

**ELECTROZI MODIFICAȚI CHIMIC PE BAZĂ DE DERIVAȚI DE 5-[(AZULEN-1-IL) METILEN]-2-TIOXOTIAZOLIDIN-4-ONĂ PENTRU DETECȚIA IONILOR DE METALE GRELE**

**Conducător Științific:**  
**Prof. Dr. Ing. Eleonora-Mihaela UNGUREANU**

**Doctorand:**  
**Ing. Maria Daniela POP**

S-au obținut electrozi modificați chimic pe bază de derivați de 5-[(azulen-1-il) metilen]-2-tioxotiazolidin-4-onă (**L**) prin metode potențiodinamice și potențiostatice (la diferite potențiale și sarcini de electropolimerizare) din soluții milimolare de **L** în acetonitril conținând 0,1 M perclorat de tetrabutil amoniu. Electrozii modificați obținuți au fost caracterizați prin metoda spectroscopiei de impedanță electrochimică în diferitele etape ale preparării lor. Electrozii modificați obținuți au fost folosiți pentru detecția ionilor de plumb.

Filmele de poli**L** au fost examinate prin microscopie de forță atomică și spectroscopie electronică de baleiaj cuplată cu EDAX. Topografiile probelor analizate au indicat prezența unor formațiuni columnare pe suprafețe. Valoarea rugozității suprafeței a straturilor depuse, calculate din imaginile de topografie, a crescut odată cu creșterea potențialului aplicat pentru electroliza la potențial controlat (CPE) la sarcină de polimerizare constantă. Pentru sarcini diferite, parametrul rugozitate a arătat valori similare, ceea ce indică același comportament pentru straturile obținute la un potențial constant pentru CPE, fără o influență notabilă asupra proprietăților adezive ale acestor suprafețe.

S-au efectuat în premieră calcule de mecanică moleculară asupra unor structuri similare cu **L** funcționalizate cu diferite grupări respingătoare de electroni. Studiul a permis o analiză structurală complexă prin calcularea și evaluarea unei serii de descriptori și proprietăți moleculare legate de reactivitatea și comportarea lor electrochimică, care a fost investigată experimental și cu care acestea au fost corelate. Analiza a fost completată cu hărți ale potențialului electrostatic și ale potențialului de ionizare local cu calcularea nivelelor energetice ale orbitalilor de frontieră moleculari și a unor parametri de reactivitate chimică înrudiți cu aceștia. Au fost calculate proprietăți termodinamice de interes.

University POLITEHNICA of Bucharest, Faculty of Applied Chemistry and Material Science  
Department of Inorganic Chemistry, Physical Chemistry and Electrochemistry

**CHEMICALLY MODIFIED ELECTRODES BASED ON 5-[(AZULEN-1-YL) METHYLENE]-2-THIOXOTHIAZOLIDIN-4-ONE DERIVATIVES FOR HEAVY METAL IONS DETECTION**

**Scientific coordinator:**  
**Prof. Dr. Eng. Eleonora-Mihaela UNGUREANU**

**PhD Student:**  
**Eng. Maria Daniela POP**

Chemically modified electrodes based on derivatives of 5 - [(azulen-1-yl) methylene] -2-thioxothiazolidin-4-one (**L**) have been obtained by means of potentiodynamic and potentiostatic (at different potentials and charges of electropolymerization) methods in millimolar solutions of **L** in acetonitrile containing 0.1 M tetrabutyl ammonium perchlorate. The modified electrodes were studied by electrochemical impedance spectroscopy method in various stages of their preparation. The modified electrodes have been used for detection of lead ions.

Poly**L** films have been examined by atomic force microscopy and scanning electron microscopy (coupled with EDAX). The topographic images of the analyzed samples have shown the presence of certain characteristics of the columnar shape on the layer surface. At constant charge of electropolymerization the roughness values of the surface for the deposited layers, computed in the topographic images, increases together with the applied potential in controlled potential electrolysis (CPE). At different charges, the roughness parameter showed the same behavior for the obtained layers by applying a constant potential in CPE, without having a significant influence over the adhesive properties of these surfaces.

Quantum mechanical calculations on **L** similar structures functionalized with different electrodonating groups have been carried out. The study led to the calculation of a complex structural analysis and assessment of a number of descriptors and molecular properties related to their reactivity and electrochemical behavior, which has been experimentally investigated. The analysis was supplemented with maps of electrostatic potential and local ionization potential, energy levels of frontier molecular orbitals and parameters related with their chemical reactivity. Thermodynamic properties of interest have been also calculated.