

IOSUD UVT
Școla Doctorală de Chimie

Prof. univ. multi-dr. Dr.-Habil. CSI Mihai V. PUTZ

DIRECȚII ȘI TEME DE CERCETARE DOCTORALE
În cadrul Grupului și Laboratorului de Cercetare în
CHIMIE-FIZICA STRUCTURALĂ ȘI COMPUTAȚIONALĂ PENTRU
NANOȘTIINTE ȘI QSAR (L-CF-SC-NQ)
~2023-2024~

- **ABORDAREA “BOSONICĂ” A MATERIEI ȘI A LEGĂTURII CHIMICE ÎN SPECIAL, cu temele de cercetare aferente:**
 - *Teoria Bondonilor, ca particule cuantice ale funcției de undă moleculare;*
 - *Caracterizarea bondonică a tranzițiilor de fază în nanosisteme extinse (de tip grafenic și fullerenic) cu defecte topologice (rotații Stone-Wales);*
 - *Identificarea spectrală a caracterului corpuscular (bondonic) al legăturii chimice.*
- **ABORDAREA CUANTICĂ A REACTIVITĂȚII CHIMICE, cu temele de cercetare aferente:**
 - *Electronegativitatea: conceptul modern în teoria funcționalei densitate; principiul de egalizare și de inegalitate al atomilor în moleculă; colorarea topologică cu electronegativitate a nanosistemelor extinse (hidrocarburi policiclice aromatice-PAH, grafene, silicene, etc.);*
 - *Tăria chimică: companion al electronegativității; problema observabilității cuantice; cuantificarea principiului tăriei maxime, și în relație cu principiul acizilor și bazelor tari și slabe;*
 - *Modelarea și standardizarea reacțiilor chimice cu principiile min-max (și de aromaticitate) ale electronegativității și tăriei chimice;*
 - *Unificarea principiilor de reactivitate chimică: acțiunea chimică și legătura chimică.*
- **ABORDAREA TOPOLOGICĂ ȘI ALGEBRICĂ A INTERACȚIEI CHIMICO-BIOLOGICE ȘI A TOXICITĂȚII, cu temele de cercetare aferente:**
 - *Metoda Spectral-SAR: abordarea algebrică a corelațiilor statistice structură-activitate și structură-toxicitate;*
 - *Principiile QSAR ale Organizației pentru Co-operare și Dezvoltare Economică (OECD); modelarea legăturii ligand-receptor cu principiile QSAR; aplicații la molecule de interes ecotoxicologic (structuri alifactice, PAH, lichide ionice, etc.);*
 - *Modelarea SMILES (Simplified Molecular-Input Line-Entry System) a legăturii ligand-receptor; problema virtual-real pentru molecula SMILES în transducția celulară a toxicanților;*
 - *Indici topologici și grafuri moleculare: indici topologici cu potențial cuantic (de tip Wiener, dar și echivalenți); formularea de noi indici și corelarea lor cu reactivitatea chimică și cu activitatea bio-ecotoxicologică.*

Pentru referințe suplimentare, persona de contact:

Conducator de doctorat

Mihai V. PUTZ

Prof. univ. multi-dr. Dr.-Habil. CSI

e-mail: mihai.putz@e-uvt.ro; tel. 0256-592.638;

Prof. dr. Vlase Gabriela Dr. habil

E-mail: gabriela.vlase@e-uvt.ro

Tel: 0256-592627

Responsabil științific în Centrului de cercetare “Analize termice în probleme de mediu”

Universitatea de Vest din Timisoara, Facultatea de Chimie, Biologie, Geografie

Domenii de interes / Direcții strategice

- Materiale cu aplicații în eliberare controlată a medicamentelor de tip membrane, dispozitive medicale avansate.
- Studiul prin tehnici termoanalitice și tehnici cuplate a materialelor de patrimoniu (Ceramica antică, mortare, podoabe).
- Studii de compatibilitate substanțe cu activitate biologică și excipienți. Studiul interacțiilor Excipienți – Excipient sau medicament-medicament;
- Studii prin tehnici hifenate a complexelor de incluziune cu utilizare în domeniul farmaceutic ca excipient sau agent de complexare.
- Utilizarea tehnicilor cuplate pentru caracterizarea materialelor avansate cu diverse aplicații.

Teme de cercetare

- Obținerea unor noi compozite nanostructurate biomimetice cu aplicații biomedicale și cu proprietăți fizice, chimice și biologice îmbunătățite pentru reconstrucție osoasă, dispozitive "drug delivery".
- Sinteza și caracterizarea de noi materiale de tip polimer pentru eliberare controlată a diferitelor medicamente pentru eliberare transdermală, tranmucozală și orodispersabile.
- Caracterizarea și obținerea unor materiale cu proprietăți avansate, materiale cu adaosuri magnetice.
- Studii prin tehnici hifenate a complexelor de incluziune cu aplicații medicale.
- Studiul stabilității termice a unor substanțe active. Dezvoltarea de noi formulări farmaceutice cu biodisponibilitate maximă.
- Noi formulări farmaceutice pentru tratamentul sclerozei în plăci.

- Obținerea și caracterizarea unor materiale pe baza de biopolimeri pentru reținerea unor poluanți din ape reziduale.

Prof. dr. ing. Vlase Titus Dr. Habil

Date de contact:

E-mail: titus.vlase@e-uvv.ro

Tel: 0256-592627

Directorul Centrului de cercetare “Analize termice în probleme de mediu”

<https://erris.gov.ro/CENTRUL-DE-CERCETARE-CATM>

Universitatea de Vest din Timișoara, Facultatea de Chimie, Biologie, Geografie

Direcții strategice

- - Studiul interacțiunilor induse termic pe diferite clase de compuși (polimeri, aditivi alimentari, compatibilitate excipienți cu substanțele active din formulările farmaceutice);
- - Studiul prin metode fizico-chimice ale materialelor, nanomaterialelor și biomaterialelor;
- - Stabilitatea termică și cinetica neizotermă (life time prediction);
- - Analiza prin metode fizico-chimice ale artefactelor și obiectelor de patrimoniu.
- - Caracterizarea și obținerea unor materiale cu proprietăți anticorozive, materiale cu adaosuri magnetice.
- - Determinarea contaminanților din sol, apă și compuși farmaceutici.
- - Analize FTIR (gaz, solide lichide), identificarea substanțelor organice și astfel caracterizarea unor materiale și compuși anorganici, compuși organici, produși biologici, polimeri, produse alimentare, medicamente.

Arii tematice/Teme de cercetare

- - Analiza termică (pierdere de masă, efect termic, identificarea volatilizării prin termooxidare sau termodegradare prin EGA)- stabilirea mecanismelor de degradare a unor substanțe cu diverse aplicații.
- - Analiza comportamentului termic și termomecanic al materialelor avansate cu proprietăți prestabilite.
- - Analiza impactului asupra mediului al polimerilor, descompunerea termică a deșeurilor, a ambalajelor, a solurilor poluate, a nămolurilor.
- - Estimarea duratei de viață termică pentru polimeri industriali, medicamente, aditivi alimentari, substanțe periculoase.
- - Obținerea și caracterizarea unor materiale cu proprietăți anticorozive, materiale cu adaosuri magnetice.
- - Dezvoltare de noi materiale compozite cu proprietăți prestabilite cu aplicații medicale;
- - Metode de identificare a microplasticului în mediu.