



C.P. 16 – 162, 062510 – BUCUREȘTI

tel. 021.4113617, fax 021.4114280

e-mail: office@matrixrom.ro, www.matrixrom.ro

Poluanți majori ai mediului: dinitrofenili și dinitrofenil eteri, sinteza, caracterizare chimică, activitate biologică

I. STUDII DE LITERATURA

Introducere

I.A. Dinitrofenoli

I.A.1. Nomenclatura și structură

I.A.2. Metode de obținere

I.A.3. Proprietăți fizice

I.A.4. Proprietăți chimice

I.A.5. Metode de analiză

I.A.6. Toxicitate

I.A.7. Activitatea biologică a dinitrofenolilor

I.A.8. Utilizări

I.A.9. Decontaminare

I.B. Dinitrofenoli orto-alchilati

I.B.1. Istoric și structură

I.B.2. Metode de sinteză

I.B.3. Proprietăți fizice

I.B.4. Proprietăți chimice

I.B.5. Metode de analiză

I.B.6. Toxicitate

I.B.7. Activitatea biologică a dinitrofenolilor orto-alchilati

I.B.8. Decontaminare

I.C. Dinitrofenil eteri

I.C.1. Structură

I.C.2. Metode de sinteză

I.C.3. Proprietăți fizice

I.C.4. Proprietăți chimice

I.C.5. Metode de analiză

I.C.6. Toxicitate

I.C.7. Utilizări

I.B.8. Decontaminare

II. CERCETARI PERSONALE

Obiective

II.1. Cercetări cu privire la sinteza și caracterizarea chimică a unor dinitrofenoli și a derivaților lor

II.1.1. Eteri ai dinitrofenolului

- II.1.2. Alti derivati ai dinitrofenilului
- II.2. Studii spectroscopice
 - II.2.1. Studii spectroscopice asupra unor nitroderivati
 - II.2.2. Studiul reactiilor analitice ale unor di- si trinitroderivati
- II.3. Studii comparative de stingere a fluorescenței cu ajutorul unor nitroderivati
 - II.3.1. Efectul 4,6-dinitro-o-cresolului, 2,5-dinitrofenolului, acidului p-nitrobenzoic si p-nitrobenzoil acil CoA asupra fluorescenței enzimei E376H-MCAD
 - II.3.2. Masurarea fluorescenței triptofanului si stingerea fluorescenței cu 2,4-dinitro-o-cresol
 - II.3.3. Masurarea fluorescenței triptofanului si stingerea fluorescenței cu diferiti mono- si dinitroderivati
 - II.3.4. Efectul unor dinitroderivati asupra fluorescenței fluoresceinei
- II.4. Determinarea unor parametri moleculari ai moleculelor studiate prin modelare computationala
 - II.4.1. Investigatii teoretice asupra proprietatilor moleculare ale unor dinitrofenoli si a derivatilor lor
 - II.4.1.1. Modelarea structurii chimice si a proprietatilor moleculare ale unor dinitrofenoli
 - II.4.1.2. Modelarea structurii chimice si a proprietatilor moleculare ale unor derivati ai dinitrofenilului
 - II.4.1.3. Modelarea structurii chimice si a proprietatilor moleculare ale unor dinitrodioli
 - II.4.1.4. Modelarea structurii chimice si a proprietatilor moleculare ale unor compusi cu grupare amidica
 - II.4.1.5. Modelarea structurii chimice si a proprietatilor moleculare ale unor eteri, tioeteri si amine secundare cu substituent dinitroaromatic
 - II.4.2. Investigatii teoretice asupra proprietatilor unor asocieri moleculare ale dinitrofenolilor si a derivatilor lor cu triptofanul
 - II.4.2.1. Modelarea structurii chimice si a proprietatilor moleculare ale triptofanului
 - II.4.2.2. Modelarea structurii chimice si a proprietatilor moleculare ale unor asocieri moleculare dintre dinitrofenoli si triptofan
 - II.4.2.3. Modelarea structurii chimice si a proprietatilor moleculare ale unor complexi ai nitroderivaților cu triptofanul
 - II.4.3. Stabilitatea asocierilor moleculare
 - II.4.3.1. Modelarea structurii chimice si a proprietatilor moleculare ale unor complexi dintre dinitrofenoli si triptofan
 - II.4.3.2. Modelarea structurii chimice si a proprietatilor moleculare ale unor asocieri moleculare dintre 2,4-dinitroanisol si triptofan
 - II.4.3.3. Modelarea structurii chimice si a proprietatilor moleculare ale unor complexi dintre 2-metil-4,6-dinitrofenol si triptofan
 - II.4.3.4. Modelarea structurii chimice si a proprietatilor moleculare ale unor complexi cu triptofan
 - II.4.3.5. Modelarea structurii chimice și a proprietatilor moleculare ale unor complexi ai unor mono- si dinitroderivați cu triptofanul
 - II.4.4. Corelatii dintre datele teoretice si cele practice
 - II.4.4.1. Dinitrofenolii si asocierile lor moleculare cele mai stabile cu triptofanul

- II.4.4.2. Dinitrofenolul comparativ cu dinitroderivati
- II.4.4.3. Dinitrofenolul comparativ cu acidul 2,4-dinitrobenzoic
- II.4.5. Calcularea energiilor de interactiune
- II.4.6. Entalpia de asociere
- II.4.7. Energii de legatura
- II.4.8. Studiul orbitalilor moleculari
- II.4.9. Studiarea proprietatile fizico-chimice ale complexilor mono- si dinitroderivatilor cu triptofanul cu ajutorul relatiilor lui Pearson
- II.5. Cercetari toxicologice
 - II.5.1. Studii pe plante
 - II.5.1.1. Efectul dinitrofenolilor si al dinitrofenileterilor asupra germinatiei semintelor de grau
 - II.5.1.2. Efectul dinitrofenolilor asupra germinatiei semintelor de grau
 - II.5.1.3. Efectul unor dinitrofenil eteri si al altor compusi de comparatie asupra germinatiei semintelor de grau
 - II.5.1.4. Efectul unor derivati ai nitrofenilului si al altor compusi asupra germinatiei semintelor de grau
 - II.5.1.5. Efectul 2,4-dinitrofenolului comparativ cu al altor inhibitori metabolici asupra germinatiei semintelor de grau
 - II.5.1.6. Efectul 2,4-dinitrofenolului si al sulfatului de magneziu asupra germinatiei semintelor de grau. Cercetari farmacologice
 - II.5.2. Studii pe drojdii
 - II.5.2.1. Efectul 2,4-dinitrofenolului asupra drojdiei
 - II.5.2.2. Efectul unor dinitroderivati asupra drojdiilor
 - II.5.3. Studii comparative
 - II.5.4. Degradarea 2,4-dinitro-6-octilfenilcrotonatului (dinocap) cu ajutorul drojdiei si a semintelor de grau
- II.6. Partea experimentală
- II.7. Concluzii generale

BIBLIOGRAFIE