcarasu, A. Siskova, L. Skultety, J. Mosnacek; **Beilstein J. Org. Chem.** 13, 779 (2017)

Expertiza resursei umane implicate

Directorul Subprogramului 9, Acad. Bogdan C. Simionescu, are o expertiza de necontestat in chimia si fizica polimerilor, dar si experienta in coordonarea/managementul de institutii universitare si academice si in proiecte nationale si europene de mare anvergura.

Directorul proiectului 1, Dr. Mariana Cristea, are cunostinte de sinteza polimerilor, experienta in modificarea polimerilor si o intelegere avansata a proprietatilor termo-reologice ale polimerilor.

Directorul proiectului 2, Dr. Magdalena Aflori, este fizician specializat in caracterizarea morfologica a materialelor polimere si prepararea de noi materiale prin modificari de suprafata.

Ambii directori de proiecte au coordonat proiecte de cercetare (CENTER, POINGBIO).

Echipa Subprogramului include cercetatori cu experienta in sinteza si caracterizarea polimerilor: C. Gaina (sinteza si caracterizare structurala poliuretani), M. Sillion (spectrometrie de masa), C. Peptu (sinteza si caracterizare polimeri pe baza de lactide si ciclodextrine), D. Ionita (caracterizare termica si vascoelastica a polimerilor), M. Olaru (sinteza, caracterizare de materiale nanostructurate pe baza de POSS), M. Drobeta (functionalizarea suprafetelor polimere prin metode fizice si chimice), C. Ursu (caracterizarea plamei produsa prin ablatie laser & optimizarea proprietatilor filmelor depuse in PLD), G. Hitruc (caracterizarea suprafetelor polimere).

Infrastructura necesara pentru realizarea Subprogramului

Laboratorul Fizica Polimerilor si a Materialelor polimere are in dotare urmatoarele echipamente:

- *Calorimetru cu scanare diferentia, Discovery DSC 250, TA Instruments:* investigarea proprietatilor termice ale compusilor organici, polimerilor si materialelor polimere; determinarea temperaturii de tranzitie sticloasa, identificarea proceselor de topire/cristalizare
- *Analizor mecanic in regim dinamic, Diamond Perkin Elmer DMA*
- *Analizor mecanic in regim dinamic, RSA G2 DMA, TA Instruments.* Determinarea proprietatilor vascoelastice ale polimerilor (evaluarea relaxarilor polimerilor, estimarea energiilor de activare ale relaxarilor, monitorizarea variatiei parametrilor vascoelastici in functie de temperatur/frecventa, determinarea temperaturii de tranzitie sticloasa, estimarea proprietatilor vascoelastice ale polimerilor in timp)
- *Analizor termo-gravimetric, Discovery TGA 5500, TA Instruments:* evaluarea caracteristicilor de degradare ale compusilor organici si polimerilor
- *Laborator de laseri excimeri:* depunerea filmelor subtiri prin ablatie laser, sistem de litografie,

sistem pentru generarea de nanoparticule

- *KLA Tencor D500 contact profiler*: determinarea grosimii filmelor polimerice, caracterizarea topografiei depunerilor fine, evaluarea rugozitatii, texturii, uniformitatii suprafetelor
- *KSV Cam 200 goniometer*: determinarea unghiului de contact (static, dinamic), masurarea tensiunilor de suprafata si de interfata ale lichidelor
- *Quanta 200 SEM & Verious G4 UC SEM*
Investigari morfologice polimeri
- *Bruker Lumos FTIR spectrometer microscope*: investigatii spectrale (transmisie, reflexie, ATR) ale materialelor
- *Spectrometru Raman*

De asemenea, echipa subprogramului are acces la echipamentele aflate in custodia altor Subprograme.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Subprogramului

Subprogramul 9 detine resursa umana reprezentata atat de cercetatori chimisti, cat si de cercetatori fizicieni. Competentele sunt bine reprezentate calitativ in termeni de sinteza si caracterizare a polimerilor. Totusi, echipa este sub-dimensionata. Extinderea echipei cu noi cercetatori este o cerinta imperativa a Subprogramului 9.

De asemenea, laboratorul dispune de echipamentele adecvate pentru indeplinirea obiectivelor Subprogramului si consumabilele necesare perioadei imediat urmatoare. Cu toate acestea este nevoie de atragerea de fonduri suplimentare prin proiecte nationale/europene.

Colaborarea cu alte Subprograme din institut

Existenta unei infrastructuri importante a ICMPP in cadrul Subprogramului 9 faciliteaza existenta unei colaborari permanente cu toate Subprogramele S1-S9. Colaborari particulare sunt mentionate in descrierea fiecarui proiect. Responsabilii de echipamente vor asigura accesul si asistenta colegilor din institut pentru determinari specifice.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Exista colaborari in derulare care vor fi continuate cu Universitatea „Al. I. Cuza” Iasi - Facultatea de Fizica, Universitatea „Gh. Asachi” Iasi, ICECHIM Bucuresti, Universitatea Apollonia Iasi, Universitatea de Medicina si Farmacie Iasi, CMPW Zabrze, Academia de Stiinte a Poloniei, Institutul de Cercetare Tehnologica Fundamentala Varsovia, Academia de Stiinte a Poloniei.

Activitati de formare a tinerilor cercetatori: doctoranzi, post-doctoranzi

Tinerii cercetatori vor gasi un mediu de lucru profesionist si stimulant pentru ideile stiintifice in cadrul Subprogramului 9. Proiectul 9.1. propune o modalitate de familiarizare a tinerilor cercetatori cu tehnicile de caracterizare in care membrii echipei au experienta recunoscuta.

Proiecte componente

Denumire/director proiect	Descriere succinta
Proiect 9.1 Fenomene de mobilitate moleculara specifice polimerilor si materialelor polimerice <i>Dr. M. Cristea, CS II</i>	Sinteza si investigarea comportarii termoreologice a compusilor pe baza de poli(acid lactic): evidentiarea si separarea proceselor care se suprapun prin metode specifice (termogravimetrie de inalta rezolutie, calorimetrie diferentia la cu modularea temperaturii). Obtinerea si caracterizarea structurilor cu proprietati mixte termoplastic- termorigid - vitrimerii.
Proiect 9.2 Procese fizico-chimice caracteristice materialelor polimere structurate` <i>Dr. M. Aflori, CS II</i>	Obtinerea (prin sinteza chimica, procesare laser, abordarea mixta a celor doua metode, electrofilare, tratamente superficiale ale polimerilor cu plasma, UV, laseri, microunde, tratamente chimice si tratamente combinate), caracterizarea si testarea de noi materiale micro- si nanostructurate multifunctionale pentru aplicatii tintite.

PROIECT 9.1. Fenomene de mobilitate moleculara specifice polimerilor si materialelor polimere

Director proiect, dr. Mariana CRISTEA, CS II

Nr. crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1	<i>Acad. Bogdan C. SIMIONESCU</i>	<i>Director subprogram 9</i> Membru proiect 9.1	<i>CS II</i>	<i>1</i>
2	<i>Dr. Mariana CRISTEA</i>	<i>Director proiect 9.1</i>	CS I	0,5
3	Dr. Constantin GAINA	Membru proiect 9.1	CS II	0,3
4	Dr. Mihaela SILION	Membru proiect 9.1	CS III	1
5	Dr. Daniela IONITA	Membru proiect 9.1	CS	1
6	Dr. Cristian PEPTU	Membru proiect 9.1	CS	0,5
7	Dr. Valentina-Elena MUSTEATA	Membru proiect 9.1	AC	1
8	Dr. Vlad HURDUC	Membru proiect 9.1	Ing.	1
9	Dorina ANGHEL	Membru proiect 9.1	Ref.	1
10	Elena MARLICA	Membru proiect 9.1	Ref.	0,5
11	Iulian OCEANU	Membru proiect 9.1	A1	1

Total norme AC-CSI: CS I: 0,5; CS II: 1,3; CS III: 1; CS: 1,5 = **5,3**

Alte categorii: Ing.: 1; Ref.: 1,5; A1: 1 = **3,5**

Scopul proiectului

Definirea compusilor macromoleculari de catre H. Staudinger acum exact un secol a produs o adevarata revolutie in domeniul materialelor. **Materialele polimere** au inlocuit treptat materialele ceramice si metalele, in principal pentru ca erau usoare, se puteau prelucra in conditii mai putin severe, costurile erau mai mici si - se credea atunci -**erau durabile**. Este mai putin stiut ca definirea compusilor macromoleculari a determinat fundamentarea **reologiei** ca un nou domeniu in stiinte, in 1929. Din acest punct de vedere, s-a stabilit ceea ce astazi este consfintit: **polimerii sunt materiale**

vascoelastice - au atat proprietati de solid (componenta elastica), cat si proprietati de lichid (componenta vascoasa). Astfel, de la temperaturi joase spre temperaturi inalte, sau de la frecvente inalte (intervale de timp foarte mici) spre frecvente joase (durate foarte lungi) un polimer poate parcurge treptat regiunea sticloasa (morfologie „inghetata”, cu mobilitate cel mult locala), zona tranzitiei sticloase, regiunea platoului cauciucos si zona de curgere (lanturile de polimer aluneca unele fata de altele, datorita mobilitatii foarte mari). Din punctul de vedere al acestei comportari, polimerii pot fi termorigizi sau termoplastici.

Acestea fiind datele preliminare, ce s-a schimbat din acest punct de vedere in ultimul secol?

1. S-a stabilit ca **polimerii nu sunt atat de durabili**, tocmai din cauza proprietatilor viscoelastice. Prin urmare, o mare cantitate de materiale polimere devin deseuri care nu se degradeaza in mod natural si au invadat mediul, cu toate consecintele negative implicate. De aici deriva interesul pentru polimerii biodegradabili. Poli(acidul lactic) (PLA) a fost folosit pe scara larga de la inceputul anilor '90 (dupa ce a primit acceptul FDA -U.S. Food and Drug Administration). De atunci, studiile pe PLA si materiale pe baza de PLA au cunoscut o dezvoltare exponentiala. *Din punctul de vedere al comportarii viscoelastice PLA si polimerii pe baza de PLA prezinta o panoplie de fenomene (relaxare entalpica, tranzitie sticloasa, contractie, cristalizare, topire) pe masura ce temperatura variaza de la valori scazute spre valori ridicate, fenomene care se suprapun si se influenteaza reciproc [1].* Aceste fenomene devin mai complexe, dar si mai interesante cand PLA este parte a unei copolimer/retele.

Primul scop al proiectului este sinteza si investigarea comportarii viscoelastice si termice a compusilor pe baza de PLA. Intr-o prima etapa se au in vedere copolimeri cu poli(butilen adipat tereftalat) (PBAT) si hidrogeluri pe baza de ciclodextrina (CD), poli(etilen glicol) (PEG) si oligolactida (LA), reticulate prin intermediul unor legaturi uretanice. In ultimul deceniu a fost definita o noua clasa de polimeri ce combina **proprietatile polimerilor termorigizi cu cele ale polimerilor termoplastici: vitrimerii** [2,3].

2. Atunci cand nodurile unei retele sunt reprezentate de legaturi covalente reversibile, topologia polimerului sufera transformari prin desfaceri si reformari de legaturi sub actiunea unui stimul (de exemplu, temperatura, solvent). In plus fata de de temperatura de tranzitie sticloasa (T_g), vitrimerii sunt caracterizati de inca o temperatura caracteristica: temperatura la care topologia retelei nu se mai modifica datorita diminuarii la maximum a reactiilor de schimb (T_v).

Al doilea scop al proiectului este dezvoltarea de structuri polimerice cu topologie de vitrimeri reprezentate de structuri dinamice *via* legaturi iminice si legaturi furfural-maleimida, precum si evidentierea proceselor termice/fenomenelor viscoelastice. Studiile pe materiale pe baza de PLA sunt extrem de numeroase.

In institut sunt rezultate notabile in domeniu (publicatii raportate de Proiectul 5.3, Proiectul 6.1, Subprogramul 8), la fel si la nivel national (ICECHIM Bucuresti, Universitatea Transilvania Brasov, Universitatea „Gh. Asachi” din Iasi, Universitatea Politehnica Bucuresti), enumerarea fiind de departe neexhaustiva. Totusi, nu am gasit studii publicate de grupuri din Romania care sa separe si sa studieze mai in profunzime fenomenele specifice evidentiata de tehnici TGA si DSC avansate (HiRes TGA, MDSC – calorimetrie diferentiala cu modularea temperaturii). Trebuie mentionat ca studii de acest tip se folosesc in mod curent in grupuri cercetare internationale din domeniul polimerilor. Membri ai echipei proiectului au publicat un review in care sunt sintetizate aspectele specifice ale PLA si ale materialelor pe baza de PLA in investigatiile de analiza mecanica in regim dinamic (DMA) [4]. Rezultate preliminare ale utilizarii HiRes TGA in separarea etapelor de degradare in compozite pe baza de PLA-PBAT au fost comunicate la ICCE 2020 [5], iar un studiu complet (TGA, DSC, DMA) va fi prezentat in luna noiembrie

la Sesiunea de comunicari stiintifice MacroYouth '2020 [6]. C. Peptu a raportat sinteza de ciclodextrine modificate cu oligolactide [7].

Pe de alta parte, domeniul polimerilor dinamici este unul dintre cele mai in voga in prezent, atat din punct de vedere ale investigatiilor de natura fundamentala, cat si al aplicatiilor practice. Exista preocupari la Facultatea de Chimie si Inginerie Chimica, Universitatea Babes-Bolyai Cluj in aria chimiei organice supramoleculare si al chimiei combinatoriale dinamice (Ioan Grosu, Niculina Hadade - Premiul C. D. Nenitescu al AR, in anul 2015). Dar se remarca rezultatele investigatiilor pe materiale dinamice obtinute pe baza reversibilitatii legaturii imina in Proiectul 3.2 (L. Marin). In echipa propusa pentru realizarea proiectului exista rezultate DMA preliminare nepublicate obtinute in colaborare cu M. Barboiu (Franta) pe membrane dinamice bazate pe reversibilitatea legaturii imina, iar C. Gaina a publicat sinteze de retele poliuretanic termoreversibile cu proprietati de auto-aparare, obtinute pe baza reactiei Diels-Alder [8].

REFERINTE 1) *Special issue: Polylactide (PLA) based polymers*. Adv. Drug Deliver. Rev. 107 (2016) **2)** D. Montarnal, M. Capelot, F. Tournilhac, L. Leibler; *Silica-like malleable materials from permanent organic networks*. Science 334, 965 (2011) **3)** N. J. Van Zee, R. Nicolay; *Vitrimers: Permanently crosslinked polymers with dynamic network topology*. Prog. Polym. Sci. 104, 101233 (2020) **4)** M. Cristea, D. Ionita, M. M. Iftime; *Dynamic mechanical analysis investigations of PLA-based renewable materials: how are they useful*. Materials 13 (2020) **5)** D. Ionita, V. Hurduc, M. Cristea; *Aspects encountered in TGA analysis of polymers performed under different heating schedules*. 5th International Conference on Chemical Engineering (ICCE 2020), Iasi, October 28-30 (2020) **6)** D. Ionita, M. M. Iftime, D. Dimonie, M. Cristea; *Crystallization and thermo-mechanical behavior of poly(lactic acid): effect of additives*. Sesiunea de comunicari stiintifice a tinerilor cercetatori (MACROYOUTH'2020), ICMPP, Iasi, November 19 (2020) **7)** C. Peptu, M. Danchenko, L. Skultety, J. Mosnacek; *Structural architectural features of cyclodextrin oligoesters revealed by fragmentation mass spectrometry analysis*. Molecules 23, 2259 (2020) **8)** O. Ursache, C. Gaina, V. Gaina; *Polyurethanes based on thermoreversible networks designed by Diels-Alder reaction*. Express Polym. Lett. 11, 467 (2017)

Obiectivul general

Obiectivul general al proiectului este **stimularea excelentei stiintifice intr-un domeniu de actualitate al stiintei polimerilor: compusi macromoleculari care indeplinesc criteriile de dezvoltare durabila**. Proiectul se va concentra pe dezvoltarea de materiale pe baza de poli(acid lactic) si retele cu legaturi chimice dinamice de tip imina si furfural-maleimida. In plus, proiectul va fi directionat intr-o proportie considerabila spre dezvoltarea unui model experimental care sa ilustreze fenomenele dinamice, suprapuse si succesive, care au loc in acest tip de materiale cu modificarea temperaturii.

Obiectivele specifice

- Obtinerea si caracterizarea esentiala termo-reologica a unor hidrogeluri de tip CD-PEG-LA reticulate prin intermediul unor legaturi uretanice;
- Sinteza si caracterizarea structurala a componentilor initiali (monomeri/polimeri functionalizati cu maleimide si furfural) din care se realizeaza reseaua poliuretanic termoreversibila, urmata de investigatii termoreologice;
- Investigatii viscoelastice (E' , E'' , $\tan \delta$ vs. temperatura/frecventa, fluaj, relaxarea efortului) pe retele dinamice cu legaturi iminice si poliuretanic;
- Evidentiarea si separarea fenomenelor succesive si care se suprapun (relaxare entalpica, tranzitie sticloasa, cristalizare, topire) prin MDSC si a etapelor de degradare care se intrepatrund prin HiRes TGA;

- Verificarea aplicabilitatii principiului superpozitiei timp-temperatura pentru estimarea evolutiei in timp, la o temperatura de referinta, a PLA si materialelor pe baza de PLA.

Modul de utilizare a resursei umane, competente

Acest tip de proiect are nevoie imperativ de o echipa cu *competente confirmate pentru sinteza si caracterizare polimeri*: C. Gaina (OS2) are expertiza recunoscuta in sinteze de monomeri si polimeri cu structuri uretanice/heterociclice; C. Peptu (OS1) a dezvoltat sinteze de polimeri pe baza de lactida; M. Sillion (OS1, OS2) a lucrat pe caracterizarea prin spectrometrie de masa a unui spectru larg de polimeri; Daniela Ionita (OS3-OS5) detine cunostinte teoretice avansate de caracterizare termo-reologica a polimerilor; B. C. Simionescu (OS1-OS5) este specialist in fizica si chimia polimerilor; M. Cristea are capacitatea sa coordoneze echipa, avand experienta atat in modificarea polimerilor, cat si in caracterizarea lor structural-morfologica. In ultimii 15 ani si-a concentrat preocuparile pe investigatii termo-reologice ale materiale polimerice.

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Pentru anul 2021 resursele sunt partial asigurate de PN-III-P1.2-PCCDI-2017-0428 (PC5), dar fiecare membru al proiectului va fi interesat sa depuna propuneri de proiecte pentru obtinerea unei finantari nationale sau internationale.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institut

Echipea va beneficia de suportul Subprogramului S3 (L. Marin) pentru obtinerea de retele dinamice cu legaturi iminice. Exista colaborari in derulare cu Proiectul 9.3 (C. Ursu), Proiectul 6.1 (A. Bele) si Proiectul 8.2 (M. Brebu). Toate proiectele din institut pot beneficia de suportul echipei proiectului 9.1, tinand cont de competentele echipei.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

In prezent exista rezultate comune, in analiza si pregatire pentru publicare, cu Univ. „Al. I. Cuza” Iasi - Facultatea de Fizica (Conf. C. Borcia), Univ. „Gh. Asachi” Iasi – Facultatea de Constructii de Masini si Management Industrial (Prof. D. Nedelcu), ICECHIM Bucuresti (D. Dimonie), CMPW Zabrze, Academia de Stiinte a Poloniei (Prof. M. Kowalczuk, M. Musiol), Institutul de Cercetare Tehnologica Fundamentala Varsovia, Academia de Stiinte a Poloniei (Prof. E. Pieczyska).

PROIECT 9.2. Proprietati fizico-chimice caracteristice materialelor polimere structurate

Director proiect, dr. Magdalena AFLORI, CSII

Nr. crt	Prenume NUME	Responsabilitatea in cadrul proiectului	Grad stiintific	Norma
1.	Dr. Magdalena AFLORI	Director proiect 9.2	CS II	1
2.	Dr. Mihaela OLARU	Membru proiect 9.2	CSIII	1
3.	Dr. Gabriela HITRUC	Membru proiect 9.2	CS	1
4.	Dr. Mioara DROBOTA	Membru proiect 9.2	CS	1
5.	Dr. Cristian URSU	Membru proiect 9.2	CS	1

6.	Dr. Bogdan-George RUSU	Membru proiect 9.2	CS	1
7.	Andrei-Victor OANCEA	Membru proiect 9.2	AC	1
8.	Drd. Daniela RUSU	Membru proiect 9.2	AC, drd.	1
9.	Dr. Florica DOROFTEI	Membru proiect 9.2	Ing.	0,5
10.	Dr. Maricel DANU	Membru proiect 9.2	Ing.	0.5

Total norme AC-CSIII: CSII:1; CSIII: 1; CS: 4; AC: 2 = 8

Alte categorii: Ing =1

Scopul proiectului

Materialele nanostructurate au atras atentia comunitatii stiintifice in ultimele doua decenii si prezinta in continuare un interes special pentru toate domeniile, de la stiintele vietii la stiintele materialelor, **datorita proprietatilor aparte care le deosebesc de restul materialelor**. Practic, niciun domeniu nu va fi lasat neatins de beneficiile acestor materiale. Totusi, societatea se confrunta cu dilema mentinerii echilibrului intre dorinta de a extinde granitele unei atat de promitatoare tehnologii si riscurile potentiale care pot surveni, inca necunoscute. În acest context, proiectul cu incadrare in domeniul de specializare inteligenta „Eco nanotehnologii si materiale avansate” isi propune **studiul proprietatilor fizico-chimice** caracteristice unor noi materiale polimere micro- si nanostructurate **si stabilirea relatiilor cauzale dintre metodele de obtinere / structura chimica si morfologica / proprietatile fizice / utilizarile polimerilor**.

Proiectul propune o abordare interdisciplinara prin implementarea unor metode de obtinere de tipul: sinteza chimica, procesare laser, abordarea mixta a celor doua metode (compozite polimer-nanoparticule, grefarea de polimeri hidrofobi pe filme poroase semiconductoare), electrofilare, tratamente superficiale ale polimerilor cu plasma, UV, laseri, microunde, tratamente chimice si tratamente combinate. Aceste metode nu au fost explorate suficient pentru materialele vizate si reprezinta o adevarata provocare pentru obtinerea de morfologii, structuri si proprietati diverse.

Una dintre directiile proiectului se refera la sinteza chimica a unor materiale silsesquioxanice cu **proprietati hidrofobe/super-hidrofobe (auto-curatare), antimicrobiene/antifungice, ignifuge, auto-reparare si/sau auto-diagnoza pentru acoperiri polimere în vederea protectiei unor obiecte de patrimoniu din ceramica si piatra monumentala**. Pana in prezent nu au fost raportate materiale de acoperire nanostructurate pentru obiecte de patrimoniu din ceramica si piatra monumentala.

O alta directie a proiectului este obtinerea de noi **nanomateriale hibride eficiente din punct de vedere fotocatalitic prin imbunatatirea proprietatilor intrinseci ale fotocatalizatorului si prin ameliorarea caracteristicilor de interfata cu mediul reactiv**, pentru degradarea poluantilor din apele reziduale. Propunerea de proiect vizeaza cresterea suprafetei de contact dintre catalizator si agentul de degradare prin fabricarea unor filme semiconductoare poroase.

Nu în ultimul rand, proiectul propune **modelarea proprietatilor polimerilor (rugozitate, cristalinitate, hidrofobitate)** prin modificari ale nanostructurilor superficiale, obtinerea de materiale noi prin asamblarea unor sisteme hibride bicomponente, cu atingerea optimului de compatibilitate între cele doua materiale. Materialele pot fi sintetice (pe baza de poliimida, poliuretan, PLA, PC, PET), naturale (pe baza de gelatina, colagen, albumina serica bovina, chitosan) sau materiale compozite in diverse combinatii de natura organica (gelatina, colagen, chitosan, BSA, poliuretan, poliimida) si anorganica (Fe_2O_4 , Fe_3O_4 , ZnO).

Se va urmări **extinderea ariei de aplicabilitate** prin evaluarea eficientei materialelor structurate obtinute, folosind corelarea proprietatilor fizico-chimice ale polimerilor obtinuti cu structura lor chimica si morfologica.

Obiective generale

Imbunatatirea cunostintelor stiintifice, a competentelor de cercetare in domeniul materialelor structurate prin elucidarea mecanismelor de interactiune, **gasirea relatiei structura-proprietati** si diseminarea rezultatelor, folosind beneficiile conceptului de „stiinta deschisa”.

Valorificarea rezultatelor aplicabile ale cercetarii fundamentale catre parteneri din mediul economic public si privat, cu respectarea dreptului de proprietate intelectuala.

Dezvoltarea de noi relatii pentru schimb de experienta prin crearea unor consortii cu centre din tara sau din strainatate, pentru propuneri de proiecte in calitate de partener sau in calitate de coordonator.

Obiective specifice

- **Dezvoltarea de noi materiale nanostructurate ierarhice functionale si nanocompozite hibride pentru acoperiri protective** prin sinteze chimice de materiale silsesquioxanice nanostructurate si utilizarea de nanoparticule metalice (quantum dots pe baza de carbon, etc.) sau de oxizi metalici obtinute prin ablatie laser in lichid, prin modificarea chimica a suprafetei acestora si incorporarea in catena polimerica. *Caracterul hidrofob/super-hidrofob* va fi conferit de prezenta unor grupari caracteristice (structuri silsesquioxanice, grupari alchilice cu catena lunga, derivati de flor) si de controlul procesului de separare de faza, cu formare de structuri ierarhice. Alaturi de componenta hidrofoba/super-hidrofoba, aceste acoperiri polimere vor contine una sau mai multe structuri responsabile de *activitatea antimicrobiana/antifungica* (quantum dots pe baza de carbon, nanoparticule de argint, grupari cuaternare de amoniu, ZnO, TiO₂) si/sau grupari responsabile de *protectie ignifuga* (derivati de brom). *Caracteristica de auto-reparare* va fi conferita de prezenta unitatilor silsesquioxanice, activate prin expunerea la iradiere UV sau de formarea de legaturi termoreversibile capabile de regenerare. *Analiza integritatii acoperirilor functionale (auto-diagnoza)* va fi urmarita atat prin monitorizarea proprietatilor emise ale unitatilor silsesquioxanice, cat si prin adaugarea de fluorofori (antracen, piren) pentru masurarea deformarii acoperirilor (mecanocromicitate).
- **Dezvoltarea de noi nanomateriale hibride destinate imbunatatirii eficientei procesului de fotocataliza pentru decontaminarea apei** folosind tehnica de depunere prin ablatie laser poroase. In raport cu alti oxizi metalici cu proprietati similare, panelul larg de nanostructuri al ZnO si controlul relativ usor al acestora constituie un atu atat in ceea ce priveste eficientizarea procesului de fotocataliza, cat si prin posibilitatea dezvoltarii unor aplicatii ce vizeaza imbunatatirea calitatii vietii (senzori, biosenzori). *Eficientizarea procesului de fotocataliza se va realiza prin imbunatatirea proprietatilor intrinseci ale fotocatalizatorului* (dopare cu C sau alte metale de tranzitie ale filmelor de ZnO (CZO), decorarea filmelor de CZO cu nanoparticule metalice sau nanoparticule constituite din alte tipuri de semiconductori) si prin *ameliorarea caracteristicilor de interfata cu mediul reactiv* (cresterea suprafetei specifice prin obtinerea de filme de CZO ce prezinta ambele tipuri de porozitati - de tip cadru si texturare - si grefarea filmelor poroase cu polimeri hidrofobi). *Monitorizarea parametrilor plamei produsa prin ablatie laser* utilizand tehnici de investigare specifice *va permite stabilirea de corelatii directe cu proprietatile filmului obtinut si, in consecinta, optimizarea proprietatilor acestuia*. Posibilitatea de a efectua studii de fotocataliza pentru decontaminarea apelor reziduale prin *utilizarea pentru prima data a filmelor superhidrofobe de ZnO dopat cu C (CZO) sau compozite CZO/polimer ofera sansa de a explora si extinde functionalitatea acestor materiale*.

- **Dezvoltarea de noi sisteme polimerice structurate** (polimeri, amestecuri de polimeri si nanocompozite polimerice) folosind: (i) pre-tratamente cu plasma de radiofrecventa, laseri, UV, microunde si (ii) tehnica electrofilarii. Prima tehnica (i) este folosita pentru activari, reticulari ale nanostraturilor superficiale polimere, ce genereaza suprafete cu grupari reactive, cu functiuni ce permit ulterior atasarea diferitelor molecule sau particule ce vor asigura proprietati utile aplicatiilor în medicina (biocompatibilitate si/sau antimicrobiene) sau altor tipuri de aplicatii tintite. În vederea optimizarii proprietatilor fizico-chimice, vor fi efectuate studii de stabilitate si degradare, studii structurale si de morfologie ale suprafetei si se va urmari elucidarea *mecanismelor de interactiune dintre plasma si suprafata polimerica*, prin efectuarea *diagnozei spectrale a plasmei (cu obtinerea parametrilor plasmei, precum densitatea si energia particulelor) si stabilirea relatiei structura-proprietati*. În procesul de interactiune dintre plasma si suprafata polimerica, procesele fizice (ciocniri cu electronii, ionii si particulele neutre, efecte termice, captarea sarcinilor in retea atomica) au ca efect cresterea rugozitatii suprafetei, microrarea cristalinitatii materialului, cresterea potentialului superficial. Procesele chimice (actiuni ale speciilor activate, difuzia in material a speciilor activate) au ca efect curatirea suprafetei, oxidarea moleculelor, microrarea greutateii moleculare, ruperea sau legarea lanturilor moleculare (in functie de compozitia gazului) si cresterea sau descresterea porozitatii. Pentru acoperiri antimicrobiene vor fi folosite nanoparticule metalice (npAg, npAu) obtinute prin procedee de „sinteza verde”. Vor fi efectuate teste de viabilitate si citotoxicitate celulara.
- Gasirea de noi **aplicatii ale micro- si nanocompozitelor polimerice noi sintetizate sau reciclate**, pentru a sprijini proiectarea circulara a produselor durabile.

Modul de utilizare a resursei umane

Indeplinirea obiectivelor specifice se bazeaza pe expertiza echipei si pe rezultatele stiintifice anterioare, astfel: *M. Aflori, M. Drobot* - tratamente chimice si neconventionale, electrofilare, analiza morfologica si structurala a materialelor polimere complexe; *M. Olaru, V. Oancea* - sinteze chimice de materiale silsesquioxanice; *C. Ursu, B. G. Rusu* - depunere prin ablatie laser pulsata si obtinere de nanomateriale hibride; *G. Hitruc* - preparare si analiza morfologica a materialelor polimere, calcul statistic pe imagini AFM scanate pentru a stabili probabilitatea de aparitie pe suprafetea unor structuri de fractali; *D. Rusu F. Doroftei* - caracterizarea morfologica SEM a materialelor polimere complexe; *M. Danu* - sinteza prin polimerizare radicalica controlata, reologia materialelor polimere

Asigurarea resurselor pentru desfasurarea Proiectului

Asigurarea de materialele consumabile va fi realizata din proiecte extrabugetare sau din colaborari cu alte Subprograme. Se urmareste completarea echipei proiectului cu noi membri.

Colaborarea cu alte Subprograme/Proiecte din institute

Vor fi continuate colaborarile începute (*POINGBIO POC G ctr. 86/2016, 5DnanoP PN-III-P4-ID-PCCF-2016-0050, PN-III-P2-2.1-PED-2019-1780*) si se vor face noi propuneri de proiecte. Membrii echipei vor oferi consultanta în interpretarea datelor pentru FTIR, AFM, SEM, RAMAN.

Colaborarea cu alte centre academice din tara si strainatate

Va fi continuata colaborarea cu centre academice din tara (UTI, UAIC, UMF Iasi, Universitatea Apollonia), cu centre de cercetare private (SANIMED, Centrul Medical Domenico, AllGreen, ApelLaser). Cercetatorii din cadrul echipei au stabilite colaborari cu alte institute din strainatate (Germania, Franta), o parte dintre acestia efectuand teze de doctorat sau stagii de cercetare in acele institutii.