

POLICARBOHIDRATI MODIFICATI. EXPERIMENT SI SIMULARE

Doctorand: Chim. **Adrian Fifere**
Conducator stiintific: Acad. **Bogdan C Simionescu**

Rezultatele proprii din aceasta lucrare analizeaza abilitatea de complexare a ciclodextrinelor cu substante organice biologice active si cu copolimeri care au proprietati optoelectronice. Un prim capitol analizeaza sinteza complexilor de incluziune intre fullerena (C_{60}) si α -ciclodextrina nativa si modificata chimic cu grupe carboxilice succinoil, in intentia maririi solubilitatii complexilor de incluziune. Capitolul este intregit prin studiul aplicatiilor compusilor sintetizati, prin inglobarea solutiilor apoase ale acestora in geluri si determinarea constrangerilor de natura fizico-chimica ce pot conduce la eliberarea produsilor absorbiti.

In cea de-a doua etapa a realizarii a tezei de doctorat, interesul a fost directionat asupra eficacitatii complexarii lanturilor macromoleculare de (co)polifluorene prin includerea in molecule de α -ciclodextrina, ceea ce conduce la imbunatatirea proprietatilor fizico-chimice (stabilitate chimica, solubilitate, comportarea la actiunea radiatiilor UV).

In ultima parte a tezei, cercetarile s-au axat pe construirea si optimizarea prin metode de calcul cuantic a structurilor moleculare ale unor complexi de incluziune intre ciclodextrine si medicamente antimicotice. In acest scop s-au studiat complexii de incluziune formati intre 5-flucitozina si β - si γ -ciclodextrina.

Articole reprezentative (selectie):

1. **A. Fifere**, T. Budtova, E. Tarabukina, M. Pinteala, S. Mariana, C. Peptu, V. Harabagiu, B. C. Simionescu, *J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem.*, **64**, 83, 2009.
2. A. Farcas, N. Jaroux, P. Guegan, **A. Fifere**, M. Pinteala, V. Harabagiu, *J. Appl. Polym. Sci.*, **110**, 2384, 2008.
3. **A. Fifere**, P. Mariana, S. Mariana, V. Harabagiu, B. C. Simionescu, M. Mracec, *AIP Conf. Proc.*, **1148**, 83, 2009.
4. L. Miron, M. Mares, V. Nastasa, M. Spulber, **A. Fifere**, M. Pinteala, V. Harabagiu, B. C. Simionescu, *J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem.*, **63**, 159, 2009.
5. N. Marangoci, **A. Fifere**, A. Farcas, V. Harabagiu, M. Pinteala, B. C. Simionescu, A. Perichaud, *High Perform. Polym.*, **20**, 553, 2008.