



ACADEMIA ROMÂNĂ
SCOSAAR

REZUMATUL TEZEI DE ABILITARE

TITLUL Caracterizarea avansată a materialelor și compușilor funcționali prin tehnici termo-analitice și complementare

Domeniul de abilitare: CHIMIE

Autor: MUȘUC Adina Magdalena

Teza de abilitare intitulată „Caracterizarea avansată a materialelor și compușilor funcționali prin tehnici termo-analitice și complementare” prezintă activitățile de cercetare științifică, fundamentală și aplicativă desfășurate între anii 2008 și 2022, după obținerea titlului de doctor în domeniul Chimie de la Universitatea din București, în anul 2007.

Teza de abilitare este structurată în două părți principale: Capitolul 1 – Realizări științifice, academice și profesionale, Capitolul II – Planuri de dezvoltare a carierei academice, profesionale și de cercetare, urmat de secțiunea Bibliografie. Cele mai importante contribuții originale descrise în capitolul I sunt susținute de cele mai reprezentative 10 articolele ISI publicate între 2008 și 2022, în calitate de autor principal, precum și în baza principalelor realizări academice și profesionale prezentate în Capitolul 2. Cercetarea științifică se concentrează pe caracterizarea avansată prin analiză termică și studii calorimetrice, determinarea proprietăților termice și fizice, prelucrarea termică și evaluarea proprietăților fizice și chimice (structurale, morfologice, optice și reologice) a multor tipuri de materiale funcționale și compuși condensați utilizați pentru diferite aplicații promițătoare.

Capitolul I descrie principalele direcții de cercetare științifice abordate fiind împărțit în cinci subcapitole:

- ❖ Analiza cinetică și caracterizarea fizico-chimică a compușilor condensați pentru desfășurarea proceselor chimice sigure de fabricație și evaluarea stabilității termice ale acestora în diferite condiții (subcapitolul I.2.);
- ❖ Caracterizarea avansată și comportarea termică a unor noi combinații complexe ale metalelor tranziționale cu baze Schiff datorită activităților lor anticonvulsivante, antiinflamatorii, antimicrobiene, antitumorale semnificative (subcapitolul I.3);
- ❖ Proiectarea/sinteza, caracterizarea, termochimia arderii și evaluările cinetice ale unor carbohidrați, ca materii prime netoxice și regenerabile pentru utilizări industriale prin producerea de bioenergie (subcapitolul I.4);



ACADEMIA ROMÂNĂ SCOSAAR

- ❖ Dezvoltarea, caracterizarea și analiza cinetică a unor noi materiale folosite ca ambalaje biodegradabile pentru industria ambalajelor alimentare (subcapitolul I.5);
- ❖ Proiectarea/sinteza și caracterizarea fizico-chimică a unor noi complecși de incluziune ai ciclodextrinelor formați cu diferite medicamente precum și a unor hidrogeluri bioinspirate pe bază de polizaharide pentru aplicații farmaceutice și biomedicale (subcapitolul I.6).

Prima direcție de cercetare reprezintă o continuare a activității începută în perioada doctorală și a constat în caracterizarea cu ajutorul metodelor termice de analiză a unor compuși chimici în stare solidă care sunt predispuși, în condiții de depozitare prelungită, la descompunere explozivă. Domeniul abordat reprezintă un grad de noutate deoarece se poate evalua într-un timp relativ scurt și în condiții de siguranță natura periculoasă a compușilor în stare condensată cu aplicații în diferite industrii. Prin analiza termică cu ajutorul calorimetriei diferențiale cu baleiaj, se obțin curbele termice DSC care ulterior sunt utilizate în analiza cinetică pentru determinarea parametrilor cinetici de descompunere și a mecanismului de reacție. Schema cinetică și parametrii cinetici obținuți pot fi ulterior utilizați pentru stabilirea condițiilor de siguranță în care pot fi procesați/depozitați compușii evaluați. Utilizarea calorimetriei diferențiale cu baleiaj ne asigură să evaluăm cinetica compușilor care se descompun autocatalitic în condiții de siguranță deoarece metoda ne permite să folosim probe de cateva mg. Apoi, predicțiile izoterme pentru condiții reale folosind parametrii cinetici obținuți sunt în principal folosite pentru evitarea pericolelor și pentru estimarea recomandărilor de siguranță în manipularea compușilor periculoși. Corelațiile structură – proprietăți permit evaluarea și determinarea proprietăților structurale și chimice ale compușilor noi cu structură moleculară similară.

Al doilea subcapitol prezintă o evaluare fizico-chimică a combinațiilor complexe ale metalelor tranziționale cu baze Schiff folosind tehnicile combinate de analiză termică. Interesul pentru studiul acestora a pornit de la faptul că bazele Schiff și complecșii lor cu metalele tranziționale prezintă numeroase activități biologice, antioxidante, antibacteriene, antiinflamatorii, antifungice, analgezice, antitumorale. Ele demonstrează, de asemenea, proprietăți biochimice și farmacologice. Bazele Schiff au, de asemenea, o mare importanță în utilizarea ca catalizator, coloranți, pigmenți, produse agrochimice, stabilizatori polimerici.

A treia direcție de cercetare propune utilizarea carbohidraților (polizaharide) ca și constituenți ai biomasei care urmează a fi supuși carbonizării hidrotermale în vederea dezvoltării de produse cu conținut crescut de carbon. Carbonizarea hidrotermală (HTC) a carbohidraților obișnuiți și/sau a biomasei complexe în produși de carbon hidrotermal (hidrocarburi, HC) a devenit o alternativă promițătoare de utilizare a biomasei ca sursă/aditiv pentru sinteza materialelor funcționale (inclusiv metale, oxizi și compozite de carbon) cu suprastructuri remarcabile și o gamă largă de aplicații (fotocataliza, biomedicină, utilizare legată de energie), dar și pentru transformarea în biocombustibili care prezintă comportamente favorabile în ceea ce privește arderea, gazeificarea



ACADEMIA ROMÂNĂ SCOSAAR

și alte conversii termice : conținutul de energie tipic al materialelor HC a fost măsurat a fi între 25 și 35 MJ kg⁻¹, ceea ce este cu aproximativ 40% mai mare decât cel al precursorilor de biomasă. Folosirea tehnicilor de analiză termică pentru a determina mecanismul reacției de ardere și de evaluare a cineticii procesului de ardere reprezintă o metodă mai mult decât eficientă.

A patra direcție de cercetare a abordat caracterizarea gradului de biodegradabilitate a polimerilor modificați prin impregnarea cu diferite extracte naturale din plante sau/și iradiere. Rezultatele experimentale obținute prin combinarea analizelor termogravimetrice și microcalorimetrice cu metodele complementare de analiză (FTIR, XRD, SEM, studii de biodegradare microbiană) ne pot ajuta să înțelegem mai bine relația dintre structura și proprietățile amestecurilor de polimeri biodegradabili. Această abordare are un interes și o importanță semnificativă pentru modificarea proprietăților și extinderea aplicațiilor practice ale polimerilor biodegradabili atât din punct de vedere academic, cât și industrial. O parte din rezultate au fost obținute în cadrul proiectului PN-II-RU-PD-2011-3-0057, implementat în perioada 2011-2013, intitulat „Evaluarea rapidă a biodegradabilității biopolimerilor prin metode de analiză termică”, finanțat de Autoritatea Națională pentru Cercetare Științifică, CNCS – UEFISCDI, coordonat de autoarea prezentei teze de abilitare.

Interesul pentru a cincea direcție de cercetare este unul recent și constă în prepararea și caracterizarea fizico-chimica a unor compuși de incluziune ai ciclodextrinelor cu diferite medicamente și includerea acestora în diferite formulări farmaceutice în vederea solubilizării/dezagregării rapide. Totodată, cercetarea a fost direcționată pe sinteza de oxizi metalici sau nanoparticule metalice folosind polizaharide datorită capacității acestora de a fi încorporate în biocompozite pe bază de hidrogeluri pentru aplicații în medicina.

Pe lângă aceste direcții de cercetare principale, au fost efectuate o serie de studii privind utilizarea metodelor termice de analiză ce oferă informații detaliate asupra proprietăților fizice și chimice ale materialelor. Această activitate de cercetare începută din anul 2007 a condus la elaborarea mai multor lucrări științifice în calitate de coautor.

Capitolul al II-lea prezintă principalele realizări profesionale, academice și științifice după obținerea titlului de Doctor în chimie. Activitatea de cercetare s-a concretizat prin publicarea a 69 de articole apărute în reviste cotate ISI (20 ca prim autor, 27 ca autor de corespondență și 34 ca coautor), 1 capitol de carte și 4 brevete naționale (unul fiind în curs de analiză). Am fost director a 4 proiecte de cercetare și colaborator la 19 proiecte de cercetare.

Partea a doua din Capitolul II prezintă planurile de dezvoltare a carierei. Direcțiile științifice de cercetare descrise anterior cu rezultate semnificative vor fi luate în considerare pentru viitor, alături de dezvoltarea a unora noi.

Ultima parte din teza de abilitare este reprezentată de referințele bibliografice.