

## Teză de abilitare

### **20 DE ANI DE CHIMIE: INTRE COMPUSI HETEROCICLICI SATURATI SINTETICI SI POLIFENOLI NATURALI**

(20 YEARS OF CHEMISTRY: BETWEEN SYNTHETIC SATURATED HETEROCYCLIC  
COMPOUNDS AND NATURAL POLYPHENOLS)

**Luminița-Camelia David (n. Muntean)**

#### **REZUMAT**

Teza de abilitare intitulată “20 YEARS OF CHEMISTRY: BETWEEN SYNTHETIC SATURATED HETEROCYCLIC COMPOUNDS AND NATURAL POLYPHENOLS” prezintă principalele realizări științifice după obținerea titlului de doctor în chimie (2000), precum și o descriere succintă a direcțiilor de cercetare ce urmează a fi abordate în viitor.

Teza de abilitare este împărțită în două secțiuni și anume:

*Partea A:* Realizări științifice

*Partea B:* Perspective și direcții viitoare de cercetare

*Partea A* a tezei de abilitare este structurată pe patru capitole, după cum urmează:

**Capitolul I. Introducere**, prezintă succint parcursul profesional și științific, după obținerea titlului de doctor în chimie.

**Capitolul II. Compuși heterociclici hexaatomici saturați**, prezintă rezultate științifice relevante referitoare la sinteza, stereochemia și reactivitatea unor compuși heterociclici hexaatomici saturați (1,3-dioxani, 1,3-oxatiani și respectiv perhidro-1,3-oxazine). În cadrul acestui capitol sunt detaliate următoarele aspecte: configurația preferată și poziția echilibrului conformațional în cazul compușilor monoheterociclici și a celor cu două heterocicluri separate printr-o catenă alchil sau printr-un nucleu aromatic, incluzând echilibrarea izomerilor *like-unlike* în cazul compușilor bis(1,3-oxatianici); influența elementelor de chiralitate asupra structurii și reactivității compușilor investigați, inclusiv

determinarea mecanismului reacției de bromurare a unor 1,3-dioxani cu structură spiranică; echilibrele conformaționale ale compușilor heterociclici spiranici; tautomeria inel-catenă a unor derivați de perhidro-1,3-oxazină nesubstituiți la atomul de azot; izomeria *cis-trans* a unor spiro-1,3-oxatiani.

Rezultatele obținute au constituit subiectul a 9 articole științifice publicate în reviste indexate Web of Science, două dintre acestea fiind publicate în reviste clasificate în quartila Q<sub>1</sub> și două în reviste clasificate în quartila Q<sub>2</sub> (după factorul de impact, conform Clarivate Analytics 2019). Relevanța științifică a acestor rezultate este dovedită și prin citarea lor de către autori internaționali de prestigiu, în cărți de referință în domeniul chimiei organice și respectiv al stereochemiei, cum ar fi Michael Smith în “March’s Advanced organic chemistry: Reactions, mechanisms and structure” și Erich Kleinpeter în “Conformational analysis of saturated six-membered oxygen-containing heterocyclic rings”.

**Capitolul III. Polifenoli naturali** are ca subiect utilizarea compușilor naturali cu proprietăți antioxidante (în special polifenoli din fructe) în industria alimentară, medicină și știința materialelor. Acest capitol detaliază influența a diferiți factori (cum ar fi: temperatura, pH-ul, natura solventului, prezența unor aditivi alimentari din clasa îndulcitorilor, conservanților și a antioxidanților) asupra procesului de degradare a polifenolilor (cu precădere coloranți antocianici) din fructele puțin valorificate ale unor arbuști din flora spontană și anume: soc, corn, călin, sânger, lemn câinesc, lemn câinesc decorativ și porumbar. Au fost determinați parametrii cinetici ai procesului de degradare în condițiile menționate, realizându-se astfel o evaluare a fructelor investigate ca și surse valoroase de coloranți naturali pentru industria alimentară. Totodată, s-a estimat influența condițiilor din tractul digestiv asupra biodisponibilității compușilor bioactivi din fructe, prin aplicarea unui model de digestie *in vitro*.

Fitocompușii din fructele de corn au fost investigați *in vivo* pentru evaluarea proprietăților antiinflamatoare și antitumorale, rezultatele obținute dovedind că aceste fructe reprezintă o sursă valoroasă de compuși bioactivi ce pot fi utilizați cu succes ca medicamente antiinflamatoare naturale și pot crește eficiența terapiei fotodinamice în tratamentul cancerului bucal.

Compușii bioactivi din fructele investigate au fost utilizați ca și agenți de reducere ai ionilor metalici, în vederea obținerii nanoparticulelor metalice corespunzătoare prin metode ecologice (“green”). Investigarea proprietăților antiinflamatoare, antioxidante, antidiabetice și

antitumorale ale nanoparticulele de aur și argint astfel obținute a relevant potențialul lor remarcabil ca adjuvanți în tratamentul unor boli inflamatorii (psoriazis, boala celiacă), al unor tipuri de cancer (ovarian și bucal), al diabetului și al bolilor generate de stresul oxidativ. Totodată, nanoparticulele de argint obținute cu compuși antioxidanți din fructe de călin s-au dovedit catalizatori eficienți ai reacției de degradare reductivă a unor coloranți organic de uz alimentar (tartrazină, azorubină și albastru brilliant FCF). Rezultatele cercetărilor din acest domeniu au fost valorificate prin publicarea acestora în 36 de articole științifice, dintre care 14 în reviste clasificate în quartila Q<sub>1</sub> (6 dintre acestea în reviste aflate în Top 10 în domeniu) și 7 în reviste clasificate în quartila Q<sub>2</sub> (conform Clarivate Analytics). Cele peste 450 de citări ale acestor articole (conform Clarivate Analytics), trei dintre ele având fiecare peste 50 de citări, reprezintă o măsură obiectivă a relevanței lor științifice.

**Capitolul IV. Proiecte de cercetare**, conține o listă a proiectelor de cercetare în cadrul cărora am fost implicată fie ca director de proiect, fie ca membru în echipă, precum și câteva precizări referitoare la tema proiectelor de cercetare gestionate în calitate de director/responsabil de proiect.

*Partea B* a acestei teze prezintă viitoarele direcții de cercetare pe care îmi propun să le dezvolt și anume: stabilizarea coloranților naturali prin copigmentare și/sau încapsulare, evaluarea efectului utilizării amestecurilor de aditivi alimentari asupra stabilității coloranților naturali, utilizarea unor compuși bioactivi separați din surse naturale pentru obținerea unor nanomateriale hibride funcționalizate pe bază de metale sau carbon cu proprietăți îmbunătățite și evaluarea acestora în vederea folosirii lor ca și agenți terapeutici.

Referințele bibliografice asociate celor două părți ale prezentei lucrări sunt prezentate la finalul tezei de abilitare.