

**RAPOART DE AUTOEVALUARE
A ACTIVITĂȚII DESFĂȘURATE ÎN ULTIMII 3 ANI**

- 1) **Numele și prenumele: HĂDĂRUGĂ DANIEL-IOAN**
- 2) **Vechimea totală în muncă (ani): 17, din care: în învățământ superior: 17 ani**
- 3) **Funcția didactică: Șef de lucrări Dr. Ing., din anul: 2004**
- 4) **Doctor din anul: 2003**
- 5) **Fișa sintetică cu punctajul realizat în ultimii 3 ani și listele cu lucrări, în conformitate cu *Criteriile Specifice de Evaluare în UPT* (Anexa 2, fisier Excel).**
- 6) **Alte performanțe în activitatea didactică (alte activități decât cele de la secțiunea 5):**
 - a) Discipline noi asimilate, corelate cu standardele interne/internaționale introduce în planul de învățământ

6a.1) Chimia Compușilor Naturali (Curs; An 3; Secții: CATB, CISOPC, SIP)

6a.2) Medicamente de Sinteză (Curs; An 4; Secție: CISOPC)

6a.3) Medicamente Naturale (Curs; An 5; Secție: ICSO)

6a.4) Intermediari în Sinteza Organică (Curs; An 3; Secție: CISOPC)

6a.5) Aditivi Alimentari (Curs; Master An 2, CAPNP; Master An 1 CAA)

b) Contribuții semnificative aduse programelor analitice

CURSURI:

6b.1) Medicamente de sinteză (contribuții la programa analitică: proiectarea modernă a medicamentelor de sinteză, high throughput screening / chimie combinatorială)

6b.2) Medicamente Naturale (contribuții la programa analitică: proiectarea modernă a medicamentelor, medicamente naturale/modificate noi)

6b.3) Chimia Compușilor Naturali (contribuții la programa analitică: analiza modernă a compușilor terpenoizi volatili-aromatizanți/odoranți)

6b.4) Intermediari în sinteza organică (contribuții la programa analitică: studii de caz în sinteza unor intermediari utilizați în obținerea compușilor bioactivi)

6b.5) Procese Fundamentale în Sinteza Organică (contribuții la programa analitică: aplicații tehnologice pentru procese fundamentale importante în obținerea unor compuși organici cu impact social, economic, asupra mediului)

6b.6) Aditivi Alimentari (contribuții la programa analitică: analiza modernă a aditivilor alimentari, detectarea falsurilor)

ACTIVITĂȚI PRACTICE (LABORATOARE, SEMINARII, PROIECTE):

6b.7) Medicamente de Sinteză (elaborarea unor lucrări de laborator noi, la nivelul actual de cunoaștere, inclusiv de proiectare a medicamentelor)

6b.8) Medicamente Naturale (elaborarea unor lucrări de laborator noi, în special de analiză calitativă și cantitativă)

6b.9) Chimia Compușilor Naturali (elaborarea tuturor lucrărilor de laborator privind analize moderne-identificări și/sau dozări-ale compușilor naturali)

6b.10) Arome și odoranți (elaborarea tuturor lucrărilor de laborator privind analiza senzorială, obținerea și analizele unor compuși odoranți-aromatizanți)

6b.11) Transformări ale alimentelor procesate (elaborarea tuturor lucrărilor de laborator privind degradarea acizilor grași, protejarea acestora prin complexare cu ciclodextrine, separarea acizilor grași saturați/nesaturați, a amilozei și amilopectinei, degradarea alimentelor prin reacția Maillard)

SYLLABUS-URI PENTRU DISCIPLINELE NOI INTRODUSE LA CICLUL DE MASTER:

6b.12) Aditivi alimentari (CAA)

6b.13) Arome și odoranți (PSOFSN)

6b.14) Chimie supramoleculară (MSCIC)

6b.15) Compuși bioactivi (CAPA, CTA, CIPO)

6b.16) Relații structură chimică-activitate biologică (MSCIC)

6b.17) Sinteze de nanostructuri (MSCIC)

6b.18) Sinteze stereospecifice (CIPO)

6b.19) Softuri pentru modelarea în chimie (MSCIC)

- c) Profesor invitat la universități din țară sau străinătate

Nu este cazul

- d) Organizarea unor activități studentești de practică în țară/străinătate

Nu este cazul

- e) Proiecte de diplomă / disertații conduse (medie / an)

Proiecte de diplomă/Lucrări de Licență (7.3 Proiecte de Diplomă/Lucrări de Licență / an):

6e.1) 2011 - 6 Lucrări de Licență (Nicolae Avram, Geanina Bota, Daniel Ciorsac, Thomas Lukaci, Monica Năhup, Nela Presură)

6e.2) 2010 – 1 Lucrare de Licență (Daniel Mutu)

6e.3) 2009 – 15 Proiecte de Diplomă/Lucrări de Licență (Andrei Daniel, Anghelescu Mihaela, Beg Arabela, Binchiciu Emilia, Ciupa Andreea, Dumitrescu Loredana, Gligor Dina, Luca Mihaela, Muntea Camelia, Pantis Alina, Serban Aura, Stefan Liliana, Tanase Ionut, Toth Gabriel, Vasile Adrian)

Lucrări de Disertație (5.3 Disertații / an) :

6e.4) 2011 – 13 Disertații (Daniel Andrei, Andreea Ciupa, Anișoara Dume, Loredana Dumitrescu, Zorina Farkas, Dina Gligor, Corina Gradoe, Ruxandra Moldovan, Camelia Muntea, Alina Pantis, Adrian Paven, Daniel Stan)

6e.5) 2010 – 2 Disertații (Diana Dorobanțu-Robu, Camelia Baba)

6e.6) 2009 – 1 Disertație (Alina Pop)

- f) Conducător de doctorat din anul

i) nr. doctoranzi în stagiul

ii) nr. de teze susținute

Selectat (concurs de dosare) în grupul țintă al programului POSDRU/21/1.5/G/13798 „Scoala doctorală în sprijinul cercetării în context european”.

Îndrumarea unui doctorand în cadrul programului sus-amintit (drd. ing. Carmen Pleșa). Doctorandul și-a finalizat Teza de Doctorat în 27.09.2011 (confirmare Ord. MECTS nr. 6468/7.12.2011)

- g) Contribuții la dezvoltarea bazei materiale în concordanță cu standardele specifice:

i) dezvoltarea laboratoarelor

Am adus contribuții semnificative la amenajarea și dotarea laboratoarelor de Chimia Compușilor Naturali, Medicamente, Aditivi Alimentari, Arome și Odoranți prin:

- proiectarea spațiului de laboratoare de pe str. Telbisz 6, demisol

- achiziționarea de materiale și amenajarea (din surse proprii - din contracte, respectiv din bani personali) spațiului sus-amintit;

- proiectarea și amenajarea din aceleași surse a unei magazii de substanțe la demisolul Departamentului;

- completarea bazei de substanțe necesare desfășurării activităților de laborator amintite prin obținerea unor donații de la universități și firme de profil;

- completarea bazei de aparatură de profil prin achiziționare din granturi de cercetare sau prin obținerea unor aparate moderne în regim de comodat de la universități sau firme de profil;

ii) înzestrarea bibliotecii de specialitate

g.ii.1) Biblioteca UPT deține 5 exemplare din cartea proprie: Compuși Odoranți și Aromatizanti, Ed. Politehnica, Timișoara, 2003, utilă cursurilor de Chimia compușilor naturali și Aditivi alimentari

g.ii.2) La disciplinele de Medicamente, Chimia Compușilor Naturali, Aditivi Alimentari sunt disponibile peste 500 de cărți de specialitate proprii (atât în engleză, cât și în română), dar și câteva mii de articole științifice din domeniile amintite

h) Recunoașteri ale performanțelor didactice educaționale

Rezultatele obținute în cadrul elaborării lucrărilor de licență, proiectelor de diplomă și a disertațiilor au fost valorificate prin prezentarea și publicarea acestora, în urma unor recenzii efectuate de colective de specialitate, la manifestări științifice cu participare internațională și/sau în reviste cotate CNCSIS (B+):

1) **Dorobanțu (Robu), Diana**; Hădărugă, N.G.; **Hădărugă, D.I.**, Antioxidant activity – flavonoid content relationships on *Ficaria verna* Huds. extracts, *International Conference on Chemistry and Chemical Engineering 2010*, May 27-29, Timișoara, P. 317

2) **Hădărugă, D.I.**; **Bals, D.**; Hădărugă, N.G., Insulin-Containing Amino Acids and Oligopeptides/ β -Cyclodextrin Supramolecular Systems: Molecular Modeling and Docking Experiments, *Chem. Bull. "Politehnica" Univ. (Timișoara) 2009*, 54(68-2), 108-113, ISSN 1224-6018

i) Activități de manageriat în procesul de învățământ

- **Membru al Senatului Universității « Politehnica » din Timișoara (mandatul 2012-2016)**

- **Șef Comisia de etică a Facultății de Chimie Industrială și Ingineria Mediului (2008-2012)**

- **Șef pe facultate la Calitatea procesului de învățământ (din 2005)**

- **Organizarea efectuării lucrărilor experimentale de licență și disertație**

- **Organizarea laboratoarelor în spațiile disponibile și funcționalizarea aparaturii și instalațiilor aferente acestora**

- **Auditor intern programe de practică**

j) Cooperare cu cadre didactice din țară / străinătate

Cooperare cu cadre didactice/cercetători din străinătate:

1) **Prof. Dr. Dr.h.c. H.-D. Isengard**, University of Hohenheim, Germany (water analysis in complex biosystems and micro/nanoparticles)

2) **Assoc. Prof. Dr. Mustafa Unlüsayin**, Akdeniz University, Turkey (fatty acids from fish: separation, purification, analysis, enhancing bioavailability by nanoencapsulation, application)

3) **Senior Researcher Dr. Eng. Sorel Mureșan**, AstraZeneca, Molndal, Sweden (molecular modeling and QSAR/QSPR)

4) **Prof. Dr. T.I. Oprea**, University of New Mexico School of Medicine, Albuquerque, New Mexico, United States of America (molecular modeling, drug design, VHTS)

Cooperare cu cadre didactice/cercetători din țară:

1) **Prof. Dr. V. Păunescu, Conf. Dr. C. Tatu**, Laboratorul de Imunologie și Transplant Timișoara, Spitalul Județean Clinic de Urgență Timișoara / Universitatea de Medicină și Farmacie Timișoara (analize fizico-chimice și citologice)

2) **Dr. Fiz. Ioan Grozescu**, Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Electrochimie și Materie Condensată Timișoara (nanoparticule de oxizi de titan dopate, nanoparticule magnetice, biodisponibilizare prin nanoîncapsulare)

3) **Prof. Dr. Ing. D. Ciubotariu**, Universitatea de Medicină și Farmacie Timișoara (modelare moleculară, 3D-QSAR, analiză statistică modernă)

4) **Conf. Dr. Ing. N. Hădărugă**, Universitatea de Științe Agricole și Medicină Veterinară a Banatului-Timișoara (analize fizico-chimice, analize senzoriale, aplicații industriale)

5) **Conf. Dr. A. Hermenean**, Universitatea de Vest « Vasile Goldiș » din Arad (analize citologice și histologie)

k) Alte activități (granturi, programe internaționale, ș.a.)

- **În echipele de cercetare ale granturilor PN2 la care sunt director partener sunt incluși masteranzi și studenți, care își desfășoară activitățile aferente Lucrărilor de Licență și Disertație tot în cadrul acestor discipline**

- **Studenții și masteranzii implicați în granturi și/sau Lucrări de Licență/Disertație au prezentat/publicat lucrări științifice la manifestări științifice internaționale și naționale din țară**

7) **Alte performanțe în activitatea științifică:**

a) **Coordonări / participări la programe de cercetare interne și internaționale**

- Participare la programe de cercetare de tip « Parteneriate în domenii prioritare » (3 granturi de cercetare: PN2 și CEEEX)

b) Organisme profesional științifice, marcând recunoașterea activității proprii

Membru în organisme științifice internaționale:

7b.1) The QSAR and Molecular Modelling Society (international), 1996-prezent

Membru în organisme științifice naționale:

7b.2) Societatea de Chimie din Romania, 1998-prezent

7b.3) Grupul de QSAR și Chimie Cuantica-Timisoara, 1996-prezent

7b.4) Asociația de Cercetare Multidisciplinara din Zona de Vest a Romaniei, 2004-prezent

c) Recunoașteri ale performanțelor științifice pe plan intern/internațional (premiul Academiei Române, premii acordate de Consilii sau Comitete naționale sau internaționale, premii acordate de reviste de prestigiu recunoscute internațional, distincții, ș.a.)

Două premii CNCSIS pentru “Rezultatele cercetării efectuate în cadrul programelor CEEEX și PN2”:

1) Cod CNCSIS 1016 (premiu CNCSIS pentru lucrarea: Liposomes containing undoped and Au⁺/Ag⁺ doped titanium dioxide nanoparticles, *Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures* **2010, 5(4), 919-925 (ISI 1.750))**

2) Cod CNCSIS 1042 (propunere premiu CNCSIS pentru lucrarea: Synthesis of Bioactive Materials Based on Undoped/Doped TiO₂ and Their Nanocrystals with alpha- / beta-Cyclodextrins, *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials* **2009, 11(7), 981-987)**

d) Membru în comitete editoriale ale unor reviste naționale / internaționale, referent științific

Recenzor: Revista *Journal of Agroalimentary Processes and Technologies* (CNCSIS B+)

Revista *Chemical Bulletin of the "Politehnica" University of Timisoara* (CNCSIS B+)

Membru colectiv de redacție, *Chemical Bulletin of the "Politehnica" University of Timisoara* (CNCSIS B+)

Evaluator granturi de cercetare internaționale:

Joint Research Grant under the SA/India Agreement on Cooperation in Science and Technology

Evaluator granturi de cercetare naționale:

Parteneriate în domenii prioritare, PN2 - PCCA

e) Participarea în consiliile științifice și conducerea lucrărilor la manifestări științifice interne / internaționale

Membru Comitet Științific, The 1st International Conference on Food Chemistry, Engineering & Technology, 3 - 4 June 2010, Timișoara, Romania

f) Citări în literatura referitoare la lucrări sau activități desfășurate

Citări 2009-2012 (in care nu sunt coautor) în reviste străine cotate ISI (selecție de 26 de citări din peste 50 de citări în total):

1) Nuchtavorn, N.; Suntornsuk, L., Simultaneous Analysis of Biologically Active Pyridines in Pharmaceutical Formulations by Capillary Zone Electrophoresis, *J. Chromatogr. Sci.* **2012**, 50(2), 151-156, doi: 10.1093/chromsci/bmr037 (ISI 1.078)

2) Sharopov, F.S.; Setzer, W.N., The Essential Oil of *Salvia sclarea* L. from Tajikistan, *Records of Natural Products* **2012**, 6(1), 75-79 (ISI 0.891)

3) Prussia, A.; Thepchatrri, P.; Snyder, J.P.; Plempner, R.K., Systematic Approaches towards the Development of Host-Directe., d Antiviral Therapeutics. Review, *International Journal of Molecular Sciences* **2011**, 12, 4027-4052, doi:10.3390/ijms12064027 (ISI 2.279)

- 4) Wang, J.; Cao, Y.; Suna, B.; Wang, C., Physicochemical and release characterisation of garlic oil- β -cyclodextrin inclusion complexes, *Food Chemistry* **2011**, 127(4), 1680-1685, doi: 10.1016/j.foodchem.2011.02.036 (ISI 3.458)
- 5) Taboureau, O.; Nielsen, S.K.; Audouze, K.; Weinhold, N.; Edsgard, D.; Roque, F.S.; Kouskoumvekaki, I.; Bora, A.; Curpan, R.; Jensen, T.S.; Brunak, S.; Oprea, T.I., ChemProt: a disease chemical biology database, *Nucleic Acids Research* **2011**, 39, D367–D372, doi:10.1093/nar/gkq906 (ISI 7.479)
- 6) Oprea, T.I.; May, E.E.; Leitão, A.; Tropsha, A., Computational Systems Chemical Biology, *Methods in Molecular Biology* **2011**, 672, 459-488, doi: 10.1007/978-1-60761-839-3_18
- 7) Laza-Knoerr, A.; Huang, N.; Grossiord, J.-L.; Couvreur, P.; Gref, R., Interfacial rheology as a tool to study the potential of cyclodextrin polymers to stabilize oil-water interfaces, *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry* **2011**, 69, 475-479, doi: 10.1007/s10847-010-9805-5
- 8) Merlot, C., Computational toxicology – a tool for early safety evaluation, *Drug Discovery Today* **2010**, 15(1/2), 16-22, doi: 10.1016/j.drudis.2009.09.010 (ISI 6.630)
- 9) Keiser, M.J.; Irwin, J.J.; Shoichet, B.K., The Chemical Basis of Pharmacology, *Biochemistry* **2010**, 49(48), 10267-10276, doi: 10.1021/bi101540g (ISI 3.226)
- 10) Walker, T.; Grulke, C.M.; Pozefsky, D.; Tropsha, A., Chembench: A cheminformatics workbench, *Bioinformatics Advance Access*, published September 30, **2010**, 1-2
- 11) Fourches, D.; Muratov, E.; Tropsha, A., Trust, But Verify: On the Importance of Chemical Structure Curation in Cheminformatics and QSAR Modeling Research, *Journal of Chemical Information Modeling* **2010**, 50(7), 1189–1204, doi: 10.1021/ci100176x (ISI 3.882)
- 12) DeGraw, A.J.; Keiser, M.J.; Ochocki, J.D.; Shoichet, B.K.; Distefano, M.D., Prediction and Evaluation of Protein Farnesyltransferase Inhibition by Commercial Drugs, *Journal of Medicinal Chemistry* **2010**, 53(6), 2464–2471, doi: 10.1021/jm901613f (ISI 4.802)
- 13) Boran, A.D.W.; Iyengar, R., Systems approaches to polypharmacology and drug discovery, *Current Opinion in Drug Discovery & Development* **2010**, 13, 297-309 (ISI 4.904)
- 14) Kratky, M.; Vinsova, J.; Buchta, V.; Horvati, K.; Bosze, S.; Stolarikova, J., New amino acid esters of salicylanilides active against MDR-TB and other microbes, *European Journal of Medicinal Chemistry* **2010**, 45(12), 6106-6113, doi: 10.1016/j.ejmech.2010.09.040 (ISI 3.269)
- 15) Bai, Y.X.; Yu, B.; Xu, X.M.; Jin, Z.Y.; Tian, Y.Q.; Lu, L., Comparison of encapsulation properties of major garlic oil components by hydroxypropyl-beta-cyclodextrin, *European Food Research and Technology* **2010**, 231(4), 519-524, doi: 10.1007/s00217-010-1307-6 (ISI 1.370)
- 16) Yang, Y.; Gu, Z.B.; Xu, H.; Li, F.W.; Zhang, G.Y., Interaction between Amylose and beta-Cyclodextrin Investigated by Complexing with Conjugated Linoleic Acid, *Journal of Agricultural and Food Chemistry* **2010**, 58(9), 5620-5624, doi: 10.1021/jf9043869 (ISI 2.469)
- 17) Cheng, L.; Gu, Y.; Jin, Q.A., QSAR of alpha-campholenic derivatives with sandalwood odor, and molecular design, *Monatshefte für Chemie* **2010**, 141(9), 953-959, doi: 10.1007/s00706-010-0347-8, ISSN (print): 0026-9247; ISSN (online): 1434-4475 (ISI 1.312)
- 18) Nicolotti, O.; Giangreco, I.; Miscioscia, T.F.; Convertino, M.; Leonetti, F.; Pisani, L.; Carotti, A., Screening of benzamidine-based thrombin inhibitors via a linear interaction energy in continuum electrostatics model, *Journal of Computed Aided Molecular Design* **2010**, 24, 117-129, doi: 10.1007/s10822-010-9320-1, 0920-654X (Print) 1573-4951 (Online) (ISI 3.835)
- 19) Keiser, M.J.; Setola, V.; Irwin, J.J.; Laggner, C.; Abbas, A.I.; Hufeisen, S.J.; Jensen, N.H.; Kuijter, M.B.; Matos, R.C.; Tran, T.B.; Whaley, R.; Glennon, R.A.; Hert, J.; Thomas, K.L.H.; Edwards, D.D.; Shoichet, B.K.; Roth, B.L., Predicting new molecular targets for known drugs, *Nature* **2009**, 462, 175-182, doi:10.1038/nature08506 (ISI 34.480)
- 20) Renner, S.; Van Otterlo, W.A.L.; Dominguez Seoane, M.; Möcklinghoff, S.; Hofmann, B.; Wetzel, S.; Schuffenhauer, A., Bioactivity-guided mapping and navigation of chemical space, *Nature Chemical Biology* **2009**, 5(8), 585-592, doi:10.1038/nchembio.188 (ISI 16.058)
- 21) Cases, M.; Mestres, J., A Genomic Approach to Drug Discovery: focus on cardiovascular diseases, *Drug discovery today* **2009**, 14(9-10), 479-485, doi: :10.1016/j.drudis.2009.02.010 (ISI 6.630)

22) Sahoo, S.; Patel, S.; Dash, S.; Mishra, B.K., A molecular structure descriptor derived from bond-disconnection: Application to quantitative structure property relationships, *Indian Journal of Chemistry* **2009**, *48A*, 921-929 (ISI 0.617)

23) Southan, C.; Várkonyi, P.; Muresan, S., Quantitative assessment of the expanding complementarity between public and commercial databases of bioactive compounds, *Journal of Cheminformatics* **2009**, *1*(10), 1-17, doi:10.1186/1758-2946-1-10

24) Cserhádi, T., Data evaluation in chromatography by principal component analysis, *Biomedical Chromatography* **2009**, *24*(1), 20-28, doi: 10.1002/bmc.1294 (ISI 1.639)

25) Medina-Franco, J.L.; Martínez-Mayorga, K.; Bender, A.; Scior, T., Scaffold Diversity Analysis of Compound Data Sets Using an Entropy-Based Measure, *QSAR&Combinatorial Sciences* **2009**, *28*(11-12), 1551-1560 (ISI 3.027)

26) Ienascu, I.M.C.; Lupea, A.X.; Popescu, I.M.; Padure, M.A.; Zamfir, A.D., The synthesis and characterization of some novel 5-chloro-2-(substituted alkoxy)-N-phenylbenzamide derivatives, *Journal of the Serbian Chemical Society* **2009**, *74*(8-9), 847-855, doi: 10.2298/JSC0909847I (ISI 0.820)

g) Membru al Academiei Române

Nu este cazul

h) Membru al Academiei de Științe Tehnice din România sau a altor Academii recunoscute

Nu este cazul

i) Doctor Honoris Causa

Nu este cazul

j) Profesor Onorific al altei universități

Nu este cazul

8) **Activități manageriale și administrative în sprijinul procesului didactic, de cercetare-dezvoltare, etc.**

a) funcții academice de conducere:

i) rector

ii) prorector

iii) secretar științific al senatului

iv) decan

v) prodecan

vi) secretar științific al consiliului facultății

vii) director departament, /șef de catedră

Nu este cazul

b) directori centre de cercetare

Nu este cazul

c) director editură

Nu este cazul

d) director programe internaționale (nu proiecte internaționale)

Nu este cazul

e) alte activități

- Auditor pentru "Organizare și desfășurarea stagiului de practică la nivel de licență" în cadrul Universității "Politehnica" din Timișoara (2010-2011)

- Șeful Comisiei de Audit Programe de Studii din cadrul Facultății de Chimie Industrială și Ingineria Mediului (2004-prezent)
- Membru în Senatul Universității “Politehnica” din Timișoara (mandatul 2012-2016)
- Membru în Consiliul facultății (2008-2012)
- Membru în Biroul Departamentului CAICON (2008-prezent)
- Secretar științific al Departamentului CAICON (2008-prezent)

9) Îndeplinirea condițiilor de abilitare

Condiții de abilitare îndeplinite pentru Domeniul fundamental P2 – Științe ingineresti:
Domeniile științifice de Ingineria materialelor și nanotehnologii, respectiv Ingineria resurselor vegetale și animale (**I1 = 4.58**, **I1_{min} = 4**, **P = 5.44**, **P_{min} = 2**, **C = 14.91**, **C_{min} = 5**)

Data:
27 Ianuarie 2012

S.I. dr. ing. Daniel I. Hădărugă