

.....

RAPORT FINAL DE ACTIVITATE - RFA

Numar proiect: 71-062

Perioada acoperită: 18.sept 2007- 30.nov. 2010

Data prezentării decembrie 2010

Elaborat de:

Contractor:

UNIVERSITATEA BABES-BOLYAI CLUJ-NAPOCA

INSTITUTUL DE CERCETARI IN CHIMIE „RALUCA RIPAN”, UBB-ICCRR

Reprezentant autorizat:

Funcția: Rector

Nume și prenume: **Prof. dr. Andrei MARGA**

Semnătura și stampila:

Director economic

Nume și prenume: **ec. Istvan PUSOK**

Semnătura:

Director de proiect :

Nume și prenume: **dr. Elisabeth-Jeanne POPOVICI**

Semnătura:.....

Telefon: 0264 580165 fax:0264 420441

Email: jennypopovici@yahoo.com

Declaram, pe proprie raspundere, ca datele furnizate prin prezentul Raport Final de Activitate sunt reale.

NOTĂ: INFORMAȚIILE CUPRINSE ÎN PREZENTUL RFA VOR FI PUBLICATE.

1. DATE GENERALE

1. DATE GENERALE	
Titlu proiect:	MATERIALE PE BAZA DE CALIXARENE CU PROPRIETATI DE RECUNOASTERE A UNOR SPECII IONICE SI/SAU MOLECULARE DE INTERES BIOLOGIC SI ECOLOGIC- CALIXMAT
Obiectivul principal:	se va limita la 40 cuvinte Realizarea unei platforme experimentale pentru: *sinteza și caracterizarea unor materiale pe baza de calixarene, compusi macrociclici cu structura si proprietati speciale, de recunoastere a unor ioni si/sau molecule de interes biologic si ecologic precum și * evaluarea potentialului lor aplicativ în domeniul senzorilor electrochimici ion-selectiv, tip ISE si respectiv imprimati, tip SPE si al separării unor ioni metalici din mediul apos.
Adresa web a proiectului:	http://institute.ubbcluj.ro/icrr/inorganic/Projects/calixmat/index.htm
Coordonator:	Universitatea Babes-Bolyai ClujNapoca <ul style="list-style-type: none"> • Institutul de Cercetari in Chimie Raluca Ripan, UBB- ICCRR • Facultatea de Chimice și Inginerie Chimică, Catedra de Chimie Anorganică; • Facultatea de Chimice și Inginerie Chimică, Catedra de Chimie Fizică;
Parteneri în consorțiu:	se vor nominaliza persoanele juridice P1- Universitatea Politehnica Bucuresti UPB P2- Universitatea de Medicina si Farmacie Iuliu Hatieganu -UMF, Cluj-Napoca; P3- Institutul National C&D pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare INCDTIM, Cluj-Napoca; P4-INCDO-INOE2000, filiala Institutul de Cercetări pentru Instrumentație Analitică ICIA, Cluj-Napoca
Director de proiect:	dr. Elisabeth-Jeanne Popovici jennypopovici@yahoo.com
Nivelul total de finanțare realizat, din care:	se va completa valoarea totala 1.373.355 lei
❖ buget: ¹	se va completa valoarea de la bugetul de stat 1.373.355 lei
❖ cofinanțare:	se va completa valoarea cofinantarii 0 lei
Rezumat:	<p>Proiectul CALIXMAT are drept scop realizarea unei retele de cercetare-experimentare pentru sinteza, caracterizarea si testarea unor materiale pe baza de calixarene, compusi macrociclici cu structura si proprietati speciale, de recunoastere a unor ioni si/sau molecule de interes biologic si ecologic. Prin experimentari specifice se urmareste evaluarea potentialului lor de utilizare la confectionarea unor senzori electrochimici ion-selectiv, tip ISE (ion-selective electrodes) si respectiv imprimati, tip SPE (screen printed electrodes) precum si la separarea unor ioni metalici din mediul apos.</p> <p>Proiectul dezvolta doua linii de cercetare si anume:1) sinteza si caracterizarea unor produse de tip calixarenic si 2) formarea/studierea unor materiale compozite cu matrice polimerică conductoare tip polianilina, PANI. Prima directie de cercetare urmareste dezvoltarea <i>de noi produse</i> cu abilitate crescută de coordonare care pot fi utilizate</p>

¹ Se va completa Anexa 1

	<p>ca agenti de extractie sau modificatori pentru senzori electrochimici ISE sau SPE, pentru detectia unor specii ionice/ sau moleculare de interes biologic sau ecologic. Cea de-a doua directie de cercetare urmareste prepararea unor noi materiale compozite, cu matrice polimerică clasica tip policlorura de vinil, PVC si respectiv conductoare, tip polianilina, PANI cu scopul utilizarii lor la confectionarea senzorilor tip ISE sau imprimati, SPE. Proiectul conduce la elaborarea unei tehnologii modulare de preparare a unor produse de tip calixarenic, validate experimental precum si la definirea normelor de calitate specifice acestora.</p> <p>Metodologia de cercetare este cea uzuală în știința materialelor. Metodele de investigare utilizate asigura caracterizarea structurală completă prin difracție de raze X, spectroscopie RMN, analiza termica, spectroscopie UV-Vis, FTIR.</p> <p>The CALIXMAT project has the realization of a networks of research-experimental for synthesis, characterization and testing of some calixarene based materials, a macro cyclic compounds with special structure and properties, to recognition of some ions or/and molecules of biological and ecological interests. By specifically experimentation following the estimate of their utilization potential to manufacturing of some electrochemical ion selective sensors, ISE type (ion-selective electrodes) and impregnated SPE type (screen printed electrodes) respectively, as well as the separation of some metallic ions from aqueous medium.</p> <p>The project develops two research directions, namely: 1) synthesis and characterization of some calixarenic type products and 2) formation of some composite materials with conductivity polymeric matrix PANI type. The first direction of research follows the development of a new products with high coordination ability which can be utilized as extraction agents or ionophores for ISE or SPE type electrochemical sensors for detection of some ionic or molecular species of biological and ecological interests. The second direction of research follows the preparation of new composite materials, with classical polymeric matrix of polyvinylchlorid, PVC and conductivity respectively, polyanilin PANI type. The project leads to the elaboration of a modular technology for preparation of some new calixarenic type products, experimentally validated as well as the defining of their specific quality standards.</p> <p>The methodology of the research is usually in the materials science. The investigation methods assure the complete structural characterization by X-ray diffraction, NMR spectroscopy, thermal analyses, UV-Vis and FTIR.</p>
--	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

2. REZULTATE FINALE OBTINUȚE		
Categoria rezultatelor finale conform art. 74 din OG 57/2002 ² (se va marca dupa caz) ³	Obiecte fizice: produs, echipament, instalație etc. <input checked="" type="checkbox"/>	Documentație(documentații de realizare produse/ servicii, proiecte tehnico-economice, know-how etc.) <input type="checkbox"/>
	Tehnologie ⁴ <input checked="" type="checkbox"/>	Plan, schemă <input type="checkbox"/>
	Produs informatic <input type="checkbox"/>	Protocol <input type="checkbox"/>
	Rețetă, formulă <input checked="" type="checkbox"/>	Serviciu/serviciu informatic ⁵ <input type="checkbox"/>

² Se va completa Anexa 2

³ Dacă prin proiect s-a realizat un produs, echipament, instalație se va completa Anexa 3

⁴ Dacă prin proiect s-a realizat o tehnologie se va completa Anexa 4

	Sistem, structură, proces <input type="checkbox"/>	Metodă, tehnică, mecanism <input checked="" type="checkbox"/>
	Studiu ⁶ <input type="checkbox"/>	
Stadiul de realizare al rezultatelor finale (se va specifica numai pentru rezultate de natura obiectelor fizice si/sau tehnologii)	Model conceptual <input type="checkbox"/>	
	Model experimental demonstrativ <input checked="" type="checkbox"/>	
	Model funcțional <input checked="" type="checkbox"/>	
	Prototip <input checked="" type="checkbox"/>	
	Instalație pilot sau echivalent <input type="checkbox"/>	
	Altele / Metoda <input checked="" type="checkbox"/>	
Elementele de noutate aduse prin proiect	se va marca nivelul de noutate: <input checked="" type="checkbox"/> national <input checked="" type="checkbox"/> european <input type="checkbox"/> international	
Participare tineri cercetători	(se vor nominaliza persoanele tinere ≤35 ani care au participat la realizarea proiectului, cu evidențierea procentului de participare față de o normă întreagă) UBB-ICCRR <ul style="list-style-type: none"> • Alina SAPONAR 30% • Adrian Ionut CADIS 5% • Ecaterina BICA 5% • Marius MORAR 10% • Diana BUT 10% • Daniela CIOLOBOC 10% UBB-ChFiz <ul style="list-style-type: none"> • VARVARI Lidia 30% UBB-ChAnorg <ul style="list-style-type: none"> • Petronela Petrar 10% • Tibor-Gabor KOCSOR 3% UPB <ul style="list-style-type: none"> • Stefan Ioan Voicu -25% • Aurelia Cristina NECHIFOR- 25% UMF <ul style="list-style-type: none"> • Cecilia Cristea – 10% • Ede Bodoki – 10% • Veronica Sima (Harceaga) -10% ICIA <ul style="list-style-type: none"> • Nu este cazul 	
Achiziții realizate* (se va marca dupa caz)	Echipamente și aparatură de cercetare la care prețul unitar este de peste 100.000 euro <input type="checkbox"/>	
	Rețele de comunicații specializate <input type="checkbox"/>	
	Baze de date și informații de specialitate <input type="checkbox"/>	
	Echipamente și mijloace moderne de documentare și comunicare <input type="checkbox"/>	
	Alte categorii <input checked="" type="checkbox"/>	

⁵ Dacă prin proiect s-a realizat un serviciu se va completa Anexa 5

⁶ Dacă în cadrul proiectului au fost realizate studii se va completa Anexa 6

* Se va completa Anexa 9 – Listă cu achizițiile realizate prin proiect

Diseminarea rezultatelor proiectului**	Comunicări științifice la seminarii, conferințe, workshopuri internaționale și alte asemenea	se va completa numărul total: 16 , din care 13 ISI și 3 BDI
	Articole publicate	se va completa numărul total: 16
	Cărți publicate	se va completa numărul total 0
	Atlase, dicționare de specialitate	se va completa numărul total 0
	Alte publicații	se va completa numărul total 5 articole/Proceedings

3. VALORIFICAREA REZULTATELOR		
Beneficiarul rezultatelor și modul de valorificare convenit	(dacă e cazul)	
Potențialul de aplicare în economie		
Impact	Descrieți impactul social (dacă e cazul)	
	Descrieți impactul de mediu (dacă e cazul)	
Beneficii estimate prin aplicarea rezultatelor		
Modalități de valorificare a rezultatelor proiectului	Vânzare produs / tehnologie	<input checked="" type="checkbox"/>
	Furnizare de servicii	<input type="checkbox"/>
	Transfer drepturi de proprietate intelectuală	<input type="checkbox"/>
	Altele (se va detalia)	<input type="checkbox"/>
Alte comentarii opționale ale autorilor (în limita a 1 pagină)		

** Se vor nominaliza numai cele care pun în evidență rezultatele obținute exclusiv din cadrul proiectului și se va completa și Anexa 8

Bugetul proiectului pe ani

Nr. Crt.	Etapa	Valoare etapă planificată (lei)	Valoare etapă realizată (lei)
1.	2007		
	Etapa 1	125.000	125.000
2.	2008		
	Etapa 2	844.241	844.241
3.	2009		
	Etapa 3	191.108	191.108
	Etapa4	68.205	68.205
4.	2010		
	Etapa 5	144.801	144.801
	Total	1.373.355	1.373.355

Centralizator rezultate/proiect

	Finalizate Total (nr.)	Finalizate noi (nr.)	Finalizate modernizate (nr.)	Finalizate aliniate la standarde internationale (nr.)	Finalizate certificate (nr.)
Produse/ produse informatice	2	2	0	0	0
Tehnologii	2	2	0	0	0
Servicii/servicii informatice	0	0	0	0	0
Sisteme, structuri, proces	0	0	0	0	0
Metode/tehnici, mecanisme	1	0	1	0	0
Rețete, formule	0	0	0	0	0
Planuri, scheme	0	0	0	0	0
Protocele	0	0	0	0	0
Studii	0	0	0	0	0

FIȘA PRODUS

Numar proiect 71-062

Denumire produs

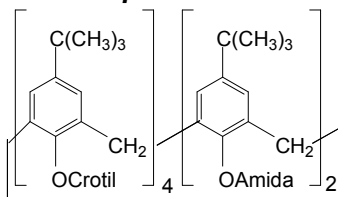
p-terț-butil-diamida-tetracrotil calix[6]arenaCod produs: **C6Am2Cr4**

Valoare/preț estimat al produsului ~120 EUR/1 g

Stadiul de dezvoltare (se va marca):

1. Model functional
- X** 2. Prototip
3. Instalatie pilot sau echivalent

Caracteristici tehnice

Formula/compozitie:

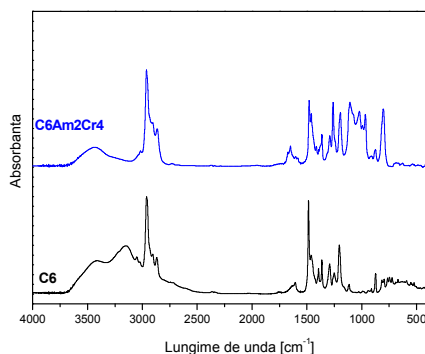
Amida \Leftrightarrow -C₆H₁₂NO \Leftrightarrow -CH₂-C(O)N(CH₂CH₃)₂
 Crotil \Leftrightarrow -C₄H₇ \Leftrightarrow -CH₂-CH=CH-CH₃

Aspect: Pulbere cristalină de culoare albă**Caracteristici structurale:**

Analiza elementală: C = 79.39 %; H = 9.34 %; N=2.26 %.

Spectroscopie ¹H-RMN: Datele spectrale ale produsului C6Am2Cr4, in comparatie cu calixarena de bază *p*-terț-butylcalix[6]arena **C6** sunt prezentate în tabel:

	C6	C6Am2Cr4	
C(CH₃)₃	1.27, s	1.12, s; 1.21, s	<i>Observatie.</i> Prezintă semnale specifice protonilor din scheletul de bază al calixarenei și grupărilor crotil și amidio. Nu se observă semnale la 10.55 ppm corespunzătoare grupărilor OH, ceea ce denotă o substituie totală a calixarenei C6
Ar-CH₂-Ar	3.97, brs	3.85, brs	
N-CH₂-CH₃	-	0.96 - 0.98, t	
N-CH₂-CH₃	-	3.34 - 3.40, q	
-CH=CH-	-	5.45 - 5.67, m	
=CH-CH₃	-	1.62, d	
O-CH₂-CO	-	4.84, s	
O-CH₂-CH=	-	4.24, d	
ArH	7.16, s	6.78, s; 7.01, s	
ArOH	10.55, s	-	

Spectroscopie FTIR. Spectrul de absorbtie a produsului C6Am2Cr4, in comparatie cu calixarena de bază *p*-terț-butylcalix[6]arena **C6** sunt prezentate în figura.**Observatie:**

Prezintă benzile caracteristice al **C6** precum și ale grupărilor amido ($\nu_{C=O} = 1649 \text{ cm}^{-1}$) și crotil ($\nu_{C-H} = 966 \text{ cm}^{-1}$); Nu se observă vibrațiile grupărilor OH din calix[6]arena de baza, ceea ce confirmă funcționalizarea totală a **C6**.

Spectroscopie UV-VIS: Benzile de absorbtie caracteristice sunt situate la 272 nm și respectiv 279 nm.

Produsul nou de tip calixarenic C6Am4Cr2 are o mare abilitate de coordinare a unor

metale tranzitionale și prețioase și se poate utiliza ca:

- agent de extracție pentru metale prețioase, aur sau paladiu din ape reziduale; se folosește dizolvat în clorofom/toluen în procese de extracție lichid-lichid;
- ionofor pentru electrozi electrochimici tip ISE sau SPE, pentru detecția unor metale de interes ecologic; se folosește înglobat în matrici polimerice;

Caracterul inovativ (se va marca):

- X** 1. **Prodot nou**
2. **Prodot modernizat**

Prodotul nou C6Am2Cr4 are caracter de noutate la nivel național și internațional; nu a fost semnalat în literatura de specialitate;

Prodotul de tip calixarenic C6Am2Cr4 este primul derivat cu grupări mixte amido-crotil obținut din p-tert-butil calix[6]arena funcționalizată la partea inferioară cu două grupări amido și patru grupări crotil

Informații privind proprietatea intelectuală

1. Brevete (se va marca):
național
USPTO

PERSOANA JURIDICA DIN CADRUL CONSORTIULUI CARE A DEPUȘ BREVETUL	DENUMIRE BREVET	STADIUL BREVETĂRII *)	MOD DE VALORIFICARE **)	INSTITUȚII/ FIRME UTILIZATOARE/ Volum beneficiu realizat***)

*) se precizează stadiul brevetării (D - dosar depus; A - brevet acordat) precum și numărul dosarului

**) pentru brevete acordate; la mod de valorificare se va preciza (R - aplicare la realizator(i); T - transfer tehnologic, VB - vânzare brevet, VL - vânzare licență, etc)

***) se vor enumera denumirile în clar ale instituțiilor/ firmelor care au preluat și aplică brevetul și valoarea realizată ca beneficiu de către realizatorii brevetului (dacă este cazul)

2. Cerere înregistrare drepturi de autor (se completează în cazul în care nu s-a obținut înregistrarea la ORDA) - numai pentru produsele informatice

Nr. data

3. Înregistrare drepturi de autor (ORDA) - numai pentru produsele informatice

Nr. data

Impact (social, de mediu)

*Descrieți **impactul social**, maximum 100 cuvinte (dacă este cazul):*

*Descrieți **impactul de mediu**, maximum 100 cuvinte (dacă este cazul):*

Prodotul de tip calixarenic p-tert-butil-diamida-tetracrotil calix[6]arena-C6Am2Cr4 poate servi la epurarea apelor reziduale cu conținut de metale tranzitionale și deci la ecologizarea mediului înconjurător.

Prodotul C6Am2Cr4 poate fi utilizat la extracția unor metale de interes tehnologic/metale prețioase din mediul apos. Are o eficiență de extracție η ~30% pentru paladiu și respectiv aur și se poate folosi la valorificarea metalelor prețioase din apele reziduale;

FIȘA PRODUS

Numar proiect: 71- 062

Denumire produs: *Produs de tip calixarenic: p-terț-butil-tetraamida-dicrotil calix[6]arena*Cod produs: **C6Am4Cr2**

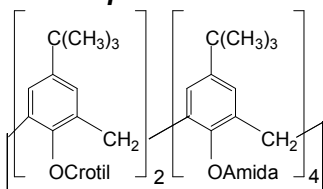
Valoare/preț estimat al produsului ~120 EUR

Stadiul de dezvoltare (se va marca):

1. Model functional
- X** 2. Prototip
3. Instalatie pilot sau echivalent

Caracteristici tehnice

Formula/compozitie:



Amida \leftrightarrow -C₆H₁₂NO \leftrightarrow -CH₂-C(O)N(CH₂CH₃)₂
 Crotil \leftrightarrow - C₄H₇ \leftrightarrow -CH₂-CH=CH-CH₃

Aspect: Pulbere alba

Caracteristici structurale:

Analiza elementală: C = 77.09 %; H = 8.94 %; N=3.36 %

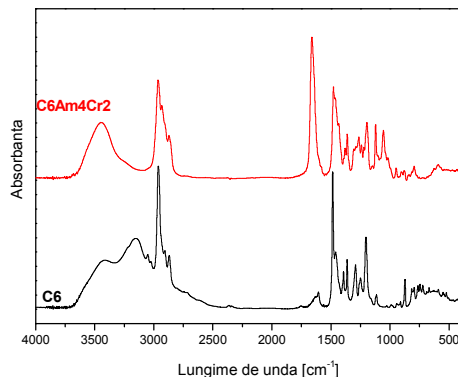
Spectroscopie ¹H-RMN. Datele spectrale ale produsului C6Am4Cr2, în comparație cu calixarena de bază p-terț-butylcalix[6]arena **C6** sunt prezentate în tabel:

	C6	C6Am4Cr2
C(CH₃)₃	1.27, s	1.13, s; 1.19, s
Ar-CH₂-Ar	3.97, brs	3.84, brs
N-CH₂-CH₃	-	0.96 - 0.98, t
N-CH₂-CH₃	-	3.36 - 3.42, q
-CH=CH-		5.65 - 5.76, m
=CH-CH₃		1.68, d
O-CH₂-CO		4.48, s
O-CH₂-CH=		4.21, d
ArH	7.16, s	6.88, s; 7.08, s
ArOH	10.55, s	-

Observatie.

Prezintă semnale specifice protonilor din scheletul de bază al calixarenei și grupărilor crotil și amidio. Nu se observă semnale la 10.55 ppm corespunzătoare grupărilor OH, ceea ce denotă o substituție totală a calixarenei **C6**

Spectroscopie FTIR . Spectrul de absorbție a produsului C6Am4Cr2, în comparație cu calixarena de bază p-terț-butylcalix[6]arena **C6** sunt prezentate în figura.



Observatie:

Prezintă benzile caracteristice al **C6** precum și ale grupărilor amido ($\nu_{C=O} = 1661 \text{ cm}^{-1}$) și crotil ($\nu_{C-H} = 958 \text{ cm}^{-1}$); Nu se observă vibrațiile grupărilor OH din calix[6]arena de baza, ceea ce confirmă funcționalizarea totală a **C6**.

Spectroscopie UV-VIS: Benzile de absorbție caracteristice sunt situate la 274 nm și respectiv 279 nm.

Produsul nou de tip calixarenic C6Am4Cr2 are o mare abilitate de coordonare a unor metale tranzitionale și prețioase și se poate utiliza ca:

- agent de extracție pentru metale prețioase, aur sau paladiu din ape reziduale; se folosește dizolvat în cloroform/toluen în procese de extracție lichid-lichid;
- ionofor pentru electrozi electrochimici tip ISE sau SPE, pentru detecția unor metale de interes ecologic; se folosește înglobat în matrici polimerice;

Caracterul inovativ (se va marca):

1. Produs nou
 2. Produs modernizat

Produsul nou **C6Am4Cr2** are caracter de noutate la nivel național și internațional; nu este semnalat în literatura de specialitate;

Produsul de tip calixarenic C6Am4Cr2 este primul derivat cu grupări mixte amido-crotil obținut din p-terț-butil calix[6]arena funcționalizată la partea inferioară cu patru grupări amido și două grupări crotil

Informații privind proprietatea intelectuală

1. Brevete (se va marca):

naționale
USPTO

PERSOANA JURIDICA DIN CADRUL CONSORTIULUI CARE A DEPUȘ BREVETUL	DENUMIRE BREVET	STADIUL BREVETĂRII *)	MOD DE VALORIFICARE **)	INSTITUȚII/ FIRME UTILIZATOARE/ Volum beneficiu realizat (***)

*) se precizează stadiul brevetării (D - dosar depus; A - brevet acordat) precum și numărul dosarului și data

**) pentru brevete acordate; la mod de valorificare se va preciza (R - aplicare la realizator(i); T - transfer tehnologic, VB - vânzare brevet, VL - vânzare licență, etc)

***) se vor enumera denumirile în clar ale instituțiilor/ firmelor care au preluat și aplică brevetul și valoarea realizată ca beneficiu de către realizatorii brevetului (dacă este cazul)

2. Cerere înregistrare drepturi de autor (se completează în cazul în care nu s-a obținut înregistrarea la ORDA) - numai pentru produsele informatice

Nr. data

3. Înregistrare drepturi de autor (ORDA) - numai pentru produsele informatice

Nr. data

Impact (social, de mediu)

Descrieți impactul social, maximum 100 cuvinte (dacă este cazul):

Descrieți impactul de mediu, maximum 100 cuvinte (dacă este cazul):

Produsul de tip calixarenic, p-terț-butil-tetramida-dicrotil calix[6]arena-**C6Am4Cr2** poate servi la epurarea apelor reziduale cu conținut de metale tranzitionale și deci la ecologizarea mediului înconjurător.

Produsul **C6Am2Cr4** poate fi utilizat la extracția unor metale de interes tehnologic/metale prețioase din mediul apos. Are o eficiență de extracție $\eta \sim 67\%$ pentru paladiu și $\eta > 54\%$ pentru aur și se poate folosi la valorificarea metalelor prețioase din apele reziduale.

FIȘA TEHNOLOGIE

Numar proiect 71-062

Denumire tehnologie: *Tehnologie micropilot de producere a unor produse de tip calixarenic de interes ecologic și biologic*

Valoare/preț estimat al tehnologiei: 25.000 lei

Mod de aplicare, prin echipamente, utilaje etc. și stadiul de dezvoltare al acestora:

1. Model experimental / functional
 2. Prototip
 3. Instalatie pilot sau echivalent

Caracterul inovativ:

1. Tehnologie nouă
 2. Tehnologie modernizată

Descrieți în ce constă caracterul inovativ – nivel național/european/internațional. (Se explică în maximum 100 cuvinte)

Tehnologia propusă are elemente de noutate națională și internațională, fiind destinată obținerii unei game de produse de tip calixarenic de interes ecologic și biologic, produse noi neamențate în literatura de specialitate.

Tehnologia conduce la produse de tip calixarenic utilizabile ca:

a) agenți de extracție ai metalelor prețioase/paladiu, rodiu, platina, aur din mediu apos; b) ionofori pentru electrozi ion-selectivi clasici tip ISE pentru detectia/monitorizarea unor ioni de interes ecologic (Ni, Zn, Co) sau biologic (Na, K, Ca);

c) ionofori pentru electrozi ion-selectivi imprimați tip SPE pentru detectia/monitorizarea unor ioni/molecule de interes biologic.

În România se comercializează *alte* produse de tip calixarenic/ionofori de proveniență străină.

Informații privind proprietatea intelectuală

Brevete(se va marca):

- naționale
- USPTO

PERSOANA JURIDICA DIN CADRUL CONSORTIULUI CARE A DEPUȘ BREVETUL	DENUMIRE BREVET	STADIUL BREVETĂRII *)	MOD DE VALORIFICARE **)	INSTITUȚII/ FIRME UTILIZATOARE/ Volum beneficiu realizat***)
-	-	-	-	-

*)se precizează stadiul brevetării (D - dosar depus; A - brevet acordat) precum și numărul dosarului

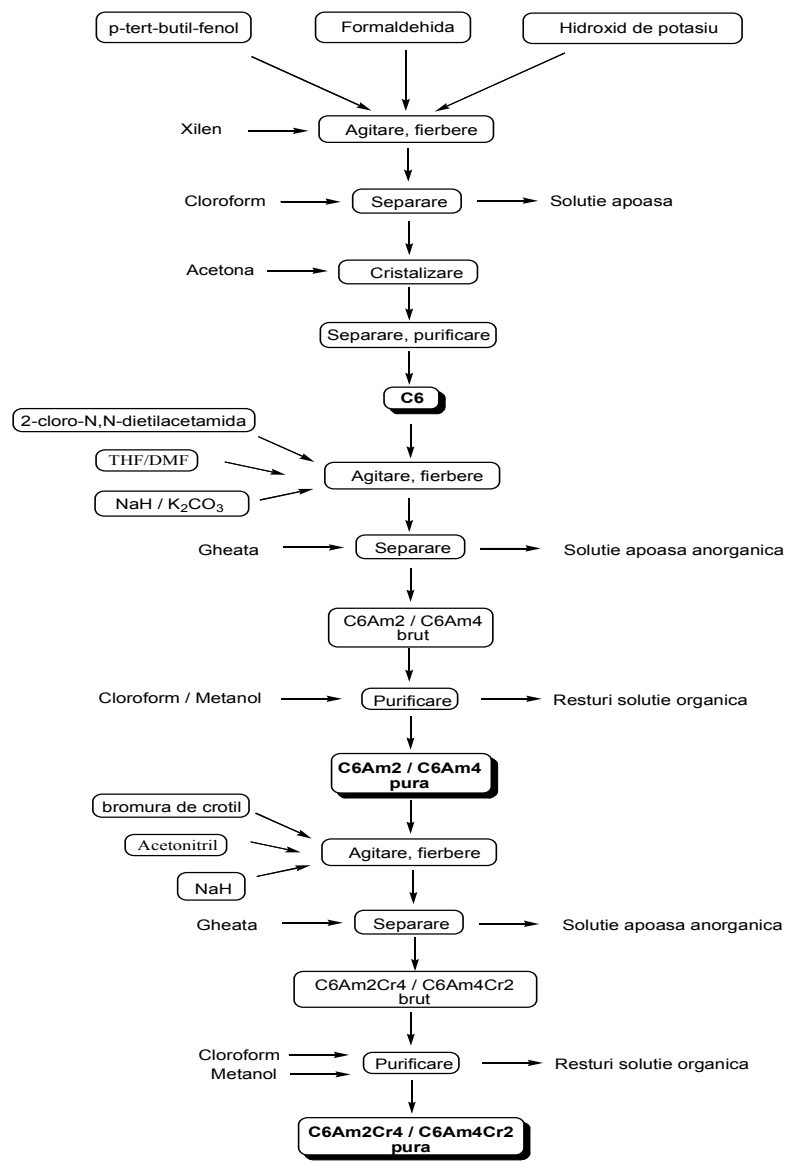
**)pentru brevete acordate; la mod de valorificare se va preciza (R - aplicare la realizator(i); T – transfer tehnologic, VB - vânzare brevet, VL – vânzare licență, etc)

***)se vor enumera denumirile în clar ale instituțiilor/ firmelor care au preluat și aplică brevetul și valoarea realizată ca beneficiu de către realizatorii brevetului (dacă este cazul)

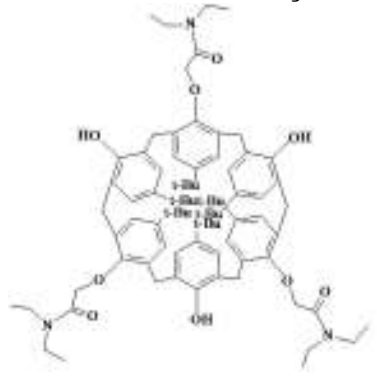
Caracteristici tehnice

Tehnologia modulară, fiabilă permite obținerea unor produse de tip calixarenic, derivați cu grupări mixte amido-crotil obținute prin funcționalizarea la partea inferioară p-tert-butil calix[6]arenei.

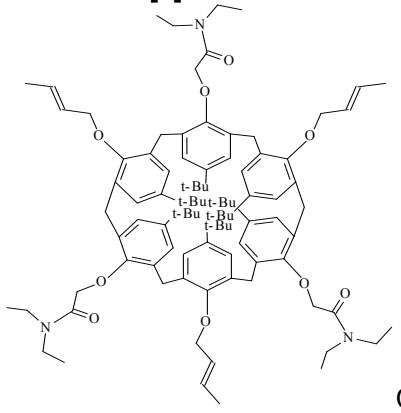
Procesul tehnologic propune obținerea produsilor intermediari de tip **C6Am2 / C6Am3/ C6Am4** și a produșilor finali de tip **C6Am2Cr4/ C6Am3Cr3/C6Am4Cr2** de interes pentru aplicațiile derivate din proprietatea de recunoaștere a speciilor ionice sau moleculare de interes ecologic sau biologic (vezi schema).



Produse de tip calixarenic, derivați cu grupări mixte amido-crotil obținute prin funcționalizarea p-tert-butil calix[6]arenei



C6Am3



C6Am3Cr3

Tehnologia propusă a fost adaptată pentru sinteza a 26 de produse de tip calixarenic i.e. calixarene modificate chimic, din care 18 sunt produse noi, ne-semnalate în literatura de specialitate.

Produsele noi de tip calixarenic au o mare abilitate de coordinare a unor metale tranzitionale și prețioase și se poate utiliza ca:

- agenți de extracție pentru metale prețioase, aur sau paladiu din ape reziduale. Se folosesc dizolvaie în cloroform/toluen în procese de extracție lichid-lichid;
- ionofori pentru electrozi electrochimici tip ISE pentru detecția unor specii ionice de interes ecologic (Co^{2+} , Ni^{2+} , Zn^{2+}) sau biologic (K^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Na^+ , Li^+ , NH_4^+); Se folosesc înglobate în matrici polimerice;
- ionofori pentru electrozi electrochimici tip SPE, pentru detecția unor specii moleculare de interes biologic (produse medicamentoase, betablocante sau anestezice);

Electrozi ISE și SPE confecționați cu produse de tip calixarenic ca ionofori



Electrozi ion selectivi ISE tip seringă



Electrozi imprimați SPE

Impact (social, de mediu)

Tehnologia modulară permite obținerea unor produse de tip calixarenic, derivați cu grupări mixte amido-crotil, cu potențial aplicativ în domeniul ecologic i.e. monitorizarea metalelor tranzitionale din apele reziduale, extracția metalelor prețioase și valorificarea apelor reziduale corespunzătoare, sau în domeniul biologic i.e. determinarea selectivă a ionilor de metale alcaline din fluide biologice. S-a demonstrat astfel potențialul aplicativ al produsilor de tip calixarenic cu grupări amido și crotil:

- **C6Am3**-ionofor pentru determinarea Na^+ din fluide biologice cu nivel scăzut de K^+ ;
- **C6Am3**- ionofor pentru monitorizarea Ni^{2+} în ape reziduale care conțin și Co^{2+} sau Zn^{2+} ;
- **C6Cr3Am3** -ionofor pentru determinarea K^+ ;
- **C4Am4** –agent de extracție pentru Pd^{2+} ($\eta > 75\%$);
- **C4Am2**- agent de extracție pentru Au^{3+} ($\eta > 70\%$)
- **C6Cr2Am4** agent de extracție pentru Pd^{2+} ($\eta > 67\%$) sau Au^{3+} ($\eta > 54\%$)

FIȘA TEHNOLOGIE

Numar proiect **71-062**Denumire tehnologie: **Tehnologie de obtinere a membranelor conductoare psf/pani****Valoare/preț estimat al tehnologiei: 10.000 lei**

Mod de aplicare, prin echipamente, utilaje etc. și stadiul de dezvoltare al acestora:

- X** 1. Model experimental / functional
 2. Prototip
 3. Instalatie pilot sau echivalent

Caracterul inovativ:

- X** 1. Tehnologie nouă
 2. Tehnologie modernizată

Descrieți în ce constă caracterul inovativ – nivel național/european/internațional. (Se explică în maximum 100 cuvinte)

Tehnologie de obtinere a membranelor conductoare PSf/PANI permite obtinerea membranelor simetrice și asimetrice de tip compozit: polisulfona-polianilina. Noutatea tehnica consta în obtinerea prin inversie de faza cu reacție chimica. Tehnologia fiabila și versatila permite obtinerea membranelor conductoare pentru dializa și senzori dar și a membranelor pentru nano și ultra filtrare. Porozitatea membranelor se regleaza prin alegerea solventului pentru polisulfona și a sistemului de coagulare. Tehnologia difera de cele cunoscute prin compozitia solutiei de turnare și a bai de coagulare.

Informații privind proprietatea intelectuală

Brevete(se va marca):

- naționale
- USPTO

PERSOANA JURIDICA DIN CADRUL CONSORTIULUI CARE A DEPUȘ BREVETUL	DENUMIRE BREVET	STADIUL BREVETĂRII *)	MOD DE VALORIFICARE **)	INSTITUȚII/ FIRME UTILIZATOARE/ Volum beneficiu realizat***)
-	-	-	-	-

*) se precizează stadiul brevetării (D - dosar depus; A - brevet acordat) precum și numărul dosarului și data

**) pentru brevete acordate; la mod de valorificare se va preciza (R - aplicare la realizator(i); T – transfer tehnologic, VB - vânzare brevet, VL – vânzare licență, etc)

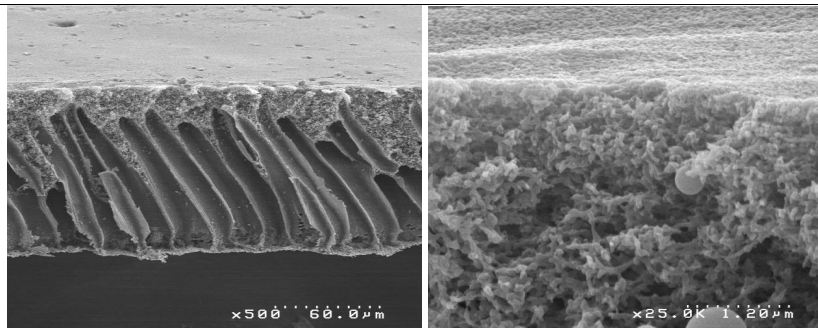
***) se vor enumera denumirile în clar ale instituțiilor/ firmelor care au preluat și aplică brevetul și valoarea realizată ca beneficiu de către realizatorii brevetului (dacă este cazul)

Caracteristici tehnice

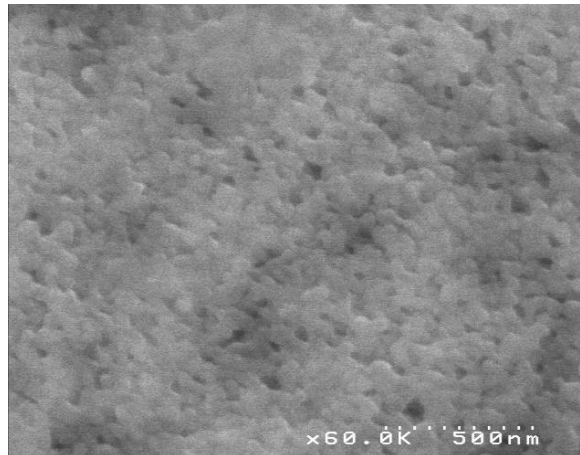
Tehnologia elaborata permite obtinerea de membrane:

- cu capacitate de schimb ionic (1,7 mval/g)
- grosime 0,1-0,4 μm
- dimensiunea porilor: 0,1 sau 0,01 μm;
- compozitie: 0,1-5% PANI in PSf

Membranele conductoare au performante comparabile cu NAFION (45% în electro-dializa) și au un preț de 10 ori mai scăzut.



Sectiune Membrana PSf/PANI



Sistemul poros superficial al membranei PSf/PANI

Impact (social, de mediu)

Descrieți impactul social, maximum 100 cuvinte (daca este cazul):

Membranele obtinute sunt componente esentiale ale tehnologiilor ecologice si de ecologizare.

Descrieți impactul de mediu, maximum 100 cuvinte (daca este cazul):

Membranele PSf/PANI pot fi integrate in sisteme de control al calitatii mediului.

Centralizator brevete

Brevete	Total (nr.)	Depuse(nr.)	Obtinue(nr.)
Nationale	0	0	0
USPTO (United States Patent and Trademark Office)	0	0	0

Nr. crt.	NUME AUTORI	TITLUL ARTICOLULUI/ CĂRȚII / COMUNICĂRII ȘTIINȚIFICE	REVISTA /VOLUMUL/ EDITURA IN CARE A APARUT / CONFERINȚA LA CARE S-A COMUNICAT
ARTICOLE ISI			
1	A. Saponar, I.Silaghi-Dumitrescu, E.-J. Popovici ; N. Popovici,	Calix[N]Arene Derivatives With Binding Properties Toward Eu ³⁺ Metal Cation	Studia Universitatis Babes-Bolyai, Chemia,XLII, 4, 2007 , 67-74
2	N.Fleuret, S. Paic, G. Nemes , R.Septelean, P. Petrar, I. Silaghi-Dumitrescu,	Lower rim silyl substituted calix[8]arenes	Studia Universitatis Babes Bolyai, seria Chemia, LIV (3), 2009 , 81-88
3	L.Varvari, S.A.Dorneanu, I.C.Popescu	Potassium-Selective Electrode based on a calix[6]arenic ester	Studia Universitatis Babes Bolyai, seria Chemia, LIV (3), 2009 , 247-254;
4	F.D. Balacianu; A.C. Nechifor; R.Bartos	Synthesis and characterization of Fe ₃ O ₄ magnetic particles-multiwalled carbon nanotubes by covalent functionalization",	Optoelectronics and Advanced Materials-Rapid Communications, 3(3), 2009 , 219-222;
5	A. Saponar, E.J.Popovici, R.Grecu, I.Silaghi-Dumitrescu, N. Popovici,	Synthesis of ester derivatives of calix[n]arene	Studia Universitatis Babes Bolyai, seria Chemia, LIV (4), 2009 , 203-210 (in press).
6	A. Saponar ,E.-J. Popovici , I.Silaghi-Dumitrescu, N. Popovici	Synthesis of narrow rim calix[n]arene derivatives with ionophore properties,	Revista de Chimie 60(3) 2009 , 278-282
7	A. Saponar, E.-J. Popovici, I.Perhaita, N. Popovici, I. Silaghi-Dumitrescu	Studies On The Europium And Palladium Extraction With Some Calix[6]Arene Derivatives	Studia Universitatis Babes-Bolyai, Chemia, XLV (2), 2010 , 133-143;
8	G. Duțu, C.Cristea, E Bodoki, V. Hârceagă, A.Saponar, E. J.Popovici, R. Săndulescu,	The electrochemical behavior of some beta-blockers on screen printed electrodes modified with calixarene	Farmacia, 58 (4), 2010 , 430-446
9	S.I.Voicu, N.D. Stanciu, A C.Nechifor, D. I. Vaireanu, G.Nechifor	Synthesis and Characterisation of Ionic Conductive Polysulfone Composite Membranes	Romanian Journal Of Information Science And Technology, 12 (3) 2009 , 410-422
10	S.I Voicu, F.Aldea, A.C.Nechifor	Polysulfone-carbon Nanotubes Composite Membranes.Synthesis and characterization	Revista de Chimie (Bucharest), 61(9) 2010
11	A. Saponar, E.-J. Popovici, G. Nemes, N.Popovici, A. I.Cadis , I. Perhaita,I. Silaghi-Dumitrescu	Synthesis and Properties Of N,N-Diethylacetamido Derivatives Of <i>P-Tert-Butyl</i> Calix[N]Arene	Revista de Chimie (Bucharest), 2011, in press
12	G.Duțu, C.Cristea, E Bodoki, V. Hârceagă, A.Saponar, E.-J. Popovici, R. Săndulescu	The Electrochemical Behavior of Some Local Anesthetics on Screen Printed Electrodes Modified With Calixarene,	Farmacia, 2011, in Press
13	A. Cuciureanu, G. Batrinescu, N.N. Badea, D. A. Radu, G. Nechifor	The Influence of Changing the Polyaniline And Polysulphone Ratio on Composite Psf-Pani Membranes Performances	Materiale Plastice, 1, 2011, 000-000, (in press)

ARTICOLE DIN BAZE DE DATE INTERNATIONALE BDI			
1	N. Popovici, T. Ursales, A. Saponar, E.-J. Popovici,	Synthesis and Characterization of the New Phosphorylated calix[4]resorcinarene derivatives	Acta Universitatis Cibiniensis Seria F Chemia 11, 2008-2 , 39-45.
2	N. Popovici, E.-J. Popovici, A.Saponar, I.Silaghi-Dumitrescu, T.Ursales	Preparation of some calix[4]pyrogallolarenes derivatives by solvent-free synthesis route	Acta Universitatis Cibiniensis Seria F Chemia, 12, 2009-2 , 55.
3	F.D. Balacianu, R. Bartos, A.C. Nechifor,	Organic-inorganic membrane materials	Sci. Bull., Series B, No.2, 2008, ISSN 1454-2331 (in Press)
CARTI			
Nu este cazul			
COMUNICARI STIINTIFICE NATIONALE			
1	E. Bodoki, C. Cristea, G. Pipaș, R. Săndulescu	Comportamentul electrochimic al unor electrozi modificați cu calixarene,	Congresul Național de Farmacie, 13 – 16 oct. 2010 , Târgu Mureș
2	G. Duțu, C.Cristea, E. Bodoki, V.. Hârceagă, A. Saponar, E.-J.Popovici, R. Săndulescu	Studiul electrochimic al unor beta-blocante și anestezice locale pe electrozi planari imprimați modificați cu calixarene	Zilele UMF Iuliu Hațieganu, Dec. 2009 , Dec. 2010 , Cluj-Napoca
3	C. Cristea, R. Săndulescu, I. O. Marian	Studii de spectroscopie de impedanță pe electrozi planari imprimați modificați cu calixarene	Zilele UMF Iuliu Hațieganu, Dec.2009, Dec. 2010 , Cluj-Napoca
CONGRESE/ SIMPOZIOANE/CONFERINTE INTERNATIONALE			
1	N.Popovici, A.Saponar, E.-J.Popovici, I.Silaghi-Dumitrescu	Synthesis of some narrow rim calix[n]arene derivatives with cation binding abilities	2nd European Chemistry Congress, EuCheMS2008 (Budapesta) Ungaria ID 13231/ I.O-S / P-093
2	E.-J.Popovici, A.Saponar, R.Grecu, D.But, P.Marginean, N.Popovici,	Calixarene derivatives immobilised on porous materials for metal separation	2nd European Chemistry Congress, EuCheMS 2008 (Budapesta) Ungaria; ID 13242/ VI.3 / P-025.
3	S.I.Voicu, A.C. Nechifor, S. Mihai, G. Nechifor	New Composite Membranes Polysulfone-Polyaniline-Nanofillers for Protein Separations	Conference of Biomaterials and Medical Devices, BIOMMED2008 (Bucuresti) Romania
4	L.Varvari, S.A. Domeanu, I. C.Popescu (oral)	Calix[6]arene Ester as Ionophore for Ion-Selective Electrodes”	2nd International Conference on Advanced Materials and Systems, ICAMS 2008 (Bucuresti) Romania
5	F. Balacianu, R. Bartos, S.I. Voicu, A.C. Nechifor;	Magnetic Nanoparticles - Carbon Nanotube Nanocomposites for Heavy Metals Removal from Aqueous Solutions	The International Conference on Materials Science and Engineering, BRAMAT 2009 (Brasov) Romania
6	S.I. Voicu, L. Iarca, F. Aldea, Gh. Nechifor	Ionic Conductive Polysulfone Blend Composite Membranes	The International Conference on Materials Science and Engineering, BRAMAT 2009 (Brasov) Romania
7	A.C. Nechifor, R.Bartos, S. I. Voicu, G.Nechifor	Heavy metals magnetic removal from aqueous solutions using Fe ₂ O ₃ magnetic nanoparticles functionalized with multiwalled carbon nanotubes	Conferinta NANOTECH INSIGHT 2009 (Barcelona) Spania
8	S. I.Voicu, A. C.Nechifor, G. Nechifor	Polysulfone – doped amino carbon nanotubes composite membranes for gas sensing applications	Conferinta NANOTECH INSIGHT 2009 , Barcelona, Spania (28 mar – 2 apr 2009)
9	L. Iarca, A. C.Nechifor, S.I.Voicu, G.Nechifor	Synthesis of three component nanocompozite membranes	Romanian International Conference on Chemistry and Chemical Engineering,

			RICCCE16, 2009 (Sinaia) ROMANIA
10	C.Trisca-Rusu, S.I.Voicu, D.I.Vaireanu, G.Nechifor	Morphological and structural characteristics of PSf/PANI composite membranes	Romanian International Conference on Chemistry and Chemical Engineering, RICCCE16, 2009 (Sinaia) ROMANIA
11	C. Trisca-Rusu, S.I. Voicu, A.C. Nechifor, G. Nechifor.	Magnetite nanoparticles – crown ether for magnetic removal	XXII International Symposium „ARS SEPARATORIA 2009”, (Kudowa Zdrój) Poland,
12	L.Varvari, S-A. Dorneanu, I.C.Popescu	New Calix[4]arenic Compound as Ionophore for Cation-Selective Electrodes	Symposium L “Bio & Chem Sensors and Transducers: from Materials to Systems”, E-MRS Spring Meeting 2009, (Strasbourg) France,
13	S.I.Voicu, G. Nechifor	Polysulfone membrane reactor for carbon nanotubes functionalization	Simpozionul « Network Young Membrains NYM 2009 (Mèze) France
14	G. Duțu, C. Cristea, E. Bodoki, V. Hârceagă, A. Saponar, E.-J. Popovici, R. Săndulescu	Electrochemical study of some betablockers and local anesthetics on planar electrodes modified with calixarenes	Conference Drug Analysis 2010 (Anvers) Belgia
15	C. Cristea, A.Marian, N. Bonciocat, I. O. Marian, R. Săndulescu	Spectroelectrochemical studies of some modified electrodes used in pharmaceutical analysis	Conference Drug Analysis 2010 (Anvers) Belgia
ATLASE, DICTIONARE DE SPECIALITATE			
Nu este cazul			
ALTE PUBLICATII			
1	S.I. Voicu, A.C. Nechifor, S. Mihai, G. Nechifor,	New Composite Membranes Polysulfone-Polyaniline-Nanofillers for Protein Separations”	Proceedings of International Conference of Biomaterials and Medical Devices, Bucharest- 2008, CD,
2	L. Varvari, S. A. Dorneanu, I. C. Popescu	„Calix[6]arene Ester as Ionophore for Ion-Selective Electrodes”,	Proceedings of ICAMS 2008 2nd International Conference on Advanced Materials and Systems, Bucuresti,- 2008, CD, p. 114-119
3	L. Varvari, S. A. Dorneanu, I. C. Popescu	Cation-Selective Electrodes based on Calix[6]arenic Compounds,	Proceedings of 8th International Symposium on “Metal Elements in Environment, Medicine and Biology”, Timisoara- 2008, CD, p.1-4
4	C. Cristea, E. Bodoki, S. Mirel, R. Sandulescu	Electrochemical methods and sensors for food quality control,	Proceedings of the „9th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry- 2008,CD, p 63-70.
5	S.I. Voicu, A. C.Nechifor, G. Batrinescu, G. Nechifor	Synthesis of new composite membranes polysulfone-polyaniline,	Proceedings of the XXXIII International Symposium on Physico-Chemical Methods of Separations Ars Separatoria 2008, ISBN 978-83-231-2208-1, pg. 353-356.

Lista achizițiilor realizate în cadrul proiectului

Denumire	Categorie de achiziții***	Valoarea / Valoarea decontată (lei)	Locație
Instalație De Uscare În Vid	Alte categorii	27.979/ 27.979	UBB-ICCRR
Spectrometru De Emisie Optica Model ICP-OES OPTIMA 2100-DV	Alte categorii	222.483 /162.483	UBB-ICCRR
Aparat De Determinare A Suprafetei Specifice	Alte categorii	159.159/ 39.159	UBB-ICCRR
Calculator ATU CINEMA	Alte categorii	3.719 /3.719	UBB-ICCRR
Instalație Pentru Vid Înaintat Din Sticla	Alte categorii	10.000/10.000	UBB-ChAng
UPGRADE – Licența ADF	Alte categorii	1.000 /1.000	UBB-ChAng
Licența ADF-GUI	Alte categorii	720 / 720	UBB-ChAng
Calculator Intel Core 2 Duo 2 Buc.	Alte categorii	4.750/ 4.500	UBB-ChFiz
Autosempler Pentru As-30	Alte categorii	53.312/ 53.312	UMF
Omogenizator- Vortex Pulse Mixer	Alte categorii	8992 /6.445	UMF
Omogenizator Vortex - Accesorii	Alte categorii	1.605/1.605	UMF
TOTAL PROIECT		493.721/310.923	

*** A se vedea *Achiziții realizate de la 2 – Rezultate finale obținute*