

RECEPȚIONAT

Agenția Națională pentru Cercetare
și Dezvoltare _____

_____ 2025

AVIZAT

Secția AȘM _____

_____ 2025

RAPORT ȘTIINȚIFIC ANUAL

(pentru etapa 2025)

privind implementarea proiectului din cadrul concursului
„Proiecte complexe bilaterale cu Republica Moldova”

Proiectul **Materialle compozite cu proprietăți ajustabile având aplicații în fotocataliză și supercapacitori (MatPhotSCs)**

Cifrul proiectului **25.80013.7007.39ROMD**

Prioritatea strategică **Biotehnologii și Protecția Mediului**

/ Rectorul Universității de Stat din
Moldova

Prof. univ., dr. Igor ȘAROV

/ Președintele Consiliului Științific al
Institutului de Chimie al USM

Membru cor. Aculina ARÎCU

Conducătorul proiectului

Dr., conf. cerc. Raisa NASTAS



Chișinău, 2025

CUPRINS:

1. Scopul etapei 2025 conform proiectului depus la concurs.....	3
2. Obiectivele etapei 2025.....	3
3. Acțiunile planificate pentru realizarea scopului și obiectivelor etapei 2025.....	3
4. Acțiunile realizate pentru atingerea scopului și obiectivelor etapei 2025.....	3
5. Rezultatele obținute	4
6. Diseminarea rezultatelor la foruri științifice.....	8
7. Impactul științific, social și/sau economic al rezultatelor științifice obținute în cadrul proiectului 2025.....	8
8. Colaborare la nivel național în cadrul implementării proiectului 2025.....	9
9. Colaborare la nivel internațional în cadrul implementării proiectului 2025.....	9
10. Dificultăți în realizarea proiectului: financiare, organizatorice, legate de resursele umane.....	9
11. Recomandări, propuneri.....	9
12. Lista lucrărilor științifice, publicate în anul 2025 (Anexa 2).....	10
13. Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect 2025 în limba română și în limba engleză (Anexa 1).....	11
14. Executarea devizului de cheltuieli din contractul de finanțare pentru anul 2025	13
15. Componenta echipei conform contractului de finanțare pentru anul 2025 (Anexa 4).....	14

1. Scopul etapei 2025 conform proiectului depus la concurs (obligatoriu)

Dezvoltarea unor nanocompozite pe bază de structuri de carbon și nanotuburi de TiO_2 , cu proprietăți funcționale optimizate pentru aplicații în fotocataliză și supercapacitori.

2. Obiectivele etapei 2025 (obligatoriu).

- Sinteza diferitor structuri de carbon (CS) din materii prime bogate în carbon.
- Sinteza nanocompozitelor CS/TNs prin metode controlate, asigurând integrarea eficientă a fazelor active.
- Caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute (morfologie, structură, porozitate, proprietăți electrochimice).
- Evaluarea performanțelor fotocatalitice în degradarea compușilor organici model.
- Determinarea performanțelor electrochimice pentru utilizarea în supercapacitori (capacitate specifică, stabilitate).
- Optimizarea compozițiilor pe baza corelației dintre proprietăți și performanțe.

3. Acțiunile planificate pentru realizarea scopului și obiectivelor etapei 2025 (obligatoriu)

- Colectarea și pregătirea materiei prime vegetale bogată în carbon
- Determinarea condițiilor optime de carbonizare, obținerea mangalului
- Determinarea condițiilor optime de activare a mangalului prin metoda de activare cu vapori de apă în strat fluidizat (în cuptor/reactor vertical)
- Determinarea condițiilor optime de activare a mangalului prin metoda de activare cu vapori de apă clasică (în cuptor/reactor orizontal)
- Decorarea structurilor de carbon (cărbuni activi) cu nanotuburi de TiO_2
- Caracterizarea morfo-structurală, compozițională și optică a nanostructurilor compozite
- Studiu computațional asupra nanocompozitelor obținute

4. Acțiunile realizate pentru atingerea scopului și obiectivelor etapei 2025

- Au fost colectate cantități suficiente de materie primă vegetală bogată în carbon (sâmburi de piersici)
- Au fost determinate condițiile optime de carbonizare, obținerea mangalului
- Au fost determinate condițiile optime de activare a mangalului prin metoda de activare cu vapori de apă în strat fluidizat (în cuptor/reactor vertical)
- Au fost determinate condițiile optime de activare a mangalului prin metoda de activare cu vapori de apă clasică (în cuptor/reactor orizontal)
- Au fost inițiate încercări de decorare a structurilor de carbon (cărbuni activi) cu nanotuburi de TiO_2 . Cercetările continuă.
- Au fost inițiate caracterizarea morfo-structurală și compozițională a nanostructurilor compozite obținute. Cercetările continuă.
- A fost inițiat studiul computațional asupra structurilor de carbon obținute.

5. Rezultatele obținute (descriere narativă 3-5 pagini) (obligatoriu)

Sinteza structurilor de carbon

Sarcina echipei Institutului de Chimie USM în acest proiect este de a obține structuri carbonice (cărbuni activi) din diverse subproduse vegetale de origine autohtonă precum: coji de nuci, sămburi de caise, prune și piersici. Materia primă utilizată este constituită din trei macro-componente: celuloza, hemiceluloza și lignina. Analiza literaturii indică că partea de masă a fiecărui component variază, hemiceluloza constituie 20-28%, celuloza 22-30% și lignina 0,2-1,0%, iar cenușa reprezintă sub 1% [1-4].

Pentru modelarea proceselor de carbonizare (piroliză) a materiei prime și activare a mangalului a fost aplicată analiza termică. Analiza termică a materiei prime în atmosferă de aer, indică un comportament asemănător; toate curbele de pierdere a masei au un profil asemănător indicând la un raport dintre cele trei componente de bază: celuloza, hemiceluloza și lignină, foarte apropiat. Conținutul de cenușă și umiditatea din samburii de piersici, calculate din curbele termoanalitice, constituie 8,17% umiditate și 1,02% cenușă. Conform analizei termice și datelor de literatură, procesul de piroliză ale materiilor prime poate fi divizat în patru etape: deshidratarea și volatilizarea substanțelor cu masă moleculară mică, degradarea hemicelulozei (180-320 °C), degradarea celulozei (300-400 °C) și descompunerea ligninei (200-500 °C). În intervalul de temperaturi 500-1000 °C, însoțit de o scădere continuă a masei, pierderea fiind sub 10%, are loc formarea scheletului carbonic în urma reacțiilor de condensare și restructurare a compușilor formați, conferind o rigiditate sporită carbonizatului [1-4].

Mangalul din sămburi de piersici a fost obținut cu un randament de cca. 40%, care ulterior a fost mărunțit în moară, separate fracțiile prin sitare și selectate fracțiile de mangal care sunt supuse ulterior activării. Pentru obținerea cărbunilor activi s-a selectat metoda de activare fizico-chimică cu vapori de apă la temperaturi ridicate (900-1000 °C) în strat fluidizat, folosind cuptor/reactor vertical și strat fix, folosind cuptor/reactor orizontal. La elaborarea metodelor de activare și selectarea condițiilor optime au fost variată temperatura de tratare termică și timpul. Calitatea mostrelor de cărbune activ a fost evaluată după indicii de benzen (volumul sorbtiv după benzen, $V^{C_6H_6}$ cm³/g), iar parametrii optimi ai fost selectați luând în calcul randamentul de obținere a cărbunelui activ și volumul sorbtiv după benzen.

În figurile 1 și 2 sunt prezentate diagramele relației condițiilor de activare în strat fluidizat, temperatura-timp-randament-volum sorbtiv. Conform rezultatelor obținute, condițiile optime activarea mangalului din sămburi de piersici sunt : 30 minute de activare la 1000 °C.

Prin metoda de activare clasică, în cuptor/reactor orizontal, condițiile optime de activare a mangalului de sămburi de piersici sunt : temperatura de 950 °C și timpul 1,0 oră.

Probele de structuri carbonice (cărbuni activi) obținute sunt analizate prin spectroscopia FTIR, raze X pe pulberi, SEM-EDX, caracteristici structurale. Cercetările continuă. De asemenea, probele de structuri carbonici sunt decorate cu nanotuburi de oxid de titan, urmate de caracterizarea morfo-structurală și optică, în vederea selectării celor mai reușite compozite pentru cercetări ulterioare.

Probele noi obținute au fost transmise partenerilor noștri de la *Institutul Național de Cercetare Dezvoltare pentru Tehnologii Izotopice și Moleculare* din Cluj Napoca, România.

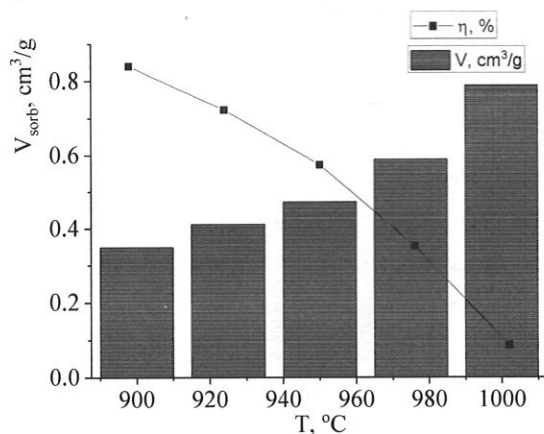


Figura 1. Relația dintre temperatura de activare a mangelului din sâmburi de piersici, randament și volumul sorbtiv. Activare în strat fluidizat, timpul de activare este 30 minute.

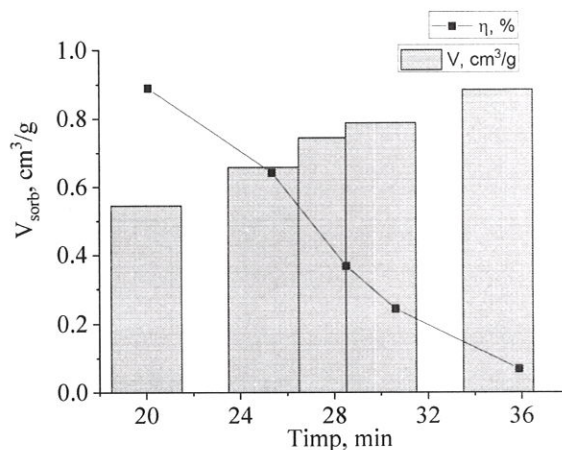


Figura 2. Relația dintre timpul de activare a mangelului din sâmburi de piersici, randament și volumul sorbtiv. Activare în strat fluidizat, temperatura de activare este 1000 °C.

Modelare cuanto-chimică a diferitor suprafețe de cărbune activ

Capacitățile de adsorbție a carbonului depinde în mare măsură de prezența pe suprafață a heteroatomilor ca oxigenul, hidrogenul, azotul și fosforul. Există multe date experimentale în care este redată dependența adsorbției diferitor substanțe de structura suprafeței carbonului activ (CA) -modificate cu grupe funcționale. Necăutând la asta, sunt foarte puține date privitor la structura acestor suprafețe și la mecanismul de adsorbție a diferitor molecule și ioni pe cărbune.

Scopul cercetărilor în 2025 a fost modelarea computațională a suprafeței de cărbune activ (simple și modificate) prin diferite metode cuanto-chimice (semiempirice, DFT și *ab initio*).

Inițial a fost efectuată optimizarea structurii geometrice a CA simplu prin metoda semiempirică (PM6) folosind pachetul de programe Gaussian09. Aceste date au servit ca structură inițială în modelarea computațională ulterioară. Astfel, folosind coordonatele atomilor obținute s-a efectuat optimizarea structurii geometrice a CA prin metoda DFT/B3LYP folosind diverse seturi de bază pentru orbitalii atomici: sto-6G, n311, durata de calcul variind de la 3 ore la 5 ore. În Figura 3. Sunt prezentate coordonatele atomilor ce constituie suprafața CA dotate cu grupe carboxil. Iar în tabelul 1 sunt indicate rezultatele obținute în DFT/B3LYP/6-311, care corespund energiilor mai joase pentru CA simplu și cu diverse grupe funcționale: hidroxilice (CA-OH), aldehydice (CA-CHO) și carboxilice (CA-COOH).

În continuare se preconizează: studiul computațional al procesului de adsorbție a moleculelor simple pe suprafețele date.

```

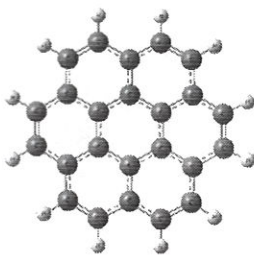
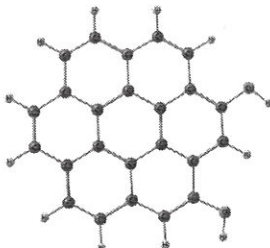
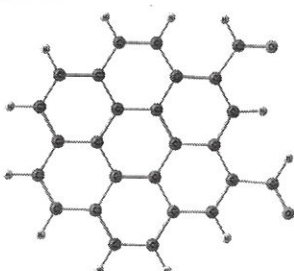
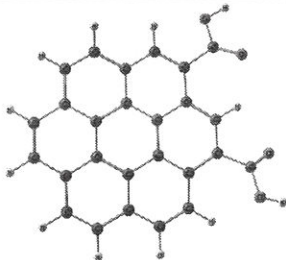
*****
Gaussian 09|
*****
%nprocshared=12
Will use up to 12 processors via shared memory.
%mem=1GB
%chk=D:\Personal\Gaussian_Job\Carbune_activ\C-act_2COOH.chk

# opt freq rb3lyp/6-311+g(d,p) geom=connectivity
-----
1/14=-1,18=20,19=15,26=3,39=1,57=2/1,3;
2/9=110,12=2,17=6,18=5,40=1/2;
3/5=4,6=6,7=111,11=2,16=1,25=1,30=1,71=1,74=-5,116=1/1,2,3;
4//1;
5/5=2,38=5/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2,28=1/1;
7//1,2,3,16;
1/14=-1,18=20,19=15,26=3/3(2);
2/9=110/2;
99//99;
2/9=110/2;
3/5=4,6=6,7=111,11=2,16=1,25=1,30=1,71=1,74=-5,116=1/1,2,3;
4/5=5,16=3,69=1/1;
5/5=2,38=5/2;
7//1,2,3,16;
1/14=-1,18=20,19=15,26=3/3(-5);
2/9=110/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2,19=2,28=1/1;
99/9=1/99;
-----
Carbune activ
-----
Symbolic Z-matrix:
Charge = 0 Multiplicity = 1
C      -2.68889  1.87402 -2.50579
C      -2.22167  1.15495 -1.39198
C      -0.89001  1.2783  -1.00238
C      -0.03  2.11047 -1.71526
C      -0.50163  2.81928 -2.81773
C      -1.84696  2.68868 -3.20366
C      -0.41837  0.56949  0.1001
C      1.30166  2.23381 -1.32565
C      1.7733  1.525  -0.22317
C      0.91328  0.69284  0.48971
C      3.10496  1.64836  0.16644
C      3.96564  2.49043 -0.55886
C      3.50392  3.18433 -1.63814
C      2.16168  3.06598 -2.03852
C      1.67703  3.77745 -3.14975
C      0.37339  3.6567  -3.53116
H      0.01442  4.20261 -4.37852
H      2.33452  4.41757 -3.6896
H      -3.71121  1.7816  -2.80781
H      -2.21257  3.2317  -4.05004
H      4.98914  2.58751 -0.26234
H      4.16727  3.82267 -2.18348
C      -3.08235  0.31288 -0.66668
C      -2.62064 -0.38102  0.41261
C      -1.2784  -0.26268  0.81298
H      -4.10535  0.21579 -0.96321
H      -3.28339 -1.01936  0.95794
C      -0.79374 -0.97414  1.92421
C      0.5098  -0.85339  2.30562
C      1.38492 -0.01597  1.59219
H      0.86887 -1.39931  3.15298
C      3.57218  0.92929  1.28025
H      4.8945  1.02171  1.58227
C      2.73025  0.11463  1.97812
C      -1.74062 -1.89542  2.71559
O      -1.31064 -2.53406  3.711
O      -3.10847 -2.02517  2.3193
H      -3.64918 -2.2087  3.09102
C      3.25645 -0.66692  3.19627
O      2.48272 -1.41974  3.84294
O      4.6243  -0.53717  3.59257
H      4.91777 -1.35443  4.0019

```

Figura. 3. Coordonatele atomilor ce constituie suprafața CA dotate cu grupe carboxil.

Tabelul 1. Energiile totale (E_{tot}) pentru diverse suprafețe de CA

Suprafața CA		E_{tot} (în Hartree)
CA simplu		-922,1008
CA-OH		-1072,5959
CA-CHO		-1148,8050
CA-COOH		-1299,3599

Bibliografie

1. Demirbaş A. Fuel Characteristics of Olive Husk and Walnut, Hazelnut, Sunflower, and Almond Shells. In: Energy Sources, 2010, vol. 24(3), p. 215–221.
2. Kar Y. Co-pyrolysis of walnut shell and tar sand in a fixed-bed reactor. In: Bioresource Technology, 2011, vol. 102(20), p. 9800–9805.
3. Cagnon B., Py X., Guillot A. Carbonization kinetics of coconut shell and plum stone. In: Rambla de la Thermodynamique, 2004,
4. Cagnon B. et. al. Contributions of hemicellulose, cellulose and lignin to the mass and the porous properties of chars and steam activated carbons from various lignocellulosic precursors. In: Bioresource Technology, 2009, vol. 100(1), p. 292–298.
5. Frisch, M.J., Trucks, G.W., Schlegel, H.B., Scuseria, G.E., Robb, M.A., et al. *Gaussian09*. Revision B.01. Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2009. <https://gaussian.com/glossary/g09/>

6. Diseminarea rezultatelor obținute în proiect în formă de publicații (obligatoriu) și în formă de prezentări la foruri științifice (comunicări, postere – pentru cazurile când nu au fost publicate în materialele conferințelor)

- 1) NASTAS, R. a participat cu lucrarea Comparative thermal and surface characterization of activated carbons obtained from peach stones. Coautori: CEBAN, I., PETUHOV, O., TIMBALIUC, N., GOREACIOC, T., BALAN, I., STEFAN, M., LUPASCU, T. la Conferința "*Chemistry for a Sustainable World: from Lab to Legacy*", IasiCHEM 2025 Conference, 7th Edition 30 - 31 October 2025 Iasi, Romania, p. 43. <https://www.chem.uaic.ro/ro/manifestari/zu-2025>
- 2) Proiectul și rezultatele proiectului sunt diseminate site-ul Institutului de Chimie al USM (<https://ichem.md/>), unde este create pagina web a proiectului în două limbi, română și engleză (<https://ichem.md/proiecte-bilaterale-0>).

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

Rezultatele obținute în cadrul proiectului au un impact semnificativ pe multiple direcții — științifică, socială și economică — datorită dezvoltării de structuri carbonice avansate din resurse vegetale autohtone și a modelării computaționale a suprafețelor de cărbune activ.

Impact științific

Proiectul contribuie substanțial la avansarea cunoașterii în domeniul materialelor carbonice și al adsorbanților funcționalizați.

- Au fost elaborate metode optimizate de carbonizare și activare a subproduselor vegetale locale, corelate cu analiza termică și comportamentul de piroliză al materialelor lignocelulozice.
- Selectarea condițiilor optime de activare (ex. 1000 °C / 30 min în strat fluidizat; 950 °C / 1 h în reactor orizontal) oferă noi date experimentale relevante despre formarea porozității și evoluția structurii scheletului carbonic.
- Modelarea cuantică (PM6, DFT/B3LYP) reprezintă o contribuție remarcabilă prin identificarea configurațiilor energetice favorabile pentru suprafețele carbonice simple și modificate cu grupe funcționale (–OH, –CHO, –COOH). Această abordare teoretică oferă baza pentru studiul mecanismelor de adsorbție la nivel molecular.

Impact social

Dezvoltarea de adsorbanți carbonici din subproduse vegetale autohtone contribuie la:

- valorificarea resurselor locale, reducând dependența de materiale importate;
- promovarea unor materiale ecologice, cu potențial pentru aplicații avansate (fotocataliză, energie, purificarea apei).

Impact economic

Proiectul oferă perspective reale pentru dezvoltarea unor tehnologii locale cu valoare economică:

- utilizarea sămburilor de piersici, caise, prune — materii prime ieftine, abundente și regenerabile, cu potențial de industrializare în Republica Moldova;
- optimizarea proceselor de carbonizare și activare permite reducerea costurilor de producție și creșterea randamentului (ex.: 40% randament la obținerea mangalului).

8. Colaborare la nivel național în cadrul implementării proiectului (obligatoriu)

La nivel național s-a colaborat cu "Orhei-Vit SRL" care este lider în procesarea fructelor și legumelor pe teritoriul Republicii Moldova (<https://orhei-vit.com/>). Orhei-Vit SRL a furnizat materia primă în cantități suficiente pentru obținerea materialelor carbonice/structuri de carbon.

În cadrul Institutului de Chimie al USM s-a colaborat cu laboratorul de Metode fizico-chimice de cercetare și analiză.

9. Colaborare la nivel internațional în cadrul implementării proiectului (obligatoriu)

La nivel internațional s-a colaborat în primul rând cu organizația parteneră, *Institutul Național de Cercetare Dezvoltare pentru Tehnologii Izotopice și Moleculare INCDTIM*, de la Cluj Napoca, România.

10. Dificultățile în realizarea proiectului de natură financiară, organizatorică, legate de resursele umane etc. (obligatoriu).

Dificultățile au fost de natură organizatorică la demararea proiectului/ semnarea contractelor pe proiect și a contractelor de prestări servicii.

11. Recomandări, propuneri (opțional).

Conducătorul proiectului *Nastas* / dr., conf. cerc. Raisa NASTAS

Data:

05.12.2025

LS



**Lista lucrărilor științifice, științifico-metodice și didactice
publicate în anul 2025 în cadrul proiectului**

**Materiale compozite cu proprietăți ajustabile având aplicații în fotocataliză și
supercapacitori (MatPhotSCs)**

7. Teze ale conferințelor științifice

7.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

1. CEBAN, I., PETUHOV, O., TIMBALIUC, N., GOREACIOC, T., BALAN, I., STEFAN, M., LUPASCU, T., NASTAS, R. Comparative thermal and surface characterization of activated carbons obtained from peach stones. In: "*Chemistry for a Sustainable World: from Lab to Legacy*", *IasiCHEM 2025 Conference*, 7th Edition 30 - 31 October 2025 Iasi, Romania, p. 43. <https://www.chem.uaic.ro/ro/manifestari/zu-2025>
2. STEFAN, M., TOLOMAN, D., POPA, A., VARADI, A., NASTAS, R., LEOSTEAN, C., ROSTAS, A., MACAVEI, S. Interface properties of g-C₃N₄-TiO₂ nanocomposites for photocatalysis and supercapacitor applications. In: *ICPAM-17 17th International Conference on Physics of Advanced Materials*, November 16 - 23, 2025, Shizuoka University, Hamamatsu, Japan, p. 111-112. www.icpams.com
3. STEFAN, M., TOLOMAN, D., POPA, A., LEOSTEAN, C., VARADI, A., GROZA, M., NASTAS, R., TRIPON, S., MACAVEI, S. Studies on g-C₃N₄-TiO₂:Mn based nanocomposites with photocatalytic properties. In: *15th International Conference PROCESSES IN ISOTOPES AND MOLECULES (PIM 2025)*, 16 - 19 September, 2025. Cluj-Napoca, Romania p. 156.

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2025

Cifra proiectului 25.80013.7007.39ROMD

Denumirea Proiectului **Materiale compozite cu proprietăți ajustabile având aplicații în fotocataliză și supercapacitori (MatPhotSCs)**

Rezumat în limba română pentru anul 2025 1 pagină

În anul 2025, activitățile realizate în cadrul proiectului au vizat dezvoltarea structurilor carbonice avansate și modelarea computațională a suprafețelor de cărbune activ, reprezentând o etapă esențială în direcția obținerii nanocompozitelor cu proprietăți funcționale pentru aplicații catalitice și electrochimice.

A fost colectată o cantitate suficientă de materie primă vegetală (sâmburi de piersici), materia primă fiind caracterizată prin compoziție lignocelulozică tipică (hemiceluloză 20–28%, celuloză 22–30%, lignină 0,2–1,0%). Analiza termică a permis descrierea etapelor de piroliză și stabilirea comportamentului termic necesar modelării proceselor de carbonizare și activare. Pe baza datelor termoanalitice, au fost determinate etapele de degradare: hemiceluloza (180–320 °C), celuloza (300–400 °C) și lignina (200–500 °C), precum și formarea scheletului carbonic în intervalul 500–1000 °C. Au fost stabilite condițiile optime de carbonizare, obținându-se un randament de aproximativ 40% pentru mangalul din sâmburi de piersici. Ulterior, au fost determinate condițiile optime de activare a mangalului prin două metode: (1) activare cu vapori de apă în strat fluidizat (cuptor/reactor vertical) — condiții optime: 1000 °C, 30 minute; (2) activare clasică cu vapori de apă (cuptor/reactor orizontal) — condiții optime: 950 °C, 1 oră.

Cărbunii activi astfel obținuți au fost ulterior supuși primelor analize morfo-structurale prin FTIR, XRD și SEM-EDX, vizând identificarea grupelor funcționale, caracteristicilor structurale și distribuției elementare. În paralel, au fost inițiate primele încercări de decorare a structurilor carbonice cu nanotuburi de TiO₂, în vederea obținerii unor compozite hibride cu potențial fotocatalitic și electrochimic. Caracterizarea morfo-structurală și optică a nanocompozitelor este în desfășurare, iar selecția materialelor promițătoare continuă.

Pe direcția teoretică, a fost inițiat studiul computațional al suprafețelor de cărbune activ, utilizând metode semiempirice (PM6) și DFT (B3LYP) pentru optimizarea configurațiilor atomice și evaluarea stabilității energetice a suprafețelor funcționalizate (CA-OH, CA-CHO, CA-COOH). Modelele obținute constituie baza pentru studiul viitor al proceselor de adsorbție la nivel molecular.

Activitățile realizate în 2025 au asigurat fundamentul experimental și teoretic necesar pentru dezvoltarea materialelor compozite avansate și pentru continuarea cercetărilor în etapele următoare ale proiectului.

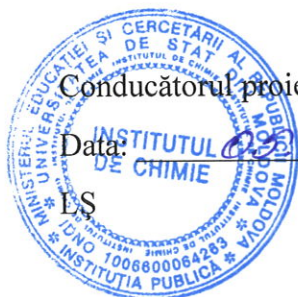
In 2025, the activities carried out within the project focused on the development of advanced carbon structures and the computational modeling of activated carbon surfaces, representing a key stage toward obtaining nanocomposites with functional properties for catalytic and electrochemical applications.

A sufficient amount of vegetal raw material (peach pits) was collected, the material being characterized by a typical lignocellulosic composition (hemicellulose 20–28%, cellulose 22–30%, lignin 0.2–1.0%). Thermal analysis enabled the description of the pyrolysis stages and the identification of the thermal behavior required to model the carbonization and activation processes. Based on thermoanalytical data, the degradation stages were determined: hemicellulose (180–320 °C), cellulose (300–400 °C), and lignin (200–500 °C), as well as the formation of the carbon framework in the 500–1000 °C interval. Optimal carbonization conditions were established, yielding approximately 40% char from peach pits. Subsequently, the optimal conditions for char activation were determined using two methods: (1) steam activation in a fluidized bed (vertical furnace/reactor) — optimal conditions: 1000 °C for 30 minutes; and (2) classical steam activation (horizontal furnace/reactor) — optimal conditions: 950 °C for 1 hour.

The activated carbons obtained were subjected to initial morpho-structural analyses using FTIR, XRD, and SEM-EDX to identify functional groups, structural characteristics, and elemental distribution. In parallel, preliminary attempts were initiated to decorate the carbon structures with TiO₂ nanotubes, aiming to obtain hybrid composites with potential photocatalytic and electrochemical applications. The morpho-structural and optical characterization of the nanocomposites is ongoing, and the selection of the most promising materials continues.

On the theoretical side, computational modeling of activated carbon surfaces was initiated using semiempirical (PM6) and DFT (B3LYP) methods to optimize atomic configurations and evaluate the energetic stability of functionalized surfaces (CA-OH, CA-CHO, CA-COOH). The resulting models provide the basis for future studies on adsorption mechanisms at the molecular level.

The activities carried out in 2025 have established the experimental and theoretical foundations necessary for the development of advanced composite materials and for the continuation of research in the subsequent stages of the project.



Conducătorul proiectului

Data:

LS

Nastas / dr., conf. cerc. Raisa NASTAS

02.12.2025

Executarea devizului de cheltuieli,
conform anexei nr. 2.3 din contractul de finanțare pentru anul 2025
Cifrul proiectului: 25.80013.7007.39ROMD

Cheltuieli, mii lei				
Denumirea	Cod		Anul de gestiune	
	Eco (k6)	Aprobat	Modificat +/-	Precizat
Servicii de cercetări științifice	222930	99 051,0		99 051,0
Total		99 051,0		99 051,0

1/ Rectorul Universității de Stat din Moldova _____ / prof. univ., dr. Igor ȘAROV

1/ Contabil șef _____ / Liliana COJOCARU

Conducătorul proiectului Nastas / dr., conf. cerc. Raisa NASTAS

Data:

LȘ



Componența echipei conform contractului de finanțare 2025

Cifrul proiectului 25.80013.7007.39ROMD

Echipa proiectului conform contractului de finanțare (la semnarea contractului) pentru 2025						
Nr	Nume, prenume (conform contractului de finanțare)	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă sau nr. de ore conform contractului	Data angajării	Data eliberării
1.	Nastas Raisa	1972	dr	10	01.09.2025	31.12.2025
2.	Petuhov Oleg	1985	dr	2	01.09.2025	31.12.2025
3.	Bălan Iolanta	1977	dr	11	01.09.2025	31.12.2025
4.	Țimbaliuc Nina	1960	dr	11	01.09.2025	31.12.2025
5.	Ceban Irina	1991	dr	11	01.09.2025	31.12.2025
6.	Goreacioc Tatiana	1980	dr	3	01.09.2025	31.12.2025
7.	Lupașcu Tudor	1950	dr. hab.	2	01.09.2025	31.12.2025

Rectorul Universității de Stat din Moldova _____ / prof. univ., dr. Igor ȘAROV

Contabil șef _____ / Liliana COJOCARU

Conducătorul proiectului Nastas / dr., conf. cerc. Raisa NASTASData: 06.12.2025

LȘ

