

**UNIVERSITATEA DIN BUCUREȘTI
FACULTATEA DE CHIMIE
ȘCOALA DOCTORALĂ ÎN CHIMIE**

REZUMATUL TEZEI DE DOCTORAT

**BIO-COMPOZITE REZULTATE PRIN PROCESAREA
BIOCATALITICĂ DE DEȘEURI LIGNINICE**

Doctorand:

Ion Sabina Gabriela

Conducător doctorat:

Prof. univ. dr. Vasile Pârvulescu

2024

Bio-compozite rezultate prin procesarea biocatalitică de deșeuri ligninice

Teza de doctorat “Bio-compozite rezultate prin procesarea biocatalitică de deșeuri ligninice” a avut ca scop sinteza unor materiale ligno-polimerice prin derivatizarea ligninei native și prin oxi-polimerizarea monolignolilor cu co-monomeri de interes industrial. Ambele alternative de sinteză au avut la bază metode catalitice enzimatică în vederea generării controlate a unor materiale noi cu proprietăți fizico-chimice îmbunătățite.

Lignina și lignina funcționalizată oferă o gamă largă de aplicații în diverse domenii, de la biomedicină la materiale avansate și stocarea energiei. Abundența lor, biocompatibilitatea și proprietățile unice fac din lignină și derivații acesteia candidați promițători pentru soluții durabile și ecologice în mai multe industrii. Numeroase studii științifice publicate în ultimii zece ani demonstrează interesul crescând al cercetărilor pentru dezvoltarea unor noi posibile aplicații precum prepararea compozitelor biodegradabile sau sinteza de nanoparticule și nanostructuri cu activitate antimutagenă și antioxidantă. Aceste aplicații valorifică generarea de proprietăți noi fizice și chimice diferite de cele furnizate de natură. Ca un exemplu, polimerizarea prin reacții de cuplare radical-radical controlate chimic poate conduce la formarea de legături C-C și C-O-C similare cu cele din lignină. Pe această cale are loc modificarea heterogenității structurale existente cu dispunerea controlată a entităților constituente și generarea unor proprietăți noi.

Teza este structurată în șase capitole. Primul capitol prezintă o imagine de ansamblu asupra biomasei, trecând în revistă tipurile de biomasă utilizate frecvent ca sursă regenerabilă de carbon. În consecință, acest capitol se concentrează asupra biomasei de tip lignină, luând în considerare tipurile de lignină din natură, proprietățile ligninei și metodele de extracție.

Capitolul 2 descrie principalele reacții chimice de modificare a structurii și proprietăților ligninei. Funcționalizarea ligninei poate avea loc prin transformări ale grupării hidroxil, carboxil, metoxi sau prin transformări ale inelului aromatic. În plus, pot fi generate materiale ligno-polimerice cu proprietăți noi comparabile cu lignina inițială prin intermediul reacțiilor de oxi-polimerizare ale monomerilor ligninei (monolignoli).

Capitolul 3 are ca scop prezentarea unei metode de sinteză a ligninei artificiale pornind de la monolignoli de tipul alcool coniferilic sau alcool sinapilic, utilizând diferite molecule (precum acidul cafeic) încorporate în structura polimerică. Pentru a genera o structură polimerică asemănătoare ligninei naturale, acidul cafeic a fost utilizat ca agent de legătură pentru acești monolignoli. Acesta este o moleculă naturală, rigidă, în care dubla legătură și ciclul obligă la

aplanizare, folosind gruparea –OH din poziția para, favorabilă geometric. Introducerea unei astfel de molecule asigură atașarea polimerului pe suprafața unui suport solid (ex. suport solid de tipul Amino C2/C6 Metacrilat), conferind proprietăți noi ligno-polimerului rezultat.

Capitolul 4 descrie studiul procesului biocatalitic de oxi-polimerizare a alcoolului coniferilic cu anilină, direct pe suprafața unui suport (Amino C2 Metacrilat sau Amino C6 Metacrilat) funcționalizat cu derivați amino-fenolici. Compozitele rezultate prezintă un strat ligno-polimeric care acoperă suprafața suportului, permițând imobilizarea lipazelor.

Capitolul 5 se focusează asupra unei alte perspective biocatalitice privind derivatizarea ligninei cu anilină prin grefarea grupării –NH₂ cu ajutorul unei metode catalitice enzimatică. Astfel, procesul se realizează cu ajutorul unui agent de oxidare, asistat de un biocatalizator de tip enzimă din clasa peroxidazelor. Această metodă conduce la lignine funcționalizate cu grupări aminice, permițând controlul proprietăților ligno-polimerului rezultat.

În final, capitolul 6 prezintă derivatizarea ligninei (carboximetilare) în prezența unui agent de carboximetilare (dimetilcarbonat) și a lipazei drept biocatalizator. Acest proces permite modificarea controlată a proprietăților fizice și chimice ale ligninei inițiale.

Concluziile generale sunt prezentate la finalul tezei de doctorat.