



ACADEMIA ROMÂNĂ
SCOSAAR

REZUMATUL TEZEI DE ABILITARE

Materiale funcționale pe bază de combinații complexe ale metalelor din blocul *d*: luminescență și/sau mezomorfism

Domeniul de abilitare: **CHIMIE**

Autor: **Dr. SZERB Elisabeta Ildyko**

În această teză de abilitare, este prezentată activitatea de cercetare științifică, academică și profesională a candidatei după conferirea titlului de doctor la Universitatea din Calabria, Departamentul de Chimie și Fizică, Laboratorul de Chimie Anorganică și de Coordinare, Centrul de Excelență CEMIF.CAL, LASCAMM CR-INSTM Unità della Calabria, Cosenza, Italia (Iunie 2005).

Teza este structurată în trei capitole principale după cum urmează: i) În *Capitolul I* sunt descrise sintetic activitatea științifică, profesională, academică și principalele rezultate științifice originale publicate ale candidatei în domeniul de cercetare principal, respectiv în *combinații complexe ale metalelor din blocul d cu proprietăți optice (cristalin lichide, fotofizice) optimizate prin inginerie moleculară "inteligentă"*, cu prezentarea stadiului actual al domeniului științific în care și-a dezvoltat cariera și evidențiind rezultatele obținute la Institutul de Chimie "Coriolan Drăgulescu" în cadrul Programului 4, cu grupul de cercetare coordonat de candidată (din ianuarie 2017); ii) *Capitolul II* descrie perspectiva de evoluție în carieră a candidatei și a echipei coordonate, iar iii) *Capitolul III* reprezintă bibliografia.

Principala tematică de cercetare inițiată și dezvoltată de către candidată după finalizarea și susținerea tezei de doctorat cuprinde proiectarea, sinteza și caracterizarea unor noi combinații complexe ale unor metale din blocul *d* ale căror proprietăți sunt optimizate prin inginerie moleculară "inteligentă", studiind în același timp relația structură moleculară - structură supramoleculară - proprietăți fotofizice în stările condensate (cristalină și/sau lichid cristalină). Combinațiile complexe sunt prezentate în funcție de centrul metalic, respectiv Ag(I) (Secțiunea 1.2.1), Ir(III) (Secțiunea 1.2.2), Cu(I) (Secțiunea 1.2.3), Zn(II) (Secțiunea 1.2.4) și Pt(II) (Secțiunea 1.2.5). În scopul de a propune modele de organizare moleculară și supramoleculară în stările condensate s-a apelat la studii structurale de difracție de raze X pe monocristal ale unor compuși model. Optimizarea proprietăților specifice țintite a fost realizată în funcție de domeniul de aplicație propus, respectiv metalomesogeni luminescenți cu proprietăți cristalin lichide la temperatură joasă pentru aplicații în electrooptică pentru obținerea de lumină polarizată și complecși de coordonare ale metalelor din blocul *d* solubile în apă cu proprietăți fotofizice sensitive pentru aplicații biomedicale (agenți teranostici, bioimagică, biosensing).

Pentru prima aplicație, au fost proiectați și obținuți metalomesogeni pe bază de combinații complexe luminescente ale Ag(I), Ir(III), Cu(I), Zn(II) și Pd(II), ale căror proprietăți foto-fizice au fost determinate în soluție și diferite stări condensate, urmărind stabilirea relației structură moleculară - structură supramoleculară - proprietăți foto-fizice. Pentru a doua aplicație, au fost proiectate și obținute combinații complexe pe bază de ioni metalici din blocul *d*, funcționalizate corespunzător cu grupări hidrofile pentru a prezenta solubilitate în apă. În acest domeniu, au fost raportați primii complecși pe bază de ioni cu geometrie octaedrică sau tetraedrică precum Ir(III) și Ag(I), cu proprietăți liotrop-cromonice. Proprietățile luminescente ale complecșilor de Ir(III) au fost studiate în soluție, mezofaze și stări condensate. De asemenea, s-au studiat sistemele obținute prin includerea combinațiilor complexe luminescente pe bază de Ir(III) în silice mezostructurată, în soluții de surfactant sau în învelișul de silice al nanoparticulelor de aur în scopuri multiple: pentru a reduce pierderea luminescenței datorită agregării, pentru a crește stabilitatea prin protejarea cromoforului împotriva degradării chimice, termice sau fotochimice sau pentru a obține nanosisteme hibride spre a fi folosite simultan în detecție și în imagistică (agenți teranostici). S-a arătat că sensibilitatea proprietăților fotofizice ale cromoforului la mediul molecular este un instrument oportun pentru a determina poziția cromoforului în sistem.

În prezenta teză de abilitare, realizările personale ale candidatei sunt prezentate în contextul stadiului actual al cercetării științifice din domeniu pe plan internațional, evidențiind, în mod argumentat și documentat, relevanța și originalitatea contribuțiilor personale. De asemenea sunt prezentate realizările academice și profesionale (coordonări stagii de cercetare, management proiecte, funcții de conducere, coordonări teze de licență, activități de revizie și editoriale), care demonstrează o capacitate bună a candidatei de a coordona echipe de cercetare, de a organiza și gestiona activități didactice.

Cele mai importante realizări științifice se referă la: i) obținerea de metalomesogeni

luminescenți pe bază de metale din blocul *d* cu proprietăți cristalin lichide la temperaturi joase, primele exemple de complecși pe bază de Ir(III) și Ag(I) cu proprietăți liotrop-cromonice; acestea din urmă pot aduce progrese importante prin redefinirea cerințelor structurii moleculare convenționale cromonice sau definirea unei *noi* clase de materiale multifuncționale dinamice ordonate pe bază de combinații complexe ale metalelor din blocul *d* cu *structuri mesogene neconvenționale*; ii) obținerea de nanoplatforme hibride care conțin combinații complexe luminescente spre a fi folosite simultan în imagistică celulară și terapia cancerului, exploatând sinergic efectele fotodinamice și fototermale (PDT) rezultate în urma cuplării dintre proprietățile fotofizice ale combinațiilor complexe și efectul termoplasmonic al nanoparticulelor de aur.

Perspectivile și direcțiile de cercetare care vor contribui la dezvoltarea științifică viitoare a candidatei sunt prezentate în capitolul II. Acesta cuprinde atât continuarea studiilor în direcțiile aplicative de cercetare descrise în teză (electrooptică și biomedicală), propunând noi strategii proiectate care vor aduce rezultate importante și inovatoare, precum și extinderea domeniului de cercetare în spectrul chimiei anorganice.