

RECEPȚIONAT

Agenția Națională pentru Cercetare
și Dezvoltare _____

_____ 2022

AVIZAT

Secția Științe Exacte și Inginerești a AȘM

_____ 2022

RAPORT ȘTIINȚIFIC ANUAL 2022

privind implementarea proiectului din cadrul Programului de Stat (2020–2023)

**"Mecanisme fizico-chimice a proceselor redox cu transfer de electroni implicate
în sistemele vitale, tehnologice și de mediu"**

Cifrul proiectului: 20.80009.5007.27

Prioritatea Strategică V. Competitivitate economica și tehnologii inovative

Conducătorul proiectului:

Academician DUCA Gheorghe



Directorul Institutului de Chimie,
Președintele Consiliului științific

Dr. habilitat ARÎCU Aculina



Chișinău 2022

Prezentul Raport este pus la dispoziție prin Licența [Atribuire - Necomercial – Distribuire în Condiții
Identice 4.0 Internațional\(CC BY-NC-SA 4.0\)](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/)

© 2022, Institutul de Chimie (absorbit de USM)
Universitatea de Stat din Moldova
Universitatea Tehnică a Moldovei



1. Scopul etapei anuale conform proiectului depus la concurs:

Institutul de Chimie: Investigarea cuanto-chimică a efectului sinergetic al antioxidantilor, cineticii reacțiilor resveratrol-radicali liberi, combinațiilor noi de antioxidanți în procese anaerobe.

USM: Aportul proceselor de oxidare a vitaminelor din grupul B (vitamina B₆) la formarea proprietăților redox ale mediului acvatic

UTM: Studiul procesului de oxidare chimică a produselor vitivinicole.

2. Obiectivele etapei anuale:

1. Organizarea Conferinței Internaționale „Chimie Ecologică și a Mediului-2022” (Ecological and Environmental Chemistry-2022).
2. Studiul cuanto-chimic al activității antioxidante a 2,3-dihidroxi-N1,N4-bis(2-hidroxietyl) fumaramidei în gaz și apă.
3. Studiul cineticii și mecanismului reacțiilor resveratrol - radicali liber, cu implicarea acizilor organici și a catehinei în dependența de tipul solventului și aciditate.
4. Cercetarea efectelor sinergetice în sistemele mixte de antioxidanți în baza calculelor cuanto-chimice.
5. PEJT în proveniența barierului transferului de proton în compușii intermediari în stările lor excitate.
6. Studiul efectului sinergetic al vitaminelor E și C în reacția de peroxidare a lipidelor.
7. Modelarea răspunsului imun sub acțiunea virală.
8. Investigatii RMN și RES (P.Poni, Iași, România) privind stabilirea interacțiunilor în sistemele antioxidantilor naturali din vin: acid dihidroxifumaric (DHF)– Catehina și DHF – acidul galic, pe baza testului cu 1,1-difenil-2-picrilhidrazil DPPH.
9. Testarea unor fitocatalizatori în procesele de oxidoreducere a biomasei în condiții anaerobe.
10. Evaluarea influenței factorilor de mediu asupra interacțiunilor dintre antioxidanți (polizaharide) și proteine și determinarea mecanismelor de reacție.
11. Obținerea derivaților acizilor spiro[oxindolciclopropan]carboxilici cu activitate antivirală și aprecierea relației "structură-activitate" al oxindolilor sintetizați.
12. Validarea metodei HSQC pentru determinarea cantitativa a acizilor triterpenici în extractele naturale cu efect antioxidant.
13. Calcule cinetice și termodinamice a procesului de sorbție a ionilor metalelor pe sorbenți biologici, în atmosferă și organisme vii.
14. Organizarea Seminarului științific național dedicat jubileului mem.cor. I.Geru.
15. Modelarea proceselor redox cu participarea vitaminelor din grupul B în mediul acvatic;
16. Studiul transformării contaminanților emergenți în sisteme chimice și fotochimice omogene și eterogene.
17. Studiul bibliografic al procesului de oxidare a produselor vitivinicole.
18. Studiul dinamicii oxidabilității vinurilor și băuturilor alcoolice în procesul de procesare a strugurilor.

3. Acțiunile planificate pentru realizarea scopului și obiectivelor etapei anuale:

1. Realizarea Conferinței EEC-2022.
2. Stabilirea colaborărilor științifice.
3. Publicarea Culegerii de rezumate EEC-2022, în care vor fi reflectate cele mai recente cercetări, inclusiv cele obținute în cadrul proiectelor Programului de stat, cu indicarea instituției finanțatoare ANCD.
4. Editarea a unei serii de lucrări ale participanților EEC-2022 pentru publicarea în revista Chemistry Journal of Moldova.
5. Studiul cuanto-chimic al activității antioxidante a 2,3-dihidroxi-N1,N4-bis(2-hidroxietil) fumaramidei în gaz și apă.
6. Publicarea a unui capitol în monografie, a unui articol cu Factor de Impact și a 2 teze la conferințe internaționale și naționale.
7. Susținerea teze de doctor (Natalia Bolocan).
8. Determinarea activității antioxidante dintre resveratrol și diverși radicali liberi.
9. Studiul influenței unor acizi organici asupra reacției de anihilare a radicalului DPPH de către resveratrol (RES).
10. Studiul influenței catehinei (CAT) asupra activității antioxidante a RES în reacția cu radicalului DPPH.
11. Determinarea tipului interacțiunilor antioxidante dintre acizii ascorbic (AA) și dihidroxifumaric (DHF) în reacția cu radicalul DPPH, recurgând la spectroscopia RES (P.Poni, Iași, România).
12. Modelarea cuanto-chimică a mecanismului de interacțiune a cation-radicalului [ABTS]⁺ cu 2 antioxidanți diferiți.
13. Determinarea parametrilor vibronici ai procesului de migrare a atomului de hidrogen.
14. Contribuții la elucidarea structurală privind derivații spiro-[ciclopropan-oxindolilor], folosind metoda RMN.
15. Asigurarea mentenanței spectrometrului RMN BRUKER Avance NMR 400.
16. Identificarea și justificarea noilor tipuri de substanțe biologice active în sistemele de fermentare biochimică în condiții anaerobe, testarea efectului acestora în sistemele de biomasă fermentată.
17. Lucrări experimentale cu noi tipuri de substanțe biologice active și amestecurile a lor în sistemele de fermentare biochimică.
18. Elaborarea protocolului experimental pentru prepararea sistemelor model de polizaharide și molecule proteice de lactoferină, variind precum raportul molar al constituenților, NaCl și temperatura mediului.
19. Prepararea propriu-zisă a sistemelor model.
20. Realizarea experimentelor de împrăștiere la unghiuri mici cu raze-X și neutroni
21. Adaptarea și optimizarea metodelor de analiză a vitaminelor din grupul B pentru condițiile experimentului cinetic;
22. Ajustarea echipamentului tehnic la specificul experimentului;
23. Identificarea și argumentarea condițiilor fizico-chimice ale experimentului;
24. Modelarea proceselor redox și fotochimice cu participarea vitaminelor din grupul B

25. Stabilirea legităților cinetice și propunerea mecanismelor ipotetice ale proceselor redox și fotochimice studiate;
26. Aplicarea microcosmelor și parametrilor redox pentru evaluarea aportului proceselor de transformare a vitaminelor din grupul B la formarea proprietăților redox ale mediului acvatic.
27. Monitorizarea obiectelor acvatice preconizate în proiect;
28. Stabilirea condițiilor optime de înlăturare a poluanților emergenți (PE) din soluții apoase ce conțin antiinflamatoare, surfactanți, la oxidarea catalitică și fotocatalitică în funcție de diferiți parametri fizico-chimici cu utilizarea reagentului Fenton și Foto-Fenton;
29. Determinarea parametrilor cinetici și propunerea mecanismelor de transformare chimică și fotochimică a antiinflamatoarelor (diclofenac, ibuprofen, indometacin) și a surfactanților (Clorură de benzalconiu, dodecyl-benzene-sulfonate de sodium) în procesele de oxidare avansată (POA): Fenton, Foto-Fenton și: sono-Fenton;
30. Determinarea parametrilor cinetici și propunerea mecanismelor de transformare fotochimică a antiinflamatoarelor (diclofenac, ibuprofen, indometacin) și surfactanților (Clorură de benzalconiu, dodecyl-benzene-sulfonate de sodium) în POA eterogene: poluant/UV/TiO₂, poluant/UV/ H₂O₂/TiO₂ și prin oxidarea electro-chimică;
31. Elaborarea schemei tehnologice de înlăturare a PE prin oxidare/mineralizare catalitică și fotocatalitică omogenă.
32. Elaborarea schemei tehnologice de înlăturare a PE prin procedeul de fotooxidare eterogenă în sistemele UV/TiO₂, UV/H₂O₂/TiO₂.
33. Studiul bibliografic și selectarea criteriilor de oxidabilitate a produselor vitivinicole. Rodajul metodelor de evidență în podgorii și metodelor de analiză de laborator. Selectarea parcelele experimentale din podgorii viticole cu soiuri albe și roșii din diferite areale vinicole naționale.
34. Studiul dinamicii proceselor de oxidare a produselor vitivinicole în funcție de temperatură, concentrația de oxigen molecular, pH și concentrația de antioxidanți naturali și sintetici.
35. Producerea vinurilor din soiurile ampelografice albe și roșii în condiții de micro-vinificare UTM din diferite areale vinicole naționale.
36. Monitorizarea procesului de fermentare malolactică a vinurilor și dinamica parametrilor fizico-chimici și organoleptici.

4. Acțiunile realizate pentru atingerea scopului și obiectivelor etapei anuale:

1. A fost organizată Conferința Internațională „Chimie Ecologică și a Mediului-2022”, în 4 secțiuni.
2. Au fost publicate două volume de ”Cărți de rezumate” (”Abstract Book”), ce au inclus 260 de rezumate științifice.
3. Optimizarea geometrică și calculul entalpiei pentru radical cationul, anionul, radicalul și molecula neutră de 2,3-dihidroxi-N1,N4-bis(2-hidroxietil)fumaramidă. Au fost calculați indicii de reactivitate intrinsecă - entalpia de disociere a legăturilor (BDE), potențialul de ionizare (IP), afinitatea electronilor (EA) și afinitatea protonilor (PA), în gaz și în apă.
4. Au fost publicate 2 teze la conferința națională cu participare internațională.

5. A fost inițiat procesul de susținere a tezei de doctor (Natalia Bolocan).
6. A fost determinată activitatea antioxidantă a compusului RES în reacțiile redox cu radicalii DPPH[•] și ABTS^{•+}.
7. Au fost studiată influența a trei concentrații diferite de DHF (0.0002 N, 0.0004 N și 0.0008 N) asupra activității antioxidante a RES în reacție cu radicalul DPPH.
8. Cinci raporturi molare de CAT/RES (3:1, 2:1, 1:1, 1:2 și 3:1) au fost supuse interacțiunii cu radicalul DPPH pentru a determina activitatea antioxidantă a amestecurilor de compuși, precum și tipul interacțiunilor antioxidante.
9. Utilizând spectroscopia RES, a fost analizată activitatea antioxidantă a diverselor combinații de AA și DHF în reacția de anihilare a radicalul DPPH. Tipul interacțiunilor antioxidante a fost stabilit recurgându-se la două metode de calcul cunoscute în literatura de specialitate.
10. Optimizarea geometriei prin metoda DFT B3LYP/6-31G(d) a reactanților, complexilor intermediari și a produșilor reacției de interacțiune a cation-radicalului [ABTS]⁺ cu acidul cafeic și glutatunul.
11. Analiza comparativă a distribuției densității electronice și de spin pentru toți complexii obținuți.
12. Calculele cuanto-chimice a curbelor energetice a stărilor fundamentale și excitate de-a lungul coordonatei de migrare a protonului central.
13. Determinarea parametrilor vibronici ai procesului de migrare a protonului prin fitarea acestor curbe la ecuațiile teoretice generale.
14. Utilizarea spectroscopiei ¹H și ¹³C RMN și a datelor cunoscute din literatura recentă, pentru modelarea interacțiunilor dintre acizii dihidroxifumaric și ascorbic, pe baza testului cu 1,1-difenil-2-picrilhidrazil (DPPH).
15. Înregistrarea spectrelor ¹H, ¹³C și ¹⁵N 1D- și 2D- RMN la spectrometrul RMN BRUKER Avance NMR 400.
16. Au fost selectate și justificate noile tipuri de substanțe biologice active cu proprietăți antioxidante pentru a fi folosite în sistemele de fermentare aerobă a deșeurilor lichide din sectorul agro-alimentar.
17. Analiza și procesarea rezultatelor experimentale obținute, sistematizarea lor cu explicarea efectelor depistate, pregătirea materialelor pentru a fi incluse în articole științifice și teze la conferințe, cu planificarea lucrărilor următoare.
18. Realizarea experimentelor de împrăștiere la unghiuri mici cu raze-X și neutroni.
19. Analizei datelor experimentale obținute, calculul valorii razei de girație din aproximația Guinier, modelarea funcției de distribuție și modelarea 3D de rezoluție joasă a moleculelor individual și complexilor formați în soluție utilizând curbele de împrăștiere.
20. Scrierea unui articol și publicarea în reviste recenzate și de circulație internațională.
21. Adaptate și optimizate metode de analiză a vitaminelor din grupul B pentru condițiile experimentului cinetic;
22. Ajustat echipamentul tehnic la specificul experimentului;
23. Identificate și argumentate condițiile fizico-chimice ale experimentului;
24. Modelate procese redox și fotochimice cu participarea vitaminelor din grupul B
25. Stabilite legitățile cinetice și propuse mecanisme ipotetice ale proceselor redox și

fotochimice studiate;

26. Aplicare microcosme și parametrii redox pentru evaluarea aportului proceselor de transformare a vitaminelor din grupul B la formarea proprietăților redox ale mediului acvatic.
27. Monitorizate obiectele acvatice preconizate în proiect;
28. Au fost stabilite condițiile optime de oxidare/mineralizare omogenă a poluanților emergenți (PE) din soluții apoase ce conțin medicamente antiinflamatoare, surfactanți anionici, la oxidarea catalitică și fotocatalitică în funcție de diferiți parametri fizico-chimici cu utilizarea reagentului Fenton, Foto-Fenton și sono-Fenton în sistemele: poluant/ Fe^{2+} / H_2O_2 , poluant/ Fe^{2+} / H_2O_2 /UV)
29. Au fost calculați parametrii cinetici de transformare catalitică și fotocatalitică omogenă a poluanților emergenți studiați: viteza proceselor de oxidare/mineralizare, constantele de viteză și timpul de înjumătățire
30. Au fost studiate legăturile cinetice de transformare fotochimică din soluții apoase ce conțin medicamente antiinflamatoare și surfactanților în Procese de oxidare avansată (POA) eterogene: poluant/UV/ TiO_2 , poluant/UV/ H_2O_2 / TiO_2 și prin oxidarea electro-chimică prin determinarea consumului chimic de oxigen (CCO_{Cr}) și concentrației substratului (C) cu scopul degradării maxime a poluanților prin aplicarea POA
31. Au fost studiate și analizate legăturile cinetice și propuse mecanismele de transformare chimică și fotochimică din soluții apoase ce conțin medicamente antiinflamatoare și surfactanți în POA omogene și eterogene
32. S-a realizat studiul bibliografic și s-au selectat criteriile de oxidabilitate a produselor vitivinicole. S-a efectuat rodajul metodelor analitice, fizico-chimice de analiză și de evidență în podgorii.
33. S-au selectat parcelele experimentale din podgorii viticole cu soiuri albe din regiunea viti-vinicole Ștefan Vodă, loc. Javgur
34. S-au produs vinuri din soiurile ampelografice albe și roșii în condiții de micro-vinificare UTM din diferite areale vinicole naționale (Valul lui Traian și Ștefan Vodă)
35. S-a studiat dinamica procesului de oxidare a vinurilor elaborate în funcție de temperatură, concentrația de oxigen molecular și pH
36. S-a monitorizat procesul de fermentare malolactică a vinurilor și dinamica parametrilor fizico-chimici și organoleptici a acestora.

5. Rezultatele obținute:

Compusul natural rasveratrol (RES) a demonstrat activitatea antioxidantă contra ambilor radicali liberi (Figura 1). Totuși, în reacția cu radicalul ABTS procentul de inhibiție este semnificativ mai mare, de aproximativ 80% pentru $[\text{resveratrol}] \approx 0.3 \text{ g/L}$. Aceeași concentrație de antioxidant în reacția cu DPPH produce o inhibiție de aproximativ 35%. Această diferență poate fi cauzată de utilizarea solventului diferit (96% etanol - DPPH și apa - ABTS) în pregătirea soluțiilor de radicali liberi. Adăugarea diferitor concentrații de DHF la soluția de resveratrol produce un efect negativ asupra activității antioxidante a RES. Astfel, în prezența celor trei concentrații de DHF, puterea antioxidantă a amestecului de compuși descrește, înregistrându-se un puternic antagonism. Raporturile molare de (catehina/rasveratrol) CAT/RES (3:1, 2:1, 1:1, 1:2 și 3:1) analizate au

demonstrat, de asemenea, un efect antagonist. Din Figura 2 se observă clar că procentul de inhibiție calculat teoretic este mai mare decât cel calculat în baza datelor experimentale, ceea ce denotă prezența antagonismului. În amestecul acestori doi antioxidanți, un astfel de efect poate fi provocat de posibilele interacțiuni dintre RES și CAT cu formare de aducți, complecși intermoleculari sau polimeri, ceea ce ar reduce numărul de grupări donatoare de electroni.

Prim două metode de calcul al efectului sinergic descrise în literatură, a fost demonstrată interacțiunea sinergică dintre AA și DHF (mM DHF/mM AA: 0.5; 0.6; 0.7; 1; 1.4; 1.7; 2), utilizând spectroscopia RES. Cel mai puternic synergism fost înregistrat pentru raporturile de concentrație DHF/AA 1.4 și 1.7. La raporturile de concentrație DHF/AA = 1 și 0.7 au fost înregistrate doar efecte aditive.

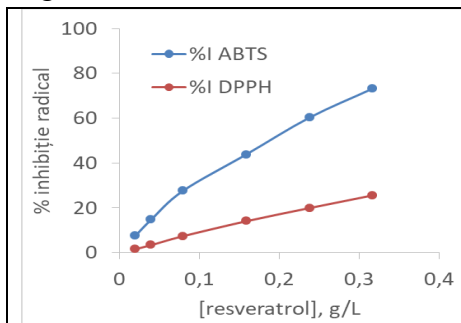


Figura 1. Reacția dintre RES și radicalii DPPH și ABTS

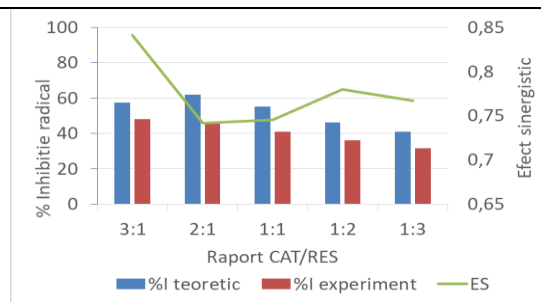


Figura 2. Ilustrarea antagonismului dintre RES și CAT

Au fost realizate studii detaliate ^1H și ^{13}C RMN pentru cercetarea interacțiunilor dintre antioxidanții naturali: acidul dihidroxifumaric (DHF)– Acidul ascorbic (AA), pe baza testului cu 1,1-difenil-2-picrilhidrazil (DPPH). Au fost urmate trei căi de studiu a reacției antioxidanților cu DPPH, care au precedat analiza ^{13}C RMN, care vizează succesiunea adăugării reactanților și durata reacției. În rezultatul tuturor experiențelor ^{13}C RMN nu a fost atestată oxidarea DHF până la acidul dicetosuccinic. Utilizarea celor trei căi de studiu a demonstrat, că radicalul DPPH este implicat atât în oxidarea AA până la acid dehidroascorbic (DAA), cât și în transformarea ireversibilă a DHF.

În perioada de raportare, metoda DFT B3LYP a dezvăluit detalii despre mecanismul molecular care descrie efectul sinergic în reacția comună a doi antioxidanți naturali puternici: acidul cafeic - CA și glutatation - GL cu radicalul ABTS+* din etanol. S-a demonstrat că moleculele neutre de glutatation și acid cafeic, interacționând cu ABTS+* prin una dintre cele două grupe ale sale $-\text{SO}_3\text{H}$, formează cu acesta următoarele complexe: $[\text{GL-ABTS}]^{+*}$ și $[\text{CA-ABTS}]^{+*}$, în care Electronii nepereche, aparținând anterior ABTS+*, rămân încă pe fragmentele structurale radicale ABTS ale acestor complexe. Cu toate acestea, la o interacțiune suplimentară a complexului $[\text{GL-ABTS}]^{+*}$ cu anionul acidului cafeic și complexul $[\text{CA-ABTS}]^{+*}$ cu anionul glutatation în complexele nou formate: $[\text{CAanion-GL-ABTS}]^{+*}$ și $[\text{GLanion-CA-ABTS}]^{+*}$, electronii nepereche sunt transferați de la fragmentele lor structurale ABTS (anterior radicale) la fragmentele lor structurale corespunzătoare (altele decât ABTS). Astfel, coordonarea suplimentară a anionului glutatation și, respectiv, a anionului acid cafeic la complexele $[\text{CA-ABTS}]^{+*}$ și $[\text{GL-ABTS}]^{+*}$ este cea care duce la apariția în acestea a fragmentelor structurale ABTS lipsite de electroni nepereche; adică, cu alte cuvinte, stă la baza efectului sinergic în interacțiunea comună a acidului cafeic și glutatationului cu cationul radical ABTS+*.

Optimizarea geometrică și calculul entalpiei pentru radical cationul, anionul, radicalul și molecula neutră de 2,3-dihidroxi-N1,N4-bis(2-hidroxietyl)fumaramidă au făcut posibile calculele indicilor de reactivitate intrinsecă - entalpia de disociere a legăturilor (BDE), potențialul de ionizare (IP), afinitatea electronilor (EA) și afinitatea protonilor (PA), în gaz și în apă. Astfel, a fost demonstrat că cel mai probabil mecanism prin care această moleculă își manifestă activitatea antioxidantă atât în gaz (*in vacuo*) cât și în apă, este mecanismul SPLET, care constă în pierderea inițială a protonului cu cedarea ulterioară a electronului.

Mediul	HAT	SET-PT		SPLET	
	BDE	IP	PDE	PA	ETE
<i>In vacuo</i>	1683.91	598.85	-68.44	363.82	166.59
Apă	1794.80	447.30	193.99	156.64	484.65

S-a studiat rolul Pseudo Efectului Jahn-Teller (PEJT) în transferul intra- și intermolecular al protonului în așa sisteme moleculare ca: H_5O_2^+ , $\text{H}_5\text{O}_2^+(\text{H}_2\text{O})_4$, aldehidele malonice, dimerii $(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_2\text{H}^+$ și $(\text{C}_3\text{H}_8\text{CO})_2\text{H}^+$. Aceste exemple revelă modul în care PJTE controlează și influențează bariera energetică pentru transferul de protoni prin legătura de hidrogen. O atenție deosebită este acordată transferului de proton intramolecular în stări excitate (ESPT) folosind exemplul unei molecule de aldehydă malonică neutră, în care transferul unui proton are loc prin legătura H intramoleculară care implică un inel cu cinci membri. În acest scop au fost calculate curbele energetice a stării fundamentale și stărilor excitate de-a lungul coordonatei de instabilitate și estimarea parametrilor vibronici prin fitarea acestor curbe la formulele generale. Dependența funcțională a energiei potențiale de coordonate de instabilitate, urmând teoria PEJT cu parametri estimați prin calcule cuanto-chimice, poate servi ca model analitic parametrizat al potențialului adiabatic, utilizat pentru simularea procesului de transfer de protoni în astfel de sisteme.

Proteinele și polizaharidele reprezintă componentele principale ale produselor alimentare, având rolul principal de conferire a structurii și texturii acestora, iar interacțiunea dintre acești constituenți poate fi influențată de proprietățile structurale dar și de diverși factori de mediu precum raportul molar, NaCl și temperatura mediului, pH, ș.a. Astfel, s-a realizat cercetarea factorilor de mediu asupra interacțiunilor dintre polizaharide cu activitate antioxidantă (arabinogalactanul, β -glucanul, pectina din măr, amidonul din porumb și amidonul din grâu și alginatul de sodiu) și lactoferrină utilizând metode de împrăștiere la unghiuri mici, la Sincrotronul Elettra, Trieste, Italia (au fost realizate 3 experimente: influența pH-ului, temperaturii, raporturile molare). Rezultatele obținute demonstrează în special influența pH-ului și a sării de NaCl asupra interacțiunilor dintre polizaharide și lactoferrina. În timp ce lactoferrina prezintă predominant o suprafață cationică pe tot intervalul de pH cercetat (3.5-7.5), polizaharidele antioxidante necesită valori ale pH-ului de până la 5 care să confere o suprafață anionică și să permită formarea de complecși macromoleculari cu lactoferrina prin interacțiuni electrostatice. De asemenea, s-a stabilit influența sării de NaCl, astfel că în prezența unei concentrații de 150 mM NaCl conduce la micșorarea razei de girație de la 46 Å la 40 Å.

Studiile efectului substanțelor biologic active (BAS) asupra procesului de digestie au fost efectuate folosind vinasa rezultată din distilarea boabelor la firma „Garma Grup” (Hâncești, Republica Moldova). Celelalte tipuri de biomasă de deșeuri au fost luate pentru cercetare, cum ar fi biomasa de deșeuri din distilarea porumbului. Procesul de digestie a fost studiat cu introducerea de substanțe biologic active de origine naturală în biomasa fermentată, care a inclus biomasa reziduală

și amestecul nutritiv. Rezultatele obținute demonstrează ca substanțele de origine naturală cu proprietăți bioactive/antioxidante prezintă efecte pronunțate asupra fermentației alcoolice a vinasei în condiții mezofile.

Evaluarea aportului vitaminelor grupului B asupra proceselor de autopurificare și a stării redox a apelor naturale

În scopul evaluării aportului vitaminelor grupului B asupra proceselor de autopurificare și a stării redox a apelor naturale, au fost stabilite condițiile optime pentru modelarea sistemelor în care vitaminele au rol de potențiali poluanți. În studiu, au fost selectate 2 vitamine: vitamina B₆, sau *piridoxina*, care este comercializată sub formă de soluție injectabilă (fiolă de 1 mL cu conținutul de 50 mg/mL) și vitamina B₉, *acidul folic* - sub forma de comprimate de 5 mg. Din totalitatea metodelor cantitative verificate de determinare a conținutului vitaminei B₆, a fost selectată metoda spectrofotometrică cu utilizarea soluției tampon fosfat cu pH 7, care deplasează maximum de absorbției a vitaminei de la 291 nm (solvent HCl 0,1N) la 328 nm (solvent sol. tampon fosfat), valoare ce nu coincide cu maximele altor substraturi din sistemele modelate. În cazul vitaminei B₉, a fost selectată metoda spectrofotometrică directă, dar a fost substituit solventul apă distilată cu soluția de NaOH 0,1 N, ceea ce duce la modificarea esențială a solubilității vitaminei. Sistemele modelate au permis stabilirea faptului că vitamina B₆ se oxidează de către oxigenul dizolvat, iar vitamina B₉ este stabilă la valorile tipice ale pH-ului apelor naturale. Rezultatele cinetice ale fotolizei vitaminelor denotă faptul că piridoxina se supune fotolizei directe și mai mult celei induse de radicalii OH, vitezele proceselor fiind de ordinul 10^{-8} - 10^{-9} M/s ($[B_6]_0 = 1 \cdot 10^{-4}$ M), pe când valorile vitezelor fotolizei directe și induse a vitaminei B₉ pentru aceleași condiții, sunt de ordinul 10^{-10} M/s și mai mic. Rezultatele modelării proceselor de autopurificare a sistemelor acvatice naturale, pe model de tip microcosm, au demonstrat că indiferent de sezon, la poluarea apelor lacului Dănceni cu vitaminele complexului B, în concentrații de peste $0,8 \cdot 10^{-4}$ M, capacitatea de autopurificare prin procese chimice de oxidare, este depășită. Astfel că vitaminele complexului B pot fi atribuite grupului factorilor declanșatori ai situației de „redox-toxicitate” în apele naturale.

Pentru anul 2022 au fost planificate 4 expediții hidrochimice, dintre care au fost realizate 3, iar a patra este preconizată pentru sfârșitul lunii noiembrie. Pe parcursul expedițiilor au fost efectuate prelevări de probe și apoi determinați parametrii hidrochimici și de poluare a apelor. Analiza preliminară a datelor denotă că pe parcursul anului, apele Nistrului au fost din clasa hidrogenocarbonată, grupa calciului de tipul II. Duritatea medie anuală a fost de 4,1 mg-eq/L, iar mineralizarea – cca 400 mg/L, ceea ce corespunde valorilor medii multianuale. A fost depistată influența negativă a Răutului asupra parametrilor hidrochimici a Nistrului, care s-a manifestat în creșterea durității și conținutul ionilor principali în aval de vărsare a afluentului. Duritatea totală a apelor Nistrului a crescut cu 10%, iar mineralizarea – cu cca 15%. Influența r. Ichel nu a fost depistată, ceea ce poate fi explicat prin debitul mic al apelor în acest afluent.

În ceea ce privește compoziția chimică a apelor din lacurile Ghidighici și Dănceni, acestea se caracterizează prin duritate excesivă și mineralizare avansată. Acești parametri sunt mai mari în lacul Dănceni, ceea ce poate fi explicat prin volumul mai mic al lacului.

În cadrul expedițiilor a fost analizat și conținutul reducătorilor peroxidazici (compuși tiolici), care în toate prizele de captare este de ordinul 10^{-6} M. Mediile anuale maxime s-au înregistrat în *fluviul Nistru, or. Vadul lui Vodă* ($1,63 \cdot 10^{-6}$ M) și *lacul Ghidighici* ($1,52 \cdot 10^{-6}$ M). Variație sezonieră firească a tiolilor nu a fost depistată în priza *fluviul Nistru barajul de la Dubăsari*, concentrația

maximă fiind toamna ($1,24 \cdot 10^{-6}$ M), dar nu pe timp de vară (0), ceea ce indică despre o încetinire a proceselor chimice de autopurificare. În priza *fl. Nistru or Vadul lui Vodă* și *lacul Ghidighici* concentrațiile maxime s-a înregistrat primăvara: $1,92 \cdot 10^{-6}$ M și respectiv $1,82 \cdot 10^{-6}$ M. Restul obiectelor acvatice monitorizate s-au caracterizat prin variație sezonieră firească a reducătorilor peroxidazici.

Studiul procesului de oxidare chimică a produselor vitivinicole.

În procesul cercetărilor s-au utilizat vinuri materie primă din struguri tehnici recolta anului 2021 din r-nul Ștefan Vodă, s. Purcari, Republica Moldova. Mostrele experimentale de vinuri au fost produse în secția de microvinificație conform tehnologiei vinurilor albe și roșii seci, păstrate în butelii închise la temperatura de 10-12 °C în enoteca universitară.

În baza analizei senzoriale a degustărilor din comisia de degustare formată din zece persoane – cadre didactice și studenți UTM. Vinul Rară Neagra, în comparație cu vinul Feteasca Neagră din același an viti-vinicol, prezintă rezultate mai bune ce țin de calitatea aromei, culoare, intensitate, ce se datorează acumulării sporite de polifenoli și acizi organici. Operația tehnologică care este considerată veriga cea mai delicată din fluxul tehnologic este *macerația*, ceea ce a permis extracția cantității de compuși fenolici, care a avut o influență decisivă asupra culorii vinului, caracterelor gusto-olfactive și stabilității vinului. Astfel, după calitățile sale senzoriale și fizico-chimice pe primul loc din vinurile roșii s-a plasat Rară Neagră, iar din vinurile albe - Feteasca Albă.

Pentru aprecierea calității vinurilor au fost studiați indicii fizico-chimici și specifici, ce permit prognozarea stabilității și oxidabilității acestora.

Tabelul 1. Indicii fizico-chimici de bază a vinurilor albe examinate

Indicii analizați	Tipul vinurilor experimentale			
	Chardonnay	Sauvignon Blanc	Viorica	Feteasca Albă
Concentrația alcoolică, % vol	12,27	12,41	13,88	13,20
Concentrația în masă a acizilor titrabili, g/dm ³	6,67	6,3	6,52	4,5
Concentrația în masă a acizilor volatili, g/dm ³	1,08	0,64	0,86	1,04
pH	3,42	3,45	3,79	4,04
Rezidul sec total, g/dm ³	20,3	20,5	24,2	27,6
Glucidele. Zaharurile reducătoare, g/dm ³	1,59	3,05	0,72	0,8
Concentrația în masă a acidului sulfuros liber, mg/dm ³	12,1	15,5	17,7	22,2
Concentrația în masă a acidului sulfuros total, mg/dm ³	88,0	126,4	186,5	145,4
Concentrația în masă a acidului sulfuros combinat, mg/dm ³	85,9	120,9	148,8	143,2
Oxigenul dizolvat, mg/dm ³	1,82	2,22	6,29	4,52
Conductivitatea, mS/cm	2,11	2,08	2,45	2,97
Analiza senzorială	7,8	8	8,1	8,3

Parametrii fizico chimici și senzoriali: concentrația alcoolică, rezidul sec total, analiza senzorială indică că vinul din soiul ampelografic *Feteasca Albă* este mai bun în comparație cu alte vinuri albe studiate, iar vinul din soiul ampelografic *Rara Neagră* din cele roșii studiate.

Informația obținută din spectrele moleculare de absorbție în domeniul UV și VIS a vinurilor albe și roșii poate fi eficient utilizată pentru aprecierea conținutului grupelor specifice a substanțelor fenolice din vinurile roșii cu scopul optimizării proceselor tehnologice în vederea diminuării susceptibilității/predispunerii vinurilor către oxidare. În baza studiilor realizate s-a stabilit că oxidabilitatea vinurilor albe poate fi apreciată eficient cu POM-test, care oferă informația despre capacitatea de oxidare a vinurilor.

La etapa a doua de realizare obiectivelor propuse s-a studiat dinamica conținutului de acizi organici din vinurile elaborate până și după demararea fermentației malolactice (FML).

Tabelul 2. Conținutul acizilor organici în probele de vinurilor roșii examinate

Tipul de vin	Conținutul acidului malic până la FML (g/l)	Conținutul acidului malic după la FML (g/l)	Conținutul acidului lactic până la FML (g/l)	Conținutul acidului lactic după la FML (g/l)	Raportul acid L-lactic/acid D-lactic
Rara Neagra	1,26		0,22		
Merlot	1,4		0,13		
Pinot Noir	1,35	0,6	0,32	1,05	0,2
Feteasca Neagră	1,56		0,15		
Cabernet Sauvignon	1,22		0,23		

Perioada fermentației malolactice diferă în funcție de tipul de vin și de soiul de struguri din care a fost obținut vinul respectiv. Astfel, vinul Pinot Noir, deși posedă o microfloră indigenă, destul de redusă, reușește să fermenteze malolactic mult mai repede, comparativ cu alte tipuri de vinuri. Aceasta se explică prin inocularea cu bacterii lactice selecționate, care degradează acidul malic într-o perioadă redusă. Rezultatele obținute indică că perioada finalizării fermentației malolactice este influențat de numărul inițial de bacterii lactice din vin, în cazul desfășurării fermentației malolactice spontane, iar în cazul desfășurării fermentației malolactice dirijate, această influență este nesemnificativă. Natura acidului lactic produs în urma fermentației malolactice (forma D sau L) indică specificități ale speciilor de bacterii lactice implicate în fermentația malolactică a vinurilor și mecanismul biochimic de metabolizare a acidului malic. În cazul desfășurării fermentației malolactice dirijate (prin utilizarea culturii *Leuconostoc oenos*), forma D a acidului lactic este predominantă, iar în cazul desfășurării fermentației malolactice spontane (pe baza microflorei indigene), forma L a acidului lactic este predominantă, ceea ce indică că în microflora indigenă se găsesc mai curând lactobacilli și mai puțin leuconostoci.

6. Diseminarea rezultatelor obținute în proiect în formă de publicații:

Lista publicațiilor din anul 2022 este prezentată în Anexa 1A (pag. 26)

7. Impactul științific, social și/sau economic al rezultatelor științifice obținute în cadrul proiectului:

Pentru prima dată a fost determinată influența acidului dihidroxifumaric asupra activității antioxidante a resveratrolului și a fost studiat tipul interacțiunilor antioxidante dintre acești doi compuși. De asemenea, rezulate inedite au fost obținute pentru combinațiile de antioxidanți resveratrol-catehină studiați în raporturi molare diferite, în reacția cu radicalul DPPH. Un efect sinergistic pronunțat a fost descoperit pentru amestecurile de acid ascorbic și acid dihidroxifumaric; testările date au fost efectuate aplicând o metodă modernă de analiză – RES. Rezultatele obținute sunt importante nu doar reieșind din noutatea pe care o prezintă, ci și datorită faptului că compușii analizați sunt compuși naturali care se găsesc în fructe, legume, plante etc., astfel, studiul interacțiunii lor este unul care permite formulare unor concluzii preliminare privind interacțiunile antioxidante ce pot avea loc în sistemele naturale.

Deșeurile din sectorul agroindustrial, datorită efectelor toxice asupra plantelor și organismelor vii, nu pot fi aruncate în sol, dar pot servi drept sursă regenerabilă de produse cu valoare adăugată. Prezenta cercetare s-a axat pe studiul procesului de fermentare a vinasei în prezența substanțelor bioactive, introduse în biomasa digerată. Rezultatele obținute mărturisesc că substanțele de origine naturală utilizate ca aditivi demonstrează efectele pronunțate asupra fermentației alcoolice a vinasei în condiții mezofile. Evaluarea comparativă a acțiunii aditivilor a demonstrat că acidul dihidroxifumaric a determinat emisia de $266 \text{ cm}^3 \text{ CO}_2$ în 76 ore, aescinum – 251 cm^3 în 55 ore, tomatin – 233 cm^3 în 78 ore, sclareol – 232 cm^3 în 55 ore, vanilină – 229 cm^3 timp de 69 de ore, în timp ce catechina – 180 cm^3 pe parcursul a 61 de ore de fermentație, până la finalizarea procesului de fermentație. Astfel, studiul efectelor substanțelor bioactive cu posibile proprietăți antioxidante asupra biomasei din sectorul vitivinicol cu identificarea mecanismelor acestor procese poate fi o direcție de perspectivă, sugerând noi modalități de valorificare a deșeurilor.

Produsele de fermentație alcoolică pot avea valoare adăugată în agricultură și câmpurile adiacente. Astfel, dioxidul de carbon emis în timpul digestiei biomasei poate fi utilizat, de exemplu, în bazinele de cultivare a microalgelor, care la rândul lor, ar putea servi drept hrană valoroasă pentru păsări/bovine din sectorul zootehnic, în timp ce apa separată din fracțiunea solidă poate fi utilizată pentru domenii tehnice la industrii (curățarea mașinilor și aparatelor, curățarea și spălarea halelor de producție și a teritoriului etc.), sau udarea plantelor din parcurile orașului, paturi de flori etc. Fracția solidă după fermentare, cu starea compoziției sale controlate, poate fi folosită ca îngrășământ pentru culturile tehnice.

Rezultatele obținute prezintă aplicații pentru industria alimentară, întrucât acestea descriu interacțiunile între moleculele reprezentante ale două clase importante de compuși – constituenți de bază ai produselor alimentare – proteinele și polizaharidele. Adicional, rezultatele obținute își regăsesc aplicabilitate în industria produselor cosmetice și farmaceutice.

Surfactanții anionici și medicamentele antiinflamatoare sunt greu biodegradabili în condiții aerobe, prin urmare nu se supun oxidării/mineralizării la stațiile de epurare, astfel sunt deversați în apele de suprafață și subterane prin apele uzate menajere și industriale. Deversarea substanțelor medicamentoase și a surfactanților ce se pot conține în apele uzate neepurate eficient prezintă un mare pericol pentru apele naturale, mediul ambinat și sănătății umane. Astfel, eliminarea compușilor farmaceutici și a surfactanților din apele reziduale este una dintre cele mai semnificative priorități în

domeniul epurării apelor uzate, deoarece această poluare are un impact atât social, cât și economic. Eficiența proceselor de oxidare avansată a poluanților emergenți este determinată de mai mulți parametri fizico-chimici, care au fost studiați în cercetările experimentale. Au fost determinate condițiile optime de înlăturare a PE din sisteme model omogene și eterogene prin procese catalitice și fotocatalitice în vederea evidențierii celei mai eficiente metode de oxidare a poluanților emergenți.

Rezultatele cercetărilor pot fi utilizate la elaborarea cursurilor universitare din domeniu chimiei ecologice, precum și pot servi ca puncte de pornire pentru înaintarea proiectelor naționale și internaționale din cadrul direcției strategice Materiale, tehnologii și produse inovative, Chimia ecologică a apelor etc.

Relevanța rezultatelor obținute rezidă în explicarea mecanismelor de oxidare a componentilor constitutivi din struguri și must în procesul tehnologic. Economic acest aspect practic ar permite modelarea proceselor tehnologice în vederea evitării brunificării și oxidării culorii vinurilor elaborate în industria vinicolă, rodarea și recomandarea unor metode moderne de apreciere a stării redox a vinurilor, a potențialului antioxidant.

Determinând cu precizie, concentrațiile de acid malic și lactic din vinuri și totodată printr-o utilizare judicioasă a culturilor starter de bacterii malolactice, putem iniția și finaliza o fermentație malolactică în condiții de siguranță, mărinđ stabilitatea microbiologică a vinului și îmbunătăținđ profilul senzorial al acestuia.

8. Infrastructura de cercetare utilizată în cadrul proiectului:

- ✓ **Infrastructura disponibilă în cadrul Laboratorului Chimie Fizică și Cuantică, Institutul de Chimie:**
 1. Patru laboratoare chimice și șase birouri echipate cu calculatoare, imprimante și conectate la Internet
 2. Spectrometru RMN Bruker 400
 3. Spectrometru Stop-Flow KINTEK E100
 4. PerkinElemer Lambda 25 Spectrometer (UV-vis) dotat cu software pentru înregistrarea datelor la calculator
 5. Calculatoare
 6. Programe pentru efectuarea calculelor cuanto-chimice: Gamess (licență academică), Gaussian09 (licență comercială)
- ✓ **Infrastructura disponibilă în cadrul Departamentului Chimie Industrială și Ecologică, Universitatea de Stat din Moldova:**
 1. 4 laboratoare chimice echipate cu calculatoare, imprimante și conectate la Internet.
 2. Mijloacele fixe și echipamentul folosit în cercetare sunt prezentate de:
 - Spectrofotometru SP8001 (1 buc, domeniile de înregistrare a spectrelor- VIS și UV, conectat la calculator, cu utilizarea soft-ului licențiat)
 - Fotometru HACH (portativ, regimul de lucru permite determinarea diferitor forme ale ionilor în probele analizate)
 - Fotometru de laborator

- Spectrofotometru AAS (utilizat pentru determinarea concentrației metalelor grele în probele de apă naturală)
 - Spectrofotometru UV-VIS cu dublu fascicol și înregistrarea directă a raportului
 - Simulator Solar Oriel Solar Simulators (Newport,USA) (1 buc, destinat studierii proceselor fotochimice ce au loc în mediul ambiant)
 - Spectrofotometre T80 (înregistrarea spectrelor în domeniile UV și VIS)
 - Cromatograf gazos ERBA (dotat cu detector pentru compuși cancerigeni de tipul N-nitrozoaminelor) ș.a.
- ✓ **Infrastructura de cercetare a departamentului Oenologie și Chimie – Laboratorul „Analize fizico-chimice”.**
- Secția de microvinificație UTM;
 - Evaporizator rotativ;
 - Balanță analitică AS 220.R2;
 - Nicolet iS5 Spectrometer;
 - Miura One biochemical analyser;
 - Gibertini Electronica Density Meter;
 - pH-meter Inolab Cond 7330;
 - UV/VIS Spectrometer T80;
 - UV/VIS Spectrometer T70+;
 - Zentrifugen EBA 21;
 - SCAN 1200 HD automatic colony counter;
 - Oven/Incubator PH030A;
 - Bio Rad CFX96;
 - Heating/Cooling Dry Block;
 - Automatic Distillation/ Titration System UDK 159;
 - Specord 250;
 - PhotoLab S12;
 - Julabo 200F;
 - Scion 456-GC;
 - GC-2010/ AOC-5000 Shimadzu.
- ✓ Infrastructura disponibilă în cadrul Laboratorului de Fizică a Neutronul al Institutului Unificat de Cercetări Nucleare (Dubn, Federația Rusă);
- ✓ Serverul Laboratorului European de Biologie Moleculară (EMBL, Hamburg, Germania) cu destinație specială pentru prelucrarea matematică a curbelor experimentale de împrăștiere la unghiuri mici;
- ✓ KWS-2 difractometrul de împrăștiere cu neutroni la unghiuri mici, din cadrul facilității internaționale MLZ, Germania;
- ✓ Spectrometrul de împrăștiere cu raze-X la unghiuri mici, din cadrul facilității internaționale Synchrotron Elletra, Trieste-Italia;
- ✓ Instalația pneumatică REGATA a reactorului cu neutroni rapizi IBR-2 și spectrometru de absorbție atomică iCE 3400 AAS (Thermo Fisher Scientific, Waltham, MA, SUA).

9. Colaborare la nivel național în cadrul implementării proiectului:

- ✓ Universitatea de Stat din Moldova, Facultatea Chimie și Tehnologie Chimică;
- ✓ Universitatea Tehnică din Moldova, Facultatea Tehnologia Alimentelor;
- ✓ Universitatea de Stat Tiraspol, Facultatea Chimie și Biologie.

10. Colaborare la nivel internațional în cadrul implementării proiectului:

- ✓ Institutul de Chimie Macromoleculară “Petru Poni”, Iași, România
- ✓ Horia Hulubei National Institute for R&D in Physics and Nuclear Engineering, Reactorului 30, Bucharest - Magurele, P.O.BOX MG-6 Romania
- ✓ Jülich Centre for Neutron Science Outstation at MLZ, Forschungszentrum Jülich GmbH, Lichtenbergstraße 1, Garching, 85748 Germany
- ✓ Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Joliot-Curie 6, Dubna, 141980 Russian Federation
- ✓ Institute of Inorganic Chemistry, Graz University of Technology, Stremayrgasse 9, 8010, Graz, Austria
- ✓ Synchrotron Elettra, Trieste-Italia

11. Dificultățile în realizarea proiectului

1. Întârziere considerabilă a finanțării, ceea ce are mai multe consecințe negative – întârzierea organizării licitației și aprovizionării cu reagenți chimici și consumabile.
2. Dificultăți organizatorice în ceea ce privește aprobarea de către ANCD a modificărilor în echipa de realizare a proiectului.
3. Interzicerea angajării a masteranzilor, care posedă abilități suficiente pentru a activa în calitate de cercetător științific stagiar.

12. Diseminarea rezultatelor obținute **în proiect** în formă de prezentări la foruri științifice

➤ Manifestări științifice internaționale (în străinătate)

- 1) DUCA Gheorghe, academician - A XXXVI-a CONFERINȚĂ NAȚIONALĂ DE CHIMIE – CNChim-2022 Călimănești – Căciulata, România, 4-7 octombrie, 2022, CHIMIA FIZICĂ, ECOLOGICĂ, TEHNOLOGICĂ ȘI BIOMEDICALĂ A PEROXIDULUI DE HIDROGEN, **(raport plenar)**
- 2) ANGHEL Lilia, dr., - Conferința internațională “Condensed Matter Research at the IBR-2, 2022”, organizată de Institutul Unificat de Cercetări Nucleare, Dubna, Rusia, 27.04.2022. **(raport plenar)**
- 3) GORINCIOI Elena, dr. în științe chimice - A XXXVI-a CONFERINȚĂ NAȚIONALĂ DE CHIMIE –CNChim-2022 Călimănești – Căciulata, România, 4-7 octombrie, 2022, Use of UV-Vis and NMR spectroscopies in studies of antioxidants’ synergism involving ascorbic and dihydroxyfumaric acids. (poster)

➤ Manifestări științifice internaționale (în Republica Moldova)

- 1) DUCA Gheorghe, academician - The 7th International Conference of Ecological and Environmental Chemistry, 3-4 March, 2022, Chisinau, Republic of Moldova. Fundamental Aspects of Ecological and Environmental Chemistry. **(prezentare orală)**
- 2) GORINCIOI Elena, dr. în științe chimice - The 7th International Conference ECOLOGICAL AND ENVIRONMENTAL CHEMISTRY-2022, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova; Preliminary Results on ^{13}C NMR Studies regarding the Radical Scavenging Activities Of Ascorbic Acid And Dihydroxyfumaric Acid Using 1,1-Diphenyl-2-picrylhydrazyl. (poster)
- 3) BĂLAN Iolanta, dr. în șt. chimice - The 7th International Conference: "Ecological and Environmental Chemistry-2022", March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova "DFT modeling of adsorption of $[\text{Sr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ ions on activated carbons."- poster.
- 4) ANGHEL Lilia, dr., - Conferința internațională "Ecological and Environmental Chemistry 2022", organizată de Institutul de Chimie, Chișinău, Republica Moldova, 4.03.2022 (prezentare poster)
- 5) BORODAEV Ruslan, dr The 7th International Conference: "Ecological and Environmental Chemistry-2022", March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova. STUDY ON THE IMPACT OF SOME LOCAL THIOLS ON THE WATER SELF-PURIFICATION CAPACITY OF DANCENI LAKE (poster)
- 6) BORODAEV Ruslan, dr. The 7th International Conference: "Ecological and Environmental Chemistry-2022", March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova. PECULIARITIES OF THE ACCUMULATION OF IRON AND COPPER IN THE DNIESTER RIVER (poster)
- 7) BORODAEV Ruslan, dr. The 7th International Conference: "Ecological and Environmental Chemistry-2022", March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova ПРЕДМЕТ «ЭКОЛОГИЧЕСКОЕ ВОСПИТАНИЕ» В ЦИКЛЕ ЛИЦЕЙСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ МОЛДОВА (poster)
- 8) BORODAEV Ruslan, dr. Международная конференция «УПРАВЛЕНИЕ ТРАНСГРАНИЧНЫМ БАСЕЙНОМ ДНЕСТРА И ЕВРОИНТЕГРАЦИЯ – ШАГ ЗА ШАГОМ», Кишинев, Молдова, 27-28 октября 2022 г. ХИМИЯ МЕТАЛЛОВ ПРИРОДНЫХ ВОД СКВОЗЬ ПРИЗМУ КОРРЕЛЯЦИОННОГО И РЕГРЕССИОННОГО АНАЛИЗА(oral)
- 9) MOCANU, Larisa. *The 7th International Conference Ecological And Environmental Chemistry-2022*, 2022. Institutul de Chimie, Republica Moldova, 3-4 martie 2022. Removal cephalixin from aqueous solution by photodegradation **(prezentare orală)**.
- 10) PORUBIN-SCHIMBATOR, Veronica. *The 7th International Conference Ecological And Environmental Chemistry-2022*, 2022. Institutul de Chimie, Republica Moldova, 3-4 martie 2022. Photocatalytic oxidation of the anionic surfactant sodium 2-ethylhexyl sulfate in $\text{UV}/\text{TiO}_2/\text{H}_2\text{O}_2$ and $\text{UV}/\text{Fe}^{2+}/\text{H}_2\text{O}_2$ systems (prezentare poster).
- 11) GONTA, Maria. The 7th International Conference Ecological And Environmental Chemistry-

2022, 2022. Institutul de Chimie, Republica Moldova, 3-4 martie 2022. Synthesis of quercetin functionalized chitosan and determination of antioxidant properties (prezentare poster).

➤ Manifestări științifice naționale

➤ Manifestări științifice cu participare internațională

- 1) BĂLAN Iolanta, dr. în șt. chimice - Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-IX-a, Universitatea de Stat din Tiraspol, 19-20 martie, 2022, „Originea pseudo Jahn-Teller a barierei de energie a transferului de proton în dimerii protonați.” **(prezentare orală)**
 - 2) GORINCIOI Elena, dr. în științe chimice - Conferința științifico-practică internațională “Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă”, ediția a IX-a, Universitatea de Stat din Tiraspol, 19-20 martie 2022, Caracterizarea materiei organice dizolvate în hidroecosistemul Valea Morilor, mun. Chișinău cu utilizarea analizei ^1H RMN. **(prezentare orală)**.
 - 3) BORODAEV Ruslan, dr. The National Conference with international participation ” Life sciences in the dialogue of generations: Connections between Universities, Academia and Business Community”, Chisinau ,September 29-30, 2022. ON THE MECHANISM OF CHEMICAL SELF-PURIFICATION OF VARIOUS WATER SYSTEMS OF THE LOWER DNIESTER BASIN (poster)
 - 4) BORODAEV Ruslan, dr. Integrare prin cercetare și inovare. Conferința științifică națională cu participare internațională dedicată aniversării a 76-a a Universității de Stat din Moldova, 10-11 noiembrie 2022, Chișinău. ДИНАМИКА АККУМУЛИРОВАНИЯ МЕТАЛЛОВ ПЕРЕМЕННОЙ ВАЛЕНТНОСТИ НА УЧАСТКЕ РЕКИ ДНЕСТР **(prezentare orală)**
- 13. Aprecierea și recunoașterea rezultatelor obținute în proiect** (premii, medalii, titluri, alte aprecieri).
1. DUCA Gh., academician - acordare a titlului de *Doctor Honoris Causa* al USPEE “Constantin Stere”, 10 noiembrie 2022, Chișinău, Republica Moldova
 2. DUCA Gh., Covaliova O., Romanciuc L. - SEWAGE SLUDGE DEWORMING METHOD, Târgului Internațional de invenții și idei practice INVENT – INVEST, ediția a XII, **Medalie de aur.**
 3. GLADCHI V., dr. - a fost decernată medalia Societății de Chimie din Republica Moldova
 4. BUNDUCHI E., dr - a fost decernată medalia Societății de Chimie din Republica Moldova
 5. GONȚA Maria, dr.hab. – a fost decernată medalia Societății de Chimie din Republica Moldova
 6. GONTA, M., GUTU, I., CEACIRU, M. Process for obtaining functionalized chitosan with dihydroxyfumaric acid residues. EUROINVENT 2022 The 14th edition of Creativity and Innovation Iasi Romania, 26-28 May, 2022. **Diplomă de excelență.**
 7. GONTA, M., GUTU, I., CEACIRU, M. Process for obtaining functionalized chitosan with dihydroxyfumaric acid residues. Salonul Internațional de Invenții INVENTICA 2022, ediția a 26-a, 22-24 iunie 2022, Iași, România. **Medalie de aur.**
 8. GONTA, M., GUTU, I., CEACIRU, M. Process for obtaining functionalized chitosan with dihydroxyfumaric acid residues. The International Fair of Innovation and Creative Education for Youth (ICE-USV), Suceava, 10-12 iulie, 2022. **Medalie de argint.**

9. Maria GONTA, Iacob GUTU, Gheorghe DUCA, Mihai CEACIRU, Process for obtaining functionalized chitosan with dihydroxyfumaric acid. **Premiul pentru Chimie Ecologica „INVEST– INVENT”** a Târgului Internațional de invenții și idei practice INVENT – INVEST, ediția a XIIa.
10. Maria GONTA, Larisa MOCANU, Gheorghe DUCA, Veronica PORUBIN, Amoxicillin removal by Fenton reagent in aqueous solutions. Premiul pentru Chimie Ecologica „INVEST– INVENT” a Târgului Internațional de invenții și idei practice INVENT – INVEST, ediția a XII
14. Promovarea rezultatelor cercetărilor obținute **în proiect** în mass-media:
 - Emisiuni radio/TV de popularizare a științei
 - ✓ DUCA Gheorghe, academician - 03.03.2022 – TV Moldova 1 - Chimistul Acad. Gheorghe Duca - <https://youtu.be/-Pj52-kSjUI>
 - ✓ DUCA Gheorghe, academician - 06.03.2022 – Tribuna MD - Omul săptămânii: Gheorghe Duca, ex-președintele Academiei de Științe a Moldovei - <https://tribuna.md/2022/03/06/omul-saptamanii-gheorghe-duca-ex-presedintele-academiei-de-stiinte-a-moldovei/>
 - ✓ DUCA Gheorghe, academician - 12.05.2022 - AVA.md: Дука Георгий, Академик, профессор, экс президент Академии наук РМ **”CERCETĂRI ȘI POLITICI PRIORITARE ÎN DOMENIUL APELOR ÎN REPUBLICA MOLDOVA”**
 - ✓ DUCA Gheorghe, academician - Iunie 2022 - AVA.md: ”Мэр Чебан vs ЛГБТ и академик Дука о серьезной проблеме Молдовы”.
 - Articole de popularizare a științei
 - ✓ DUCA Gheorghe, academician - Februrie, 2022 - Curentul,; INTERVIU jubiliar cu Gheorghe Duca: ”Anii trec repede, destinul și soarta fiecărui om pe Pământ sunt determinate de anumite întâmplări, evenimente și persoane”.
 - ✓ DUCA Gheorghe, academician - 24.02.2022 – Literatura și Arta Nr.8-9 (3989-39900)- Viața tumultuoasă i-a încununat chipul. Stăpîn al acțiunilor eficace. Matricea expresivă din confluentele ecologice. Academicianul Gheorghe Duca în evoluția timpului. Managerul înzestrat cu grație cerească. Un suflet implinit. Omul care unește oameni.
 - ✓ DUCA Gheorghe, academician - 10.03.2022 – Literatura și Arta Nr.11-12 (3992-2993) – Vocația unui savant în misiune.
15. Teze de doctorat / postdoctorat susținute și confirmate în anul 2022 de membrii echipei proiectului.
 - ◆ Lis Angela - dr - "Legități de transformare fotochimică a unor substanțe tiolice în sistemele acvatic", sp. 145.02.Chimie ecologică a apei, (16.02.2022). Conducător științific – Gladchi Viorica, dr. în șt. chimice, conf. univ.; Consultant științific – Duca Gheorghe, dr hab. în șt. chimice, prof. univ., academician AȘM.
 - ◆ Mocanu Larisa - dr -”Aplicarea metodelor fizico-chimice combinate la înlăturarea poluanților textili din soluții apoase”, pretendentă la titlul de doctor în științe chimice, specialitatea 145.01. Chimie ecologică, conducător șt.: DUCA Gheorghe, dr. hab. în șt. chimice, prof. univ., academician AȘM; consultant științific – GONTA Maria, dr. hab. în șt. chimice, prof. univ.

- ◆ Zinicovscaia Inga - dr.hab - "Impactul unor metale determinate prin analiza de activare cu neutroni asupra calității mediului ambiant", specialitatea 145.01. Chimie ecologică, consultant științific – Duca Gheorghe, dr hab. în șt. chimice, prof. univ., academician AȘM.

16. Materializarea rezultatelor obținute în proiect:

1. **Actul de implementare a rezultatelor din cadrul proiectului** din 18.09.2022, semnat de Directorul Institutului de Ecologie și Geografie. Anexa 1D (pag. 41)

17. Informație suplimentară referitor la activitățile membrilor echipei în anul 2022

- Membru/președinte al comitetului organizatoric/științific, al comisiilor, consiliilor științifice de susținere a tezelor
- ◆ DUCA Gheorghe - Conferința Internațională „Chimie Ecologică și a Mediului-2022”, 3-4 Martie, 2022, Chisinău, Republica Moldova. (Presedinte al comitetului organizatoric) http://eec-2022.mrda.md/?page_id=32
- ◆ ROMANCIUC Lidia - Conferința Internațională „Chimie Ecologică și a Mediului-2022”, 3-4 Martie, 2022, Chisinău, Republica Moldova. (Secretar al conferinței) http://eec-2022.mrda.md/?page_id=32
- ◆ BĂLAN Iolanta - Conferința Internațională „Chimie Ecologică și a Mediului-2022”, 3-4 Martie, 2022, Chisinău, Republica Moldova. (Membru al Comitetului organizatoric local) http://eec-2022.mrda.md/?page_id=32
- ◆ ANGHEL Lilia - Conferința Internațională ”Ecologica land Environmental Chemistry 2022”, 3-4 martie 2022. (Membru al comitetului organizațional local, responsabil de secția A)
- ◆ ANGHEL Lilia - ședința Seminarului Științific de Profil ad-hoc în cadrul Institutului de Chimie al tezei de doctor habilitat în științe chimice cu titlul: „Impactul unor metale determinate prin analiza de activare cu neutroni asupra calității mediului ambiant”, elaborată de către doamna Inga ZINICOVSCAIA la specialitatea 145.01. Chimie ecologică, din data de 24.05.22 [https://ichem.md/sedinta-seminarului-stiintific-de-profil-privind-evaluarea-tezei-de-doctor-habilitat./24 mai 2022/](https://ichem.md/sedinta-seminarului-stiintific-de-profil-privind-evaluarea-tezei-de-doctor-habilitat./24%20mai%202022/) (Secretar științific)
- ◆ BĂLAN Iolanta - ședința Seminarul Științific de Profil în format mixt, pentru examinarea tezei de doctor habilitat în științe chimice "*Impactul unor metale determinate prin analiza de activare cu neutroni asupra calității mediului ambiant*", specialitatea-145.01-Chimie ecologică, elaborată de dr. ZINICOVSCAIA Inga, USM, 02.02.2022, ora 13.00. (Membru)
- ◆ BĂLAN Iolanta - ședința Seminarul Științific de Profil în format mixt, pentru examinarea tezei de doctor în științe chimice "*Legități de transformare fotochimică a unor substanțe tiolice în sistemele acvatice*", sp.-145.02-Chimie ecologică a apei, elaborată de LIS Angela, USM, 16.02.2022, ora 12.00 (Membru)
- ◆ BĂLAN Iolanta - ședința Seminarul Științific de Profil în format fizic, pentru examinarea tezei de doctor în științe chimice "*Aplicarea metodelor fizico-chimice combinate la înlăturarea poluanților textili din soluții apoase*", sp. 145.01.Chimie ecologică, elaborată de MOCANU Larisa, USM, 11.05.2022, ora 13.00 (Membru)
- ◆ BĂLAN Iolanta - ședința Seminarul Științific de Profil ad-hoc în format mixt, pentru

examinarea tezei de doctor habilitat în științe chimice *"Impactul unor metale determinate prin analiza de activare cu neutroni asupra calității mediului ambiant"*, specialitatea-145.01-Chimie ecologică, elaborată de dr. ZINICOVSCAIA Inga, Institutul de Chimie, 24.05.2022, ora 14.00. (Membru)

- ◆ GORINCIOI Elena – ședința Comisiei de Doctorat din data de 05.05.22, în cadrul căreia a fost prezentată teza de doctorat a dnei Svetlana Blaja cu titlul Sinteza dirijată și studiul activității antimicrobiene a unor compuși norlabdanici polifuncționalizați. (Secretar științific)
- ◆ GLADCHI V. – participarea la 8 ședințe ale Comisiei de profil ANACEC
- ◆ GLADCHI V. – membrul Consiliului științific de susținere a tezei de doctor. Pretendent - Ivanova Anastasia, Institutul de Zoologie, 15.04.2022
- ◆ GLADCHI V. - ședința din cadrul Departamentului Chimie Industrială și Ecologică din data de 05.04.2022, în cadrul căreia a fost prezentată teza de doctorat a dnei Lis Angela cu titlul "Legități de transformare fotochimică a unor substanțe tiolice în sistemele acvatice", sp. 145.02.Chimie ecologică a apei (membru al dep. CIE)
- ◆ GLADCHI V. - Seminarul Științific de profil ad-hoc din cadrul Institutului de Chimie în vederea examinării tezei de doctor habilitat cu titlul "Impactul unor metale determinate prin analiza de activare cu neutroni asupra calității mediului ambiant" la specialitatea 145.01. Chimia ecologică, elaborată de către dna Inga Zinicovscaia, consultant științific Duca Gheorghe, dr. hab. în șt. chimice, prof. univ., academician. (24 mai 2022, regim online).
- ◆ GLADCHI V. - 11.05.22 participare la ședința seminar. Științific în cadrul căreia a fost prezentată teza de doctorat a dnei Mocanu Larisa cu titlul " Aplicarea metodelor fizico-chimice combinate la înlăturarea poluanților textili din soluții apoase".
- ◆ GONȚA, Maria - ședința din cadrul Departamentului Chimie Industrială și Ecologică din data de 05.04.2022, în cadrul căreia a fost prezentată teza de doctorat a dnei Lis Angela cu titlul "Legități de transformare fotochimică a unor substanțe tiolice în sistemele acvatice", sp. 145.02.Chimie ecologică a apei (membru al dep. CIE)
- ◆ GONȚA, Maria - ședința din cadrul Departamentului Chimie Industrială și Ecologică din data de 05.04.2022, în cadrul căreia a fost prezentată teza de doctorat a dnei Mocanu Larisa cu titlul " Aplicarea metodelor fizico-chimice combinate la înlăturarea poluanților textili din soluții apoase". (Consultant științific).
- ◆ GONȚA, Maria - Seminarul Științific de profil ad-hoc din cadrul Institutului de Chimie în vederea examinării tezei de doctor habilitat cu titlul "Impactul unor metale determinate prin analiza de activare cu neutroni asupra calității mediului ambiant" la specialitatea 145.01. Chimia ecologică, elaborată de către dna Inga Zinicovscaia, consultant științific Duca Gheorghe, dr. hab. în șt. chimice, prof. univ., academician. (24 mai 2022, regim online).
- ◆ GONȚA, Maria - expert în evaluarea tezei de dr. hab. în cadrul USM, SȘP-144, cu tema "Impactul unor metale determinate prin analiza de activare cu neutroni asupra calității mediului ambiant" (02.02.2022), sp. 145.01. Chimie ecologică, consultant științific: acad. Gh. Duca.
- ◆ GONȚA, Maria - 12.07.22 participare la șed. Consiliului științific în cadrul căreia a fost prezentată teza de doctorat a dnei Lis Angela cu titlul "Legități de transformare fotochimică a unor substanțe tiolice în sistemele acvatice", sp. 145.02.Chimie ecologică a apei- Președintele consiliului.
- ◆ GONȚA, Maria - 11.05.22 participare la ședința seminar. Științific în cadrul căreia a fost

prezentată teza de doctorat a dnei Mocanu Larisa cu titlul " Aplicarea metodelor fizico-chimice combinate la înlăturarea poluanților textili din soluții apoase". (Consultant științific).

- ◆ GONȚA, Maria – participare la ședința (online) în Programul manifestărilor organizate sub egida EUROINVENT - 2022 (26- 28 mai, 2022).
- ◆ GONȚA, Maria – participare la Atelierul/webinarul de formare continuă., USM (27.05.22)
- ◆ GONȚA Maria – participare la ședința atelierului “Principii FAIR în managementul datelor de cecetare “, 19.05.22.
- ◆ GONȚA, Maria – participare la evenimentul ERC InfoDay in Romania din 11 mai 2022
- ◆ GONȚA, Maria - membru al Comisiei de experți în domeniul atestării Științe chimice, biologice și geonomice: ramurile științifice 14-16.
- ◆ MOCANU, Larisa - Recenzie la capitolul "Clathrate Hydrates - a Hope for the Fuel Industry and Great Ecological Hazard", publicat in cartea Research on Water Sciences and Society. Editura IGI Global, Ianuarie 2022.
- ◆ GONȚA, Maria și MOCANU, Larisa - Participare in format on-line la webinarul : Live Q&A and presentation "Disrupting drug resistance using innovative design". <https://sunet.zoom.us/j/66036709841>, 25 ianuarie 2022.
- ◆ GONȚA, Maria - Moderator la sectiunea B la conferinta EEC-2022, Martie 2022
- ◆ MOCANU, Larisa - Moderator la sectiunea E la conferinta EEC-2022, Martie 2022
- ◆ BORODAEV Ruslan. Conferinta stiintifica studenteasca etapa XXVI. 10.02.2022 Membru Juriului.
- ◆ Bunduchi Elena/Seminar Științific de Profil/ 2 februarie 2022/secretar
- ◆ Bunduchi Elena/Seminar Științific de Profil/ 16 februarie 2022/secretar
- ◆ Bunduchi Elena/Seminar Științific de Profil/ 11 mai 2022/secretar
- ◆ Bunduchi Elena/Consiliul Științific Specializat D 145.02-22-10/12 iulie 2022/secretar
- ◆ Bunduchi Elena/Consiliul Știinșific Specalizat D 145.01-22-25/31 octombrie 2022/secretar
- ◆ Bunduchi Elena/Consiliul Științific Specializat DH 145.01-22-4/28 noiembrie 2022/secretar
- ◆ Bunduchi Elena/ Conferință științifică studențească națională cu participare internațională “Chimia ecologică și a mediului”/22 noiembrie 2022/membru Comitetul științific
- ◆ BORODAEV Ruslan. Seminarului științific de profil la specialitățile: 144.01-Chimie fizică, 145.01-Chimie ecologică, 145.02-Chimie ecologică a apei. Teze de doctor A. Lis, L. Mocanu. Membru

➤ Redactor / membru al colegiilor de redacție al revistelor naționale / internaționale

- ◆ DUCA Gheorghe - revista de categoria A – Chemistry Journal of Moldova, Redactor-șef
- ◆ DUCA Gheorghe – revista ”Environmental Engineering”, Iași, Romania, membru colegiului de redacție
- ◆ DUCA Gheorghe – revista ”Chimia și tehnologia apei”, Kiev, Ucraina, membru colegiului de redacție
- ◆ DUCA Gheorghe – revista ”Chimia Ecologica”, Sanct-Petersburg, membru colegiului de redacție
- ◆ DUCA Gheorghe – membrul Comisiei de Experți ANACEC
- ◆ GORINCIOI Natalia - revista de categoria A – Chemistry Journal of Moldova, membru al colegiului de redacție

- ◆ ANGHEL Lilia - revista de categoria A – Chemistry Journal of Moldova, Membru al oficiului editorial
- ◆ ANGHEL Lilia – revista internațională FOOD CHEMISTRY JOURNAL (IF 9.23), Recenzent oficial la manuscrisul Ms. Ref. No.: FOODCHEM-D-20-09457R1
- ◆ ANGHEL Lilia – revista internațională FOOD CHEMISTRY JOURNAL (IF 9.23), Recenzent oficial la manuscrisul Ms. Ref. No.: FOODCHEM-D-22-08374
- ◆ BARBA Alic - revista de categoria A – Chemistry Journal of Moldova, Recenzent oficial
- ◆ BOLOCAN Natalia - revista de categoria A – Chemistry Journal of Moldova, redactor de limbă engleză
- ◆ GORINCIOI Elena - revista de categoria B – Akademos, Recenzent oficial la manuscrisul Indirect chronovoltametric dosage of alkaline earth metals. The contribution of the chemist Ion Vatamanu to the development of electrochemical methods of analysis.
- ◆ BĂLAN Iolanta - revista de categoria A – Chemistry Journal of Moldova, Membru al oficiului editorial
- ◆ GLADCHI Viorica – redactor-șef adjunct a revistei științifice Chemistry Journal of Moldova
- ◆ GLADCHI Viorica - redactor-șef adjunct a revistei științifice Studia Universitatis Moldaviae, Seria *Științe Reale și ale Naturii*
- ◆ GLADCHI Viorica – recenzent la revista științifică *Akademos*
- ◆ GONȚA Maria - membru al colegiului de redacție a revistei științifice Chemistry Journal of Moldova
- ◆ GONȚA Maria - membru al colegiului de redacție a revistei științifice Studia Universitatis Moldaviae, Seria *Științe Reale și ale Naturii*
- ◆ GONȚA Maria - membru al Colegiului de redacție al revistei *Environmental Problems*, Livov, ISSN: 2414-5955 (print), 2522-4417 (online)
- ◆ STURZA Rodica - Journal of Engineering Science/ Editor responsabil
- ◆ STURZA Rodica - Journal of Social Science/ Editor responsabil
- ◆ STURZA Rodica - Chemistry Journal of Moldova/ Membru de redacție

Altele:

1. DUCA Gheorghe – membrul Comisiei de Experți ANACEC
2. GLADCHI Viorica – membrul Comisiei de profil în învățământul superior ANACEC
3. GONȚA Maria – membrul Comisiei de Experți ANACEC
4. GORINCIOI Elena- expert MOLDAC
5. GORINCIOI Elena – membru al Comisiei de Calificare și Evaluare, Centrul Național de Expertize Judiciare.

18. Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect:

Ro: Rezultatele cercetărilor în cadrul proiectului nr. **20.80009.5007.27** din anul 2022 au fost focusate pe studiul experimental și teoretic al efectului sinergic manifestat de diverși antioxidanți. A fost stabilită prezența efectului antagonist dintre varii combinații de acid dihidroxifumari – resveratrol și catehină – resveratrol. În amestecul de antioxidanți acid ascorbic – acid dihidroxifumaric, analizat prin spectroscopia RES, a fost depistată o puternică interacțiune sinergică.

Prin calcule cuanto-chimice s-a constatat că efectul sinergic al formei reduse de glutatation asupra reacției acidului cafeic cu cation-radicalul $ABTS^{+}$ constă în ionizarea de către anionii glutatationului a moleculelor de acid cafeic asociate cu grupările sulfonice ale cation-radicalilor $ABTS^{+}$ cu transferul simultan al unui electron din fragmentul anionic nou format de acid cafeic pe fragmentul structural $ABTS^{+}$.

S-a demonstrat că cel mai probabil mecanism prin care molecula de 2,3-dihidroxi-N1,N4-bis(2-hidroxietil)fumaramidă își manifestă activitatea antioxidantă în reacția cu DPPH, atât în gaz (in vacuo) cât și în apă, este mecanismul SPLET, care constă în pierderea inițială a protonului cu pierderea ulterioară a electronului.

S-a demonstrat că PEJT controlează reacțiile de transfer de protoni în sistemele cu legături de hidrogen. Calculele cuantice-chimice ale parametrilor de cuplare PEJT între starea fundamentală și starea excitată relevantă de-a lungul coordonatei transferului de protoni permit dezvoltarea mecanismului reacției și posibila manipulare a acesteia.

Pentru prima dată a fost evidențiat efectul factorilor de mediu precum pH-ul și prezența sării de NaCl asupra interacțiunilor dintre moleculele lactoferrină și polizaharide cu activitate antioxidantă utilizând metoda de împrăștiere la unghiuri mici. Rezultatele obținute demonstrează formarea complexelor macromoleculare în baza interacțiunilor electrostatice.

Au fost determinate legăturile cinetice de transformare a vitaminelor din grupa B sub influența factorilor de mediu și s-a depistat eficiența proceselor redox și celor fotochimice. Au fost monitorizate 5 obiecte acvatice din bazinul Nistrului și s-a depistat influența r. Răut asupra compoziției chimice a apelor Nistrului. A fost studiată degradarea medicamentelor antiinflamatoare (diclofenac sodic) și a surfactanților anionici (sodiu dodecilbenzosulfonat) din soluțiile apoase prin aplicarea fotolizei și a proceselor de oxidare avansată. Au fost stabiliți parametrii cinetici optimi ai procesului catalitic și fotocatalitic de degradare/mineralizare în sisteme omogene și eterogene prin monitorizarea concentrației substratului oxidat, valorile CCO în funcție de diferiți parametri fizico-chimici. Având în vedere rezultatele menționate mai sus, procedeul Fenton poate fi utilizat la depoluarea apelor uzate cu conținut de medicamente antiinflamatoare și surfactanți anionici.

Pentru aprecierea calității vinurilor din r-nul Ștefan Vodă, s. Purcari au fost studiați indicii fizico-chimici și specifici, ce permit prognozarea stabilității și oxidabilității acestora. Parametrii fizico-chimici și senzoriali: concentrația alcoolică, reziduul sec total, analiza senzorială indică că vinul din soiul ampelografic Feteasca Albă este mai bun în comparație cu alte vinuri albe studiate, iar vinul din soiul ampelografic Rara Neagră din cele roșii studiate.

En: The results of the research within project no. 20.80009.5007.27 from the year 2022 were focused on the experimental and theoretical study of the synergistic effect manifested by various antioxidants.

The presence of the antagonistic effect between various combinations of dihydroxyfumaric acid – resveratrol and catechin – resveratrol was established. In the mixture of antioxidants ascorbic acid - dihydroxyfumaric acid, analyzed by RES spectroscopy, a powerful synergistic interaction was detected.

Through quantum-chemical calculations it was found that the synergistic effect of the reduced form of glutathione on the reaction of caffeic acid with the radical cation ABTS^{•+} consists of the ionization by glutathione anions of the caffeic acid molecules associated with the sulfonic groups of the radical cation ABTS^{•+} with the transfer simultaneously of an electron from the newly formed anionic fragment of caffeic acid on the ABTS^{•+} structural fragment.

It was demonstrated that the most likely mechanism by which the molecule of 2,3-dihydroxy-N1,N4-bis(2-hydroxyethyl)fumaramide manifests its antioxidant activity in reaction with DPPH, both in gas (in vacuo) and in water is the SPLET mechanism, which consists in the initial loss of the proton with the subsequent loss of the electron.

The PJTE was shown to control the proton transfer reactions in hydrogen-bonded systems. Quantum-chemical calculations of the parameters of PJTE coupling between the ground and the relevant excited state along the coordinate of the possible proton transfer allow for revealing the mechanism of the reaction and its possible manipulation.

For the first time, the effect of environmental factors such as pH and the presence of NaCl salt on the interactions between lactoferrin molecules and polysaccharides with antioxidant activity has been highlighted by using the small angle scattering method. The obtained results demonstrate the formation of macromolecular complexes based on electrostatic interactions

The kinetic laws of transformation of group B vitamins under the influence of environmental factors were determined and the efficiency of redox and photochemical processes was detected. 5 aquatic objects from the Dniester basin were monitored and the influence of the Răut River on the chemical composition of the Dniester waters was detected. The degradation of anti-inflammatory drugs (diclofenac sodium) and anionic surfactants (sodium dodecylbenzosulfonate) from aqueous solutions was studied by applying photolysis and advanced oxidation processes. The optimal kinetic parameters of the catalytic and photocatalytic process of degradation/mineralization in homogeneous and heterogeneous systems were established by monitoring the concentration of the oxidized substrate, and the CCO values according to different physicochemical parameters. It was demonstrated that, the Fenton process can be used for the depollution of wastewater containing anti-inflammatory drugs and anionic surfactants.

In order to assess the quality of the wines from the Ștefan Vodă district, Purcari village, physicochemical and specific indices were studied, which allow forecasting their stability and oxidizability. The physicochemical and sensory parameters: alcohol concentration, total dry residue and sensory analysis indicate that the wine from the ampelographic variety Feteasca Alba is better compared to other white wines studied and the wine from the ampelographic variety Rara Neagra to the red ones studied.

19. Recomandări, propuneri

Studiul influenței aditivilor substanțelor biologice active asupra fermentației biomasei reziduale din sectorul agroindustrial, împreună cu dezvăluirea mecanismelor acestor procese pot deschide o nouă perspectivă direcție de cercetare în acest domeniu. Acest lucru ar permite nu numai gestionarea proceselor de fermentare, accelerarea sau suprimarea acestora pentru domeniile specifice, ci și obținerea unei serii de produse cu valoare adăugată în condiții mai favorabile, precum și prevenirea deversărilor de deșeuri nocive în mediu.

Informația obținută din spectrele moleculare de absorbție în domeniul ultraviolet (UV) și vizibil (VIS) poate fi eficient utilizată pentru aprecierea conținutului grupelor principale a substanțelor fenolice din vinuri cu scopul optimizării proceselor tehnologice. Oxidabilitatea vinurilor albe poate fi apreciată destul de eficient cu POM- test. POM- testul oferă informația despre capacitatea de oxidare a vinurilor. Determinând cu precizie, concentrațiile de acid malic și lactic din vinuri și totodată printr-o utilizare judicioasă a culturilor starter de bacterii malolactice, putem iniția și finaliza o fermentație malolactică în condiții de siguranță, mărind stabilitatea microbiologică a vinului și îmbunătățind profilul senzorial al acestuia.

Conducătorul de proiect



academician DUCA Gheorghe

Data: 10.11.2022

LȘ



**Lista lucrărilor științifice, științifico-metodice și didactice
publicate în anul de referință în cadrul proiectului din Programul de Stat**

**”Mecanisme fizico-chimice a proceselor redox cu transfer de electroni implicate în sistemele
vitale, tehnologice și de mediu”**

1. **Monografii** (recomandate spre editare de consiliul științific/senatul organizației din domeniile cercetării și inovării)

1.1. monografii internaționale

- 1) VASEASHTA, A.; DUCA, Gh.; TRAVIN, S. *Handbook of Research on Water Science and Society*. IGI Global, USA. 2022, 1, 931 p. DOI: <http://doi.org/10.4018/978-1-7998-7356-3>. ISBN 9781799873563 (hardcover); ISBN 9781799873570(ebook).

<https://www.igi-global.com/gateway/book/262680>

1.2. monografii naționale

- 1) DUCA, Gh. *Abstract Book of the 7th International Convergence: Ecological and Environmental Chemistry*. Chisinau: CEP USM, 2022, 1, 230 p. ISBN 978-9975-159-07-4, DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v1>
- 2) DUCA, Gh. *Abstract Book of the 7th International Convergence: Ecological and Environmental Chemistry*. Chisinau: CEP USM, 2022, 2, 350 p. ISBN 978-9975-159-07-4, DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v2>
- 3) BLONSCHI, V.; GLADCHI, V.; DUCA, Gh. *Participarea substanțelor tiolice în procese de autopurificare chimică a apelor naturale*. Chișinău: CEP USM, 2022, 138 p. ISBN 978-9975-159-45-6.
http://catalog.bnrm.md/opac/bibliographic_view/1163561?pn=opac%2FSearch&q=Participarea+substan%C8%9Belor+tiolice+%C3%AEn+proces+de+autopurificare+chimic%C4%83+a+apelor+naturale+%3A+Monografie#level=all&location=0&ob=asc&q=Participarea+substan%C8%9Belor+tiolice+%C3%AEn+proces+de+autopurificare+chimic%C4%83+a+apelor+naturale+%3A+Monografie&sb=relevance&start=0&view=CONTENT
- 4) LIS, Angela; GLADCHI, Viorica; DUCA Gheorghe. *Legități de transformare fotochimică a unor substanțe tiolice în sistemele acvatice*. Chișinău: CEP USM, 2022. 194 p. ISBN 978-9975-159-85-2

2. Capitole în monografii naționale/internaționale

- 1) VASEASHTA, A.; DUCA, GH.; COVALIOVA, O.; ROMANCIUC, L. Water Safety, Security, and Sustainability - Emerging Trends and Future Pathways. In: VASEASHTA, A.; DUCA, Gh.; TRAVIN, S. (Eds.) In: *Handbook of Research on Water Sciences and Society*. IGI Global, SUA, pp. 1-36. DOI: <http://doi.org/10.4018/978-1-7998-7356-3.ch001>. ISBN13: 9781799873563

- 2) BUNDUCHI, E.; DUCA, Gh.; GLADCHI, V. New Kinetic Parameters for Natural Water Quality Assessment. In: VASEASHTA, A.; DUCA, Gh.; TRAVIN, S. (Eds.) In: *Handbook of Research on Water Sciences and Society*, USA, 2022, 1, pp. 257-270. DOI: <http://doi.org/10.4018/978-1-7998-7356-3.ch004>. ISBN13:9781799873563.
- 3) BOGDEVICI, O.; DUCA, GH.; SIDOROFF, M.E.; STANICA, A.; PERSOIU, A.; VASEASHTA, A. Groundwater Resource Investigation Using Izotope Technology ob River-Sea System. In: VASEASHTA, A.; DUCA, Gh.; TRAVIN, S. (Eds.) In: *Handbook of Research on Water Sciences and Society*. IGI Global, USA, 2022, 1, pp. 87-100. DOI: <http://doi.org/10.4018/978-1-7998-7356-3.ch004>. ISBN 9781799873563 (hardcover); ISBN 9781799873570(ebook).
- 4) GLADCHI, V.; BUNDUCHI, E.; BLONSCHI, V.; ROMANCIUC, L. Hydrochemistry of Polluted Surface Water: Case Study of Moldova. In: VASEASHTA, A.; DUCA, Gh.; TRAVIN, S. (Eds.) In: *Handbook of Research on Water Sciences and Society*. IGI Global, USA, 2022, 1, pp. 501-529. DOI: <http://doi.org/10.4018/978-1-7998-7356-3.ch022>. ISBN13: 9781799873563
- 5) GLADCHI, V.; BUNDUCHI, E.; BLONSCHI, V.; ROMANCIUC, L. Chimia ecologică a apelor naturale și procese de autopurificare a sistemelor acvatice. Istoria și dezvoltarea la Universitatea de Stat din Moldova. In: *Chimie ecologică: istorie și realizări: Academicianul Gheorghe Duca, 70 ani de la naștere: Monografie*. Coordonatori ed.: V. Gladchi, A. Arîcu. Chișinău: CEP USM, 2022, pp. 37-85. ISBN 978-9975-159-05-0.
- 6) ROMANCIUC, L. Overview of the Ecological and Environmental Chemistry International Conferences in the Republic of Moldova within the 1985-2022. In: *Chimie ecologică: istorie și realizări: Academicianul Gheorghe Duca, 70 ani de la naștere: Monografie*. Coordonatori ed.: V. Gladchi, A. Arîcu. Chișinău: CEP USM, 2022, pp. 284-302. ISBN 978-9975-159-05-0.

3. Editor culegere de articole, materiale ale conferințelor naționale/internaționale

1. DUCA, Gh. Abstract Book of the 7th International Convergence: Ecological and Environmental Chemistry. Chisinau: CEP USM, 2022, 1, 230 p. ISBN 978-9975-159-07-4, DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v1>
2. DUCA, Gh. Abstract Book of the 7th International Convergence: Ecological and Environmental Chemistry. Chisinau: CEP USM, 2022, 2, 350 p. ISBN 978-9975-159-07-4, DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v2>

4. Articole în reviste științifice

4.1. în reviste din bazele de date Web of Science și SCOPUS (cu indicarea factorului de impact IF)

- 1) DUCA, Gh.; COVALIOV, V.; COVALIOVA, O. Novel Materials and Reactors for the Efficient Electrochemical Production of Hydrogen. In: *Environmental Engineering and Management Journal*, 2022, 21(6), 1037-1046. <http://www.eemj.icpm.tuiasi.ro> (IF: 1.86).

- 2) CEPOI, L.; ZINICOVSCAIA, I.; RUDI, L.; CHIRIAC, T.; DJUR, S.; YUSHIN, N.; GROZDOV, D. Assessment of Metal Accumulation by *Arthrospira platensis* and Its Adaptation to Iterative Action of Nickel Mono- and Polymetallic Synthetic Effluents. In: *Microorganisms*, 2022, 10(5), p. 1041. DOI: <https://doi.org/10.3390/microorganisms10051041>. (IF: 4.926)
- 3) GORBACHEV, M.; GORINCHOY, N.; BALAN, I. Some particularities of the reaction between antioxidant phenolic acids and the free radical ABTS^{•+}: A comparative DFT study for the gas phase and ethanol. In: *Chemistry Journal of Moldova*, 2022, 17(1), pp. 24-30. DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/cjm.2021.919> (Web of Science și SCOPUS)
http://www.cjm.asm.md/accepted_papers

4.2. în alte reviste din străinătate recunoscute

4.3. în reviste din Registrul National al revistelor de profil, cu indicarea categoriei

Categoria A:

- 1) GONTA, M., DUCA, Gh., SIRBU, E., ROBU, S., MOCANU, L. Synthesis of quercetin functionalized chitosan and determination of antioxidant properties. In: *CHEMISTRY JOURNAL OF MOLDOVA, General, Industrial and Ecological Chemistry*, 2022. In press.

Categoria B:

- 2) DUCA, Gh.; COVALIOVA, O.; COVACI, E.; ROMANCIUC, L.; TAȘCA, C. Effect of bioactive additives on biomass fermentation from agro-industrial sector. In: *Journal of Engineering Science*, Cat. B+. 2022, 29 (3), pp. 176-188.
[https://doi.org/10.52326/jes.utm.2022.29\(3\).15](https://doi.org/10.52326/jes.utm.2022.29(3).15)
- 3) GONȚA, M., MOCANU, L., MATVEEVICI, V. Degradarea/mineralizarea antibioticelor în soluții apoase prin aplicarea proceselor de oxidare avansată. În: *Studia Universitatis Moldaviae Seria (Științe Reale și ale Naturii)*, 2022, 1(151), pp. 70-78. ISSN 1814-3237. 10.5281/zenodo.66957872022.
- 4) MOCANU, L., GONȚA, M., MATVEEVICI, V. Degradarea/mineralizarea diclofenacului sodic din soluții apoase prin aplicarea fotolizei și a proceselor de oxidare avansată. În: *Studia Universitatis Moldaviae Seria (Științe Reale și ale Naturii)*, 2022. În redacție.

4.4. în alte reviste naționale

- 5) Ялтыченко, О.В., Канаровский, Е.Ю., Учёт синергии витаминов Е и С в кинетической модели перекисного окисления липидов. В: *Журнал «Электронная обработка материалов»*, 2022, 58(5), p. 44-50. DOI: <https://doi.org/10.52577/eom.2022.58.5.44>

5. Articole în culegeri științifice naționale/internaționale

6. Articole în materiale ale conferințelor științifice

6.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

- 1) ЯЛТЫЧЕНКО, О.В., ДУКА, Г.Г., ГОРИНЧОЙ, Н.Н. Моделирование кинетики иммунной реакции организма на вирусную нагрузку. In: *The 13th International scientific and practical conference "Modern directions of scientific research development"*, June 15-17, 2022, Chicago, USA. 2022, p. 65-70.

<https://sci-conf.com.ua/wp-content/uploads/2022/06/MODERN-DIRECTIONS-OF-SCIENTIFIC-RESEARCH-DEVELOPMENT-15-17.06.22.pdf>

- 2) ЛИС, Анжела; ГЛАДКИ, Виорика. Влияние гуминовых веществ на процесс сенсibilизированного фотоллиза тиомочевины. In: *Scientific Collection "InterConf - Scientific horizon in the context of social crises"*. Vol. 124, 16-18 septembrie 2022, Tokyo. Tokyo, Japan: Otsuki Press, 2022, pp. 155-165. ISBN 978-4-272-00922-0. <https://interconf.top/documents/2022.09.16-18.pdf>

6.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

- 3) BALAN, I; GORBACHEV, M.; GORINCHOY, N.; ARSENE, I. Originea pseudo Jahn-Teller a barierei de energie a transferului de proton în dimerii protonați. In: *Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ”*, Ediția a-IX-a, 19-20 martie 2022, Volumul II Chimie, p. 43-49.
- 4) GORINCIOI, E.; TRIFAUȚAN, V. Caracterizarea materiei organice dizolvate în hidroecosistemul Valea Morilor, mun. Chișinău cu utilizarea analizei ^1H RMN. Rezumatele In: *Conferința științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ”*, ediția a IX-a, Universitatea de Stat din Tiraspol, 19-20 martie 2022, Vol II Chimie, pag. 133-137.
- 5) BLONCHI, V., GLADCHI, V., DUCA Gh. Estimarea proceselor de autopurificare a apelor nistrene în prezența compușilor tiolici (perioada anilor 2015-2021). В: *Международная конференция «УПРАВЛЕНИЕ ТРАНСГРАНИЧНЫМ БАСЕЙНОМ ДНЕСТРА И ЕВРОИНТЕГРАЦИЯ – ШАГ ЗА ШАГОМ»*, Кишинев, Молдова, 27-28 октября 2022 г. Материалы Международной конференции, Chișinău: Eco-TIRAS, с. 27-31. https://eco-tiras.org/docs/Nistru_Conferinta_2022_10%20oct.pdf
- 6) БОРОДАЕВ, Р. Химия металлов природных вод сквозь призму корреляционного и регрессионного анализа В: *Международная конференция «УПРАВЛЕНИЕ ТРАНСГРАНИЧНЫМ БАСЕЙНОМ ДНЕСТРА И ЕВРОИНТЕГРАЦИЯ – ШАГ ЗА ШАГОМ»*, Кишинев, Молдова, 27-28 октября 2022 г. Материалы Международной конференции, Chișinău: Eco-TIRAS, с.39-42. https://eco-tiras.org/docs/Nistru_Conferinta_2022_10%20oct.pdf

6.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

- 7) GLADCHI, Viorica, LIS, Angela. Fototransformarea acidului folic în soluții apoase. In: *Integrare prin cercetare și inovare. Științe ale naturii și exacte*. 10-11 noiembrie 2022, Chișinău.

Chisinau, Republica Moldova: Centrul Editorial-Poligrafic al USM, 2022. În redacție

- 8) GONTA, M., MOCANU, L., LEONTIEV, E. Oxidarea/mineralizarea surfactantului anionic dodecilbenzulfonatului de sodiu cu reagentul Fenton. În: *Conferința științifică națională cu participare internațională „INTEGRARE PRIN CERCETARE ȘI INOVARE”, dedicată zilei internaționale a științei pentru pace și dezvoltare*, 10-11 noiembrie 2022. În redacție.
- 9) LIS, A., GLADCHI, V., DUCA, Gh. Fotoliza indirectă a acidului tioglicolic în sistemele acvatice. In: *Integrare prin cercetare și inovare. Științe ale naturii și exacte*. 10-11 noiembrie 2022, Chișinău. Chisinau, Republica Moldova: Centrul Editorial-Poligrafic al USM, 2022. În redacție
- 10) LIS, A., GLADCHI, V., DUCA, Gh., BUNDUCHI, E. The influence of glutathione on the self-purification capacity of aquatic systems. In: *Ecological chemistry ensures a healthy environment*. 16 septembrie 2022, Chisinau. Chișinău: Institute of Chemistry, 2022, p. 15.
- 11) MOCANU, L., GONTA, M., POPAZ, I. Degradarea diclofenacului de sodiu din soluții apoase prin utilizarea proceselor de oxidare avansată. În: *Conferința științifică națională cu participare internațională „INTEGRARE PRIN CERCETARE ȘI INOVARE”, dedicată zilei internaționale a științei pentru pace și dezvoltare*, 10-11 noiembrie 2022. În redacție.
- 12) БОРОДАЕВ, Р. Динамика аккумуляирования металлов переменной валентности на участке реки ДНЕСТР In: *Integrare prin cercetare și inovare. Conferința științifică națională cu participare internațională dedicată aniversării a 76-a a Universității de Stat din Moldova*, 10-11 noiembrie 2022. Științe ale naturii și exacte, Chișinău, 2022, CEP USM, în tipar

7. Teze ale conferințelor științifice

7.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

- 1) VICOL, C., GORINCIOI, E., BARBA, A., DUCA, Gh. Use of UV-Vis and NMR spectroscopies in studies of antioxidants' synergism involving ascorbic and dihydroxyfumaric acids. In: *Rezumatele celei de-a XXXVI-a CONFERINȚE NAȚIONALE DE CHIMIE –CNChim-2022 CĂLIMĂNEȘTI – CĂCIULA*, 4-7 octombrie, 2022, pag. 107.

7.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

- 2) DUCA, Gh. Fundamental Aspects of Ecological and Environmental Chemistry. In: *Abstract Book of the 7th International Conference of Ecological and Environmental Chemistry*, 3-4 March, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, 2022, 1, pp. 28. DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v1>
- 3) ANGHEL, L.; RĂDULESCU, A., ERHAN, R.V. A small angle scattering study of polysaccharides with antioxidant activity. In: *Environmental and Ecological Chemistry 2022. Book of Abstracts*, p. 148. <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
- 4) BOLOCAN, N., DUCA, Gh. Keto-enol-tautomerism and geometrical isomerism of dihydroxyfumaric acid. A DFT study in gas and water. In: *Abstract Book of the 7th*

- International Conference of Ecological and Environmental Chemistry*, 3-4 March, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, 2022, 1, pp. 212. DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v1>
- 5) BUNDUCHI, E., DUCA, Gh. The evaluation of redox self-purification processes of some natural waters. Abstr. In: *The 7th International Conference: "Ecological and Environmental Chemistry-2022"*, March 3-4, 2022, 2022, 1, p. 126. DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v1>
 - 6) COVALIOV, V., COVALIOVA, O., DROVOSEKOV, A., DUCA, Gh., ROMANCIUC, L. Modified 3D-electrodes for the efficient hydrogen production. In: *The 7th International Conference: "Ecological and Environmental Chemistry-2022"*, 3-4 March, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, 2022, 1, p. 33. DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v1>
 - 7) DUCA, Gh., BOGDEVICH, O., NICOLAU, E. Persistent Organochlorine Pesticides and Their Impact on Human Health. In: *The 7th International Conference: "Ecological and Environmental Chemistry-2022"*, 3-4 March, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, 2022, 1, p. 194. <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v1>
 - 8) GONTA, M., DUCA, Gh., SIRBU, E., ROBU, S., MOCANU, L. Synthesis of quercetin functionalized chitosan and determination of antioxidant properties. Abstract Book. In: *The 7th International Conference: "Ecological and Environmental Chemistry-2022"*, March 3-4, 2022, 1, p. 61. DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v1>
 - 9) GORBACHEV, M., GORINCHOY, N., BALAN, I. Ionic quasi-splet mechanism of the interaction of some organic antioxidant acids with the radicals ABTS^{•+} and DPPH[•]. In: *The 7th International Conference: "Ecological and Environmental Chemistry-2022"*, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, EEC-2022 Abstract Book, Volume 1, p. 50. DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v1> <http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>
 - 10) GORINCHOY, N., BALAN, I., GORBACHEV, M., ARSENE, I., POLINGER, V., DUCA, Gh., BERSUKER, I. The H-bond in environmental redox processes as a Pseudo-Jahn-Teller Effect. In: *The 7th International Conference: "Ecological and Environmental Chemistry-2022"*, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, EEC-2022 Abstract Book, Volume 1, p. 30. DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v1>
 - 11) GORINCIOI, E., VICOL, C., BARBA, A., DUCA, Gh. ¹H and ¹³C NMR Studies of Radical Scavenging Activities of Ascorbic acid and Galic Acid Using 1,1-Diphenyl-2-Picrylhydrazyl. In: *The 7th International Conference: "Ecological and Environmental Chemistry-2022"*, 3-4 March, 2022, Chisinau, Republic of Moldova. Ed.: CEP MSU, 2022, 1, p. 64. <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v1>
 - 12) LIS, A., GLADCHI, V., DUCA, Gh. Influence of H₂O₂ on thiourea photochemical transformations in the presence of Cu(II) and Fe(III) ions in aquatic systems. In: *The 7th International Conference: "Ecological and Environmental Chemistry-2022"*, March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, EEC-2022 Abstract Book, Volume 1, p. 95.

- 13) POGREBNOI, S., EREMIA, N., BILAN, D., LUPASCU, L., BOLOCAN, N., DUCA, Gh., ARMASU, S., TERTEAC, D., CEBANU, V., TINCU, S., ZNAGOVAN, A., NEICOVCENA, I., COSELEVA, O., SLANINA, V., MACAEV, F. Propolis Extracts From Central Zone of Moldova as an Accessible and Alternative Therapeutic Raw Material. In: *Abstract Book of the 7th International Conference of Ecological and Environmental Chemistry*, 3-4 March, 2022, Chisinau, Republic of Moldova. Ed.: CEP MSU, 2022, p. 166. - <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v1>
- 14) SHTAMM, E., SHVYDKIY, V., BAYKOVA, I., DUCA, Gh., TRAVIN, S. Detoxication and Disinfection Technologies of Dangerous Chemical Substances (DCS) Used in Industry and Agriculture. In: *Abstract Book of the 7th International Conference of Ecological and Environmental Chemistry*, 3-4 March, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, 2022, 1, p. 93. <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v1>
- 15) TASCA, C., DUCA, Gh., COVACI, E. The impact of tomatin bac on the process of alcoholic fermentation of cereal biomas. In: *Abstract Book of the 7th International Conference of Ecological and Environmental Chemistry*, 3-4 March, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, p. 186-187. <http://eec-2022.mrda.md/>
- 16) VICOL, C., MORARI, B., TARAN, N., DUCA, Gh. Study of the Evolution of Popyphenolic Content and Antioxidant Acivity of Local Grape Varieties at Different Maturation Periods. In: *Abstract Book of the 7th International Conference of Ecological and Environmental Chemistry*, 3-4 March, 2022, Chisinau, Republic of Moldova, 2022, 1, p. 162. <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v1>
- 17) YALTYCHENKO, O., GORINCHOY, N., DUCA, Gh. Immune Response Modeling Under Viral Load. In: *Abstract Book of the 7th International Conference of Ecological and Environmental Chemistry*, 3-4 March, 2022, Chisinau, Republic of Moldova. Ed.: CEP MSU, 2022, 1, p. 73. <http://dx.doi.org/10.19261/eec.2022.v1>
- 18) ANGHEL, L., KUKLIN, A., IVANKOV, O., BODNARCHUK, V., ERHAN, R.V. Small-angle scattering structural study of ph-effect in beta-lactoglobulin – alginates complexes. In: *International Conference “Condensed Matter Research at the IBR-2, 2022”*, Book of Abstract, p. 56.
https://indico.jinr.ru/event/2708/attachments/11703/20465/Book%20of%20Abstracts_CM2R_2022.pdf
- 19) DUCA, G., STURZA, R., COVALIOVA, O., COVACI, E., TAȘCA, C. The influence of bioactive additives on the process of alcoholic fermentation of waste biomas. In: *Abstract Book of the 5th International Conference Modern Technology in the Food Industry - 2022*, 20-22 october 2022, Chisinau, In Print.
- 20) SUBOTIN, Iu., DRUTA, R., COVACI, E., GHERDELESCU, L. The dynamics of the oxidation process of white wines depending on temperature, molecular oxygen rate and pH. In: *Abstract Book of the 5th International Conference Modern Technology in the Food Industry - 2022*, 20-22 october 2022, Chisinau, In Print.

- 21) SCUTARU, IU.; STURZA, R.; GHERDELESCU, L. Oxidative-reducing processes in winemaking. Abstract Book of the 5th International Conference Modern Technology in the Food Industry - 2022, 20-22 october 2022, Chisinau, In Print.
- 22) COVALIOVA, O., STURZA, R., COVACI, E., ROMANCIUC, L., TASCA, C. New additives of bioactive substances in the biochemical digestion processes. In: Abstract book of the 7th International Conference Ecologica land environmental chemistry, 2022, p. 150-151. ISBN 978-9975-159-07-4 <http://eec-2022.mrda.md/>
- 23) COVACI, E., STURZA, R., DRUTA, R., SUBOTIN, Iu. Dynamics of white wine oxidability depending on technological factors: sulfur dioxide, iron and copper ions. In: *Abstract book of the 7th International Conference Ecologica land environmental chemistry*, 2022, p. 161-162. ISBN 978-9975-159-07-4 <http://eec-2022.mrda.md/>
- 24) VLADEI, N., COVACI, E. Assessment the potential of biologically active substances of young red wine produced from *Rară Neagră* (local grape variety). In: *Abstract book of the 7th International Conference Ecologica land environmental chemistry*, 2022, p. 168. ISBN 978-9975-159-07-4 <http://eec-2022.mrda.md/>

7.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

- 25) BOLOCAN, N.; DUCA, GH. Stopped-flow studies of the interaction of DFH₄ and its derivatives with DPPH[•]. In: *Book of abstracts of the National conference with international participation "Life sciences in the dialogue of generations: connections between universities, academia and business community"*, 29-30 septembrie, 2022, Chisinau, Moldova, Editura USM, p. 205.
- 26) BOLOCAN, N., DUCA, GH. Estimation of ADMET properties of DFH₄ and its novel derivatives. In: *Book of abstracts of the National conference with international participation "Life sciences in the dialogue of generations: connections between universities, academia and business community"*, 29-30 septembrie, 2022, Chisinau, Moldova, Editura USM, p. 206.

8. Alte lucrări științifice (recomandate spre editare de o instituție acreditată în domeniu)

8.1. cărți (cu caracter informativ)

8.2. enciclopedii, dicționare

8.3. atlase, hărți, albume, cataloage, tabele etc. (ca produse ale cercetării științifice)

9. Brevete de invenții și alte obiecte de proprietate intelectuală, materiale la saloanele de invenții

- 1) BLONCHI, V., GLADCHI, V., DUCA, Gh. Metodă de determinare a concentrației grupelor –SH în apele de suprafață. In: *Salonul Internațional de Invenții și Inovații „Traian Vuia”*, Timișoara-România, ediția a VIII –a, 08-10 octombrie 2022. **Medalie de aur.**
- 2) GONTA, M., GUTU, I., CEACIRU, M. Process for obtaining functionalized chitosan with dihydroxyfumaric acid residues. In: *EUROINVENT 2022 The 14th edition of Creativity and Innovation*, Iasi Romania, 26-28 May, 2022. **Diplomă de excelență.**

- 3) GONTA, M., GUTU, I., CEACIRU, M. Process for obtaining functionalized chitosan with dihydroxyfumaric acid residues. In: *Salonul Internațional de Invenții INVENTICA 2022, ediția a 26-a*, 22-24 iunie 2022, Iași, România. **Medalie de aur.**
- 4) GONTA, M., GUTU, I., CEACIRU, M. Process for obtaining functionalized chitosan with dihydroxyfumaric acid residues. In: *The International Fair of Innovation and Creative Education for Youth (ICE-USV)*, Suceava, 10-12 iulie, 2022. **Medalie de argint.**

10. Lucrări științifico-metodice și didactice

- 10.1. manuale pentru învățământul preuniversitar (aprobate de ministerul de resort)
- 10.2. manuale pentru învățământul universitar (aprobate de consiliul științific /senatul instituției)
- 10.3. alte lucrări științifico-metodice și didactice

**Executarea devizului de cheltuieli, conform anexei nr. 2.3 din contractul de finanțare
(la data raportării)**

Cifrul proiectului: 20.80009.5007.27

Institutul de Chimie

Cheltuieli, mii lei				
Denumirea	Cod		Anul de gestiune	
	Eco (k6)	Aprobat	Modificat +/-	Precizat
Remunerarea muncii angajaților conform statelor	211180	1 179.9	+9.0	1 188.9
Contribuții de asigurări sociale de stat obligatorii	212100	342.1	+2.7	344.8
Deplasări în interes de serviciu peste hotare	222720	78.6	+29.2	107.8
Servicii de protocol	222920	8.0		8.0
Servicii neatribuite altor aliniate	222990	35.2	-29.2	6.0
Indemnizații pentru incapacitatea temporară de muncă achitate din mijloacele financiare ale angajatorului	273500	5.0		5.0
Alte prestații sociale ale angajatorilor	273900	-	+27.0	27.0
Procurarea materialelor pentru scopuri didactice, științifice și alte scopuri	335110	41.5		41.5
Total		1 690.3		1 729.0

Directorul
Institutului de Chimie



dr. hab. Aculina ARÎCU

Contabil - șef



Viorica BOLOGA

Conducătorul de proiect



academician Gheorghe DUCA

Data: 07.11.2022



Componenta echipei proiectului
Cifrul proiectului: 20.80009.5007.27

Institutul de Chimie

Echipa proiectului conform contractului de finanțare (la semnarea contractului)						
Nr	Nume, prenume (conform contractului de finanțare)	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării	Data eliberării
1.	Duca Gheorghe	1952	Acad.	1,0	04.01.2021	
2.	Duca Gheorghe	1952	Acad.	0,25	04.01.2021	
3.	Gorincioi Natalia	1951	Dr.	1,0	04.01.2021	
4.	Covaliova Olga	1960	Dr. hab.	1,0	04.01.2021	
5.	Gorbaciov Mihail	1959	Dr.	1,0	04.01.2021	
6.	Anghel Lilia	1986	Dr.	1,0	04.01.2021	
7.	Bălan Iolanta	1977	Dr.	0,75	04.01.2021	
8.	Romanciuc Lidia	1960	Dr.	1,0	04.01.2021	
9.	Vicol Crina	1994		1,0	04.01.2021	
10.	Barbă Alic	1958	Dr.	0,75	04.01.2021	
11.	Gorincioi Elena	1972	Dr.	0,5	04.01.2021	
12.	Arsene Ion	1981	Dr.	0,25	04.01.2021	
13.	Ialticenco Olga	1968	Dr.	0,25	04.01.2021	
14.	Bolocan Natalia	1984		0,5	04.01.2021	
15.	Tașcă Corina	1992		0,25	04.01.2021	
16.	Zinicovscaia Inga	1986	Dr.	0,1	04.01.2021	
17.	Bersuker Isaac	1928	Acad.	-		
18.	Hramco Constantin	1990		-		

Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor conform contractului de finanțare	35,3
--	------

Directorul
Institutului de Chimie

dr. hab. Aculina ARÎCU

Contabil - șef

Viorica BOLOGA

Conducătorul de proiect

academician Gheorghe DUCA

Data 07.11.2022



Anexa 1B

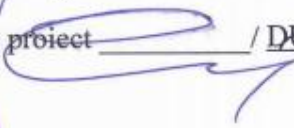
**Executarea devizului de cheltuieli, conform anexei nr. 2.3 din contractul de finanțare
(la data raportării)**

Cifra proiectului: 20.80009.5007.27

Cheltuieli, mii lei				
Denumirea	Cod Eco (k6)	Anul de gestiune 2022		
		Aprobat	Modificat +/-	Precizat
Remunerarea muncii angajaților conform statelor	211180	410,4		410,4
Contribuții de asigurări sociale de stat obligatorii (24%)	212100	98,5		98,5
Deplasări de serviciu în interiorul țării	222710	7,2		7,2
Deplasări de serviciu peste hotare	222720	8,4	-8,4	
Servicii editoriale	222910	4,9	-4,9	
Procurarea materialelor pentru scopuri didactice, științifice și alte scopuri	335110		+13,3	13,3
Total		529,4	0,0	529,4

Conducătorul organizației  / ȘAROV Igor

Contabil șef  / COJOCARU Liliana

Conducătorul de proiect  / DUCA Gheorghe



Data: 07.11.2022

Componenta echipei proiectului

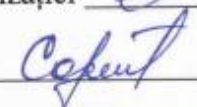
Cifra proiectului 20.80009.5007.27

Echipa proiectului conform contractului de finanțare (la semnarea contractului)						
Nr	Nume, prenume (conform contractului de finanțare)	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării	Data eliberării
1.	Gladchi Viorica	1964	Dr.	0,5	03.01.2022	
2.	Bunduchi Elena	1974	Dr.	0,5	03.01.2022	
3.	Borodaev Ruslan	1973	Dr.	0,25	03.01.2022	
4.	Blonschi Vladislav	1994	Dr.	0,5	03.01.2022	
5.	Gonța Maria	1948	Dr. hab.	0,5	03.01.2022	
6.	Matveevici Vera	1949	Dr.	0,5	03.01.2022	
7.	Mocanu Larisa	1986		1	03.01.2022	
8.	Porubin Veronica	1994		0,5	-	
9.	Lis Angela	1985	Dr.	0,5	03.01.2022	

Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor conform contractului de finanțare	44,4 %
--	--------

Modificări în componența echipei pe parcursul anului 2022					
Nr	Nume, prenume	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării
1.	Culea Maria	1975		0,25	01.10.2022
2.	Mereuța Aliona	1975	Dr.	0,25	01.10.2022

Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor la data raportării	30%
---	-----

Conducătorul organizației  / (ȘAROV Igor)Contabil șef  / (COJOCARU Liliana)Conducătorul de proiect  (DUCA Gheorghe)

Data: 07.11.2022



Executarea devizului de cheltuieli, conform anexei nr. 2.3 din contractul de finanțare
(la data raportării)

Cifra proiectului: 20.80009.5007.27

Cheltuieli, mii lei				
Denumirea	Cod		Anul de gestiune 2022	
	Eco (k6)	Aprobat	Modificat +/-	Precizat
Remunerarea muncii conform statelor	211180	97,2		97,2
Contribuții și prime de asigurări obligatorii	212100	23,3		23,3
Deplasări de serviciu în interiorul țării	222710			
Deplasări de serviciu peste hotare	222720			
Servicii editoriale	222910			
Servicii de protocol	222920			
Servicii de cercetări științifice contractate	222930			
Servicii neatribuite altor aliniate	222990	8,2	-8,2	
Procurarea mașinilor și utilajelor	314110		+8,2	8,2
Procurarea activelor nemateriale	317110			
Procurarea combustibilului, carburanților și lubrifianților	331110			
Procurarea produselor alimentare	333110			
Procurarea materialelor pentru scopuri didactice, științifice și alte scopuri	335110	5,3		5,3
Procurarea materiale de uz gospodăresc și rechizite de birou	336110			
Procurarea altor materiale	339110			
TOTAL		134,0		134,0

Notă: În tabel se prezintă doar categoriile de cheltuieli din contract ce sunt în execuție și modificările aprobate (după caz)

Rector U.T.M.

V. Bostan
(semnătura)

dr. hab. Viorel BOSTAN
(numele, prenumele)

Contabil (economist)

V. Iovu
(semnătura)

Victoria IOVU
(numele, prenumele)

Conducătorul de proiect
(partener)

Iurie Subotin
(semnătura)

Dr. Iurie SUBOTIN
(numele, prenumele)



Componența echipei proiectului

Cifra proiectului 20.80009.5007.27

Echipa proiectului conform contractului de finanțare (la semnarea contractului)						
Nr	Nume, prenume (conform contractului de finanțare)	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării	Data eliberării
1.	Subotin Iurie	1971	dr.	0,25	03.01.2022	
2.	Sturza Rodica	1960	dr.hab.	0,25	03.01.2022	
3.	Druta Raisa	1972	dr.	0,25	03.01.2022	
4.	Covaci Ecaterina	1985	dr.	0,25	03.01.2022	

Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor conform contractului de finanțare	0
--	---

Modificări în componența echipei pe parcursul anului 2022					
Nr	Nume, prenume	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării
1.					
2.					

Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor la data raportării	0
---	---

Rector U.T.M.


 (semnătura)

dr. hab. Viorel BOSTAN

(numele, prenumele)

Contabil (economist)


 (semnătura)

Victoria IOVU

(numele, prenumele)

Conducătorul de proiect
(partener)

 (semnătura)

Dr. Iurie SUBOTIN

(numele, prenumele)



Actul nr. 12/2022
de implementare a activității științifice în practică

Mun. Chișinău

„18” septembrie 2022

Institutul de Ecologie și Geografie, în persoana directorului Institutului de Ecologie și Geografie, dlui Bejan Iurie, dr., conf. univ., pe de o parte, și a șefului de Departament Chimie Industrială și Ecologică a Universității de Stat din Moldova în persoana dnei Bunduchi Elena, dr., conf. univ., pe de altă parte, au întocmit prezentul act și menționează că au fost implementate rezultatele studiilor din monografia științifico-practică „Transformările catalitice și starea redox a mediului ambiant”, autor dna dr. Gladchi Viorica, destinată cercetătorilor științifici, studenților, masteranzilor, doctoranzilor, profesorilor în domeniul mediului și protecției apelor (*Viorica Gladchi. „Transformările catalitice și starea redox a mediului ambiant”. Chișinău: CEP USM, 2018, 212 p. ISBN 978-9975-71-996-4.*).

În corespundere cu cele menționate ambele părți au ajuns la concluzia că Institutul de Ecologie și Geografie cu scopul informării profesionale a cercetătorilor în domeniul protecției mediului și a apei a implementat rezultatele studiului din monografia științifico-practică „Transformările catalitice și starea redox a mediului ambiant”, autor dna dr. Gladchi Viorica, destinată cercetătorilor științifici, studenților, masteranzilor, doctoranzilor, profesorilor în domeniul mediului și protecției apelor.

Directorul Institutului de Ecologie și Geografie, dr., conf. univ.

Iurie BEJAN



Șeful Departamentului Chimie Industrială și Ecologică a USM, dr., conf. univ.

Elena BUNDUCHI

