



ACADEMIA ROMÂNĂ
SCOSAAR

REZUMATUL TEZEI DE ABILITARE

TITLUL Metode matematice avansate în spectroscopie -evaluarea proprietăților fizico-chimice ale materialelor micro- și nanostructurate

Domeniul de abilitare: **CHIMIE**

Autor: Dr. Maria-Cristina Popescu

Teza de abilitare intitulată: **Metode matematice avansate în spectroscopie - evaluarea proprietatilor fizico-chimice ale materialelor micro- și nanostructurate** prezintă o selecție din rezultatele științifice obținute după susținerea tezei de doctorat (23 februarie 2009).

Lucrarea este împărțită pe trei secțiuni importante, una dedicată realizărilor științifice și profesionale urmată de o parte în care sunt descrise cele mai semnificative rezultate obținute de către autoare și încadrarea lor în contextul științific actual și o a treia parte care este dedicată unor proiecte și teme de cercetare ce vor fi dezvoltate în cadrul Laboratorului de Chimie-Fizică a Poimerilor din cadrul Institutului de Chimie Macromoleculara "Petru Poni" din Iași.

Tehnicile spectroscopice sunt frecvent utilizate în știința materialelor pentru a obține informații asupra structurii componentilor și în înțelegerea interacțiunilor dintre aceștia. Prin cuplarea acestor tehnici cu metodele chemometrice (cum ar fi *PCA*) sau cu *spectroscopia de corelație 2D (2D-COS)* se pot obține informații care altfel ar fi fost greu de obținut.

În *prima parte* a tezei sunt prezentate într-un mod succint pregătirea profesională a autoarei urmată de o descriere a principalelor direcții de cercetare abordate după finalizarea tezei de doctorat. Încă de la începutul activității de cercetare am fost preocupată de dezvoltarea profesională printr-o instruire permanentă pentru dobândirea de cunoștințe și lărgirea domeniului de cunoaștere. Astfel am participat la numeroase cursuri și stagii (în institute și universități din UK, Belgia, Elveția sau Japonia) de specializare și perfecționare.

Pe lângă acestea cei 19 ani de experiență în cercetare s-au concretizat în publicarea ca și autor principal sau coautor a **84** de lucrări științifice; publicarea **1** cărți și a **9** capitole de carte; peste **100** de

participări la manifestări științifice; *1* brevet; participarea la *16* proiecte de tip Acțiuni COST din care la *12* în comitetul de management; membru în proiecte științifice de cercetare: *10* din care la *3* ca și director de proiect. Recunoașterea activității științifice de către comunitatea științifică s-a concretizat în citarea lucrărilor în reviste de prestigiu (*1399* citări fără autocitări în ISI Thomson - Web of Knowledge sau *1428* Scopus; H index *21* Thomson - Web of Knowledge, *21* Scopus)

Cea de-a doua parte este grupată în două secțiuni și anume secțiunea: **Metode matematice avansate utilizate în spectroscopie pentru evaluarea proprietatilor fizico-chimice ale sistemelor polimere** care descrie bazele teoretice ale metodelor chemometrice utilizate în cercetările noastre. Astfel au fost descrise principiile matematice pentru cele 2 metode matematice utilizate precum și avantajele care derivă din utilizarea acestora în analiza spectrală.

Cea de-a doua secțiune: **Evaluarea proceselor fizico-chimice care au loc în sisteme polimere folosind metode matematice avansate în spectroscopie** prezintă câteva exemple de domenii în care au fost aplicate aceste metode. În spectroscopia de corelație 2D pot fi folosite numeroase tipuri de perturbații externe și stimuli fizici care induc variații spectrale. Perturbațiile utilizate în analiza de corelație 2D pot fi clasificate în două tipuri majore. Primul tip implică un set de date spectrale funcții directe de variabila perturbației (adică, temperatură, concentrație sau presiune). Cel de-al doilea tip este funcție de consecința secundară produsă de perturbație, cum ar fi progresia dependentă de timp a variațiilor spectrale cauzate prin aplicarea unui stimul.

În studiile întreprinse în cadrul grupului au fost folosite diverse tipuri de perturbații cum ar fi temperatura, concentrația, timpul, RH etc., pentru a evalua interacțiunile în sisteme constituite din 2 sau mai multe componente, pentru evidențierea tranzițiilor de fază, evaluarea modului de orientare al moleculelor, interacțiunea materialelor compozite cu apa sau pentru evaluarea unor procese de degradare sau a unor procese biologice.

În ce privește analiza interacțiunilor intermoleculare au fost utilizate două concepte și anume unul propus de către Ren, care presupune gruparea spectrelor probelor în două seturi funcție de conținutul fiecărui component din sistem și compararea spectrelor de corelație pentru cele 2 seturi. Ulterior am propus un alt concept în care se construiesc spectrele de corelație pentru spectrele experimentale și pentru cele calculate și se compară acestora între ele. Se știe că în cazul unui amestec fizic nu există interacțiuni între componentele sistemelor iar spectrul asincron prezintă un aspect specific, în timp ce în cazul în care există interacțiuni în sisteme poate fi construit un spectru asincron bine definit. Metoda propusă de noi a fost preluată ulterior de comunitatea științifică.

În ce privește evaluarea tranzițiilor de fază, pentru determinarea temperaturilor specifice s-au folosit atât reprezentările grafice ale dependențelor anumitor benzi spectrale de temperatură cât și analiza componentelor principale PCA. Pentru determinarea cu precizie a temperaturilor de tranziție a fost introdusă fitarea cu funcții de tip Boltzman.

Utilizarea metodelor spectrale cuplată cu metodele chemometrice și spectroscopia de corelație 2D pentru stabilirea mecanismelor de degradare a materialelor polimere reprezintă un domeniu de pionierat în cercetarea științifică, în momentul de față grupul nostru fiind singurul care folosește aceste metode în studiul degradării. Pe această direcție au fost realizate studii privind degradarea unor materiale lemnoase sub acțiunea diferiților factori de mediu cum ar fi tratament hidro-termic, fotodegradare sau biodegradare cu diferite tipuri de fungi.

O altă direcție abordată în ultimul an este aceea de a folosi metodele spectrale cuplate cu cele chemometrice și spectroscopia de corelație 2D pentru evaluarea unor procese biologice. În acest sens a fost realizat un studiu în care s-a încercat diferențierea stadiilor de evoluție a unor tumori.

In *Partea III* sunt trasate directiile de cercetare științifică ce vor fi abordate și dezvoltate în viitor, care justifică dorința de a conduce și forma doctoranzi. În plus prin colaborările pe care le am atâr naționale cât și internaționale (*Dr. Petronela Gradinariu* Institutul de Biologie din Iasi, *Prof. Dr. Vasile Stoleru* Universitatea de Agronomie și Medicină Veterinară Ion Ionescu de la Brad, precum și cu *Dr. Dongyang Sun* Universitatea Napier din Edinburg, UK, *Dr. Claudia Preininger și Ursula Sauer* AIT Austrian Institute of Technology, Tulln, Austria; *Dr. Einav Kulbak* Melodea Ltd, Rehovot, Israel; *Şems Yonsel*, Simbiyotek, Tuzla/Istanbul, Turcia; *Prof. Heinz Siesler*, Universität Duisburg-Essen, Essen, Germania; *Prof. Antonella Dalla Cort* - Università La Sapienza, Italia; *Prof. Emilia Csiszár*, Budapest University of Economics and Technology, Ungaria; *Prof. Gilles Sèbe*, Univesity of Bordeaux, Franta; *Prof. Zeki Candan*, Istanbul University, Turcia; *Dr. Åsa Östlund* RISE, Suedia; *Prof. Jalel Labidi* University of the Basque Country, Spania, *Dr. Eduard Fron* - KU Leuven, Belgia; *Prof. Isao Noda* University of Delaware, USA; *Prof. Young-mee Jung*, Kangwon National University, Coreea de Sud; *Prof. Rafael Gómez și Prof. Francisco Javier De La Mata*, Universidad de Alcalá, Spania) va fi posibilă instruirea acestora într-un mediu diferit.

Teza de Abilitare se incheie cu referintele bibliografice care subliniaza contextul stiintific in care au fost dezvoltate cercetarile personale, dar si lucrarile proprii ce stau la baza acestei teze.