

RECEPȚIONAT

Ministerul Educației și Cercetării

_____ 2026

AVIZAT

Secția AȘM _____

_____ 2026

UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA

INSTITUTUL DE CHIMIE

RAPORT ȘTIINȚIFIC ANUAL

pentru etapa 2025

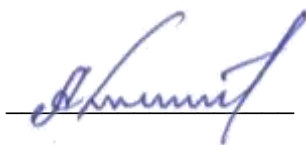
**privind realizarea subprogramului de cercetare în cadrul
programului instituțional de cercetare al organizației (2024-2027)**

Titlul subprogramului **Cercetări avansate în chimia computațională și ecologică, identificarea
procedeelor tehnologice de tratare, formare a calității și cantității apelor**

Prioritatea strategică III. Biotehnologii și protecția mediului

Codul subprogramului 010603

Directorul Institutului de Chimie al USM
ARÎCU Aculina, memb. cor., dr. hab.



Coordonatorul de subprogram
POVAR Igor, dr. hab.



Chișinău, 2026

CUPRINS:

1. Scopul și obiectivele etapei 2025.....	3
2. Acțiunile planificate pentru etapa 2025.....	3
3. Acțiunile realizate în 2025.....	4
4. Rezultatele obținute.....	31
5. Impactul științific, social și/sau economic al rezultatelor științifice obținute.....	36
6. Diseminarea rezultatelor obținute în subprogram în formă de publicații.....	38
7. Diseminarea rezultatelor obținute în subprogram în formă de prezentări la foruri științifice (opțional).....	38
8. Promovarea rezultatelor cercetărilor obținute în subprogram în mass-media: (opțional).....	41
9. Colaborare la nivel național și internațional (opțional).....	42
10. Teze de doctorat/ postdoctorat susținute și confirmate în anul 2025 de membrii echipei subprogramului (opțional).....	46
11. Dificultăți în realizarea subprogramului (financiare, organizatorice, legate de resursele umane etc.) (opțional).....	46
12. Concluzii.....	47

1. Scopul și obiectivele etapei 2025

Etapa 2.1. Studiul eficienței catalitice a compozitelor carbonice în procesele de eliminare a poluanților din mediu apos. Studiul compoziției chimice a apelor naturale în diferite zone geografice ale Republicii Moldova.

Etapa 2.2. Investigarea metodelor de modelare hidrologică și hidrogeologică cu utilizarea izotopilor în scopul evaluării balanței apelor naturale la nivelul bazinului

Etapa 2.3. Realizarea unui inventar tehnic și evaluarea condițiilor de funcționare ale stațiilor de epurare biologică din zona centrală a Republicii Moldova, având în vedere compoziția chimică a apelor uzate și evaluarea impactului lor asupra mediului acvatic.

Etapa 2.4. Stabilirea corelației între parametrii electronici și geometrici ai LI ca zwitterioni de tip [L-carnitină - acizi alimentari].

Etapa 2.5. Influența oxidării și fotolizei vitaminei B₆ în mediul acvatic și inovații în eliminarea poluanților prin funcționalizarea antioxidanților și procese fermentative cu substanțe biologice active.

2. Acțiunile planificate pentru etapa 2025

Etapa 2.1. Vor fi studiate procesele catalitice și adsorbționale de eliminare a poluanților (ioni de nitrit, sulfuri, ioni ai metalelor grele, poluanți organici) din ape model și selectate compozitele cu potențial catalitic sporit. Va fi analizată compoziția chimică a 24 de probe de apă prelevate din diferite zone geografice ale R. Moldova și vor fi elaborate tehnologii de potabilizare în cazul când apa nu corespunde normelor sanitare impuse pentru apa potabilă. Vor fi studiate reacțiile redox care se produc în procesele de îndepărtare a poluanților din apele subterane.

Etapa 2.2. În cadrul etapei a fost planificate evidențierea și testarea metodelor de modelare hidrologică și hidrogeologică cu utilizarea izotopilor în scopul evaluării balanței apelor naturale la nivelul bazinului hidrografic. Pentru realizarea acestei sarcini va fi efectuată o analiză a literaturii de specialitate privind metode de modelare hidrologică și hidrogeologică, având în vedere tehnologia hidrologiei izotopice. De asemenea, vor fi testate metodele de modelare a balanței hidrologice la nivelul bazinului hidrografic utilizând datele obținute în cadrul proiectului dat.

Etapa 2.3. Vor fi identificate dispozitivele funcționale de epurare și tratare a apelor uzate, vor fi evaluate debitele și încărcăturile poluante ale apei uzate tratate în aceste instalații. Vor fi analizate posibilitățile de dezvoltare a sistemelor de epurare în zonele investigate ale regiunii. Va fi efectuată analiza termodinamică a transformărilor speciilor de azot și fosfor în diverse scheme tehnologice de epurare.

Etapa 2.4. Vor fi analizați parametrii electronici responsabili de formarea LI antioxidanți ca zwitterioni de tip [L-carnitină - acizi alimentari].

Etapa 2.5. Vor fi obținute relațiile de determinare a vitezelor de transformare a vitaminelor din grupul B (B₆, B₂, B₁₂) în diverse compoziții a sistemelor modelate; efectuate calcule privind valoarea constantelor efective ale vitezei; estimată persistența substraturilor în diverse sisteme conform timpului de înjumătățire. Vor fi obținute rezultate privind parametrii hidrochimici, cinetici și

starea redox în prezența vitaminelor din grupul B în apele lacului Ghidighici și dinamica sezonieră ale acestora. Vor fi analizate probe integrale din 7 prize de captare situate pe fl. Nistru (porțiunea Dubăsari-Vadul lui Vodă), gurile de vărsare a r. Răut și Ichel, precum și lacurile de acumulare Ghidighici și Dănceni cu obținerea rezultatelor complexe privind compoziția chimică a apelor, poluarea acestora cu substanțe biogene și organice, conținutul substanțelor tioice, starea redox și intensitatea proceselor de autopurificare radicalică. Se va efectua studiul proceselor fermentative cu implicarea substanțelor biologic active (SBA). Vor fi evaluate posibilitățile de aplicare a tehnologiei DBD pentru eliminarea poluanților organici persistenți și micro- și nanoplasticilor în mediile apoase. Vor fi dezvoltate tehnologii inovatoare de purificare a apelor și solului de poluanți prin materiale funcționalizate. Va fi optimizată fermentația prin crearea de noi tehnici care integrează antioxidanți naturali pentru eficientizarea proceselor. Va fi studiat efectului amestecului de antioxidanți în sisteme complexe.

3. Acțiunile realizate în 2025

Etapă 2.1. Executor Laboratorul Chimie Ecologică.

Activitatea 1. *Elaborarea metodei de obținere a unui nou compozit compus din polimer reticulat, compuși ai Cr(III) și a unui ligand. Cercetarea compozitului obținut cu utilizarea metodelor fizice de cercetare. Testarea compozitului în procesele de eliminare din ape a unor compuși (Fe^{2+} , Fe^{3+}).*

A fost preparată o cantitate suficient de mare de compozit Cr-polimer pentru cercetările ulterioare. A fost cercetată sorbția ionilor NCS^- pe compozitul Cr-polimer și pe polimer funcție de temperatură:

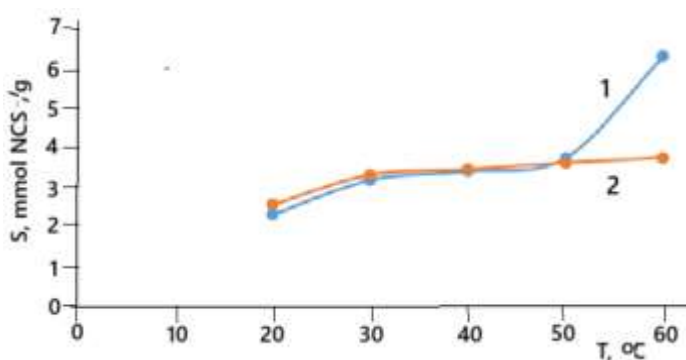


Fig. 1. Sorbția ionilor NCS^- în funcție de temperatură pe compozitul Cr-polimer (1) și Purolit A-400(Cl).

A fost cercetată sorbția ionilor NCS^- pe compozitul Cr-polimer și pe polimer funcție de durata contactării cu soluția:

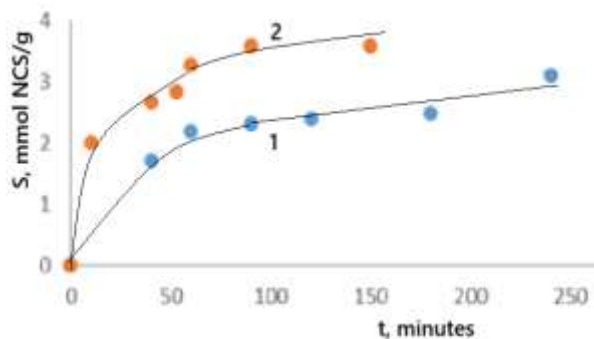


Fig. 2. Curbele cinetice ale sorbției de anioni NCS⁻ pe Cr-polimer la 18 °C (1) și 60 °C (2).

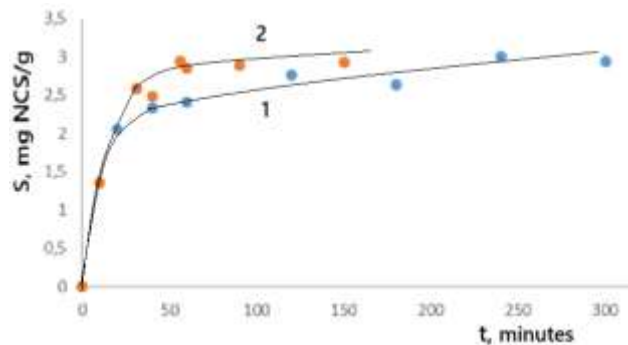


Fig. 3. Curbele cinetice ale sorbției de anioni NCS⁻ pe Purolite A-400(Cl) la 18 °C (1) și 60 °C (2)

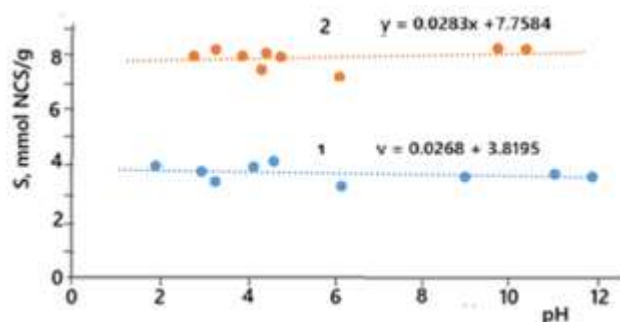


Fig. 4. Sorbția ionilor NCS⁻ în funcție de pH-ul soluției pe compozitul de Cr-polimer la 18 °C (1) și 60 °C (2).

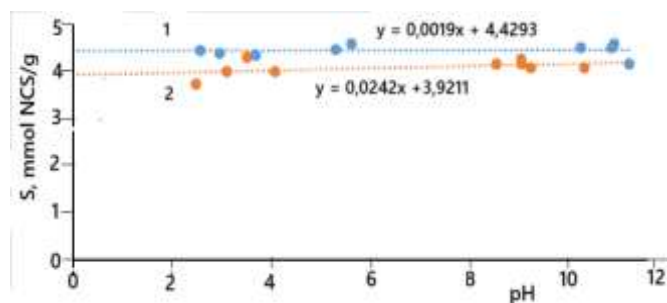


Fig. 5. Sorbția ionilor NCS⁻ în funcție de pH-ul soluției pe Purolite A-400(Cl) la 18 °C (1) și 60 °C (2).

A fost cercetată sorbția ionilor NCS⁻ pe compozitul Cr-polimer și pe polimer funcție de concentrația soluției:

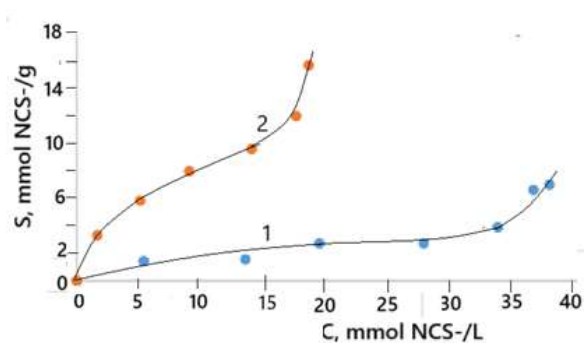


Fig. 6. Sorbția izotermă a ionilor NCS⁻ pe compozitul Cr-polimer la 18 °C (1) și 60 °C.

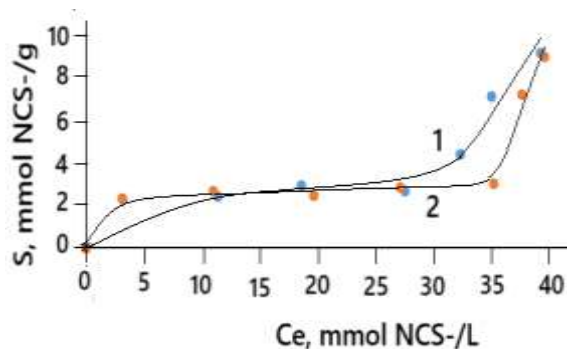


Fig. 7. Sorbția izotermă a ionilor NCS⁻ pe Purolite A-400(Cl) la 18 °C (1) și 60 °C.

A fost cercetată interacțiunea dintre ionii NCS^- și sorbant utilizând spectroscopia FT-IR.

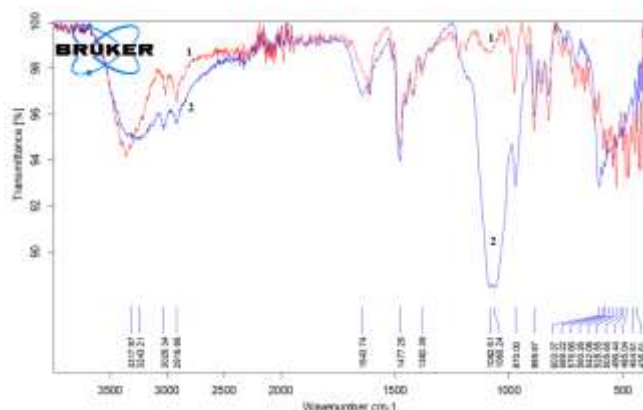


Fig. 8. Spectrele FT-IR ale Purolite A-400(CI) (1) și compozit Cr-polimer (2).

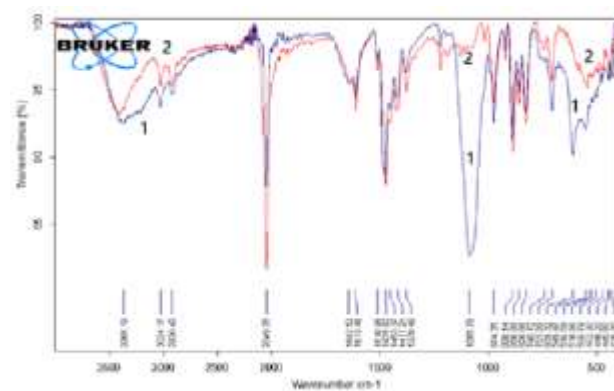


Fig. 9. Spectrul FT-IR al compozitului Cr-polimer care a reținut ionii NCS^- din soluție la 20 °C (1) și 60 °C (2).

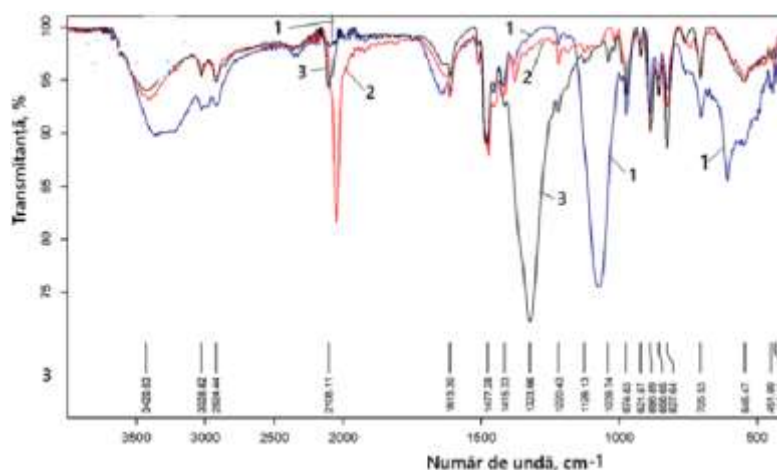


Fig. 10. Spectrele FT-IR ale compozitului Cr-polimer (1), sorbantul (2) și sorbantul care a reținut cationii Hg^{2+} din soluția (3).

Ca rezultat s-a stabilit că ionii de NCS^- sorbiți pe compozitul sintetizat posedă proprietăți de a reține ioni de metale grele.

Activitatea 2. Studiul proceselor de oxidare/eliminare a ionilor de Fe^{2+} și Mn^{2+} din ape model prin aerare și utilizarea compozitelor carbonice.

Analizând baza de date privind componența chimică apelor naturale subterane din localitățile RM, pusă la dispoziție de dna Tatiana Mitina, am constatat ca, în unele localități ionii de Fe depășesc CMA de cca. 3 ori, iar ionii de Mn de cca. 10÷30 ori. În același timp, în probele de apă analizate au fost identificate cantități excesive și pentru alți componenți, precum ionii de amoniu (până la 7 mg/L), ioni de sulfat (până la 900 mg/L) și hidrogen sulfurat (până la 2 mg/L).

Metoda de determinare a ionilor de Fe(II) utilizată (verificarea metodei, construirea curbei de etalonare):

Ionii Fe^{2+} reacționează cu acid sulfosalicilic (5-sulfosalicilic acid, H_3SSA) în mediu slab acid sau neutru, formând un complex colorat solubil în apă. Acest complex poate fi analizat colorimetric, prin măsurarea absorbției la lungimea de undă (λ_{max}) în jur de 400 nm; culoarea și intensitatea complexului depind de pH, concentrație și raport molar între reactiv și ion metallic. Curba de etalonare este utilizată pentru a determina concentrația necunoscută de ioni Fe^{2+} într-o probă, prin compararea absorbției probei cu cele ale unor soluții standard cu concentrații cunoscute.

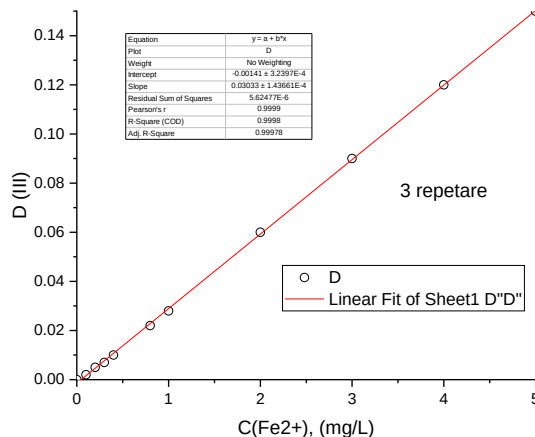


Fig. 11. Curba de etalonare a ionilor de fier(II).

Testarea catalitică a compozitelor carbonice pentru eliminarea substanțelor organice din ape model.

A fost supus carbonizării carbonul natural (CN), fracția 2 – 3.15 mm, la 450 °C, timp de 1 h. Randamentele obținute sunt cuprinse între 33.41% și 34.24%, indicând o stabilitate a procesului și o reproductibilitate bună a transformării termice în condiții constante. Cărbunii activi sintetizați (ACCN) au fost supuși stabilirii volumului de adsorbție a benzenului. Valorile obținute sunt cuprinse între 0.3768 și 0.4242 cm³/g. Aceste valori confirmă prezența unei structuri micro- și mezoporoase în materialele activate. Astfel au fost obținute compozitele dotate cu săruri de fier, mangan și cobalt ACCN-Fe1, ACCN-Mn1, ACCN-Mn2, ACCN-Mn3, ACCN-MnSO₄ și ACCN-Co1 calcinate la 650 °C timp de 3 ore. Analiza termică a compozitelor confirmă impregnarea eficientă și retenția dopantului în structura carbonului activat. Probele de compozite impregnate cu MnCl₂, FeCl₃ și calcinate au fost activate la 950 °C, în timp de 12 și 20 minute cu volume variabile de apă. Randamentele rezultate sunt cuprinse între 4.2% și 9.2%, evidențiind optimizarea procesului în funcție de durata tratamentului și cantitatea de agent fluidizant. Catalizatorii obținuți din probele dopate cu MnCl₂ și FeCl₃ au fost supuși determinării volumului sorbtiv al benzenului. Volumul de benzen adsorbit, determinat gravimetric, indică valori cuprinse între 0.27 și 0.68 cm³/g, cu o medie superioară comparativ cu probele activate simplu sau dopate cu apă. Aceste rezultate sugerează o structură poroasă favorabilă pentru cataliză și adsorbție, influențată de doparea cu Mn și Fe.

Utilizând metoda volumetrică de descompunere a peroxidului de hidrogen a fost determinată activitatea catalitică a patru compozite ce conțin ioni de Mn (ACCN-Mn1, ACCN-Mn2, ACCN-Mn3, ACCN-Mn4) și trei compozite cu ioni de Fe (ACCN-Fe1, ACCN-Fe2, ACCN-Fe3). Pentru determinarea activității catalitice a compozitelor cercetate (cu masa de 100 mg) s-a utilizat fracția 90-125 μm la viteza de agitare 1200 și volumul de peroxid de hidrogen 100 ml. (Fig. 12-13):

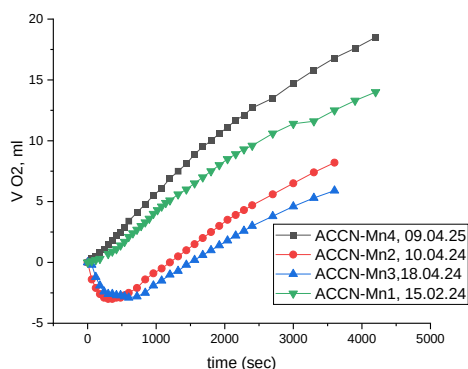


Fig. 12. Curbele de descompunere a peroxidului de hidrogen în prezența compozitelor ACCN-Mn1, ACCN-Mn2, ACCN-Mn3 și ACCN-Mn-4.

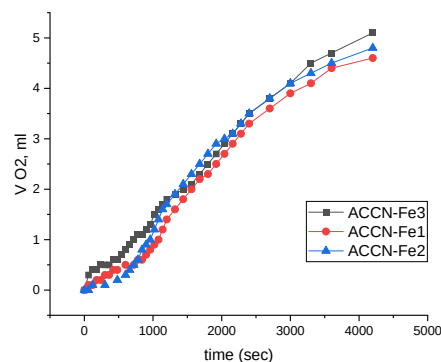


Fig. 13. Curbele de descompunere a peroxidului de hidrogen în prezența compozitelor ACCN-Fe1, ACCN-Fe2 și ACCN-Fe3.

Studiul diminuării concentrației de echilibru a coloranților în prezența catalizatorului și a peroxidului de hidrogen.

Pentru cercetare s-a utilizat compozitul carbonic ACCN-Fe1. Măsurările experimentale s-au realizat la contactarea și agitarea timp de 30 min a câte 100 mg de compozit, utilizând fracția 90-125 μ m, cu 50 ml soluție de colorant cu concentrația prestabilită și 50 ml peroxid (0.02M) sau apă. În calitate de coloranți s-au folosit Congo Roșu (Fig. 14.), Albastru de Metilen (Fig. 15) și Murexid (Fig. 16).

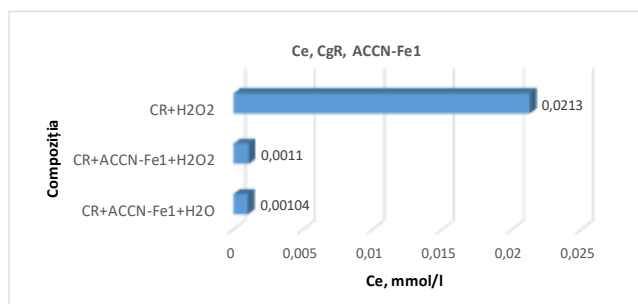


Fig. 14. Datele diminuării concentrației colorantului Congo Roșu în prezența compozitului ACCN-Fe1 cu participarea sau lipsa peroxidului de hidrogen.

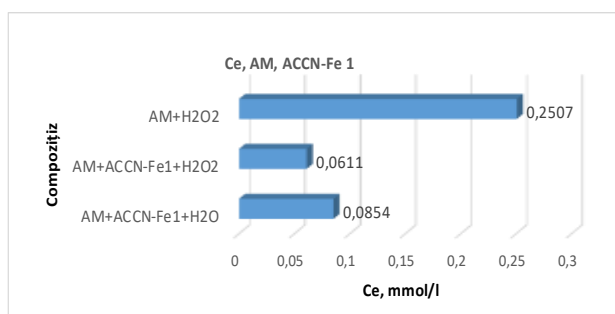


Fig. 15. Datele diminuării concentrației colorantului Albastru de Metilen în prezența compozitului ACCN-Fe1 cu participarea sau lipsa peroxidului de hidrogen.

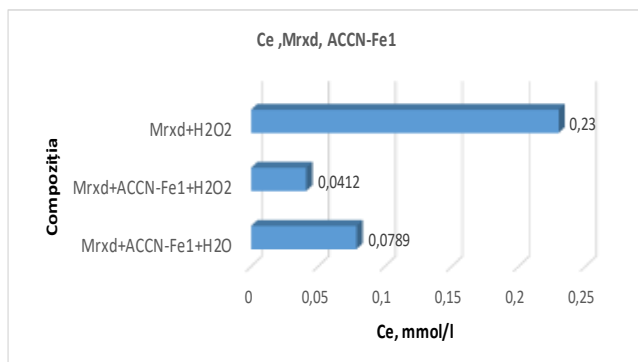


Fig. 16. Datele diminuării concentrației colorantului Murexid în prezența compozitului ACCN-Fe1 cu participarea sau lipsa peroxidului de hidrogen.

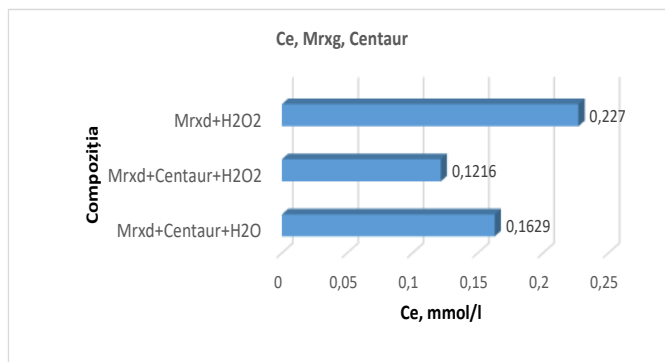


Fig. 17. Datele diminuării concentrației colorantului Murexid în prezența probei de referință Centaur cu participarea sau lipsa peroxidului de hidrogen

Evaluarea rezultatelor obținute ne permite să marcăm că cea mai amplă diminuare a concentrației se observă în cazul determinărilor cu Congo roșu, când după 30 minute de contactare/agitare rămân doar cca 5% din cantitatea inițială de colorant. În cercetările cu Albastru de Metilen, diminuarea cantității de colorant constituie aproape 75% în prezența peroxidului de hidrogen și cca 66% în lipsa acestuia. Pentru Murexid reducerea valorii concentrației inițiale este de 82% în prezența H₂O₂ și cam 65% în soluție apoasă. Pentru comparație, s-a studiat diminuarea concentrației de Murexid la utilizarea probei de referință Centaur în sistemul de contactare/agitare (Fig. 17). Datele obținute denotă o micșorare a concentrației inițiale de colorant de cca 46% în prezența H₂O₂ și de doar 28% în apă.

Activitatea 3. *Stabilirea compoziției chimice a apelor naturale în diferite zone geografice ale R. Moldova.*

Pentru studiul calității apei au fost prelevate 6 probe din 24 preconizate pentru anul de cercetare 2025. Sursele de apă sunt situate în comuna Boșcana, raionul Criuleni. Comuna Boșcana este o localitate situată în centrul Republicii Moldova ([47°07'28"N 29°00'26"E](#)), cu o populație de 3390 locuitori și este formată din satele Boșcana și Mardăreuca. Din cele 6 probe prelevate din comuna Boșcana, 3 sunt ape din sondă arteziană, 3 sunt din fântână de mină. Evaluarea calității apei s-a efectuat în baza următorilor parametri fizico-chimici: duritatea totală, nitriți, amoniac și ioni de amoniu, nitrați, fier total, sodiu, sulfati, cloruri, fluoruri, reziduu uscat, indice de hidrogen, oxidabilitate permanganată, hidrogen sulfurat și sulf solubil.

Etapa 2.2. *Executor Laboratorul Monitoring Calității a Mediului*

În anul de raportare a fost determinată linia de regresie $\Delta_{L-P}\delta^2H \sim \Delta_{L-P}\delta^{18}O$, cunoscută sub numele de „linie locală de evaporare” (LEL). Punctul în care LEL intersectează Linia Globală a Apei

Meteorologice (GMWL) definește valoarea izotopică estimată a aportului de apă al lacului înainte de evaporare. GMWL universală are următoarea linia de regresie $\delta^2\text{H} = 8\delta^{18}\text{O} + 10$, datorită fundamentului teoretic. Pentru a elimina influența precipitațiilor moderne asupra compoziției izotopice a lacului, toate datele $\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$ obținute din lacuri și rezervoare au fost normalizate la compoziția izotopică a intrărilor ponderate în funcție de cantitatea de precipitații din fiecare bazin hidrografic, care a fost definită ca diferența dintre valorile izotopilor lacului ($\delta^{18}\text{OL}$ sau $\delta^2\text{HL}$) și valorile izotopilor precipitațiilor ($\delta^{18}\text{OP}$ sau $\delta^2\text{HP}$) care cad în bazinul hidrografic (ecuația 1):

$$\Delta_{L-P}\delta^{18}\text{O} (\Delta_{L-P}\delta^2\text{H}) = \delta^{18}\text{OL} (\delta^2\text{HL}) - \delta^{18}\text{OP} (\delta^2\text{HP}) \quad (1)$$

Valorile îmbogățirii prin evaporare (EE) au fost bazate pe date normalizate ($\Delta_{L-P}\delta^{18}\text{O}$ și $\Delta_{L-P}\delta^2\text{H}$) și au fost transformate în valori mediane pentru fiecare lac. Partiționarea la echilibru izotopic și compoziția izotopică a fluxului evaporativ au fost utilizate pentru a estima E/I folosind date izotopice nenormalizate pentru lac. Atunci când modelul cu izotopi a arătat o discrepanță mare în raportul E/I dintre cei doi izotopi O și H (adică o discrepanță >20%), lacul este considerat dezechilibrat izotopic. În plus, în cazul în care unele lacuri nu au putut fi luate în considerare, deoarece doar $\delta^{18}\text{O}$ este disponibil pentru calculele bilanțului hidric sau modelul nu a putut fi aplicat corect din cauza aporturilor suplimentare de apă presupuse din reîncărcarea apelor subterane adânci sau topirea ghețurilor, am presupus condiții hidrologice staționare în lac, care sunt observate în principal în perioada de amestecare, și am calculat bilanțul masic izotopic în această perioadă după ecuația. 2:

$$I\delta I = Q\delta Q + E\delta E \quad (2)$$

unde I ($\text{m}^3 \text{an}^{-1}$) este debitul total de apă de intrare în lac, inclusiv precipitațiile, debitele de suprafață și cele subterane; E este fluxul de evaporare; Q ($\text{m}^3 \text{an}^{-1}$) este debitul lacului și δI și δQ (‰) sunt compozițiile izotopice medii ponderate (AW) ale debitului total de intrare și ieșire.

Compoziția izotopică a fluxului de evaporare (δE , ‰) se estimează, folosind ecuația 3:

$$\delta_E = \frac{\left(\frac{\delta_E - \varepsilon^+}{\alpha^+}\right) - h\delta_A - \varepsilon_k}{(1 - h + \varepsilon_k 10^{-3})} \quad (3)$$

unde compoziția izotopică a umidității atmosferice δA este calculată pe baza unei abordări de echilibru. Umiditatea relativă (h), un parametru adimensional, a fost obținută din datele Copernicus NETCDF. Echilibrul de separare izotopică (ε^+) a fost calculat pe baza fracționării izotopice (α^+). Separarea izotopică cinetică (ε_k) a fost calculată pe baza umidității relative, a parametrilor de rezistență la transport (egală cu unu atunci când rata de evaporare este controlată prin transportul molecular al apei prin stratul laminar către atmosferă) și a unei constante cinetice. Raportul E/I al lacului a fost calculat conform ecuației:

$$\frac{E}{I} = \frac{(\delta_I - \delta_Q)}{(\delta_E - \delta_Q)} \quad (4)$$

În anul de raportare au fost obținute următoarele rezultate pentru testarea metodei de modelarea balansului la nivelul bazinului hidrografic:

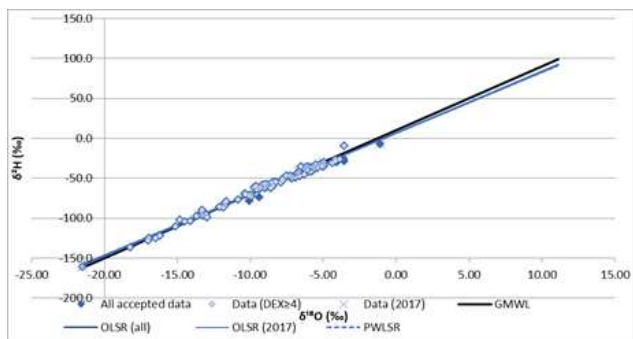


Fig. 18. Relația între izotopi stabili a apei $\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$ în precipitații.

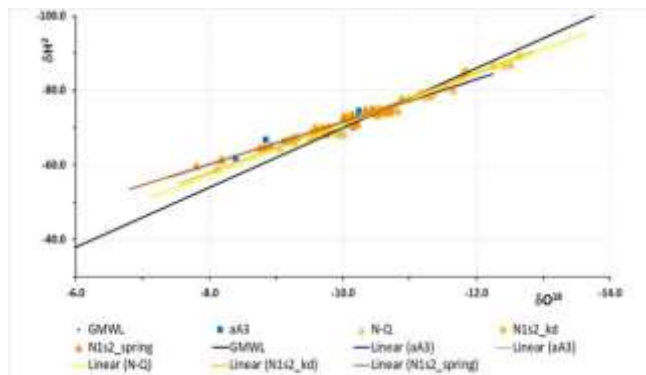


Fig. 19. Relația între izotopi stabili a apei $\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$ în apele subterane din zona de aerare.

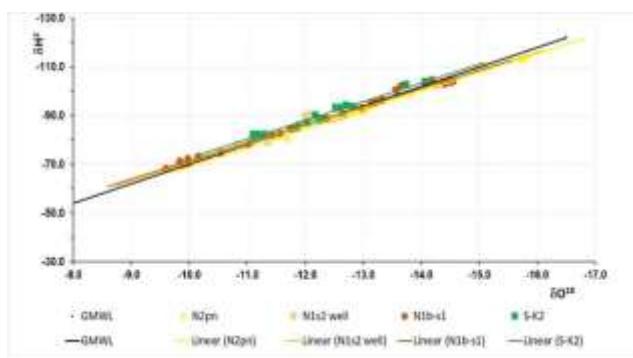


Fig. 20. Relația între izotopi stabili a apei $\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$ în apele subterane acoperite cu straturi impermeabile de adâncimea.

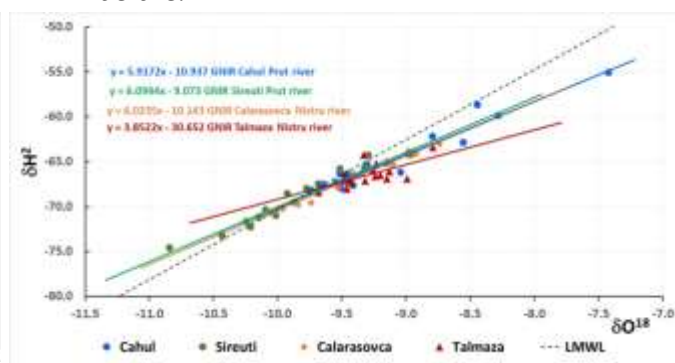


Fig. 21. Relația între izotopi stabili a apei $\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$ în apele de suprafață din râuri Prut și Nistru.

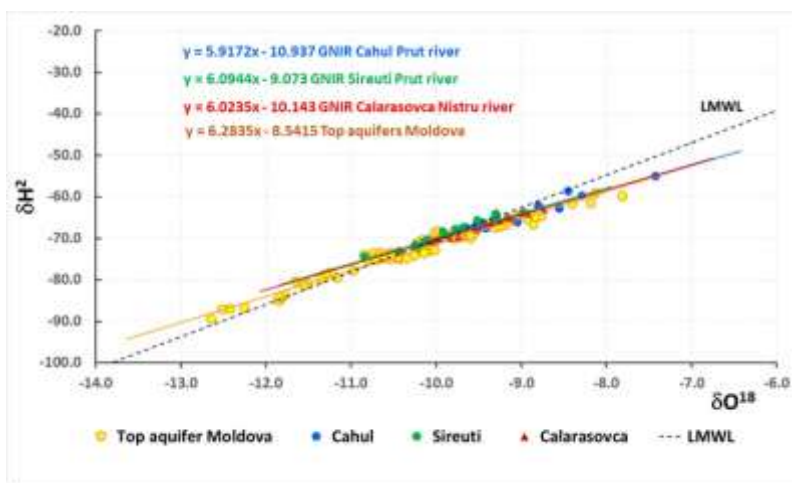


Fig. 22. Relația între izotopi stabili a apei $\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$ în apele de suprafață din râuri Prut, Nistru și apele subterane din zona de aerare.

Etapa 2.3. Executor Laboratorul Metode Fizico-chimice de Cercetare și Analiză

Activitatea 1. *Identificarea dispozitivelor funcționale de epurare și tratare a apelor uzate, evaluarea debitelor și a încărcăturilor poluante ale apei uzate tratate în aceste instalații. Analiza posibilităților de dezvoltare a sistemelor de epurare în zonele investigate ale regiunii.*

Pe teritoriul Republicii Moldova conform datelor statistice al Ministerului de Protecție a Mediului¹ din 271 stații de epurare biologice (SEB) funcționează 211, dintre care numai 29 efectuează o epurare adecvată pentru eliminarea compușilor carbonului (CBO₅) și materiilor în suspensie, inclusiv stațiile de epurare a apelor uzate a municipiilor Chișinău și Bălți. În rezultatul inventarierii tehnice efectuate s-a constatat că există doar 9 stații de epurare a apelor uzate care funcționează în conformitate cu specificațiile de proiectare în ceea ce privește tratamentul biologic. Acestea includ Dondușeni, Glodeni, Bălți, Orhei, Cricova, Chișinău, Colonița, Căușeni și Cantemir. Este de menționat că din cele 9 stații funcționabile numai 2 (Căușeni și Cantemir) își îndeplinesc funcția de eliminare a azotului. Acest fapt a agravat sever gradul de eutrofizare a mediului acvatic din Republica Moldova. Un alt factor care afectează calitatea apei sunt schimbările în utilizarea apei și implementarea măsurilor de economisire. Aceasta conduce la o schimbare a raportului între apele „gri” și „negre”, care se reflectă în compoziția apelor uzate colectate și tratate în Republica Moldova la obiectivele investigate în procesul de audit ce corespund tendințelor mondiale, dar nu corespund cerințelor limite stipulate de legislația Republicii Moldova în vigoare.

Tabelul 1. Concentrațiile de poluanți și nutrienți în influenții a stațiilor de epurare investigate în procesul de audit și comparația cu cele prescrise de legislația în vigoare.

Localitatea	Populația mii locuitori	CCO _{Cr} mgO ₂ /L	Azot amoniacal mg /L	Fosfor total mg /L
CMA conform HG 950		600	30	5
Dondușeni	7.100	997.7	88.4	10.1
Cricova	10.670	930.5	81.4	9.7
Căușeni	15.940	560.4	76.5	9.9
Chișinău	532.510	618.8	65.7	20.4
Ocnita	7.250	1022.1	63.1	11.6
Cantemir	3.430	1109.5	109.2	9.27
Basarabeasca	8.470	996.6	74.6	9.63
Ermoclia, Ștefan Vodă.	3.850	819.8	74.4	7.89

Datele prezentate reflectă o creștere generală a concentrațiilor de poluanți în apele uzate din localitățile urbane din Republica Moldova în ultimele decenii. Gestionarea eficientă a apelor uzate, implementarea unor tehnologii avansate de epurare și practici sustenabile sunt esențiale pentru protejarea resurselor de apă ale țării și pentru asigurarea unei dezvoltări durabile în viitor.

¹ https://ipm.gov.md/upfiles/menu_files/ANUARUL%20%202020%20text%201-108_compressed.pdf

Activitatea 2. Efectuarea unei analize termodinamice a transformărilor speciilor de azot și fosfor în diverse scheme tehnologice de epurare.

În baza ecuațiilor deduse anterior au fost calculate ΔG_S și fracțiile molare ale speciilor chimice care se pot forma în condițiile studiate. Figurile 23-26 prezintă variația energiei Gibbs și diagrame de distribuție în funcție de pH în sistemele eterogene „Hidroxid de magneziu $Mg(OH)_{2(s)}$ - soluție apoasă saturată” la diferite concentrații ale componentelor individuale.

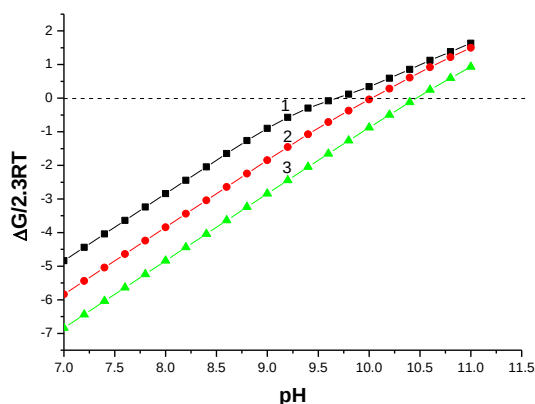


Fig. 23. Variația energiei Gibbs totale în funcție de pH pentru procesul de precipitare-dizolvare în sistemul $Mg(OH)_{2(s)}$ - soluție apoasă saturată. C_i , mol L^{-1} :

1. $C^0(Mg^{2+}) = 1 \cdot 10^{-2}$; $C^0(PO_4^{3-}) = 1 \cdot 10^{-2}$;
2. $C^0(Mg^{2+}) = 1 \cdot 10^{-3}$; $C^0(PO_4^{3-}) = 1 \cdot 10^{-3}$;
3. $C^0(Mg^{2+}) = 1 \cdot 10^{-4}$; $C^0(PO_4^{3-}) = 1 \cdot 10^{-4}$.

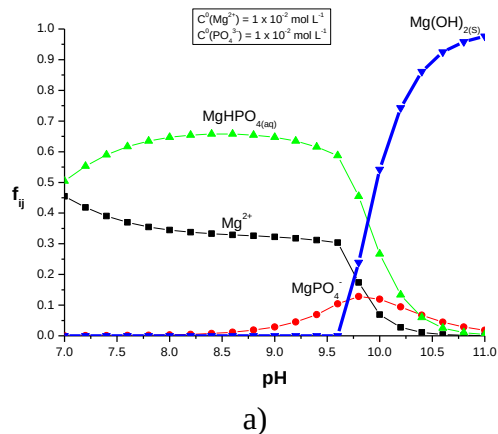


Fig. 24. Diagrama de distribuție a speciilor chimice pentru sistemul eterogen $Mg(OH)_{2(s)}$ - soluție apoasă saturată.

C_i , mol L^{-1} : $C^0(Mg^{2+}) = C^0(PO_4^{3-}) = 1.00 \cdot 10^{-2}$.

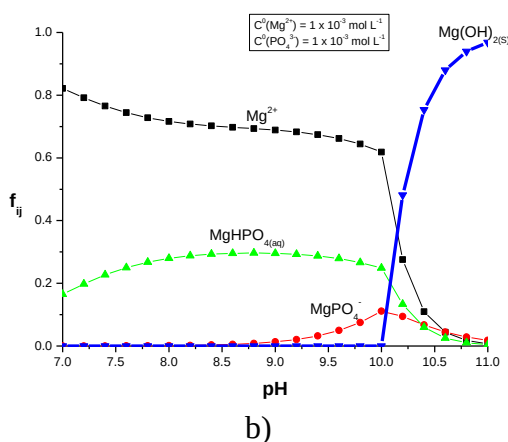


Fig. 25. Diagrama de distribuție a speciilor chimice pentru sistemul eterogen $Mg(OH)_{2(s)}$ - soluție apoasă saturată.

C_i , mol L^{-1} : $C^0(Mg^{2+}) = C^0(PO_4^{3-}) = 1.00 \cdot 10^{-3}$.

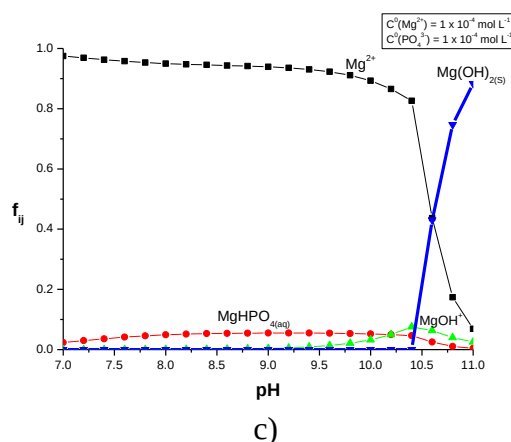


Fig. 26. Diagrama de distribuție a speciilor chimice pentru sistemul eterogen $Mg(OH)_{2(s)}$ - soluție apoasă saturată.

C_i , mol L^{-1} : $C^0(Mg^{2+}) = C^0(PO_4^{3-}) = 1.00 \cdot 10^{-4}$.

Faza solidă $Mg(OH)_{2(s)}$ (brucit) începe să se formeze la $pH > 9.5$ pentru setul de concentrație (a), la $pH > 10.0$ pentru setul (b) și la $pH > 10.4$ pentru setul de concentrație $C^0(Mg^{2+}) = C^0(PO_4^{3-}) = 1 \cdot 10^{-4}$ mol L^{-1} (c). Diagramele de distribuție pentru sistemul eterogen care conține două faze solide pentru ambele seturi (a) și (b) indică faptul că brucit ar putea influența formarea struvitului la valori

ale pH-ului > 10.0 (Figurile 27-28). Calculele noastre teoretice se aliniază cu observațiile experimentale care indică faptul că precipitarea brucitului la pH peste 9.5 afectează formarea struvitului.²

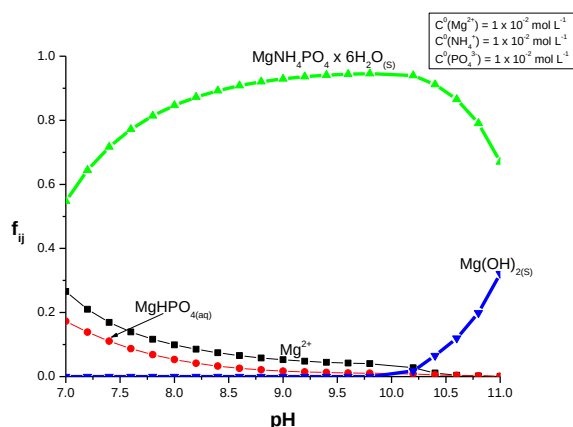


Fig. 27. Diagrama de distribuție a speciilor chimice pentru sistemul eterogen $\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O(s)} - \text{Mg(OH)}_{2(\text{s})}$ - soluție apoasă saturată.

C_i , mol L^{-1} : $C^0(\text{Mg}^{2+}) = C^0(\text{NH}_4^+) = C^0(\text{PO}_4^{3-}) = 1.00 \cdot 10^{-2}$.

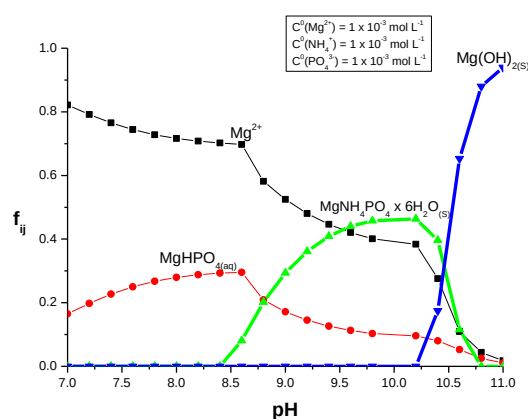


Fig. 28. Diagrama de distribuție a speciilor chimice pentru sistemul eterogen $\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O(s)} - \text{Mg(OH)}_{2(\text{s})}$ - soluție apoasă saturată.

C_i , mol L^{-1} : $C^0(\text{Mg}^{2+}) = C^0(\text{NH}_4^+) = C^0(\text{PO}_4^{3-}) = 1.00 \cdot 10^{-3}$.

Figurile 29-32 ilustrează coexistența a două faze: struvit și $\text{MgHPO}_4(\text{s})$, $\text{MgKPO}_4(\text{s})$ și respectiv $\text{MgNaPO}_4(\text{s})$. A fost dovedit prin calcule că în fiecare caz, formarea unei a doua faze solide care conține fosfat nu afectează semnificativ gradul de formare a struvitului.

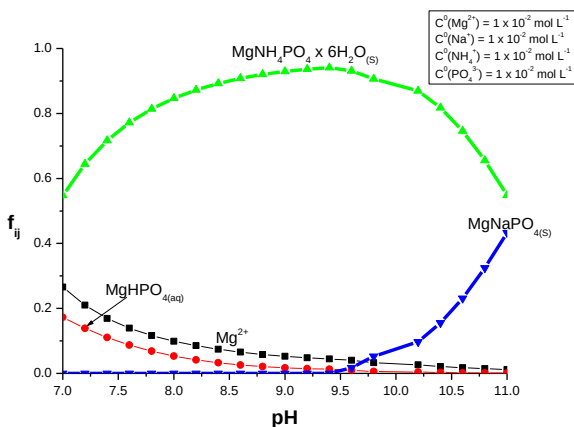


Fig. 29. Diagrama de distribuție a speciilor chimice pentru sistemul eterogen $\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O(s)} - \text{MgNaPO}_4(\text{s})$ - soluție apoasă saturată.

C_i , mol L^{-1} : $C^0(\text{Mg}^{2+}) = C^0(\text{NH}_4^+) = C^0(\text{PO}_4^{3-}) = C^0(\text{Na}^+) = 1.00 \cdot 10^{-2}$.

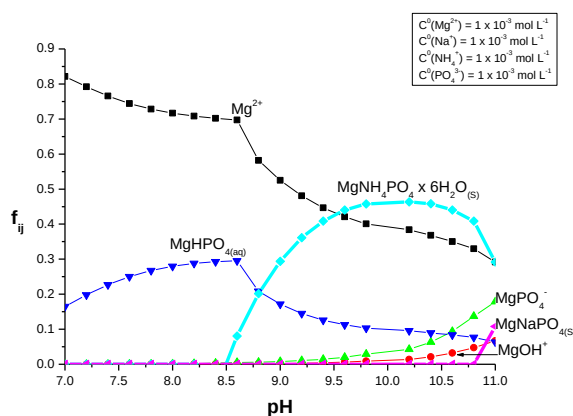


Fig. 30. Diagrama de distribuție a speciilor chimice pentru sistemul eterogen $\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O(s)} - \text{MgNaPO}_4(\text{s})$ - soluție apoasă saturată.

C_i , mol L^{-1} : $C^0(\text{Mg}^{2+}) = C^0(\text{NH}_4^+) = C^0(\text{PO}_4^{3-}) = C^0(\text{Na}^+) = 1.00 \cdot 10^{-3}$.

² Musvoto EV, Wentzel MCM, Ekama GAM (2000) Integrated chemical—physical processes modelling II. Simulating aeration treatment of anaerobic digester supernatants. Water Research 34:1868-1880. [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(99\)00335-8](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(99)00335-8)

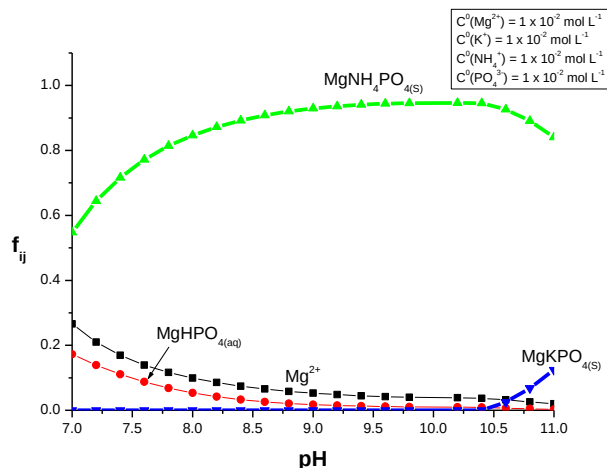


Fig. 31. Diagrama de distribuție a speciilor chimice pentru sistemul eterogen $\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O(s)} - \text{MgKPO}_4\text{(s)}$ - soluție apoasă saturată. $C_i, \text{ mol L}^{-1}$: $C^0(\text{Mg}^{2+}) = C^0(\text{NH}_4^+) = C^0(\text{PO}_4^{3-}) = C^0(\text{K}^+) = 1.00 \cdot 10^{-2}$

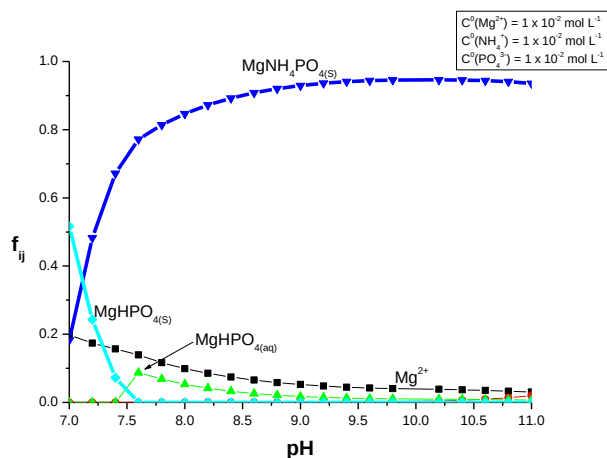


Fig. 32. Diagrama de distribuție a speciilor chimice pentru sistemul eterogen $\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O(s)} - \text{MgHPO}_4\text{(s)}$ - soluție apoasă saturată.

$C_i, \text{ mol L}^{-1}$: $C^0(\text{Mg}^{2+}) = C^0(\text{NH}_4^+) = C^0(\text{PO}_4^{3-}) = 1.00 \cdot 10^{-2}$

Ionii de calciu, prezenți în diferite tipuri de ape uzate și digesteore, concurează și/sau interferează procesului de formare a struvitului. Ajustarea unui $\text{pH} > 8.0$ în apele reziduale reale care conțin Ca^{2+} ar putea duce la precipitarea impură a struvitului. În prezența ionilor de calciu, concentrația ionilor de fosfat joacă, de asemenea, un rol important. După cum este arătat în diagramele din Fig. 33-34 cel mai ridicat grad de precipitare atât pentru struvit, cât și pentru $\text{CaHPO}_4\text{(s)}$ se atinge atunci când concentrația de fosfat este cel puțin dublă față de cea a ionilor de magneziu și calciu.

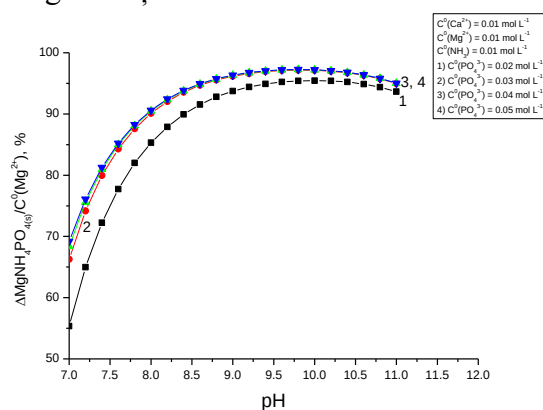


Fig. 33. Gradul de precipitare al **struvitului** versus pH în prezența ionilor de calciu pentru diverse concentrații ale fosfat - ionului, mol L^{-1} :

$$C^0(\text{Mg}^{2+}) = C^0(\text{NH}_3) = C^0(\text{Ca}^{2+}) = 1 \cdot 10^{-2},$$

$C^0(\text{PO}_4^{3-})$: $2 \cdot 10^{-2}$ (1); $3 \cdot 10^{-2}$ (2); $4 \cdot 10^{-2}$ (3); $5 \cdot 10^{-2}$ (4)

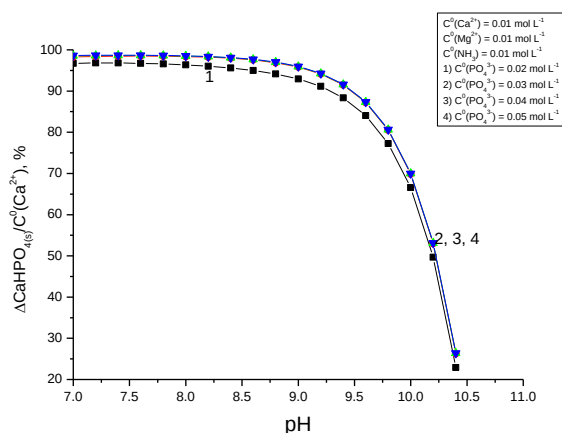


Fig. 34. Gradul de precipitare al **$\text{CaHPO}_4\text{(s)}$** versus pH pentru diverse concentrații ale fosfat - ionului, mol L^{-1} :

$$C^0(\text{Mg}^{2+}) = C^0(\text{NH}_3) = C^0(\text{Ca}^{2+}) = 1 \cdot 10^{-2},$$

$C^0(\text{PO}_4^{3-})$: $2 \cdot 10^{-2}$ (1); $3 \cdot 10^{-2}$ (2); $4 \cdot 10^{-2}$ (3); $5 \cdot 10^{-2}$ (4)

Repartiția speciilor ce conțin ioni de magneziu și de fosfat în funcție de pH (Fig. 35, 36), oferă informații utile despre existența diferitelor specii solubile și insolubile. În plus, acest tip de diagrame oferă informații despre transformarea reciprocă a fazelor solide.

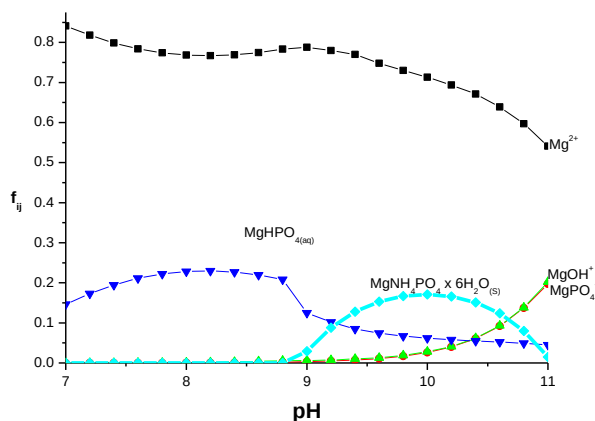


Fig. 35. Diagrama de distribuție a speciilor ce conțin **ionul de magneziu** în sistemul eterogen $\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ - $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}_{(s)}$ - soluție apoasă saturată.

C_i , mol L^{-1} : $C^0(\text{Mg}^{2+}) = C^0(\text{Ca}^{2+}) = C^0(\text{NH}_4^+) = C^0(\text{PO}_4^{3-}) = 1 \cdot 10^{-3}$

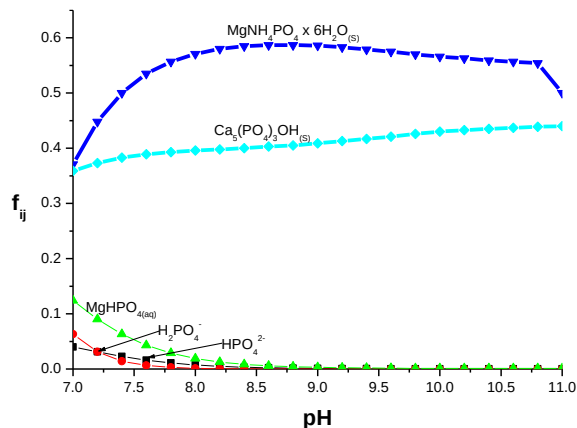


Fig. 36. Diagrama de distribuție a speciilor ce conțin **ionul de fosfat** în sistemul eterogen $\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ - $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}_{(s)}$ - soluție apoasă saturată.

C_i , mol L^{-1} : $C^0(\text{Mg}^{2+}) = C^0(\text{NH}_4^+) = C^0(\text{PO}_4^{3-}) = C^0(\text{Ca}^{2+}) = 1 \cdot 10^{-2}$

Activitatea 3. *Determinarea condițiilor optime pentru eliminarea fosforului cu clorură ferică (FeCl_3), evaluarea influenței raportului molar Fe/P asupra eficienței procesului și a costului specific de reactiv per metru cub de apă tratată.*

Experiențele de laborator s-au efectuat pe probe de apă uzată colectate din stațiile de epurare municipale din Chișinău (influent), Căușeni și Colonița (efluent). Probele de influent prezentau o concentrație medie de fosfor total de 4.5–4.8 mg/L și un consum chimic de oxigen (CCO_{Cr}) de 260–280 mg/L. pH-ul inițial era cuprins între 7.1 și 7.4. Probele de efluent prezentau o concentrație medie de fosfor total de 2.7–4.7 mg/L. Dozele de clorură ferică au fost stabilite astfel încât să acopere un interval al raportului molar Fe/P de la 0 la 3.0. Pentru fiecare probă, s-a determinat concentrația reziduală de fosfor total, fosfați, amoniu și CCO_{Cr} după amestecare timp de 30 minute și decantare de 60 minute, la temperatura de $20 \pm 2^\circ\text{C}$.

Rezultatele obținute au arătat că eficiența procesului de îndepărtare a fosforului crește proporțional cu doza de clorură ferică până la un prag optim, după care tendința se stabilizează. La un raport molar Fe/P de 1.0, eficiența medie de îndepărtare a fosforului a fost de 43–46%, iar la Fe/P = 2.0 a crescut la 74–78%. Dozarea suplimentară până la Fe/P = 3.0 a adus o îmbunătățire marginală, atingând o eficiență maximă de 83%, ceea ce indică o limitare cinetică a procesului prin saturația punctelor de reacție disponibile. Concomitent, s-a observat o reducere parțială a CCO_{Cr} de la 281 mg/L la 150 mg/L, confirmând că procesul de coagulare contribuie și la îndepărtarea fracției organice coloidale. Concentrația de amoniu (NH_4^+) a rămas aproape constantă, în jurul valorii de 62 mg/L, demonstrând că reacțiile de nitrificare nu sunt influențate de prezența ionilor Fe^{3+} în dozele utilizate. Analiza pH-ului a arătat o ușoară scădere de la 7.3 la 6.8, fără impact asupra echilibrului

biologic sau a procesului de decantare. Produsele de reacție formează compuși insolubili, care se separă sub formă de flocoane și sunt reținuți în nămolul activ. În același timp, ionii Fe^{3+} acționează ca agenți de coagulare pentru particulele coloidale încărcate negativ, îmbunătățind claritatea efluentului și proprietățile de sedimentare ale nămolului.

Rezultatele indică faptul că, pentru a obține un efluent cu fosfor total sub 1.0 mg/L, raportul molar Fe/P optim se situează între 2.0 și 2.5. Doze mai mari nu aduc beneficii semnificative și pot conduce la formarea excesivă de nămol chimic, crescând costurile de deshidratare și eliminare.

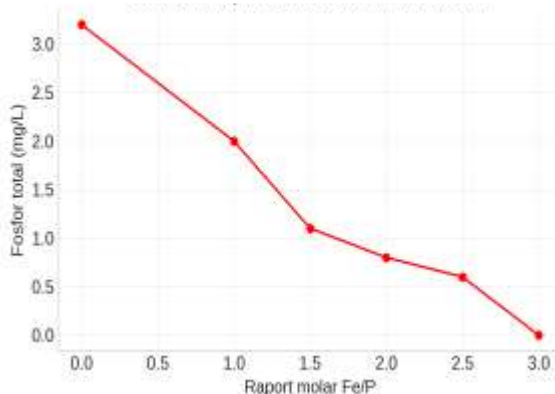


Fig. 37. Concentrația fosforului total în efluent în dependență de raportul molar Fe/P.

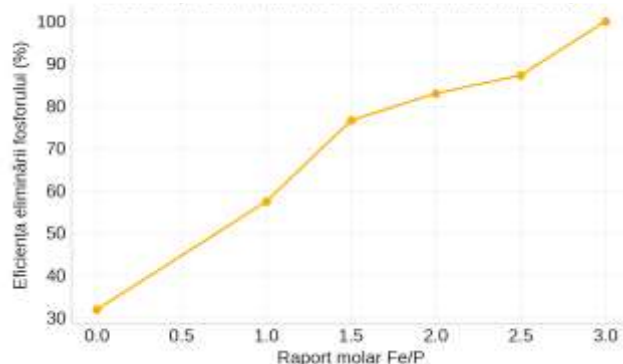


Fig. 38. Eficiența eliminării fosforului total în efluent în dependență de raportul molar Fe/P.

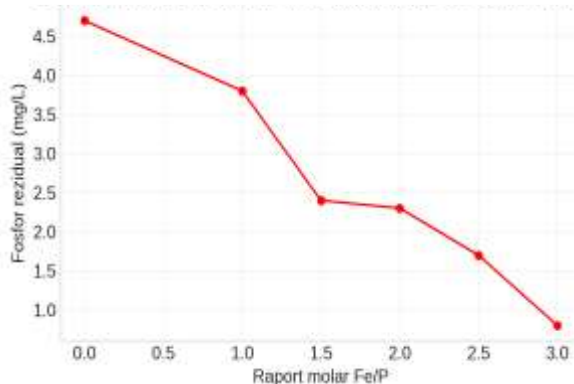


Fig. 39. Concentrația fosforului rezidual în dependență de raportul molar Fe/P.

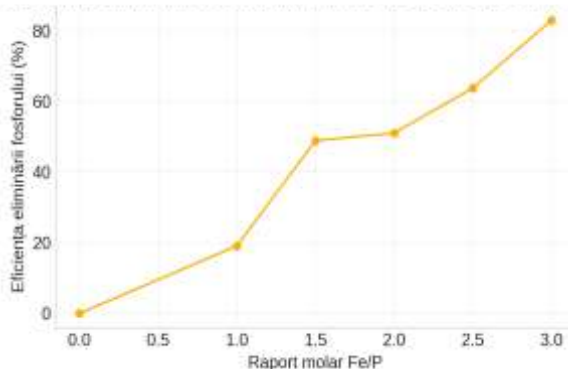


Fig. 40. Eficiența eliminării fosforului rezidual în funcție de raportul molar Fe/P.

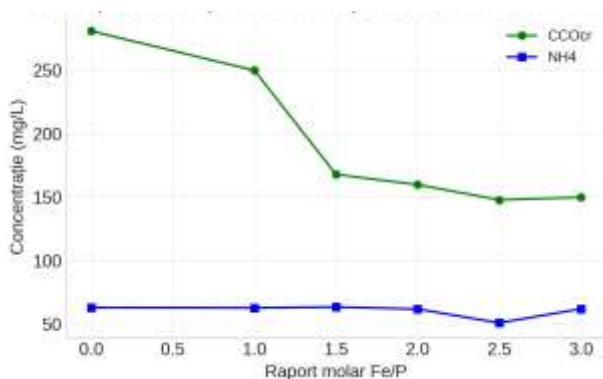


Fig. 41. Concentrația amoniului și CCO_{Cr} în dependență de raportul molar Fe/P.

Activitatea 4. *Determinarea condițiilor optime de eliminare a sulfurilor prin interacția acestora cu ioniile metalelor grele din reziduurile de nămol, în vederea reducerii emisiilor odorante și a intensificării procesului de deshidratare.*

Secțiunea nr. 1. Teste industriale de utilizare a clorurii de fier (FeCl_3) în procesul tehnologic de deshidratare prin centrifugare la Stația de Epurare din Chișinău.

Au fost realizate testele industriale de utilizare a clorurii de fier (FeCl_3) cu concentrația 0.89 – 1.1 mL/L (mediată 1.0 mL/L) de soluție 40% în procesul tehnologic de deshidratare prin centrifugare la Stația de Epurare din Chișinău. Măsurătorile s-au efectuat în perioada caniculară la temperaturi 29 – 36 °C, când are loc emanarea intensivă de sulfuri și mercaptani. Pe durata acestor teste hidrogenul sulfurat nu a fost depistat în punctele stabilite de măsurare cu excepția gurii bazinului de omogenizare la nivelul sub placa de beton, fapt care demonstrează eficiența durabilă a soluției utilizate de FeCl_3 . În lipsa clorurii ferice în perioada de monitorizare s-a depistat o concentrație variabilă de H_2S , care, în unele cazuri, a ajuns la 120 ppm, valorile maxime depășind limita de măsurare de 200 ppm.

Testele industriale de utilizare a clorurii de fier (FeCl_3) în procesul tehnologic de deshidratare prin centrifugare la Stația de Epurare din Chișinău au demonstrat că pentru stoparea emanării de hidrogen sulfurat și diminuarea mirosului provocat de sulfuri și mercaptani în perioada caldă cu temperaturi de 17 – 37°C doza recomandată ca procesabilă să fie de 1 mL de soluție 40% la 1 L de nămol. În perioada cu temperaturi sub de 16°C doza procesabilă necesară este de 0.6 – 0.8 mL de soluție 40% la 1 L de nămol.

Secțiunea nr. 2. Evaluarea posibilității utilizării combinate a clorurii de fier (FeCl_3) și a floclantului folosit curent pentru deshidratare în diferite raporturi în condiții de laborator prin teste și investigații.

Experiențele planificate privind evaluarea posibilității utilizării combinate a clorurii de fier (FeCl_3) și a floclantului folosit curent pentru deshidratare în diferite raporturi în condiții de laborator prin teste și investigații au fost efectuate în laborator prin evaluarea vitezei de cedare a apei prin filtrare (material geotextil cu deschiderea aparentă 0.48 mm, cu pâlnia Büchner). În experiment au fost utilizate nămolurile de la SEB (prelevate și transportate la Institut de ACC) cu o umiditate de 94.9%, cu aplicarea diferitor doze de floclant utilizat actual la deshidratare prin centrifugare. Dozele experimentate 1.5; 2.0; 2.5; 3.0; 3.5; 4.0; 4.5 kg/t materie uscată ca probă martor și cu adaos de FeCl_3 cu doze de 1.0; 1.5; 2.0 mL/L de nămol. Datele și figurile obținute sunt prezentate în figurile 42 și 43.

Pentru proba martor

Utilizând doza de floclant de 1.5 și 2.0 kg/t m.u. (materie uscată) la proba martor (fără adaos de FeCl_3) procesul de floclare nu se petrece. La doza de floclant de 2.5 și 3.0 kg/t m.u. la proba martor (fără adaos de FeCl_3) procesul de floclare se petrece, dar cu efectul de turbiditate excesiv în filtrat (o masă considerabilă de MS este evacuată din sistem, datorită necuprinderii particulelor din spațiul interfloclular). La doza de floclant de 3.5 și 4.0 kg/t m.u. la proba martor (fără adaos de FeCl_3) procesul de floclare se petrece cu o scădere considerabilă a turbidității în apa separată, dar cu o frânare a vitezei de cedare a apei, cauza fiind doza excesivă de floclant și formarea gelului concentrat interfloclular.

Pentru proba cu adaos de clorură de fier în doză de 1 mL/L (soluție de 40%)

La doza de flocculant de 1.5 kg/t m.u. procesul de flocculare nu se petrece. La doza de flocculant de 2.0 kg/t m.u. s-a manifestat procesul de flocculare stabil cu o turbiditate suficientă. La doza de flocculant de 2.5 și 4.0 kg/t m.u. procesul de flocculare se petrece cu o stabilizare a turbidității (o masă considerabilă de MS este reținută în sistem, datorită agentului de coagulare a particulelor din spațiul interflocular) și o majorare a vitezei de cedare a apei. La doza de flocculant de 4.0 kg/t m.u. procesul de flocculare se petrece cu o stabilizare a turbidității în apa separată, dar cu o frânare a vitezei de cedare a apei din cauza dozei excesive de flocculant și formarea gelului concentrat interflocular.

Testele efectuate ilustrează procesul de deshidratare în regim de filtrare statică. În procesul de deshidratare dinamică (centrifugare) pot apărea alți factori care influențează stabilitatea flocoanelor și eficacitatea procesului.

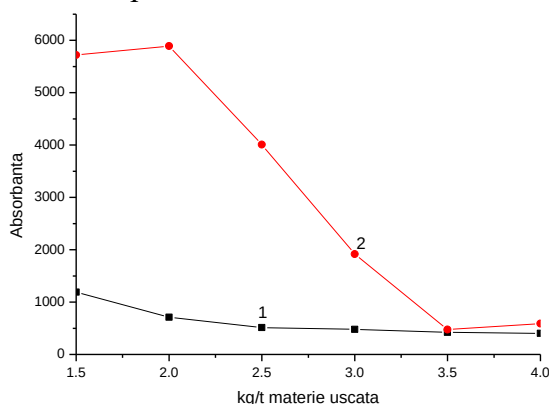


Fig. 42. Evaluarea turbidității apelor separate în cadrul testelor 1) cu adaos de FeCl₃ (1.0 mL/L de nămol) și 2) fără adaos de FeCl₃.

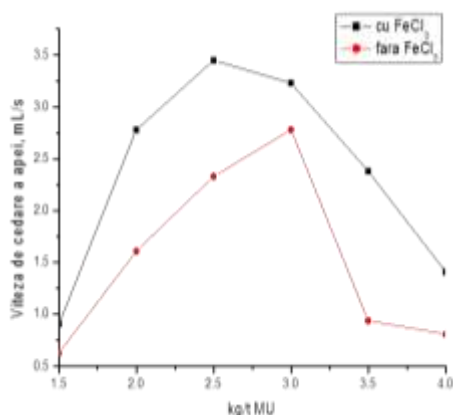


Fig. 43. Viteza de cedare a apei în procesul de filtrare a nămolurilor tratate în funcție de doza de flocculant utilizată

Reieșind din viteza de cedare a apei și turbiditatea apei separate, s-a stabilit că doza optimă a flocculantului utilizat împreună cu 1 mL/L FeCl₃ este între 2.5- 3.5 kg/t m.u. Majorarea dozei de FeCl₃ până la 2.0 mL/L nu mărește esențial efectul de cedare a apei.

Secțiunea nr. 3. Evaluarea prin teste și investigații a posibilității utilizării combinate a clorurii de fier (FeCl₃) și a flocculantului folosit curent pentru deshidratare în diferite raporturi în condiții industriale. Conform experiențelor planificate, s-a evaluat posibilitatea utilizării combinate a clorurii de fier (FeCl₃) și a flocculantului folosit curent pentru deshidratare în diferite raporturi, prin teste industriale și investigații efectuate în laboratorul de ape uzate DEAU. Scopul a fost evaluarea dozelor optime de flocculant în combinație cu utilizarea clorurii ferice ca agent de combatere a mirosurilor, prin estimarea valorilor de materii în suspensie din apele separate. În cadrul încercărilor industriale, au fost testate doze de 4.2; 4.0; 3.8; 3.3 și 2.8 kg/tonă m.u., cu soluția de flocculant diluată în proporții de 0.14%, 0.12% și 0.10% la turații a centrifugii 60%; 70% și 80% din turațiile maxime posibile de tratare a reziduurilor solide de la SEBM Chișinău.

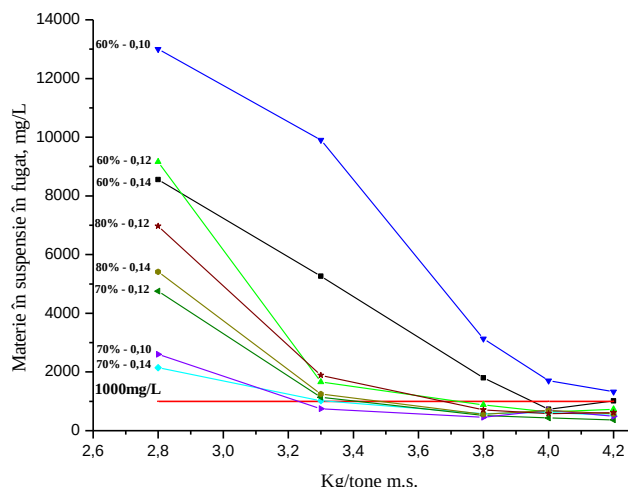


Fig. 44. Dinamica materiei în suspensie din fugat la regimul de deshidratare prin centrifugare la regimul de 1) 60%; 2) 70% și 3) 80% turații maxime.

În cadrul experiențelor cu 60% din turațiile maxime poate fi aleasă doar soluția de flocculant de 0.12% cu dozele 3.8; 4.0; 4.2 kg/t m.u. Conform materiei în suspensie a apei separate doza optimă a flocculantului (0.14% concentrație) în combinație cu FeCl_3 1 mL/L este 4.0 Kg/t m.u. La regimul de centrifugare 70% din turațiile maxime variațiile sunt mai mari. Pentru soluția de flocculant 0.10%; 0.12% și 0.14% segmentul de doze de tratare eficientă (sub 1000 mg/L materie în suspensie în apa de separare) în linii mari este 3.3 – 4.2 Kg/t m.u. La regimul de centrifugare 80% din turațiile maxime posibilitățile de tratare a reziduurilor solide de la SEBM Chișinău este medie. Pentru soluțiile de flocculant 0.14% și 0.12% segmentul de doze de tratare eficientă (sub 1000 mg/L materie în suspensie) este 3.8-4.2 Kg/t m.u.

Etapa 2.4. Executor *Chimie Fizică și Cuantică*

Activitatea 1. Activitatea antioxidantă a lichidelor ionice formate ca urmare a interacțiunii carnitinei cu acizii alimentari.

În perioada de raportare, a fost studiată cuanto-chimic (folosind metoda DFT/B3LYP) activitatea antioxidantă a lichidelor ionice formate ca urmare a interacțiunii carnitinei cu acizii alimentari, folosind exemplul interacțiunii acestora cu cationul radical stabil ABTS^{•+}. Am demonstrat că interacțiunea moleculelor de acid alimentar cu zwitterionul de carnitină are loc cu participarea formei tautomerice a carnitinei, care are o energie mai joasă (vezi Fig. 45 și 46). În acest caz (după transferul unui proton de la moleculele de acid la zwitterionul de carnitină), anionii acizi din perechile de ioni rezultați se leagă de cationul carnitinei protonate prin intermediul atomului de oxigen aparținând grupării hidroxil a carnitinei.

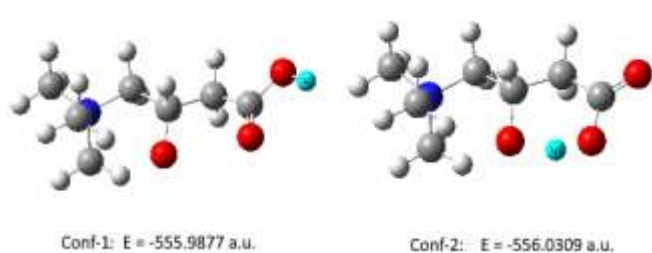


Fig. 45. Structurile optimizate ale principalelor forme tautomerice ale carnitinei.

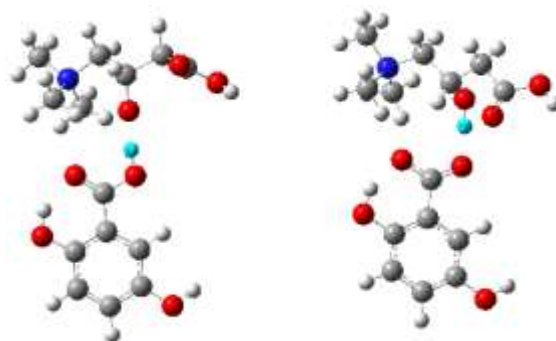


Fig. 46. Geometriile inițiale și finale ale complexului [carnitină și acid gentisic]: formarea perechilor ionice.

Anterior a fost stabilit că cationul radical $\text{ABTS}^{+\bullet}$ interacționează exclusiv cu anionii acizilor alimentari (dar nu și cu moleculele lor neutre). Astfel, întrucât perechile de ioni ale lichidelor ionice studiate constau dintr-un cation de carnitină protonat și anioni acizi, a fost evident că anionii acestor perechi de ioni vor interacționa cu radicalul cationic $\text{ABTS}^{+\bullet}$. Cu toate acestea, interacțiunea acestor anioni cu radicalul cationic $\text{ABTS}^{+\bullet}$ se poate realiza în două moduri:

1. Interacțiunea cu acești anioni după disocierea perechilor de ioni în soluție; și
2. Interacțiunea cu acești anioni care rămân în structura perechilor de ioni corespunzătoare.

În primul caz, numărul de anioni (și, în consecință, activitatea antioxidantă EC50) ar trebui determinat (corelat) cu valorile pKa ale acizilor neionizați. În al doilea caz, activitatea antioxidantă a lichidelor ionice studiate (perechile lor de ioni) va fi cu atât mai mare, cu cât sarcina negativă a anionului inclus în structura perechii de ioni este mai mare (adică, cu cât momentul dipolar al perechii de ioni studiate este mai mare). Rezultatele calculelor noastre chimice cuantice efectuate folosind programul GAUSSIAN 09 în setul de baza orbitală 6-31G arată că valorile calculate ale momentelor dipolare prezintă, de asemenea, o corelație clară cu valorile activității antioxidante EC50.

Activitatea 2. Studiul teoretic al structurilor geometrice ale conformerilor acidului ascorbic și influența solventului asupra stabilității

Prin scanarea unghiurilor diedrale al acidului ascorbic $a(\text{C3-C2-O6-H7})$ și $b(\text{C10-C1-O8-H9})$ au fost generate un număr total de 361 de conformații geometrice distincte. Prin analiza energetică a conformațiilor generate, au fost selectate câteva structuri în funcție de valoarea unghiurilor diedrale, acestea fiind identificate prin calcularea suprafeței de energie potențială (SEP), unde regiunile de minim energetic sunt evidențiate printr-un gradient cromatic albastru (Fig. 47). Diferența de energie dintre conformația C1.1 și C2.4 este, de aproximativ 11,47 kcal/mol, indicând o flexibilitate conformațională semnificativă a sistemului.

A doua serie de calcule a fost realizată pentru a investiga comportamentul geometric al moleculei sub constrângere parțială, în care anumite unghiuri diedrale au fost menținute fixe, având scopul de a analiza efectele acestora asupra conformațiilor lanțului lateral. Astfel, unghiurile diedrale ale inelului furanic, $a(\text{C3-C2-O6-H7})$ și $b(\text{C10-C1-O8-H9})$, au fost menținute la valorile de 0° și respectiv 180° , pentru a păstra structura de referință, cea mai stabilă energetic la prima scanare.

Aceste constrângeri au fost aplicate pentru a asigura un punct de plecare stabil al geometriei moleculare. În paralel, atenția a fost concentrată pe optimizarea poziției unghiurilor diedrale ale lanțului lateral, anume $c(C14-C12-O17-H18)$ și $d(C12-C14-O19-H20)$, care au fost ajustate pentru a identifica configurațiile energetic favorabile ale moleculei. Astfel, calculele au vizat în mod specific aceste unghiuri, având în vedere interacțiunile dintre segmentele moleculare și influența acestora asupra stabilității energetice. Din cele 441 forme conformaționale obținute, au fost selectați 4 conformeri cu diferite valori ai unghiului diedral, fiind ilustrate pe diagrama suprafeței de energie potențială (Fig. 48).

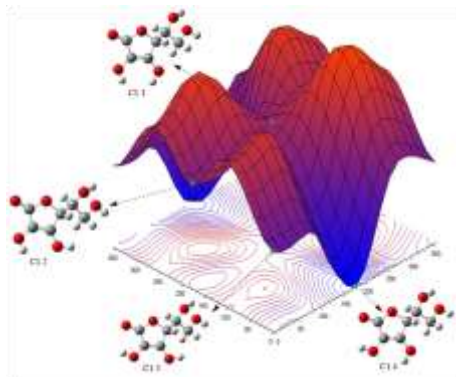


Fig. 47. Suprafața de energie potențială, reprezentată de energia totală în funcție de valorile unghiurilor diedre $a(C3-C2-O6-H7)$ și $b(C10-C1-O8-H9)$.

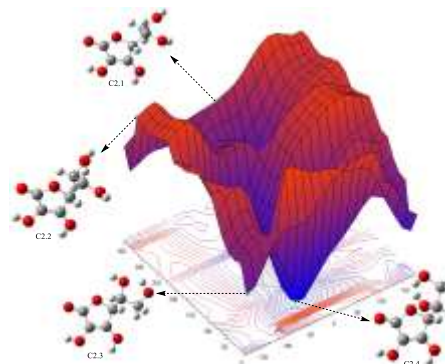


Fig. 48. Suprafața de energie potențială, reprezentată de energia totală în funcție de valorile unghiurilor diedrale $c(C14-C12-O17-H18)$ și $d(C12-C14-O19-H20)$.

A fost construită curba energetică a speciilor moleculare cu stabilitate superioară, reprezentată în Fig. 49. Analizând datele energetice, se observă că cele 6 forme conformere ale acidului ascorbic sunt mai stabile în solvenți polari, în cazul dat apa. Aceasta se datorează interacțiunilor favorabile între moleculele de apă și grupările funcționale ale acidului ascorbic, care contribuie la stabilizarea structurilor conformerilor. Aceste interacțiuni includ legături de hidrogen, care reduc energia liberă a sistemului și efectele solvătății care facilitează acomodarea diferitelor forme conformere într-un mediu apos.

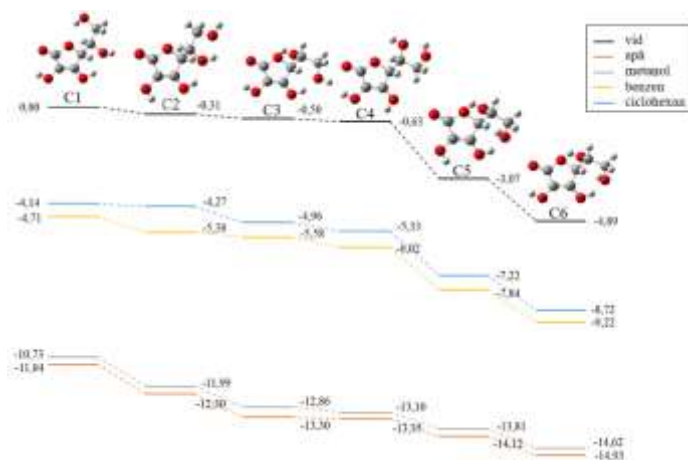


Fig. 49. Profilul energetic în kcal/mol al stabilității conformerilor acidului ascorbic în vid și în solvenți polari și nepolari.

Activitatea 3. Efecte Jahn–Teller și Pseudo Jahn–Teller în complexii Van-der-Waals de tip CH₄-OX (X=C, N, O).

A fost studiată instabilitatea configurației trigonal-piramidale C_{3v} (Fig. 50) a celor trei complexi Van-der-Waals de tip CH₄-OX (unde X = C, N, O) folosind metodele cuanto-chimice și abordarea Pseudo-Efectului Jahn-Teller, iar natura simetriei distorsionate rezultantă Cs diferă în cele trei cazuri. În configurația de referință C_{3v} sistemul CH₄-NO are un electron neîmperecheat care ocupă orbitalul molecular dublu-degenerat e activ Jahn-Teller (Fig. 51). Prin urmare, starea fundamentală a lui CH₄-NO nedistorsionat este dublet ²E. Datorită Efectului Jahn-Teller de tip E⊗e, configurația de referință C_{3v} este instabilă privitor la modul e. Sistemul molecular se distorsionează în planul xz, iar configurația nucleară se stabilizează în simetria Cs. Această distorsiune corespunde în principal unei transformări a feței frontale a lui CH₄ (triunghi roșu din Fig. 50) din echilateral într-un triunghi isoscel, însoțită de o ușoară înclinare atât a NO, cât și a CH₄. După cum se distinge de cele de mai sus, nu există niciun Efect Jahn-Teller în celelalte două cazuri - CO și O₂, care interacționează cu CH₄. În ambele cazuri, orbital molecular HOMO este completat integral cu electroni. Prin urmare, starea fundamentală multielectronică este un singlet nedegenerat care se transformă prin reprezentarea total-simetrică A₁ a grupului de simetrie de referință C_{3v}.

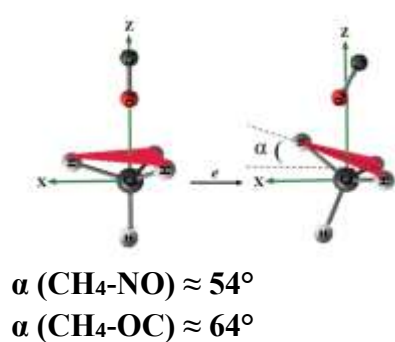


Fig. 50. Stabilizarea Jahn-Teller a configurației distorsionate a sistemelor CH₄-OX de-a lungul e-modului vibrațional.

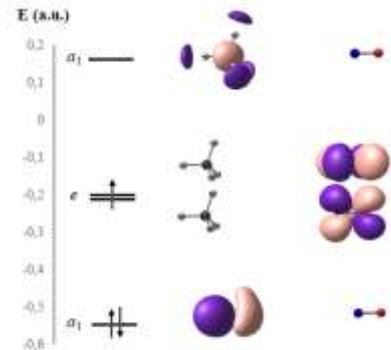


Fig. 51. OM de frontieră a CH₄-NO.

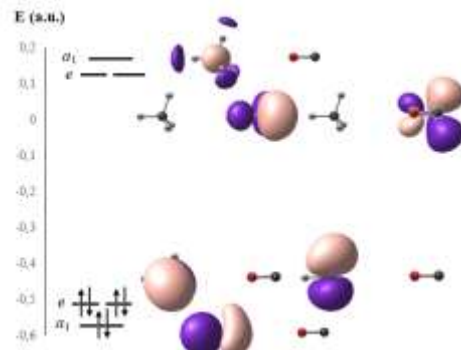


Fig. 52. OM de frontieră ale CH₄-OC.

Cu toate acestea, geometria optimizată *ab initio* a celor două sisteme moleculare este distorsionată în modul e, ca în Fig. 50. Spargerea simetriei se datorează pseudo-efectului Jahn-Teller (PEJT) puternic de tipul (A₁+E)⊗e. Secțiunea transversală în planul xz a termenilor adiabatici corespunzători este

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{1}{4}(K_{01} + K_{02})Q^2 + \frac{\Delta}{2} \mp \frac{1}{2}\sqrt{\left[\frac{1}{2}(K_{01} - K_{02})Q^2 - \Delta\right]^2 + 4F^2Q^2} \quad (1)$$

Aici Δ este decalajul de energie dintre termenii de energie A₁ și E amestecați PEJT, Q este componenta respectivă a modului vibrațional e de-a lungul planului xz, K₀₁ și K₀₂ sunt constantele forței de referință ale modului e în cei doi termeni, iar F este constanta de cuplare vibronică a PEJT. Acești parametri au fost evaluați prin potrivirea curbelor de energie potențială adiabatică calculate *ab initio* (Fig. 53) la expresia analitică (1).

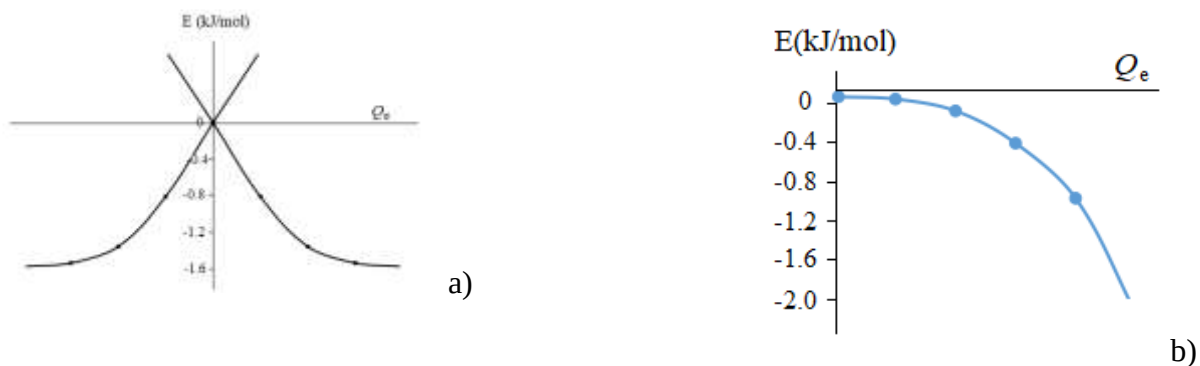


Fig. 53. Secțiuni transversale ale APES de-a lungul coordonatei Q_e pentru sistemul $\text{CH}_4\text{-NO}$ (a) și $\text{CH}_4\text{-OC}$ (b).

În cazul cu simetrie mare a spin-tripletului O_2 care interacționează cu CH_4 , calculele noastre nu au ca rezultat nicio frecvență imaginară, astfel încât acest complex, contrar celor de mai sus, nu este distorsionat.

Activitatea 4. *Optimizarea fermentației prin crearea de noi tehnici de fermentație care integrează antioxidanți naturali pentru eficientizarea proceselor.*

Studiile efectuate asupra procesului de fermentare anaerobă a biomasei reziduale din sectorul viticol au confirmat eficiența utilizării substanțelor biologice active (SBA) ca acceleratori ai procesului de fermentare cu formarea de biogaz și obținerea unor randamente ridicate (până la 87-90%) de biometan. Cele mai efective substanțe-adaosuri identificate sunt: acid dioxidofumaric, aescinum și betulină. Explicarea efectelor identificate ale SBA în procesele biochimice studiate a devenit posibilă datorită efectuării cercetărilor computaționale ale mecanismului proceselor respective. Pentru ambele tipuri de fermentație (precum, aerobă și anaerobă), prima și cea mai lentă etapă este fosforilarea carbohidraților (de exemplu, glucoza) care servesc ca materii prime în fermentarea multor substraturi vegetale. Datorită ratei celei mai scăzute a reacției de fosforilare în întregul proces de fermentație, această reacție/etapă este responsabilă pentru viteza totală a întregului proces. Ținând cont de acest fapt a fost studiată influența compușilor organici cu proprietăți antioxidante (aditivi) asupra mersului reacției de fosforilare.

Activitatea 5. *Studiul interacțiunilor antioxidante dintre compușii naturali din struguri în diferite condiții de reacție și prin diferite teste antioxidante (DPPH, ABTS, FRAP).*

Experimentele de determinare a tipului de interacțiune antioxidantă (IA) dintre acizii ascorbic (AA) și dihidroxifumaric (DHF) au fost efectuate utilizând radicalul DPPH și metoda existentă în literatura de specialitate. Datele obținute arată că, în condițiile de reacție cercetate – 98% etanol, interacțiunile sunt antagoniste și aditive, variind în intervalul 0.91 – 0.99, unde 0.91 indică efectul antagonist și 0.99 – efecte aditive. Dacă analizăm raporturile în care au fost luați cei doi antioxidanți (DHF/AA), atunci observăm că la raporturile DHF/AA de 1.5 și 1.875, a fost obținută cea mai mare activitate antioxidantă și cel mai mare efect aditiv. Pe când la raporturile DHF/AA de 2.7, 3.3 și 4 soluția formată din amestecul de antioxidanți anihilează radicalul DPPH doar în proporții de 46 – 48%, înregistrându-se și cele mai mici valori pentru interacțiunile antioxidant de 0.92 și 0.91. Rezultatele

obținute evidențiază importanța raportului dintre antioxidanții AA și DHF utilizați în reacție, subliniind relevanța studiului pentru optimizarea eficienței reducătorilor și reducerea concentrației acestora în diverse aplicații industriale.

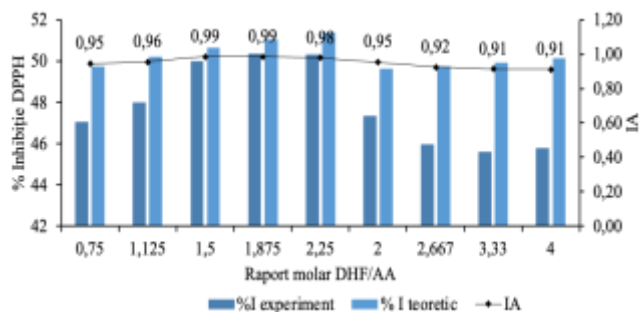


Fig. 54. Interacțiuni antioxidante dintre acizii ascorbic și dihidroxifumaric în diferite raporturi de concentrație

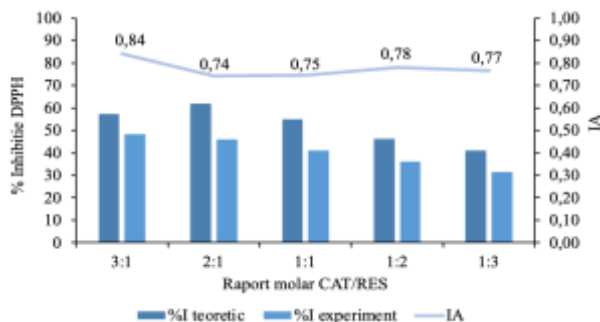


Fig. 55. Interacțiuni antioxidante dintre catehină și resveratrol în diferite raporturi de concentrație

Concluzii similare pot fi făcute în raport cu datele ilustrate în Fig. 55 privind interacțiunile dintre polifenolii naturali din struguri catehină (Cat) și resveratrol (Res). Compușii dați au fost combinați în raporturi de 3:1, 2:1, 1:1, 1:2 și 1:3, cea mai mare activitatea antioxidantă demonstrând-o proba cu Cat/Res = 3:1. Prin urmare, valoare maximă ce caracterizează interacțiunile antioxidante de 0,84, de asemenea a fost obținută pentru amestecul dat. Toate amestecurile Cat/Res s-au dovedit a fi antagoniste din cauza posibilelor reacții de oligomerizare dintre compușii dați. Totuși, se poate observa că în soluțiile cu concentrație mai mare de Cat, activitatea antioxidantă totală a amestecului crește, și invers, odată ce raportul Cat/Res descrește, se diminuează și activitatea antioxidantă. Aceste rezultate preliminare trebuie aprofundate pentru a contura o imagine mai detaliată și mai clară asupra interacțiunilor dintre antioxidanții naturali din struguri și vinuri.

Activitatea 6. *Legități cinetice de oxidare/ mineralizare a catecolului ca rezultat al aplicării proceselor de oxidare avansată omogenă.*

Degradarea catalitică a catecolului (concentrația inițială de 50 mg/L) a fost investigată în intervalul de timp 0-240 min în funcție de valoarea pH-ului (2.6 - 9.13), concentrația ionilor Fe^{2+} (0.01 – 0.5 mM), concentrația peroxidului de hidrogen (0.5 - 5 mM), radiații UV (254 și 365 nm) radiații ultrasonice și doza de dioxid de titan (0.0125 - 0.05 g/L). Studiile experimentale de oxidare omogenă și eterogenă au fost realizate utilizând soluții de catecol de 50 mg/l, variindu-se raporturile dintre reactanți $\text{H}_2\text{O}_2/\text{Fe}^{2+}$ și $\text{H}_2\text{O}_2/\text{TiO}_2$. Degradarea catecolului din soluțiile apoase prin aplicarea proceselor de oxidare avansată (AOPs) a fost estimată prin studierea cineticii procesului catalitic și fotocatalitic (vitezele de reacție ($\Delta c/\Delta t$, $\text{molL}^{-1}\text{s}^{-1}$), determinarea constantelor de viteză (k , min^{-1}), timpul de înjumătățire ($t_{1/2}$) și a mecanismelor de oxidare în funcție de diferiți parametri fizico-chimici. În baza datelor experimentale obținute la oxidarea catecolului ($C_0 = 50 \text{ mg/L}$) cu reactivul Fenton la diferite valori ale pH-ului, s-a considerat că reacția a fost de ordinul pseudo I, iar pentru fiecare valoare a pH-ului au fost calculate constanta de viteză aparentă k (min^{-1}), coeficientul de corelație R^2 și timpul de înjumătățire $t_{1/2}$ (min). La pH acid (2.6), mediul este favorabil pentru reacții

oxidative, în special în prezența radicalilor OH generați în procesele Fenton sau Foto-Fenton, însă la pH 3.2 s-a obținut cea mai mare constantă de viteză și cel mai bun coeficient de corelație R^2 , ceea ce indică o degradare eficientă și o bună conformitate cu modelul cinetic dat. La pH 9.13, concentrația catecolului crește în timp, semn că reacția nu are loc eficient sau că are loc un proces secundar (ex. desorbție, interferențe analitice). Timpul optim de reacție se încadrează în jurul valorii de 240 min, unde se observă conversia cea mai mare a catecolului, dar se poate optimiza și în funcție de randament/eficiență energetică. Influența concentrației ionilor Fe^{2+} asupra procesului de oxidare avansată a catecolului prin metoda Fenton și Fenton asistată de raza UV este esențială pentru eficiența reacției, deoarece ionii Fe^{2+} sunt catalizatorul principal în generarea radicalilor OH, care sunt specii oxidante responsabile de degradare a catecolului.

Oxidarea catecolului din soluții apoase în prezență de dioxid de titan.

S-a studiat efectul pH-ului asupra procesului de adsorbție a catecolului pe dioxid de titan. Este cunoscut că pH-ul unei soluții are o influență semnificativă asupra echilibrului substratului (determinate de valorile pK_a) și asupra diferitelor sarcini prezente pe suprafața adsorbantului. Aceste sarcini pot fi pozitive, neutre sau negative. La pH peste pK_a , substratul este încărcat negativ, iar sub pK_a , substratul este încărcat neutru. Pentru catecol, valorile pK_a sunt 9.5 și respectiv 9.96. Efectul pH-ului asupra adsorbției catecolului de către dioxid de titan a fost studiat la diferite valori ale pH-ului în intervalul 4-12. În cadrul studiului experimental s-a investigat oxidarea fotocatalitică a catecolului (concentrație inițială 50 mg/L) utilizând dioxid de titan (TiO_2 , particule ≈ 100 nm). Experimentele au fost grupate în două serii: prima a variat pH-ul reacției în intervalul 4-12 (dozaj TiO_2 menținut la 0.025 g/L), iar a doua a variat dozajul TiO_2 între 0.0125 și 0.05 g/L la pH (≈ 4.5). Iradierea s-a realizat cu surse UV la $\lambda = 254$ nm și $\lambda = 365$ nm; timpul de expunere pentru toate probele a fost 60 min. Rezultatele au arătat că eficiența degradării catecolului a depins în mod clar de pH și de dozajul fotocatalizatorului. Conversia maximă s-a înregistrat în jurul pH 4-6, unde pentru $\lambda = 254$ nm conversia a atins valori între 53-56 % și reducerea CCO a fost 42-44 %. La pH spre neutru (pH 6-8) și la pH foarte alcalin (pH 12) performanța a scăzut semnificativ, ceea ce a fost atribuit fie schimbării speciei ionizate a catecolului, fie modificării interacțiunii suprafață/mixtură cu TiO_2 . Diferența între cele două lungimi de undă a fost constantă: $\lambda = 254$ nm a furnizat, în general, rate de conversie mai mari cu aproximativ 4-6 pp comparativ cu $\lambda = 365$ nm, ceea ce sugerează o absorbție și generare de perechi e^-/h^+ mai eficiente pentru condițiile experimentale folosite.

Etapa 2.5.

Activitatea 1. *Evaluarea impactului proceselor de oxidare și fotoliză ale vitaminei B₂ asupra proprietăților redox ale mediului acvatic.*

Reieșind din abundența naturală a acesteia și din numeroasele surse antropice (alimente, preparate farmaceutice, cosmetice ș.a.) vitamina B₂ a fost selectată ca obiect de studiu în calitate de potențial poluant în procesele de autopurificare a apelor naturale. În perioada de referință au fost determinate legăturile cinetice de transformare redox și fotochimică ale vitaminei B₂ (riboflavina) și confirmate mecanismele chimice ipotetice de transformare ale acesteia în sisteme apoase. Pentru a determina

concentrația vitaminei B₂ în regim cinetic, s-a folosit metoda spectrofotometrică directă. Soluția de vitamina B₂ prezintă patru maxime de absorbție la lungimile de undă de 223 nm, 267 nm, 373 nm și 444 nm. Pentru determinarea concentrației s-a folosit lungimea de undă 444 nm, deoarece este singurul maxim de absorbție din domeniul Vis responsabil de culoarea soluției de vitamină. A fost cercetată stabilitatea soluției în intervalul de pH tipic apelor naturale. Astfel, valorile absorbanței înregistrate la toate lungimile de undă la 4 valori ale pH-ului în intervalul 6 - 9 indică că acestea scad în medie de 1.4 ori, respectiv curba de calibrare poate fi construită inclusiv utilizând maximul de absorbție 444 nm. După valoarea de pH de 9.7, această legitate nu mai este valabilă din cauza că în soluție va domina forma disociată a vitaminei, pentru care maximul de absorbție nu mai este reprezentativ.

Legitățile cinetice de transformare redox și fotochimică a vitaminei B₂ în soluții apoase au fost studiate prin modelarea următoarelor sisteme: B₂ – O₂ // B₂ – Cu(II) – O₂ // B₂ – H₂O₂ – O₂ // B₂ – H₂O₂ – Cu(II) – O₂, unde: B₂ – substratul reducător analizat, O₂ – oxigenul dizolvat în sistemul model, Cu (II) – ionii de Cu²⁺ din CuSO₄. În fiecare dintre sistemele modelate, consecutiv, a fost variată concentrația unei componente, celelalte fiind menținute constante, astfel au fost realizate 80 experimente, cu și fără iradiere. Ținând cont că în compoziția apelor naturale sunt prezenți ionii metalelor de tranziție, în special ionii de Cu(II) în forma omogenă, aceștia au fost adăugați în al doilea sistem modelat conform concentrațiilor tipice în apele naturale. Rezultatele indică că atât la variația concentrației vitaminei în sistem, cât și la variația conținutului ionilor de Cu(II), concentrația vitaminei nu suferă schimbări. Prin urmare, în prezența ionilor metalelor de tranziție, vitamina B₂ este stabilă și nu se descompune. Rezultatele studiului cinetic în sistemele unde a fost adăugat peroxid de hidrogen, principala formă activă a oxigenului dizolvat în apele naturale, de asemenea indică despre o stabilitate înaltă a vitaminei în soluție. Prezența concomitentă a H₂O₂ și a ionilor de Cu(II), la valorile tipice apelor naturale, la fel nu a descompus vitamina B₂.

Aceleași sisteme modelate au fost supuse fotolizei, utilizând în calitate de sursă de iradiere lampa policromatică DRT-400, ce emite radiația în domeniile UV și Vis. Din punct de vedere a proceselor de autopurificare în apele naturale, fotoliza vitaminei prezintă un aport suplimentar de radicali liberi, necesari pentru oxidarea poluanților de diferită natură. Din aceste considerente studiul cinetic al fotolizei vitaminei în condițiile similare mediului natural furnizează informație importantă privind impactul acesteia asupra proceselor de autopurificare și stării redox a apelor. Datele experimentale confirmă că vitamina B₂ se supune fotolizei. Conform valorilor constantei de viteză de ordinul 1, cu cea mai mare intensitate decurge fotoliza directă $(1.57 \pm 0.12) \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$. Valoarea constantei în sistemele în care au fost adăugați ionii de Cu(II) este cea mai mică, ce indică indirect că aceștia nu formează compuși complecși cu vitamina B₂ ce ar mări reactivitatea ei. Valorile practic egale în primele două sisteme sugerează despre faptul că vitamina nu consumă peroxidul de hidrogen la fotoliză.

Activitatea 2. Participarea vitaminei B₆ în procese de autopurificare chimică a sistemelor acvatice.

Pentru a studia cinetica proceselor de transformare a vitaminei B₆ în soluții apoase, în sisteme model, s-a utilizat metoda spectrofotometrică directă, utilizând soluție tampon fosfat la pH 7. Pentru a determina concentrațiile substratului densitatea optică a soluției a fost măsurată la 328 nm. În condiții

de laborator, au fost modelate următoarele sisteme redox: Vitamina B₆ - H₂O_{dist.}- O₂ (1); Vitamina B₆ - H₂O_{dist.}- O₂ - Cu(II) (2); Vitamina B₆ - H₂O_{dist.} - O₂ - H₂O₂ (3); Vitamina B₆ - H₂O_{dist.}- O₂ - H₂O₂ - Cu(II) (4). Toate sistemele au fost investigate în condiții aerobe, cu oxigen dizolvat prezent ca oxidant important în mediul acvatic. Un alt oxidant, H₂O₂ prezent în apele naturale, a fost adăugat la sistemele model (3) și (4). Adăugarea compușilor de cupru în sistemele (2) și (3) este justificată de prezența lor în condiții naturale și de importanța catalitică a ionilor de Cu(II) în transformarea chimică a poluanților. Regularitățile cinetice au fost studiate pentru fiecare dintre sistemele modelate, variind succesiv concentrația unei componente, menținând în același timp celelalte constante. Ca rezultat, au fost determinate ordinele de reacție parțiale, au fost derivate expresii pentru calcularea vitezelor de reacție și au fost calculate constantele de viteză efectivă și valorile timpului de înjumătățire al substratului. Concentrațiile componentelor din sistemele modelate au fost alese pentru a reflecta condițiile naturale: peroxid de hidrogen la aproximativ 10⁻⁵ M, ioni de Cu(II) la 10⁻⁶ M și vitamina B₆ la 10⁻⁵ M pentru a asigura valori optime ale densității optice.

Întrucât prezenta oxigenului dizolvat în apele de suprafață este constantă, este necesar de studiat interacțiunea sa cu vitamina B₆ în soluții apoase. În timpul experimentelor, conținutul de oxigen dizolvat în sistem a fost de 3.0·10⁻⁴ M. Pentru a studia oxidarea vitaminei B₆ de către oxigenul dizolvat, au fost modelate 5 subsisteme în care concentrația inițială a vitaminei a variat în intervalul de la 1.0·10⁻⁵ M la 5.0·10⁻⁵ M, în timp ce conținutul de oxigen dizolvat a fost constant și a corespuns concentrației sale la saturare la o temperatură de 20 °C (cca 3.0·10⁻⁴ M). Analizând datele cinetice obținute, am ajuns la concluzia că vitamina B₆ este dificil de oxidat cu oxigen dizolvat, deoarece s-a observat o ușoară scădere a concentrațiilor de vitamine în timp și s-au obținut și viteze de reacție scăzute ($W_{300} = 10^{-10}$ M/s). Cel mai eficient proces de oxidare a vitaminei B₆ este oxidarea catalitică cu oxigen dizolvat în apă, care are cea mai mare constantă efectivă (5.31·10⁻⁵ s⁻¹) și cel mai mic timp de înjumătățire (3 h 37 min 33 s); cel mai slab proces de oxidare este cu peroxidul de hidrogen, timpul de înjumătățire fiind de 5 h 25 min 25 s. Când ionii de cupru sunt adăugați în sistemul B₆-H₂O₂, rata proceselor crește semnificativ, ceea ce confirmă rolul catalitic al ionilor de cupru în apele de suprafață.

Activitatea 3. *Studiul comparativ al vitaminelor B₉ și B₁₂ în procesele de autopurificare radicalică a sistemelor acvatice.*

Cercetarea a avut ca scop compararea comportamentului vitaminelor B₉ (acid folic) și B₁₂ (cianocobalamină) în procesele de autopurificare a sistemelor acvatice, analizate prin parametri cinetici precum capacitatea de inhibiție ($\sum k_{iOH}[S_{iOH}]$) și concentrația staționară a radicalilor hidroxil (·OH). Experimentele s-au realizat pe sisteme model în prezența peroxidului de hidrogen și a radiației (UV-Vis), cu sau fără catalizator Cu(II). Rezultatele obținute arată că la concentrații 0.5-5.0·10⁻⁶ M, în prezența vitaminelor B₉ și B₁₂, după parametrii capacitatea de inhibiție și concentrația radicalilor ·OH, sistemele acvatice se clasifică ca ape poluate și foarte poluate. Ceea ce indică că vitaminele date, fiind puternic reducătoare, conduc la consumul activ a radicalilor ·OH în procesele de oxido-reducere. Dar, totodată, rezultatele obținute arată clar că creșterea concentrației vitaminei B₁₂ în sistem determină o scădere treptată a valorilor capacității de inhibiție, menținându-se în același ordin de mărime (10⁶ s⁻¹). În mod similar, vitamina B₉ prezintă o tendință descendentă și mai accentuată a acestui parametru, evidențiind un comportament redox pronunțat.

Vitamina B₉ s-a dovedit a fi mult mai reactivă din punct de vedere redox decât vitamina B₁₂, datorită grupărilor sale funcționale (amino, carboxil, pteridină), care facilitează formarea de intermediari activi și propagă reacții radicalice în lanț. Creșterea concentrației vitaminei B₉ duce la o scădere rapidă a capacității de inhibiție și o creștere semnificativă a concentrației radicalilor ·OH (până la $5.00 \cdot 10^{-17}$ M), ceea ce evidențiază o contribuție puternică la regenerarea speciilor reactive și la intensificarea proceselor de autopurificare.

În contrast, vitamina B₁₂ are o structură mai complexă, cu un nucleu metalic Co³⁺/Co²⁺, implicat în reacții de transfer de electroni mai lente. Deși și ea determină scăderea capacității de inhibiție și creșterea concentrației radicalilor ·OH, aceste modificări sunt moderate (maxim până la $6.69 \cdot 10^{-18}$ M), indicând o contribuție mai redusă, dar constantă, la autopurificare.

Prezența ionilor Cu(II) amplifică aceste efecte. Ionii de Cu(II) catalizează formarea radicalilor ·OH din peroxidul de hidrogen sub influența radiației. Ca rezultat a cercetărilor s-a stabilit că vitaminele studiate nu formează complecși inhibitori cu ionii de Cu(II), menținându-se astfel activitatea catalitică a acestora. În acest context, vitamina B₉ determină o scădere a capacității de inhibiție cu două ordine și o creștere accentuată a concentrației ·OH (până la $5.64 \cdot 10^{-16}$ M), ceea ce clasifică apele ca fiind de calitate bună. Iar în prezența vitaminei B₁₂, după parametrii capacitatea de inhibiție și concentrația radicalilor OH, apele se clasifică ca poluate sau foarte poluate.

Activitatea 4. *Influența vitaminelor din grupul B asupra parametrilor hidrochimici, cinetici și proceselor de autopurificare chimică a apelor naturale.*

În cadrul acestei cercetări s-a urmărit de a stabili concentrația/concentrațiile de vitamina B₆ care pot fi transformate de sistemul de autopurificare a sistemelor acvatice naturale lentice, lacurile Dănceni și Ghidighici și a înlătura fenomenul de poluare produs de aceasta. Modelările au fost realizate pe modele simplificate ale ecosistemelor menținute în ambianță de laborator, sisteme de tip microcosm (acvarii cu apă naturală). Procesul de poluare a fost modelat cu adăugarea în acvarii a cantităților de vitamină B₆, obținându-se concentrații de poluant în limitele $0.8 - 2.0 \cdot 10^{-4}$ M. Procesele de poluare și autopurificare au fost evaluate cu indicatorii: pH-ul, oxidabilitatea permanganatometrică (CCO_{Mn}), gradul de saturație cu oxigen dizolvat (OD, mg O₂/L) și capacitatea de inhibiție (Sk_i[S_i], s⁻¹). Valorile obținute au fost comparate cu cele ale referinței – apă de lac fără poluare indusă.

Măsurările preliminare au indicat că apele lacurilor conțineau încărcături de substanțe ce le depășeau pe cele stabilite ca norme și la o capacitate de autopurificare scăzută susținută de radicalii ·OH. Regimul de oxigen era de la bun (Dănceni) până la satisfăcător (Ghidighici), valoarea pH-lui era de circa 8.5-9.0 unități. Aceeași indicatori au semnalat că după accederea vitaminei fenomenul de poluare s-a accentuat.

Activitatea 5. *Monitoringul hidrochimic al apelor de suprafață din bazinul hidrografic al Nistrului în perioada de primăvară a anului 2025. Monitorizarea calității apelor de suprafață din bazinul fluviului Nistru prin determinarea conținutului de tioli.*

Pentru a evalua compoziția chimică și starea apelor de suprafață din bazinul hidrografic al Nistrului, în luna aprilie a fost organizată expediția hidrochimică cu prelevarea probelor complexe de apă din

bazinul hidrografic al Nistrului. În total au fost prelevate 7 probe de apă din Nistru, afluenții săi Răut, Ichel, precum și din lacurile de acumulare Ghidighici și Dănceni. Pentru a evalua compoziția chimică, gradul de poluare și capacitatea de autopurificare a apelor din bazinul fluviului Nistru, a fost monitorizată porțiunea fluviului de la amonte de vărsare în el a r. Răut (priza de captare – aval barajului de la Dubăsari) – aval de vărsare în Nistru a r. Ichel (or. Vadul lui Vodă). Pentru a evalua influența afluenților asupra compoziției chimice a apelor din fluviul Nistru, au fost prelevate probe din secțiunile de vărsare a r. Răut și Ichel în fluviu. În total, pe parcursul realizării proiectului, au fost alese 7 prize de captare:

- Priza nr. 1. – Nistru, barajul de la Dubăsari, amonte de vărsare a r. Răut;
- Priza nr. 2. – Răut, gura de vărsare în Nistru, s. Ustia;
- Priza nr. 3. – Nistru, or. Criuleni, aval de vărsare a r. Răut, amonte de vărsare a r. Ichel;
- Priza nr. 4. – Ichel, regiunea de vărsare în Nistru;
- Priza nr. 5. – Nistru, Vadul lui Vodă, aval de vărsare a r. Ichel;
- Priza nr. 6 – lacul Ghidighici;
- Priza nr. 7 – lacul Dănceni.

Au fost efectuate determinările hidrochimice clasice în câmp, conservarea probelor și apoi analiza acestora în laborator. În condițiile pe teren au fost determinate dinamica diurnă a valorilor temperaturii, pH-ului, Eh-ului, schimbării conținutului de oxigen dizolvat. În toate probe de apă prelevate au fost determinați parametri hidrochimici tradiționali și parametri ce indică poluarea apelor cu substanțe organice dizolvate. În toate probe de apă a fost determinat conținutul de compuși tiolici. Au fost obținute următoarele rezultate (Tab. 2):

Tabelul 2. Conținutul compușilor tiolici în probele de apă nefiltrate și filtrate în obiectele acvatice cercetate

Sursa	11.04.2025		02.07.2025	
	[-SH], M (apa nefiltrată)	[-SH], M (apa filtrată)	[-SH], M (apa nefiltrată)	[-SH], M (apa filtrată)
fluviul Nistru, barajul Dubăsari	$1.42 \cdot 10^{-6}$	$1.37 \cdot 10^{-6}$	$1.52 \cdot 10^{-6}$	$1.52 \cdot 10^{-6}$
râul Răut	$1.48 \cdot 10^{-6}$	$1.48 \cdot 10^{-6}$	$2.32 \cdot 10^{-6}$	$2.02 \cdot 10^{-6}$
fluviul Nistru, or. Criuleni	$1.54 \cdot 10^{-6}$	$1.34 \cdot 10^{-6}$	$1.62 \cdot 10^{-6}$	$1.62 \cdot 10^{-6}$
râul Ichel	$1.46 \cdot 10^{-6}$	$1.42 \cdot 10^{-6}$	$1.31 \cdot 10^{-6}$	$1.31 \cdot 10^{-6}$
fluviul Nistru, or. Vadul lui Vodă	$2.00 \cdot 10^{-6}$	$1.37 \cdot 10^{-6}$	$1.52 \cdot 10^{-6}$	$1.31 \cdot 10^{-6}$
lacul Ghidighici	$1.99 \cdot 10^{-6}$	$1.40 \cdot 10^{-6}$	$2.32 \cdot 10^{-6}$	$2.32 \cdot 10^{-6}$
lacul Dănceni	$1.31 \cdot 10^{-6}$	$1.31 \cdot 10^{-6}$	$3.44 \cdot 10^{-6}$	$2.12 \cdot 10^{-6}$

Datele experimentale obținute sunt tipice pentru aceste perioade ale anului, încadrându-se în limita ordinului 10^{-6} M.

4. Rezultatele obținute

Etapa 2.1.

Activitatea 1. A fost elaborată o metodă de obținere a unui nou compozit compus din polimer reticulat, compuși ai Cr (III) și a unui ligand. A fost efectuată cercetarea compozitului obținut cu utilizarea metodelor fizico-chimice de cercetare. S-a stabilit că în compozit la reținere ionii NCS^- formează legături Cr-NCS. Atomul S din fragmentul Cr-NCS are o afinitate sporită pentru cationii metalelor grele. Astfel compozitul Cr-polimer încărcat cu ioni NCS^- devine sorbent pentru reținerea selectivă a ionilor metalelor grele. Următoarea experiență confirmă acest lucru. Prin filtru pentru proba de compozit care a reținut ioni NCS^- a fost filtrată soluție de $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$ care conținea exces de NaNO_3 . Proba a fost cercetată cu utilizarea spectroscopiei FT-IR. Banda de absorbție la 2106 cm^{-1} (spectrul 3, Fig.10) aparține ionilor NCS^- care sunt punte în Cr-NCS-Hg. Astfel se demonstrează că compozitul modificat cu ioni NCS^- devine un sorbent nou capabil să rețină cationi ai metalelor grele din soluții.

Activitatea 2. Au fost studiate procesele de oxidare/eliminare a ionilor de Fe^{2+} și Mn^{2+} din ape model prin aerare și utilizare a compozitelor carbonice. A fost perfectată metoda de determinare a ionilor de Fe(II) în ape naturale. A fost construită curba de etalonare pentru a determina concentrația necunoscută de ioni Fe^{2+} într-o probă. A fost stabilit că procesul de eliminare/oxidare a ionilor de Fe^{2+} cuprinde două etape fundamentale: *adsorbția Fe^{2+} pe suprafața cărbunelui și oxidarea catalitică a Fe^{2+}* . Prin contact cu oxigen dizolvat sau alți oxidanți (ex. H_2O_2 , KMnO_4) are loc oxidarea la Fe^{3+} când cărbunele este dopat cu metale tranziționale (ex. Mn, Cu, Co), acestea acționează ca centre catalitice redox și se formează $\text{Fe}(\text{OH})_3$ precipitat, care poate fi reținut de suprafața cărbunelui sau îndepărtat prin filtrare.

A fost dovedit că compozitele carbonice cercetate manifestă o activitatea catalitică pronunțată. În șirul descreșterii activității catalitice probele cu conținut de Mn sunt situate în ordinea: $\text{ACCN-Mn4} > \text{ACCN-Mn1} > \text{ACCN-Mn2} > \text{ACCN-Mn3}$. În raport cu proba de referință Centaur, activitatea catalitică a mostrelor ACCN-Mn1 și ACCN-Mn4 este notabil superioară, practic dublă (ACCN-Mn1)/triplă (ACCN-Mn4), respectiv aceste compozite prezintă un interes deosebit pentru cercetările ulterioare. Compozitele ACCN-Fe1, ACCN-Fe2 și ACCN-Fe3 au înregistrat valori ale activității catalitice practic de același ordin și cu 20-25% mai mari față de cărbunele Centaur. În procesul de eliminare a coloranților Congo Roșu, Albastru de Metilen și Murexid, activitatea catalitică a compozitului ACCN-Fe1 este notabil mai pronunțată față de cea a probei de referință - cărbunele Centaur.

Activitatea 3. Studiind probele prelevate din comuna Boșcana a fost determinată o cantitate sporită de **sulfati** în 4 din cele 6 probe analizate (în 3 fântâni de mină și în 1 din fântânile arteziene), cea mai mare valoare a fost depistată în proba prelevată din sonda arteziană particulară (762,9 mg/L), ceea ce întrece valoarea CMA de 3,50 ori. **Duritatea totală** de asemenea întrece CMA în 4 din 6 probe analizate (în 3 fântâni de mină și în 1 din fântânile arteziene), cea mai mare valoare a fost depistată în proba prelevată din 2 fântâni de mină ($25,3\text{ mol/m}^3$), ceea ce întrece valoarea CMA de 3,61 ori. **Amoniacul și ionii de amoniu** întrece valoarea CMA în 3 din cele 6 probe analizate, cea mai mare valoare a fost depistată în proba prelevată dintr-o fântână de mină (4,98 mg/L), ceea ce întrece valoarea CMA de 9,96 ori. **Reziduul uscat** întrece valoarea CMA în 3 din cele 6 probe analizate, cea mai mare valoare a fost depistată în proba prelevată dintr-o fântână de mină (2471,2 mg/L), ceea ce

întrece valoarea CMA de 1,65 ori. Conform normelor concentrației maximal admisibile (CMA), nivelul ionului **nitrat** nu se încadrează în aceste norme, în 2 din 6 probe analizate, valoarea cea mai mare (186,9 mg/L), ceea ce întrece valoarea CMA de 3,74 ori. **Hidrogenul sulfurat și sulf** întrec valoarea CMA în 2 din cele 6 probe analizate, cea mai mare valoare a fost depistată în proba prelevată dintr-o fântână de mină și sonda arteziană particulară (0,88 mg/L), ceea ce întrece valoarea CMA de 1,76 ori. **Sodiu** întrece valoarea CMA în 2 din cele 6 probe analizate, cea mai mare valoare a fost depistată în proba prelevată dintr-o fântână de mină (264,3 mg/L), ceea ce întrece valoarea CMA de 1,32 ori. **Fierul** total întrece valoarea CMA doar în una din probe din cele 6 mostre analizate, cea mai mare valoare a fost depistată în proba prelevată din sonda arteziană particulară (1,35 mg/L), ceea ce întrece valoarea CMA de 6,75 ori. Parametrii fizico-chimici care nu depășesc CMA pentru toate 6 probe analizate sunt următorii: nitriți, cloruri, fluoruri, indicele de hidrogen și oxidabilitatea permanganată.

Etapa 2.2.

Compoziția izotopilor stabili $\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$ a apei din precipitații are un caracter similar la Linia Globală Meteorică a Apei (Global Meteoric Water Line, GMWL). Parametrii ecuației de regresie între izotopii stabili ai $\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$ ale acviferelor superioare neacoperite din zona de aerare sunt similari pentru apele subterane ale diferitelor corpuri de apă. Efectul de evaporare este stabilit pentru aceste acvifere ca rezultatul proceselor complexe de mișcare apelor subterane în zona de aerare. Acviferele adânci au o compoziție izotopică mai ușoară și o regularitate apropiată în raportul dintre izotopii stabili ai $\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$ și GMWL, ceea ce demonstrează o vârstă mai înaintată a reîncărcării apelor subterane, posibil de la ultima eră glaciară. Relația dintre izotopilor stabili $\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$ pentru apa de suprafață din râurile Prut și Nistru la stațiile GNIR a arătat o apropiere a parametrilor ecuației de regresie pentru trei stații: Șireuți și Cahul la râul Prut și Calarașovca la râul Nistru. Aceasta poate fi utilizată ca linie locală de evaporare (Local Evaporation Line, LEL). Relația dintre izotopii stabili $\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$ la stația Talmaz a arătat impactul evaporării mai intens din cauza prezenței lacului de acumulare Dubăsari și caracteristicilor regimului hidrologic în zona de jos a râului Nistru. Raportul izotopilor stabili $\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$ pentru apa de suprafață din râuri Prut și Nistru este aproape la raportul aceasta pentru apele subterane din zona de aerare. Acest fapt demonstrează relația bună între apele de suprafață și apele subterane. Există două procese de migrare a apelor subterane și interacțiune cu apele de suprafață: Primul - deversarea apelor subterane în văile râurilor; al doilea - alimentarea cu apă subterană din valea râului Nistru printr-un sistem de falii și cavități carstice.

Etapa 2.3.

Activitatea 1. Analiza studiului epurării apelor uzate în Republica Moldova evidențiază problemele infrastructurale și provocările legate de deficitul de apă, mai ales în sudul țării unde sunt funcționale numai 3 stații. Deși există 272 de stații de epurare, majoritatea nu funcționează deloc sau insuficient. Doar 9 SEB respectă specificațiile de proiect pentru tratamentul biologic și numai 2 își îndeplinesc funcția de eliminare a substanțelor biogene. S-a confirmat că, reducerea consumului de apă și

modificarea raportului dintre apele "gri" și "negre" conduc la o creștere semnificativă a concentrației de poluanți în apele uzate. Această schimbare influențează eficiența sistemelor convenționale de epurare ce sunt în majoritate aplicate în Moldova, impune necesitatea unor cercetări aprofundate privind optimizarea și implementarea tehnologiilor avansate de epurare, capabile să asigure o eliminare eficientă a substanțelor biogene și să răspundă noilor cerințe de gestionare a apelor uzate.

Activitatea 2. Pentru a obține o precipitare semnificativă a struvitului, ar fi necesară o adăugare considerabilă atât de Mg^{2+} , cât și de NH_4^+ în sistem, reducând potențialul de sustenabilitate economică a procesului. Analiza noastră a indicat că pH-ul optim pentru precipitarea struvitului s-a încadrat în intervalul 9.0 – 9.5, iar pentru valori ale pH-ului care depășesc 9.5, probabilitatea precipitării struvitului în comparație cu alte săruri a fost considerabil redusă. Pe baza calculelor noastre, reiese că adăugarea de Mg^{2+} într-un raport molar mai mic în comparație cu P nu induce precipitarea struvitului. În același timp, aceasta poate duce la formarea altor faze solide, care conțin ioni de magneziu și fosfați. Diagramele de distribuție ale struvitului $MgNH_4PO_4 \cdot 6H_2O$ în prezența și absența Ca^{2+} s-au dovedit a fi foarte ilustrative (Fig. 56). Diagrama din Fig. 57 exemplifică direct dependența concentrațiilor speciilor de magneziu solubile și insolubile de concentrația totală de ioni de calciu în sistemul bifazic analizat.

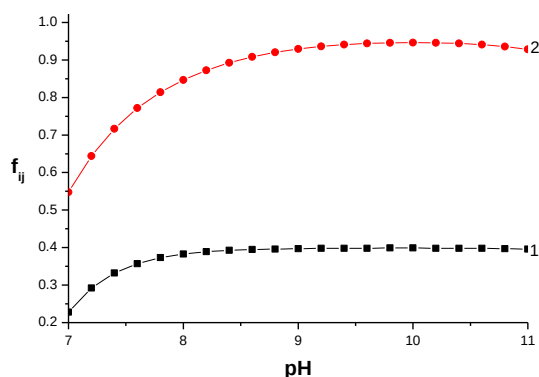


Fig. 56. Diagrama de distribuție al struvitului $MgNH_4PO_4 \cdot 6H_2O$:

1. în prezența Ca^{2+} ;

2. În absența Ca^{2+} .

C_i , mol L^{-1} : $C^0(Mg^{2+}) = C^0(NH_4^+) = C^0(PO_4^{3-}) = C^0(Ca^{2+}) = 1 \cdot 10^{-2}$.

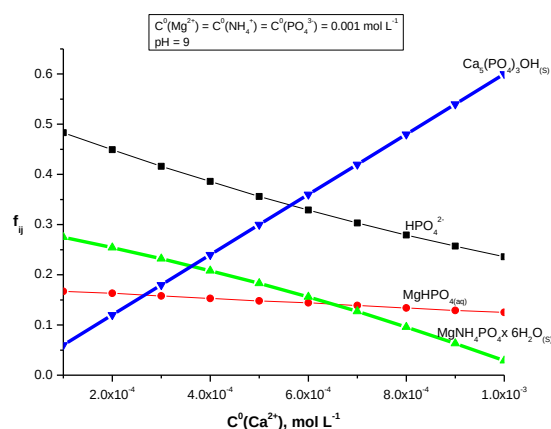


Fig. 57. Diagrama de distribuție ce conține 2 specii insolubile: **struvit** și **hidroxiapatitei** în funcție de $C^0(Ca^{2+})$.

C_i , mol L^{-1} : $C^0(Mg^{2+}) = C^0(NH_3) = C^0(PO_4^{3-}) = 1 \cdot 10^{-3}$, pH = 9.00

Activitatea 3. Eliminarea chimică a fosforului prin dozare de clorură ferică este un proces eficient, stabil și ușor de controlat operațional, care poate aduce eficiențe de peste 80% la doze moderate (Fe/P = 2–2.5). Impactul secundar favorabil al procesului constă în reducerea consumului chimic de oxigen (CCO_{Cr}) cu 40–45% și în diminuarea emisiilor odorante provenite din compuşii sulfurici ai nămolului, ca urmare a reacțiilor de precipitare a sulfurilor de fier. Totuși, aplicarea acestui tratament într-un sistem biologic complex de eliminare a azotului este limitată, deoarece consumul suplimentar de materie organică de către ionii Fe^{3+} reduce disponibilul de carbon necesar pentru procesul de pre-denitrificare.

Consumul teoretic de clorură ferică pentru raportul $\text{Fe/P} = 2.0$ a fost calculat la aproximativ 10.81 mg FeCl_3 per mg P eliminat. Pentru o apă cu 5 mg/L fosfor, rezultă o doză de aproximativ 52.5 mg/L FeCl_3 , respectiv 52.5 g/m³ apă tratată. La un preț mediu al clorurii ferice lichide de 0.55 EUR/kg, pentru un debit zilnic de 1300 m³/zi, costul zilnic este de aproximativ 37.6 EUR, iar costul lunar (30 zile) este de aproximativ 1128 EUR. Dacă se crește doza la $\text{Fe/P} = 3.0$, costul crește cu 50% (aprox. 56 EUR/zi), fără o îmbunătățire proporțională a eficienței, ceea ce face economic nerentabilă utilizarea dozelor peste raportul $\text{Fe/P} = 2.5$. Prin urmare, raportul $\text{Fe/P} = 2.0$ – 2.5 este optim nu doar din punct de vedere tehnologic, ci și economic, asigurând cel mai bun raport între costul reactivului și eficiența de îndepărtare a fosforului.

Activitatea 4. Regimurile industriale de diminuare a mirosurilor pestilențiale cu FeCl_3 și deshidratare a sistemelor disperse au efect esențial în ambele proceduri de prelucrare industrială a reziduurilor solide de la SEB Chișinău. În urma experiențelor au fost găsite marjele de operare tehnologică cu un efect bun de procesare industrială a acestora prin:

- Schimbarea regimurilor de centrifugare 60%, 70% și 80% din turațiile maxime;
- Tratarea cu soluție de floclant cu diluția 0.14%, 0.12% și 0.10% pentru atinge eficiență maximă de floclare.

Alegerea regimului de lucru și a parametrilor tehnici în exploatarea sistemului (centrifugii) de tratare a reziduurilor solide de la SEBM Chișinău este la discreția utilizatorului.

Etapa 2.4.

Activitatea 1. În baza analizei structurii electronice a interacțiunii carnitinei cu acizii alimentari s-a determinat dependența activității antioxidante a acestor perechi LI de sarcina transferată și de momentul dipol: cu cât momentul dipol este mai mare cu atât perechea LI este mai activă. Rezultatele obținute permit sinteza ținută a unor noi compuși cu proprietăți antioxidante pentru industria alimentară și vinicolă din Republica Moldova. Rezultatele pot fi utilizate și pentru căutarea și sinteza de noi medicamente cu proprietăți analgezice și antipiretice.

Activitatea 2. Studiul teoretic al structurilor geometrice ale conformerilor acidului ascorbic a demonstrat influența semnificativă a rotației grupelor hidroxilice de pe inelul furanic și lanțul lateral asupra stabilității energetice și proprietăților acidului ascorbic. Analiza suprafeței de energie potențială a permis identificarea celor mai stabile conformații la fiecare dintre cele trei etape de investigare, evidențiind o evoluție clară a stabilității conformaționale. Dintre cele 1163 de conformații evaluate, C1.4, C2.3 și C3.3 au prezentat cele mai scăzute valori energetice în fiecare etapă, C3.3 fiind cel mai stabil conformer la finalul analizei. Această tendință sugerează o preferință energetică crescută pentru anumite aranjamente specifice ale grupelor hidroxilice, ceea ce poate avea implicații în reactivitatea și interacțiunile moleculare ale acidului ascorbic. Solvenții ca mediu de reacție joacă un rol esențial în chimie, influențând în mod direct stabilitatea moleculară și comportamentul compușilor în reacțiile chimice. Prin interacțiunea lor cu moleculele solvate, solvenții pot modifica conformațiile, energia și reactivitatea chimică. Studiul efectului solvenților asupra stabilității moleculare permite o înțelegere mai profundă a fenomenelor de polaritate, solubilitate și interacțiuni intermoleculare.

Activitatea 4. A fost demonstrat prin calcule computaționale că mecanismul proceselor de fermentare atât aerobe cât și anaerobe este influențat de prezența unor substanțe biologice active, precum acid dihidroxifumaric DHFA. Accelerarea fermentării biomasei în prezența DHFA este legată cu o creștere a numărului de complexe $[MgATP_{an}]^{2-}$ capabile să atingă centrul activ al enzimei hexokinaze fără scindarea grupărilor lor fosforil în timpul procesului de difuzie și să participe la procesul ulterior de fosforilare a glucozei. Fragmentul structural al acidului dihidroxifumaric inclus în complexul $[MgATP_{an} \& DHFA]^{2-}$ reduce semnificativ labilitatea grupării fosforil a atomului P_3 și, de asemenea, îi protejează atomii de oxigen de atacul protonilor prezenți în plasma intracelulară.

Activitatea 5. Datele obținute pentru combinațiile de compuși AA/DHF și Cat/Res, în condițiile de reacție menționate, corespund interacțiunilor antioxidante aditive și antagoniste. Raportul dintre antioxidanți este semnificativ atât pentru puterea totală de anihilare a radicalului liber, cât și pentru efectele antioxidante dintre compușii naturali. Studiul argumentează relevanța cercetării pentru explicarea mecanismelor de acțiune a antioxidanților din sistemele complexe din struguri și vinuri, precum și pentru optimizarea eficienței reducătorilor și reducerea concentrației acestora în diverse aplicații industriale.

Activitatea 6. În baza rezultatelor experimentale, s-a observat că eficiența maximă a procesului Fenton/UV-C a fost atinsă la concentrația de reactiv de 0,05 mM, unde concentrația poluantului a scăzut de la 50 mg/L la 20.8 mg/L după 90 min de reacție. La concentrații mai mici (0.01 mM), procesul nu a fost eficient, din cauza că are loc generare lentă a radicalilor OH, iar la concentrații mai mari (0.1–0.5 mM) s-au observat efecte de saturație și inhibiție, probabil cauzate de excesul de reactiv și reacțiile secundare de tip „*scavenging*” ale radicalilor hidroxil. Aceasta confirmă necesitatea optimizării dozei de reactiv prin stabilirea concentrației optime de oxidant, pentru a maximiza generarea radicalilor și a evita consumul inutil de oxidant. Astfel, sistemul model ce conține 50 mg/L catecol se poate oxida eficient prin aplicarea procesului Fenton asistat cu radiație UV la 254 nm, la valoarea pH-ului de 2.6, concentrația ionilor Fe^{2+} de 0.1 mM și concentrația H_2O_2 de 0.5 mM. Ca rezultat, s-a obținut următorii parametri cinetici: viteza inițială a reacției $9.23 \cdot 10^{-8}$ mol/L·s, constanta de viteză (k): 0.00347 min^{-1} , iar timpul de înjumătățire ($t_{1/2}$): 199.52 min. În aceste condiții, concentrația catecolului s-a redus cu 73%, iar valoarea CCO – cu 74%. Pentru condițiile experimentale folosite în oxidarea catecolului din soluții apoase în prezență de dioxid de titan s-a demonstrat că pH = 4.5 și $TiO_2 = 0.025 \text{ g/L}$ au furnizat condițiile de referință optime; adăugarea de H_2O_2 poate fi benefică doar în intervalul optim ($\approx 0.25\text{--}0.50 \text{ mM}$); concentrații foarte mici pot inhiba procesul, iar concentrații prea mari pot favoriza consumul radicalilor și reducerea randamentului. Aceste constatări au implicații practice: optimizarea concomitentă a pH-ului, dozajului de TiO_2 și a concentrației de H_2O_2 este esențială pentru maximizarea conversiei și minimizarea costurilor operaționale.

Etapa 2.5.

Activitatea 1. Vitamina B_2 s-a dovedit a fi stabilă în soluție în intervalul de pH tipic apelor naturale, iar la pH 10 concentrația acesteia scade în timp, ceea ce demonstrează că are loc formarea anionului respectiv ($pK_a = 9.94$ la $t = 20^\circ C$), care posedă reactivitate sporită în raport cu forma nedisociată a

riboflavinei. A fost dovedit că în condițiile apelor naturale riboflavina, în prezența oxigenului dizolvat, a peroxidului de hidrogen și a ionilor de Cu(II) nu se va supune transformărilor redox. Radicalii hidroxil generați la fotoliza H_2O_2 cel mai probabil sunt captați de produșii fotolizei vitaminei, asigurând astfel un grad de mineralizare mai avansat, dar nu asigură creșterea intensității de descompunere a moleculei de riboflavină. Prin urmare, impactul vitaminei B_2 asupra proceselor de autopurificare chimică a apelor naturale este unul pozitiv, deoarece aceasta nu consumă ROS (specii reactive ale oxigenului), dar contribuie la formarea lor, nu scoate din circuitul hidrochimic ionii de Cu(II), principalii catalizatori din apele naturale în stare omogenă.

Activitatea 2. Viteza proceselor de oxidare este mai mare în sistemul $B_6-O_2-Cu(II)$ decât în sistemul $B_6-H_2O_2-Cu(II)$. Rezultă că vitamina B_6 este mai ușor oxidată catalitic de oxigenul dizolvat decât de peroxidul de hidrogen. Având în vedere faptul că concentrația de peroxid de hidrogen variază pe parcursul zilei, acesta poate fi prezent sau absent în apele de suprafață. Deși oxigenul dizolvat este întotdeauna prezent, acest factor asigură procesul de descompunere catalitică a vitaminei B_6 . În consecință, procesul de autopurificare chimică în transformările redox care implică vitamina B_6 se realizează atât ziua, cât și noaptea. Întrucât vitamina B_6 este oxidată eficient catalitic de oxigenul dizolvat în apă, degradarea sa în mediul apos poate acumula cantități suplimentare de peroxid de hidrogen, care este un produs intermediar activ al reducerii oxigenului. Prezența ionilor de cupru în mediul apos are un efect pozitiv asupra proceselor redox care implică vitamina B_6 . Activitatea catalitică este cea mai pronunțată în sistemul $B_6-O_2-Cu(II)$.

Activitatea 3. Un aspect important constatat este comportamentul dual al vitaminelor B_9 (acid folic) și B_{12} (cianocobalamină): pe de o parte, consumă radicali $\cdot OH$, iar pe de altă parte contribuie la regenerarea acestora. Vitamina B_{12} , în special, acționează și ca fotosensibilizator – în stare excitată, transferă energie oxigenului dizolvat, generând specii reactive precum oxigenul singlet și anionul superoxid, care ulterior duc la formarea radicalilor $\cdot OH$.

Activitatea 4. Datele monitorizării proceselor de autopurificare au relevat aceeași situație pentru lacurile Dănceni și Ghidighici, și anume, sistemul de autopurificare al obiectului acvatic nu reușește să elimine poluarea provocată de concentrațiile vitaminei de ordinul $^3 0.5 \cdot 10^{-4} M$, doar o atenuează ușor. Consumul formelor active ale oxigenului (radicalii $\cdot OH$) scot în evidență vulnerabilitatea sistemelor acvatice naturale a căror capacitate de autopurificare este compromisă din cauza fenomenului de poluare, la poluarea cu vitamina B_6 , chiar și în concentrații mici.

5. Impactul științific, social și/sau economic al rezultatelor științifice obținute

Etapă 2.1. Procese catalitice și adsorbționale pentru tratarea apelor

În cadrul Etapei 2.1 au fost realizate cercetări experimentale și aplicative privind sinteza, funcționalizarea și caracterizarea materialelor compozite pe bază de carbon activ și polimeri reticulați, dopate cu ioni metalici de tranziție (Fe, Mn, Co, Cr). Aceste materiale au fost investigate în procese de adsorbție și cataliză eterogenă pentru eliminarea poluanților anorganici și organici din medii apoase.

Rezultatele obținute au demonstrat capacități ridicate de adsorbție și eficiențe sporite de degradare a compușilor organici în procese de oxidare avansată, confirmând rolul grupărilor funcționale de suprafață și al centrilor metalici activi în mecanismele de interacțiune și transformare chimică. Studiile parametrice au evidențiat influența pH-ului, temperaturii, concentrației inițiale și compoziției ionice asupra performanței materialelor, fiind identificate domenii optime de funcționare.

În paralel, a fost realizată analiza chimică detaliată a apelor naturale din diferite regiuni ale Republicii Moldova. Au fost identificate depășiri ale valorilor admise pentru fier, mangan, amoniu și sulfuri, confirmând necesitatea aplicării unor tehnologii eficiente și adaptate local pentru tratarea și potabilizarea apei.

Etapă 2.2. Modelarea hidrologică și izotopică a resurselor de apă

Cercetările din Etapa 2.2 au fost orientate spre analiza izotopilor stabili ai apei ($\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$) în precipitații, ape de suprafață și ape subterane. Au fost stabilite ecuațiile de regresie caracteristice și a fost determinată Linia Locală de Evaporație, utilizată pentru modelarea balanței hidrologice regionale.

Rezultatele au evidențiat relația directă dintre apele de suprafață (Prut și Nistru) și apele subterane din zona de aerare, demonstrând interconectarea acestor sisteme. Modelele izotopice elaborate oferă instrumente științifice solide pentru evaluarea disponibilității resurselor de apă, pentru identificarea zonelor vulnerabile la deficit hidric și pentru fundamentarea strategiilor de management durabil al resurselor acvatice.

Etapă 2.3. Evaluarea infrastructurii de epurare și controlul poluanților

În cadrul Etapei 2.3 a fost realizată evaluarea infrastructurii de epurare a apelor uzate, incluzând inventarierea stațiilor de epurare, analiza debitelor și a încărcăturilor poluante. Analiza a arătat că, deși sunt înregistrate oficial peste 270 de stații de epurare, doar o parte funcționează conform parametrilor de proiectare, în special în ceea ce privește eliminarea azotului și fosforului.

La Stația de Epurare Chișinău au fost testate soluții de clorură ferică pentru controlul hidrogenului sulfurat și al mirosurilor neplăcute. Au fost stabilite doze optime sezoniere, iar analiza nămolurilor a confirmat formarea sulfurilor de fier, cu efect direct asupra reducerii emisiilor odorante și stabilizării chimice a nămolului. Rezultatele obținute au demonstrat eficiența soluțiilor chimice simple și bine controlate pentru optimizarea funcționării infrastructurii existente.

Etapă 2.4. Chimia computațională și procesele redox

Etapă 2.4 a inclus cercetări avansate de chimie computațională, utilizând metode DFT pentru optimizarea structurilor și evaluarea proprietăților electronice ale lichidelor ionice antioxidante de tip [L-carnitină – acizi alimentari]. A fost stabilită o corelație clară între activitatea antioxidantă și parametrii electronici fundamentali, oferind un cadru predictiv pentru proiectarea rațională a compușilor bioactivi.

În paralel, au fost studiate transformările redox ale vitaminelor B₂, B₆, B₉ și B₁₂ în sisteme acvatice naturale și model. Rezultatele au evidențiat rolul acestor compuși în procesele de autopurificare a apelor și în menținerea echilibrului redox al ecosistemelor acvatice.

Etapă 2.5. Procese fermentative, monitorizare ecologică și tehnologii avansate

Cercetările din Etapa 2.5 au vizat procesele anaerobe de fermentare a biomasei agroalimentare în prezența substanțelor biologice active cu proprietăți antioxidante. Au fost testate combinații binare multiple, fiind identificate efecte sinergice, aditive și antagoniste asupra randamentului fermentativ.

Au fost realizate campanii sezoniere de monitorizare în bazinul Nistrului și în lacurile Ghidighici și Dănceni, evaluând parametri hidrochimici, redox, nutrienți, specii sulfurice și capacitatea radicalică. În paralel, a fost analizat potențialul tehnologiilor avansate (inclusiv descărcări de barieră dielectrică) pentru eliminarea poluanților organici persistenti și a micro- și nanoplasticilor din ape.

Rezultatele obținute în cadrul subprogramului 010603 în anul 2025 constituie o contribuție științifică solidă la dezvoltarea chimiei ecologice, chimiei computaționale și a tehnologiilor de tratare a apelor. A fost demonstrată eficiența materialelor funcționalizate, relevanța modelării izotopice și valoarea predictivă a abordărilor computaționale pentru înțelegerea și optimizarea proceselor complexe din medii acvatice și biologice.

Din perspectivă socio-economică, rezultatele obținute oferă soluții concrete pentru îmbunătățirea calității apei, optimizarea infrastructurii de epurare și valorificarea biomasei reziduale. Implementarea soluțiilor propuse poate conduce la reducerea costurilor operaționale, îmbunătățirea sănătății populației și creșterea eficienței energetice în sectorul agro-industrial.

Impactul aplicativ al subprogramului constă în transferabilitatea directă a rezultatelor către tehnologii de tratare a apelor, managementul resurselor de apă și protecția mediului. La nivel strategic, subprogramul contribuie la consolidarea capacității naționale de cercetare, la alinierea cu prioritățile naționale și europene privind securitatea apei și tranziția verde și la crearea premiselor pentru continuarea cercetărilor și atragerea de finanțări competitive.

6. Diseminarea rezultatelor obținute în subprogram în formă de publicații

Lista publicațiilor din anul 2025 în care se reflectă doar rezultatele obținute în subprogram, perfectată conform cerințelor față de lista publicațiilor (Anexa nr. 2)

7. Diseminarea rezultatelor obținute în subprogram în formă de prezentări la foruri științifice. (comunicări, postere – pentru cazurile când nu au fost publicate în materialele conferințelor)

Salonul tehnologiilor și produselor inovative ale USM, Ediția III – Industrie și protecția mediului – 14.03.2025 (3 prezentări orale - Vișnevschi Alexeandru):

- 1) *Îmbunătățirea eficienței epurării apelor uzate în industriile de prelucrare a laptelui*, **autori:** Vișnevschi Alexandru, Spătaru Petru, Spînu Oxana, Povar Igor
- 2) *Îmbunătățirea eficienței epurării apelor uzate în industriile de prelucrare a cărnii*, **autori:** Vișnevschi Alexandru, Spătaru Petru, Spînu Oxana, Povar Igor.
- 3) *Procedeu și instalație de epurare biologică a apelor uzate menajere cu nitrificare și denitrificare simultană*. Brevet de invenție MD-1807. 2024, **autor:** Vișnevschi Alexandru.

Eveniment organizat de către Asociația Română de Mediu consacrat Zilei Mondiale a Apei:

„O metoda de tratare biologică nouă a apelor uzate domestice cu nitrificare și denitrificare simultană” – [comunicare orală Alexandru Vișnevschii](#).

Earth Systems and Environment Journal Annual Meeting, 28-30 April, 2025, Istanbul, Turkey *„Thermodynamic Analysis of Synergistic Goethite Dissolution Mediated by Siderophore and Oxalate”* – [comunicare orală dr. Bolocan N.](#), [moderatorul secției – dr. hab. Povar Igor](#).

IXth Intl. Symposium on Dielectric Materials and Applications (ISyDMA), 7-9 May 2025, Marrakech, Morocco *“Dielectric Barrier Discharge Technology Applications for the Treatment of Micro- and Nanoplastic-Polluted Water Compartments”*- [comunicare orală acad. Duca Gh.](#)

XXIII International Scientific-Practical Conference Rnwcr-2025 Resources of Natural Waters of the Carpathian Region (Problems of protection and rational use), 29 mai 2025, Lviv, Ucraina *„Gallic acid in wastewater: Environmental risks and advanced oxidation-based mitigation strategies”* - [comunicare orală dr. Mocanu Larisa](#).

Conferința Științifică Internațională „Perspectivele Și Problemele Integrării În Spațiul European Al Cercetării Și Educației” Ediția a XII-a, Științe Exacte și Inginerești, 6 iunie 2025, Chișinău, Republica Moldova *„Degradarea și mineralizarea poluanților emergenți prin procese de oxidare catalitică omogenă”*- [comunicare orală dr. Mocanu Larisa](#).

2nd Meeting of the Presidents of the Academy of Sciences of the Black Sea Economic Cooperation Member States, 27 June 2025, Istanbul University, Turkey *”Collaboration and Development of Science, Education and Artificial Intelligence in the Black Sea Region”*- [comunicare orală acad. Duca Gh.](#)

2nd International Conference on Science for the Planet – SciPlanet-2025, Campobasso, Italy, 23-25 June 2025 *“The Role of Redox Processes in Sustaining Life on Earth”*- [prezentare orală dr. hab. Covaliova Olga](#).

The 8 Ed. of the National Conference with International Participation *NATURAL SCIENCES IN THE DIALOGUE OF GENERATIONS-2025*, September 18-19, 2025, Chisinau *“Catalytic degradation of sodium dodecylbenzenesulfonate: a comparative assessment of Fenton and photo-Fenton oxidation ”* [comunicare orală dr. Mocanu Larisa](#).

Festivalul de Transfer Tehnologic – TetraFest 2025, București, România, 9–11 octombrie 2025 – eveniment de networking [dr. hab. Povar Igor](#).

28th International Symposium “The Environment and Industry” - SIMI 2025, 23-24 October 2025, online “*Comparative study on the Fenton oxidation of gallic acid and catechol in aqueous solutions*” – poster dr. Mocanu Larisa.

Faculty of Chemistry Conference, IasiChem 2025, 30-31 October, Iași, România „*Antioxidant activity of new molecular hybrid based on homodrimane, thiosemicarbazone and oxadiazole unit*” – poster dr. Vicol Crina.

The 1st International Electronic Conference on Medicinal Chemistry and Pharmaceutics, 1–30 November 2025 „*Thermodynamic Framework for Quantifying Drug Precipitation and Solubility in Cyclodextrin-Based Systems*” - comunicare orală dr. Bolocan Natalia;

SMART DIASPORA 2025, Atelierul DANUBIUS-RI: infrastructura strategică pentru studiul sistemelor râu-mare, 04 – 07 noiembrie 2025 - comunicare orală dr. hab. Povar Igor, dr. Bolocan Natalia, Spînu Oxana)

Congresul MEDICINA, ȘTIINȚELE MOLECULARE ȘI DE MEDIU (MedMolMed 2025), 10 – 14 noiembrie 2025, Chișinău, Republica Moldova:

- 1) „*Improvement of the water quality of the Bâc River using the example of intensifying the process of purifying ammonia nitrogen in Chișinău MWWTP water*” - comunicare orală dr. Spătaru Petru;
- 2) „*Infrared spectroscopy of human urinary stones in Republic of Moldova*” – poster dr. Șepeli Diana;
- 3) „*Spectrophotometric method for quantitative determination of the drug Mabipan*” – poster dr. Șepeli Diana;
- 4) „*Soluble nitrogen species in model of river or lake water samples as indicators of the state of the aquatic environment*” – poster Vișnevschi Alexandru;
- 5) „*Determination of humic substances content in the wastewater of the treatment facilities of Cricova, Republic of Moldova*” - poster dr. Șepeli Diana;
- 6) „*Application of a new herbal drug based on fennel seed extract for the treatment of dental diseases*” – poster dr. Șepeli Diana;
- 7) „*Application of thin layer chromatography for the analysis of sclareol in clary sage concrete*” - poster dr. Șepeli Diana.
- 8) „*Optimization of anionic surfactant removal using gallic acid assisted Fenton oxidation*” - comunicare orală dr. hab. Gonța Maria.
- 9) „*Optimization and kinetic evaluation of catechol degradation in aqueous solutions using homogeneous processes*” - comunicare orală dr. Mocanu Larisa.
- 10) „*DFT study of photoswitching systems based on fluorescent azulenyl-substituted dithienylcyclopentenes*” – poster dr. Balan Iolanta.
- 11) „*Antioxidant co-action of wine polyphenols and organic acids*” – poster dr. Vicol Crina.

Conferința științifică națională cu participare internațională ”Integrare prin cercetare și inovare”, 6-7 noiembrie 2025:

- 1) „*Problem of the center for cubic differential systems with a bundle of three invariant straight lines and the line at infinity of multiplicity two*” – comunicare orală dr. Puțuntică V.
- 2) „*Compoziția chimică a apei de ploaie și impactul climatic și erodiv asupra CaCO₃ și soluri*” - comunicare orală dr. Spătaru Petru;

Expoziția Internațională Specializată INFOINVENT 2025, 03-05 decembrie 2025, Chișinău, Republica Moldova „Procedeu de tratare a nămolului activ provenit în urma epurării apelor reziduale” – poster dr. Spătaru Petru;

Expoziția Internațională Specializată INFOINVENT 2025, 03-05 decembrie 2025, Chișinău, Republica Moldova „Procedeu și instalație de epurare biologică a apelor uzate menajere cu nitrificare și denitrificare simultană” – poster Vișnevschi Alexandru;

The 6th International Electronic Conference on Applied Sciences, 9–11 December 2025 „Unified thermodynamic methodology for modeling chemical reactions in heterogeneous equilibria applied to wastewater treatment and reuse” <https://sciforum.net/manuscripts/27658/slides.pdf> – poster Spînu Oxana.

8. Promovarea rezultatelor cercetărilor obținute în subprogram în mass-media:

LUPAȘCU Tudor / TVR Moldova, Telematinal, 03.03.2025 / Rolul științei în societate.

LUPAȘCU Tudor / TVR Moldova, Portret obiectiv, 26.03.2025

DUCA Gh. / Lumea științei cu Gheorghe Duca, ianuarie 2025 / <https://www.youtube.com/watch?v=jGyZLXd-uko>

Articole de popularizare a științei

DUCA Gh. / Literatura și Arta, Nr. 10 (4147), 06.03.2025 / Savantul care iubește și protejează natura.

DUCA Gh. / <https://noi.md/md/societate/academicianul-gheorghe-duca-despre-reforma-in-invatamint-europenii-n-au-sustinut-o>, 17.04.2025 / Academicianul Gheorghe Duca, despre reforma în învățământ: "Europenii n-au susținut-o".

DUCA Gh. / Tribuna, 14.04.2025, <https://tribuna.md/2025/04/14/interviu-gheorghe-duca-stiinta-este-coloana-vertebrala-a-unei-natiuni/> / Interviu: Gheorghe Duca: știința este coloana vertebrală a unei națiuni.

DUCA Gh. / https://ava.md/ru/stati/analitika_i_kommentarii/taynyi_moldavskogo_vinodeliya_kak_priroda_i_traditsii_sozdayut_unikalnyie_vina/, 17.04.2025 / Тайны молдавского виноделия, как природа и традиции создают уникальные вина.

DUCA Gh. / https://ava.md/ru/stati/analitika_i_kommentarii/apel_catre_toti_romanii_alegeti_viitorul_nu_f_antomele_trecutului/, 13.05.2025 / Apel către toți românii - alegeți viitorul, nu fantomele trecutului!

DUCA Gh. / Literatura și Arta, Nr. 24 (4161), 12.06.2025 / Intransigența științei în asceze poetice.

DUCA Gh. / https://ava.md/ru/stati/analitika_i_kommentarii/konferentsiya_predsdateley_akademiy_nauk_s

[tran-chlenov_ches_stambul_27_iyunya_2025_goda/](#), 28.06.2025 / Конференция председателей академий наук стран-членов ЧЭС, Стамбул, 27 июня 2025 года.

DUCA Gh. / Tribuna, <https://tribuna.md/2025/08/18/politici-prioritare-pentru-facilitarea-integrarii-republicii-moldova-in-uniunea-europeana/>, 18.08.2025 / Politici prioritare pentru facilitarea integrării Republicii Moldova în Uniunea Europeană.

DUCA Gh. / https://ava.md/ru/stati/analitika_i_kommentarii/ekologicheskaya_situatsiya_v_respublike_moldova_problemyi_monitoring_probelyi_i_resheniya/, 20.08.2025 / Экологическая ситуация в Республике Молдова. Проблемы, Мониторинг, Пробелы и Решения.

9. Colaborare la nivel național și internațional

- Laboratorul Chimie Ecologică al ICh deja al doilea an realizează proiectul „*Adsorbanți durabili multifuncționali pentru tratarea apei asistați de tehnologii cu plasmă și pentru protecția sănătății împotriva xenobioticelor*” (CLEANWATER), HORIZON-MSCA-2022-SE-01/101131382 din cadrul apelului HORIZON-MSCA-2022-SE-01-MSCA Staff Exchange 2022 (<https://ichem.md/CLEANWATER>).
- Laboratorul Monitoring Calității a Mediului participă în 3 proiecte internaționale și într-un grup de lucru:
 - „*Innovative sediment management in the Danube river basin (iNNOSED)*”, HORIZON IA-101157360 din cadrul programului HORIZON-MISS-2023-OCEAN-01 (Actions for the implementation of the Mission Restore our ocean and waters by 2030), perioada de realizare 2024 – 2029 (<https://ichem.md/en/iNNOSED>);
 - “*Ensuring water availability in a changing climate*”, IAEA RER7017 din cadrul IAEA’s Technical Ccooperation Programme, perioada de realizare 2024 – 2026 (<https://ichem.md/en/ensuring-water-availability-changing-climate>);
 - COST action “*Airborne synergIstically inteRactive muLtIplatforms For aTmospheric, aStrophysical and earth sciences*” AIRLIFT OC-2025-1-28725.
 - - Participarea în grupul pentru elaborarea “*Statement of work (SoW) for procurement of a supplier for a national screening of suitable regions/sites for siting of a near-surface disposal facility and deep borehole solution in Moldova*”.
- LMFCCA a colaborat activ în plan național cu SA „Apă-Canal Chișinău”, Primăria com. Colonița, Primăria or. Cricova, SA „Apă-Canal Căușeni”. Colaborarea cu SA „Apă-Canal Chișinău” s-a soldat cu un act de implementare în practică.



**SOCIETATEA PE ACȚIUNI
„APĂ-CANAL CHIȘINĂU”**

str. Albișoara nr. 38, MD 2005,
mun. Chișinău, Republica Moldova
tel. 022 25-69-01, tel/fax: 022 22-23-49,
e-mail: acc@acc.md, web: www.acc.md



Titular al Ordinului MD 880 Certificat ac 88C
„Gloria Muncii”
12.12.2012



Nr. 01-1869 din 14.08.2025

La nr. _____ din _____

ACT DE IMPLEMENTARE Nr. 01/2025

privind aplicarea unei tehnologii perfecționate de tratare a apelor uzate,
care utilizează un preparat chimic accesibil pe piața locală, cu eficiență ridicată în
condițiile specifice ale procesului tehnologic, având drept scop îmbunătățirea procesului
de deshidratare a nămolului, reducerea semnificativă a mirosurilor pestilențiale generate
de reziduurile organice solide și diminuarea cheltuielilor de exploatare la Stațiile de
epurare a apelor uzate din municipiul Chișinău

Chișinău, 12 august 2025

În baza contractului nr. 32 din 15.03.2024, încheiat între S.A. „Apă-Canal Chișinău” și Institutul de Chimie al Universității de Stat din Moldova, Laboratorul „Metode Fizico-chimice de Cercetare și Analize” a fost perfecționată și implementată pe scară industrială cu succes o tehnologie modernizată pentru îmbunătățirea procesului de tratare a nămolului la Stațiile de epurare a apelor uzate din municipiul Chișinău.

Tehnologia elaborată aplică un preparat chimic ieftin și accesibil pe piața locală, caracterizat prin performanțe superioare și eficiență ridicată în condițiile specifice ale procesului tehnologic. Aplicarea acestui preparat a condus la îmbunătățirea semnificativă a procesului de deshidratare a nămolului, optimizând consumul de reactivi și reducând volumul nămolului rezultat, ceea ce a determinat diminuarea costurilor operaționale și impactul negativ asupra mediului.

Testele de laborator și pilot, precum și monitorizarea la fața locului, realizate în perioada martie-septembrie 2024, au demonstrat reducerea semnificativă a emisiilor de hidrogen sulfurat și a disconfortului olfactiv cauzat de reziduurile organice solide stocate. Astfel, calitatea vieții locuitorilor municipiului Chișinău a fost considerabil îmbunătățită, iar mediul înconjurător protejat.

Pentru integrarea preparatului în fluxul tehnologic existent, au fost realizate

Cod IBAN MD12PR002251166792001498, BC „ProCreditBank”, CF 1002600015876, Cod TVA 0600920, capitalul social 611915200 lei

Atenție! Documentul conține date cu caracter personal, prelucrate în cadrul sistemului de evidență, înregistrat în Registrul de evidență al operatorilor de date cu caracter personal www.registru.datapersonale.md. Prelucrarea ulterioară a acestor date poate fi efectuată numai în condițiile prevăzute de Legea nr. 133 din 08.07.2011 privind protecția datelor cu caracter personal.

adaptări tehnice esențiale, inclusiv instalarea sistemelor dedicate de dozare și adaptarea infrastructurii pentru depozitarea și utilizarea optimă a acestuia, asigurând funcționarea stabilă și eficientă a procesului tehnologic fără perturbări.

Implementarea a condus la reducerea consumului de reactivi, accelerarea separării solide-lichide și diminuarea volumului nămolului depozitat, generând astfel economii financiare semnificative și contribuind la sustenabilitatea economică a operațiunilor de epurare.

Echipa de specialiști care a realizat această implementare include: dr. hab., șef laborator Igor Povar – coordonarea generală a proiectului și strategia de modernizare; dr. cercetător științific coordonator Petru Spătaru – testarea și analiza parametrilor fizico-chimici; cercetător științific Alexandru Vișnevschi – optimizarea dozajului și interpretarea rezultatelor; cercetător științific Oxana Spînu – monitorizarea procesului și raportarea către echipă.

Rezultatele obținute au un impact ecologic major, prin reducerea poluării și protejarea resurselor naturale, un efect economic pozitiv prin optimizarea costurilor și crearea de oportunități durabile, precum și o valoare socială prin îmbunătățirea condițiilor de viață și sănătate publică. Implementarea cu succes a acestor măsuri demonstrează angajamentul ferm pentru dezvoltarea durabilă a municipiului și pentru asigurarea unui viitor mai curat și mai sigur pentru întreaga comunitate. Astfel, această realizare reprezintă un progres semnificativ pentru sistemul de epurare a apelor uzate din municipiul Chișinău, aducând beneficii ecologice, economice și sociale comunității locale.

Prezentul act este întocmit în două exemplare originale, câte unul pentru S.A. „Apă-Canal Chișinău” și Institutul de Chimie al Universității de Stat din Moldova, și va fi anexat documentației oficiale de implementare.

Chișinău, 12 august 2025

Director general adjunct



Diana TACU

- LMFCCA a colaborat activ în plan internațional cu Prof. dr. în șt. ing. Crețescu Igor de la Universitatea Tehnică „Gh. Asachi”, Iași, România; Prof. dr. Alina Ion și prof. dr. Ion Ion de la Universitatea ”Politehnica”, București, România; Dr. Marin Senila, cercetător științific superior, Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Optoelectronică - INOE 2000, Cluj-Napoca, România; Dr. Sheida Faraji, Istanbul Technical University; Dr. Cristina BADICA, director executiv „Asociația Română a Apei”. Rezultatele acestor colaborări au fost materializate în propunerile de proiecte și manuscrise expediate în 2025:
- **Tipul concursului „ERASMUS+ Global Mobility”:** „GreenEx: Exchanging good practices on sustainable agri-food waste valorization and resource management”. Conducătorul proiectului dr. Janna Cropotova, Universitatea Norvegiană de Știință și Tehnologie (NTNU).

- **Proiect bilateral Moldova–Turcia pentru anii 2026-2028** „Cooperarea moldo-turcă privind validarea și utilizarea senzorilor pentru detectarea și controlul avansat al poluării apelor uzate”. Conducător de proiect dr. Sheida Faraji, Istanbul Technical University.
 - **Tipul concursului** Water4All 2025 Joint Transnational Call - Water and Health. Pillar B - Research and Innovation Development: „AQUA-RESIL: Advancing Quality and Resilience through integrated water, health and climate governance”. Conducător de proiect Cristina BADICA, director executiv „Asociația Română a Apei”.
 - **COST Action** CA23104 Water4Reuse (<https://water4reuse.inrae.fr/>)
 - Participarea în activitățile Asociației Române de Mediu, filiala din republica Moldova (<https://www.asrm.ro/filiala/Chisinau.html>).
- Presedinte: prof. univ. dr. Oleg BOGDEVICI
- Consiliu coordonare: cs. dr. Raisa NASTAS
- Secretar:cs. dr. Natalia BOLOCAN
- Acad. Gheorghe DUCA (conducător), dr. Iolanta BĂLAN (executor), dr. Crina VICOL (executor) în proiectul ROMD-2023-0045 ”*Cuști organice și metal-organice redox-active cu derivați ai azulenei pentru inginerie cristalină. (AZMETCA)*”; ANCD în comun cu UEFISCDI.
 - Dr., prof. GLADCHI Viorica, Acad. DUCA Gheorghe sunt membrii echipei proiectului bilateral moldo-român ”*Chimie redox și coordinativă nouă cu cobalamina și sisteme din clasa Cobalaminei*” din programul Proiecte complexe bilaterale cu Republica Moldova”, aprobat prin Decizia Consiliului Autorității contractante nr. 5 din 05.09.2025 și Ordinul Autorității contractante nr. 30 din 05.09.2025, din cadrul Priorității strategice II. Agricultură durabilă, Securitatea alimentară, înscris în Registrul de stat al proiectelor din sfera științei și inovării cu cifra 25.80013.5107.20ROMD, conducător de proiect Viorica GLADCHI. Perioada – 01.09.25-31.08.27
 - Acad. Gheorghe DUCA, Dr. Lidia ROMANCIUC, Dr. hab. Olga COVALIOVA, propunere de proiect înaintat pe data de 29.09.2025 la Programul UE Orizont Europe, apel: HORIZON-EIC-2025-PATHFINDERCHALLENGES-01-04, Titlu: Water4Value-Hub “Multi-functional Platform Reactor for WasteWater Valorization”, Consortium: Romania (coord), Moldova, Marea Britanie, Bulgaria.
 - Acad. Gheorghe DUCA, Dr. Lidia ROMANCIUC, Dr. hab. Olga COVALIOVA, propunere de proiect înaintat pe data de 13.11.2025 la Programul: Water4All Joint Transnational Call 2025: “Water and Health”, Titlu: OneWaterSense, “Integrated Wastewater Monitoring and Biofiltration Approaches for Pharmaceuticals and Microplastics within the One Health Concept”, Consortium: Romania (coord), Moldova, Polonia.
 - În proces de realizare este proiectul de cooperare științifică Moldova-China pentru perioada 2025/1/1 - 2026/12/31 cu Universitatea din Harbin pe tematica ”Materials and Environmental science by theoretical calculations and experiments”. Conducători - Acad. Gh. DUCA, Acad. I.B. Bersuker; executori: GORINCIOI N., GORBACIOV M., BĂLAN I.

- Dr. hab. Maria GONȚA și doctoranda Carolina GRIGORAȘ au realizat o vizita de lucru în cadrul subproiectului „Crearea unui cluster educațional-științific pentru suportul moderne în economia națională/ BIOTEHN”, la Centru de Cercetări Avansate pentru materiale, produse și procese inovative al Universității Naționale de Știință și Tehnologie POLITEHNICA București, Laboratorul de Nanostructuri Fluide și Soft Nanomateriale, care a avut loc în perioada 26.10.2025 – 01.11.2025.
- Dr. hab. Maria Gonța și dr. Larisa Mocanu au demarat colaborări cu dr. Oana-Georgiana Dragos-Pinzaru de la National Institute of R&D for Technical Physics, Iasi, 700050, Romania cu privir la tema epurării apelor reziduale cu continut de poluanti emergenti.

10. Teze de doctorat/ postdoctorat susținute și confirmate în anul 2025 de membrii echipei subprogramului

Elena Culighin „STUDIUL GRADULUI DE POLUARE A SOLULUI ȘI APELOR NATURALE ÎN DISTRICTUL HIDROGRAFIC NISTRU ȘI UTILIZAREA METODELOR ADSORBȚIONALE DE REMEDIERE”. 145.01. Chimie ecologică, susținută la 11 aprilie 2025. <https://www.youtube.com/watch?v=oao6sokhkT0>

Elena Nicolau „ESTIMAREA RISCULUI DE POLUARE CHIMICĂ CU SUBSTANȚE ORGANICE PERSISTENTE ÎN DISTRICTUL HIDROGRAFIC DUNĂRE-PRUT ȘI MAREA NEAGRĂ DIN REGIUNEA DE SUD A REPUBLICII MOLDOVA ȘI ELABORAREA RECOMANDĂRIILOR DE REMEDIERE”. 145.01. Chimie ecologică. Data susținerii – 30 aprilie 2025. <https://www.youtube.com/watch?v=Srgqij9WIRI>

Vișnevschi Alexandru „STUDIUL FIZICO-CHIMIC ȘI TEHNOLOGIC AL PROCESELOR ETEROGENE COMPLEXE ALE COMPUȘILOR AZOTULUI ÎN STAȚIILE BIOLOGICE DE EPURARE DIN REPUBLICA MOLDOVA”. 145.01. Chimie ecologică. Data susținerii – 23 septembrie 2025. <https://www.youtube.com/watch?v=OCJGPgH--vE>

Tașca Corina „STUDIUL PROCESELOR DE OXIDO-REDUCERE ÎN FERMENTAREA ANAEROBĂ A BIOMASEI”. 145.01. Chimie ecologică. Data susținerii – 30.10.2025. <https://www.youtube.com/watch?v=IrazV7qQhMQ>

11. Dificultăți în realizarea subprogramului (financiare, organizatorice, legate de resursele umane etc.

Implementarea subprogramului „*Cercetări avansate în chimia computațională și ecologică, identificarea procedeele tehnologice de tratare, formare a calității și cantității apelor*” se confruntă cu un set complex de dificultăți care afectează atât eficiența activităților științifice, cât și dinamica organizatorică a echipelor de cercetare. Dificultățile financiare, organizatorice și cele legate de resursele umane constituie obstacole majore pentru buna desfășurare a activităților subprogramului. Lipsa echipamentelor moderne, întârzierile drastice la achiziții, absența tinerilor cercetători și reducerea motivării personalului experimentat afectează semnificativ capacitatea de realizare a

obiectivelor științifice și pot compromite sustenabilitatea pe termen lung a direcțiilor de cercetare elaborate.

Dificultăți financiare

- Lipsa mijloacelor financiare pentru procurarea utilajului științific esențial. Bugetul alocat subprogramului nu permite achiziționarea echipamentelor moderne necesare pentru investigații experimentale avansate, ceea ce limitează capacitatea de validare practică a rezultatelor obținute prin modelare computațională. Această insuficiență afectează competitivitatea echipei și posibilitatea alinierii la standardele internaționale de cercetare.
- Întârzieri majore în procurarea reactivilor și a consumabilelor de laborator. Procesul de achiziție pentru reactivi, materiale de laborator și chiar rechizite de birou se desfășoară extrem de lent, cu întârzieri ce depășesc frecvent 10–12 luni. Acest lucru duce la întreruperi semnificative în desfășurarea experimentelor, decalaje în realizarea obiectivelor planificate și imposibilitatea respectării termenelor asumate contractual.

Dificultăți organizatorice

- Proceduri birocratice și administrative ineficiente.
- Procesele de achiziție, raportare și autorizare sunt excesiv de lente și complicate, generând întârzieri în realizarea activităților și adaptarea tardivă la necesitățile de cercetare care evoluează dinamic.
- Imposibilitatea de a moderniza infrastructura de cercetare.
- Fără investiții în echipamente și consumabile, laboratoarele nu pot asigura condițiile necesare pentru experimente moderne, ceea ce limitează drastic capacitatea de inovare și realizare a cercetărilor interdisciplinare complexe.

Probleme legate de resursele umane

- Imposibilitatea angajării de tineri cercetători.
- Bugetele reduse și lipsa unor mecanisme funcționale de stimulare împiedică atragerea și menținerea în echipă a tinerilor absolvenți sau doctoranzi, ceea ce afectează grav continuitatea generațională și capacitatea de inovare.
- Restricții salariale pentru angajații vârstnici.

Legislația actuală limitează salariul pentru angajații aflați după vârsta de pensionare:

- la 50% pentru persoanele de peste 65 de ani;
- la 25% pentru persoanele de peste 70 de ani.

Această situație reduce veniturile unor experți cu experiență esențială în proiect, diminuând implicarea lor și afectând calitatea generală a activităților științifice.

- Lipsa unui cadru de motivare și stabilitate pentru cercetători.
- Inexistența unor programe de retenție, mobilități internaționale, bonusuri sau instrumente de sprijin profesional amplifică fenomenul migrației specialiștilor spre alte sectoare sau alte țări.

12. Concluzii

Etapa 2.1.

- A fost sintetizat un compozit compus din polimer reticulat și compuși ai Cr^{3+} . A fost studiată sorbția ionilor NCS^- pe compozit și pe polimer intact în funcție de temperatură, de timpul de contact ale fazelor, pH soluției, de concentrația soluției sorbat. S-a stabilit că în compozit la

reținere ionii NCS^- formează legături Cr-NCS. Atomul S din fragmentul Cr-NCS are o afinitate sporită pentru cationii metalelor grele. Astfel compozitul Cr-polimer încărcat cu ioni NCS^- devine sorbent pentru reținerea selectivă a ionilor metalelor grele.

- A fost utilizat testul ABTS pentru a evalua capacitatea antioxidantă a diferitelor mostre de cărbuni activi (CA), exprimate ca procent de inhibiție a radicalilor ABTS după 5 și 10 minute de reacție. Mostrele studiate au inclus CA modificați cu metale de tranziție (Fe, Mn, Co, Ni, Cu), combinați cu KMnO_4 sau referințe precum MnO_2 și mostra comercială „Centaur”.
- Au fost obținute compozitele dotate cu săruri de fier, mangan și cobalt ACCN-Fe1, ACCN-Mn1, ACCN-Mn2, ACCN-Mn3, ACCN-MnSO₄ și ACCN-Co1 calcinate la 650 °C timp de 3 ore. Aceste compozitele carbonice manifestă o activitatea catalitică mai pronunțată față de cea a probele de referință Centaur, fapt ce sugerează că acestea pot avea un bun potențial de utilizare în calitate de catalizatori.
- Au fost stabiliți indicii chimici de concentrație a ionilor și cationilor în 6 probe de apă prelevate din comuna Boșcana, raionul Criuleni. În urma analizei rezultatelor obținute s-a constatat, că doar o singură sursă corespunde cerințelor CMA față de apa potabilă, după 12 parametri determinați, mai exact sonda arteziană nivelul 2. Celelalte 5 nu corespund, după cel puțin 1 parametru, o probă după 4 parametri și 2 probe după 5 parametri.

Etapă 2.2.

- A fost realizată analiza literaturii din domeniu modelării balansului resurselor acvatice cu utilizarea tehnologiei de izotopii stabili și datelor din lacuri naturale și artificiale la nivelul bazinului hidrografic.
- Modelul hidrogeologic conceptual este confirmat de compoziția izotopilor stabili $\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$ din apele subterane și de suprafața ce poate fi utilizat în scopuri de modelare. Zona activă a mișcării apelor subterane poate fi evaluată prin această abordare.

Etapă 2.3.

- Studiul epurării apelor uzate subliniază necesitatea unor măsuri urgente și strategii de dezvoltare pentru a sprijini dezvoltării infrastructurii de epurare a apelor uzate cu implementarea tehnologiilor avansate.
- Rezultatele obținute în urma modelării termodinamice au elucidat mecanismele de cristalizare a struvitului asociate cu reacțiile de precipitare și condițiile predominante.
- Eliminarea chimică a fosforului prin dozare de clorură ferică este un proces eficient, stabil și ușor de controlat operațional, care poate aduce eficiențe de peste 80% la doze moderate ($\text{Fe/P} = 2\text{--}2.5$). Consumul specific de reactiv este de aproximativ 50–55 g FeCl_3 per 1 m³ apă tratată, ceea ce corespunde unui cost de 0.028–0.030 EUR/m³, valori economic avantajoase în raport cu alternativele existente. Dozarea peste $\text{Fe/P} = 2.5$ nu este justificată economic, deoarece creșterea consumului de reactiv nu aduce îmbunătățiri semnificative ale calității efluentului, dar mărește volumul de nămol chimic.
- Testele industriale de utilizare a clorurii de fier (FeCl_3) în procesul tehnologic de deshidratare prin centrifugare la Stația de Epurare din Chișinău au demonstrat că pentru stoparea emanării de hidrogen sulfurat și diminuarea mirosului provocat de sulfuri și mercaptani în perioada caldă cu

temperaturi de 17 – 37 °C doza recomandată ca procesabilă să fie de 1 mL de soluție 40% la 1 L de nămol. În perioada cu temperaturi sub de 16°C doza procesabilă necesară este de 0.6 – 0.8 mL de soluție 40% la 1 L de nămol. Reieșind din viteza de cedare a apei și turbiditatea apei separate, s-a stabilit că doza optimă a floclulantului utilizat împreună cu 1 mL/L FeCl₃ este între 2.5- 3.5 kg/t m.u. Regimul de turații 70% și 80% din cele maxime au o eficiență mai bună în deshidratarea reziduurilor solide de la SEBM Chișinău, ceea ce oferă posibilitate de economie a floclulantului.

Etapa 2.4.

- Activitatea antioxidantă a lichidelor ionice studiate în reacția lor cu radicalul cationic stabil ABTS⁺• este determinată atât de perechile de ioni disociați, cât și de cei nedisociați care formează aceste lichide ionice și, în ambele cazuri, anionii acizilor alimentari (fie liberi, fie incluși în structura perechilor de ioni) interacționează cu radicalul cationic.
- Utilizând metode avansate de modelare moleculară, au fost analizate 40 de structuri geometrice ale acidului ascorbic. Dintre acestea, 6 structuri au fost selectate pe baza stabilității energetice maxime. Stabilitatea energetică a conformerilor acidului ascorbic este semnificativ influențată de natura solventului. Apa și metanolul fiind solvenți polari stabilizează acidul ascorbic mai eficient prin formarea de legături de hidrogen și interacțiuni dipol-dipol, reducând astfel energia totală a sistemului față de vid de la -4.89 la -14.93. Solvenții nepolari precum benzenul și ciclohexanul oferă o stabilizare mai redusă, energiile totale ale acestora sunt -8.72 kcal/mol și respectiv -9.22 kcal/mol rezultând în energii totale mai mari.
- Atât procesele Fenton/UV, cât și cele de oxidare heterogenă pe bază de TiO₂ reprezintă soluții tehnologice sustenabile și versatile pentru epurarea avansată a apelor uzate cu conținut de compuși fenolici. Integrarea acestora în scheme hibride sau multi-etapă poate contribui la îndeplinirea normelor stricte impuse pentru protecția mediului și la dezvoltarea unor strategii eficiente de gestionare a poluanților emergenți. Pentru a spori eficiența de degradare/oxidare a apelor reziduale care conțin catecol, se propune o abordare integrată, care combină Foto-Fenton cu una sau mai multe metode ulterioare (adsorbție + tratare biologică + filtrare). Această abordare este adesea cea mai eficientă pentru epurarea completă a apei contaminate cu catecol sau alți poluanți fenolici, comparativ cu aplicarea unei singure metode. Producții reziduale de degradare și compuși organici refractari pot fi adsorbiți pe cărbune activ, biochar, zeoliți etc., iar procesul biologic complementar prin biofiltrare sau în bioreactor are ca scop biodegradarea produșilor intermediari, oxidarea catalitică poate transforma poluanții recalcitranți în compuși mai biodegradabili, facilitând tratarea biologică ulterioară.

Etapa 2.5.

- La concentrații reduse (10⁻⁶ M) vitaminele B₉ (acid folic) și B₁₂ (cianocobalamină) influențează semnificativ echilibrul redox al apelor, având un rol activ în procesele de autopurificare. Vitamina B₉ intensifică reacțiile radicalice prin reactivitatea ridicată, iar vitamina B₁₂ susține formarea radicalilor prin mecanisme foto-redox, menținându-și eficiența în prezența ionilor de cupru. Pe termen lung, ambele pot fi degradate lent în mediile acvatice, contribuind la dinamica naturală a proceselor oxidative.
- Datele monitorizării proceselor de autopurificare în microcosme au relevat că sistemele acvatice naturale lentice, a căror capacitate de autopurificare este compromisă din cauza producerii continue a fenomenului de poluare, nu reușesc să elimine poluarea provocată de concentrații ale vitaminei B₆ de ordinul $\geq 0.5 \cdot 10^{-4}$ M, doar o atenuează ușor.

- Cele mai înalte grade de poluare cu substanțe cu proprietăți de captori de radicali $\cdot\text{OH}$ au fost stabilite pentru apele de lacuri, urmate de cele ale afluenților.
- Procesele chimice de autopurificare, susținute de formele active ale oxigenului, decurg mai eficient în apele fluviului, în restul apelor supravegheate sunt încetinite, astfel că în aceste sisteme acvatice se stabilesc compoziții chimice neadecvate valorii biologice de habitare.

Coordonatorul subprogramului de cercetare POVAR Igor, dr. hab.

(numele, prenumele)



(semnătura)

Data: 19.01.2026

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în subprogram în anul 2025

„Cercetări avansate în chimia computațională și ecologică, identificarea procedeele tehnologice de tratare, formare a calității și cantității apelor”

Codul subprogramului 010603

- Au fost realizate cercetări privind eficiența catalitică și adsorbțională a unor compozite carbonice și polimerice funcționalizate în procesele de eliminare a poluanților din medii apoase, precum și studii privind compoziția chimică a apelor naturale din diferite zone ale Republicii Moldova. Au fost elaborate și caracterizate compozite pe bază de carbon activ și polimeri reticulați, dopate cu ioni de Fe, Mn, Co și Cr, demonstrând o capacitate sporită de adsorbție și activitate catalitică în procese de oxidare avansată și de eliminare a coloranților organici și a ionilor metalici. Rezultatele experimentale au evidențiat influența parametrilor fizico-chimici (pH, temperatură, concentrație, timp de contact) asupra performanței materialelor obținute. Totodată, analiza calității apelor naturale a permis identificarea depășirilor valorilor admise pentru anumiți parametri, confirmând necesitatea implementării unor tehnologii eficiente de tratare și potabilizare. Cercetările realizate oferă suport științific pentru dezvoltarea de soluții sustenabile destinate protecției resurselor de apă și sănătății publice.
- Au fost stabiliți parametrii ecuației de regresie pentru izotopii stabili $\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$ a apei din precipitații, râuri, lacuri și apelor subterane. Acest rezultat a arătat particularitățile formării rezervelor apelor subterane din zona de aerare și zona adâncă a secțiunii geologice, a stabilit Linia de Evaporare Locală pentru modelarea balanței resurselor acvatice. Raportul izotopilor stabili $\delta^{18}\text{O}$ și $\delta^2\text{H}$ pentru apa de suprafață din râurile Prut și Nistru este similar raportului pentru apele subterane din zona de aerare. Acest fapt demonstrează relația existentă între apele de suprafață și apele subterane. Aceste rezultate poate fi utilizate în scopuri de modelare pentru elaborarea soluțiilor stabile în managementul resurselor acvatice.
- Au fost identificate toate instalațiile funcționale de epurare a apelor uzate în regiunile investigate. Evaluările efectuate au arătat că, din cele 272 de stații de epurare existente în Republica Moldova, doar o mică parte funcționează la parametri proiectați.
- În cadrul Stației de Epurare a municipiului Chișinău au fost testate proceduri de utilizare a soluțiilor de FeCl_3 pentru reducerea emisiilor de hidrogen sulfurat și alte mirosuri pestilențiale. În perioada caldă (17–37°C), doza optimă a fost stabilită la 1 mL soluție 40% FeCl_3 per 1 L de nămol, iar în perioada rece (sub 16°C), la 0.6–0.8 mL/L.
- În cadrul studiului, s-au analizat procesele din sistemele eterogene care conțin hidroxid de magneziu, amoniu, calciu și fosfați, stabilindu-se condițiile favorabile pentru formarea struvitului ($\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$).
- Laboratorul de Chimie Fizică și Cuantică a realizat cercetări integrate în chimia computațională, chimia ecologică și procesele de autopurificare a apelor. Au fost optimizate lichide ionice antioxidante de tip [L-carnitină – acizi alimentari], stabilindu-se relații clare între activitatea antioxidantă și proprietățile electronice. Au fost studiate transformările redox ale vitaminelor B2, B6, B9 și B12 în sisteme model. Au fost efectuate expediții hidrochimice în bazinul Nistrului și în lacurile Ghidighici și Dănceni. S-au evaluat starea redox, poluarea biogenă, sulfuri și capacitatea radicalică a apelor. S-au studiat procesele anaerobe ale biomasei agroalimentare cu substanțe biologice active antioxidante. 21×2 combinații de antioxidanți naturali au fost testate, identificându-se efecte sinergice, aditive și antagoniste. Laboratorul a integrat cu succes modelarea cuantică și experimentele ecologice, oferind rezultate aplicabile în protecția mediului, epurarea apelor și optimizarea proceselor biochimice.

- Research activities focused on the catalytic and adsorption efficiency of functionalized carbonaceous and polymer-based composites for pollutant removal from aqueous media, alongside the chemical characterization of natural waters from different country regions. Synthesized carbon-based and cross-linked polymer composites doped with Fe, Mn, Co and Cr ions proved enhanced adsorption capacity and catalytic performance in advanced oxidation processes, as well as in the removal of organic dyes and metal ions. Experimental results revealed the decisive influence of key physicochemical parameters (pH, temperature, concentration and contact time) on material performance. The assessment of natural water quality identified exceedances of regulatory limits for several parameters, emphasizing the need for efficient and locally adapted water treatment technologies.
- The parameters of regression equations for stable water isotopes ($\delta^{18}\text{O}$ and $\delta^2\text{H}$) in precipitation, rivers, lakes and groundwater were established, allowing the definition of the Local Evaporation Line and improved modelling of water balance processes. The similarity between isotopic ratios in surface waters (Prut and Dniester rivers) and groundwater from the aeration zone confirms a strong hydraulic connection between these systems, supporting the use of isotopic tools in sustainable water resource management.
- All functional treatment facilities within the investigated regions were identified, and detailed evaluations of wastewater flows and pollutant loads were conducted. The analysis revealed profound infrastructural limitations: although 272 wastewater treatment plants are officially registered in the country, only a small fraction operates according to design specifications.
- All functional wastewater treatment facilities in the investigated regions were identified and evaluated in terms of flow rates and pollutant loads. The analysis revealed major infrastructural deficiencies, showing that although over 270 wastewater treatment plants are officially registered, only a limited number operate according to design specifications. At the Chisinau WWTP, FeCl_3 solutions were tested for hydrogen sulfide and odor control, and optimal dosages were established for both warm and cold periods. The formation of iron sulfide precipitates in sludge was confirmed, leading to a substantial reduction of odor emissions.
- Thermodynamic modelling of heterogeneous systems containing Mg^{2+} , NH_4^+ , Ca^{2+} and PO_4^{3-} ions enabled the prediction of favorable conditions for struvite ($\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) precipitation, supporting nutrient recovery strategies.
- Integrated computational and experimental studies on antioxidant ionic liquids based on L-carnitine and food acids revealed clear correlations between antioxidant activity and electronic properties. Redox transformations of vitamins B_2 , B_6 , B_9 and B_{12} , seasonal surveys of major water bodies, and anaerobic fermentation of agro-biomass with bioactive antioxidants were also investigated. Binary mixtures of antioxidants displayed synergistic, additive or antagonistic effects, generating results relevant for water treatment, environmental protection and biochemical process optimization.

Coordonatorul subprogramului de cercetare

POVAR Igor, dr. hab.

(numele, prenumele)



(semnătura)

Data: 19.01.2026

Lista lucrărilor științifice, științifico-metodice și didactice publicate în anul 2025 în cadrul programului instituțional de cercetare al organizației (2024-2027)

Titlul subprogramului Cercetări avansate în chimia computațională și ecologică, identificarea procedeele tehnologice de tratare, formare a calității și cantității apelor

Prioritatea strategică III. Biotehnologii și protecția mediului

Codul subprogramului 010603

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

1.1. monografii internaționale

Nu sunt

1.2. monografii naționale

1. GOREACIOC, T., NASTAS, R., LUPAȘCU, T. *Tratarea apelor naturale de ioni de nitrit*. Chișinău: Tipografia Print-Caro, 2025, 112 p.

2. Capitole în monografii naționale/internaționale

2.1. capitole în monografii internaționale

1. CEBAN, I., NASTAS, R. Adsorption of Nitrite Ions Using Activated Carbons Derived from Walnut Shells. In book: *Chemical and Materials Sciences: Research Findings Vol. 3*, Chapter 3, Publisher: BI International, 6 May 2025, pp. 39-73. <https://doi.org/10.9734/bpi/cmsrf/v3/5161>
2. NASTAS, R., CEBAN, I., LUPASCU, T. Plant-Based Activated Carbons for Cobalt and Strontium Removal: Insights into Adsorption Mechanisms. In book: *Chemical and Materials Sciences: Research Findings Vol. 2*, Publisher: BI International, 7 April 2025, pp. 142-191. <https://doi.org/10.9734/bpi/cmsrf/v2/5160>

2.2. capitole în monografii naționale

Nu sunt

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

3.1. culegere de articole sau materiale ale conferințelor internaționale

Nu sunt

3.2. culegere de articole sau materiale ale conferințelor naționale

Nu sunt

4. Articole în reviste științifice

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

1. CEBAN, G., NASTAS, R. Walnut Shells Activated Carbons for Adsorption of Nitrite Ions. *Acta chimica Slovenica*. 2025, 72, pp. 24-33. ISSN 1318-0207. <https://doi.org/10.17344/acsi.2024.8693> (IF 1.3)
(Q3 - <https://wos-journal.info/journalid/20634>)
2. CISTEACOV, M., DUCA, G., BLONSCHI, V., GLADCHI, V., LIS, A., BUNDUCHI, E. Dynamics of the self-purification processes in the waters of the Dniester River during the years 2015-2024 (Dubasari – Vadul lui Voda section). In: *Chemistry Journal of Moldova*. 2025, 20(1), pp. 17-27. ISSN 1857-1727. <https://doi.org/10.19261/cjm.2025.1318> (IF 0.5)
(Q4 - <https://wos-journal.info/journalid/8922>)
3. CORD, D., RIMBU, M. C., TANASE, C., TABLET, C., DUCA, Gh. Molecular Docking Study of Some Active Principles from *Silybum Marianum*, *Chelidonium Majus*, *Ginkgo Biloba*, *Gelsemium Sempervirens*, *Artemisia Annua*, and *Taraxacum Officinale*. In: *Chemistry Journal of Moldova*, 2025, 20(1), pp. 100-105. ISSN 1857-1727. <https://doi.org/10.19261/cjm.2025.1337> (IF 0.5)
(Q4 - <https://wos-journal.info/journalid/8922>)
4. GLADCHI, V., DUCA, Gh., BLONSCHI, V., CISTEACOV, M., LIS, A. The role of vitamin B₆ in the chemical self-purification processes of aquatic systems. In: *Studia Universitatis Babes-Bolyai Chemia*. 2025, 70, pp. 141-154. ISSN 1224-7154. <https://doi.org/10.24193/subbchem.2025.3.10> (IF 0.5)
(Q4 - <https://wos-journal.info/journalid/2109>)
5. GORINCIOI, E., VICOL, C., BOLOCAN, N., CIMPOIU, C., BARBA, A., NICA, S., DUCA, Gh. Harnessing Synergy: Investigation of the Antioxidant Interactions between trans-Resveratrol and L-Ascorbic Acid by Spectroscopic and DFT Methods. In: *Acta Chimica Slovenica*. 2025, 72(4), pp. 654–665. ISSN 1318-0207. <https://doi.org/10.17344/acsi.2025.9292> (IF 1.3)
(Q3 - <https://wos-journal.info/journalid/20634>)
6. GUTSANU, V., IPATE, A. M., LISA, G., & BOTNARU, M. Chrome–Polymer Composite as a Precursor for Obtaining a Sorbent with Selective Properties. *Colloid Journal*. 2025, 87(3), pp. 408-422. <https://doi.org/10.1134/S1061933X25600447> (IF 1.1)
(Q4 - <https://wos-journal.info/journalid/695>)
7. POVAR, I., SPINU, O., VISNEVSCHI, A. Quantifying the Buffering Action of Soil Minerals as Natural Defenders. In: *Earth Systems and Environment*. 2025, 9, pp. 919-934. <https://doi.org/10.1007/s41748-024-00494-x> (IF 4.7)
(Q1 - <https://wos-journal.info/journalid/8685>)
8. VIȘNEVSCHI A., POVAR I. New biological treatment method of domestic wastewater with simultaneous nitrification and denitrification based on detached biofilm. In: *Applied Water Science*. 2025, 15, 69. <https://doi.org/10.1007/s13201-025-02408-2> (IF 5.7)
(Q1- <https://wos-journal.info/journalid/11521>)

4.2. în alte reviste din străinătate recunoscute

1. DUCA, Gh. Criza Inteligentei Artificiale - Provocari globale si perspectivele asupra stiintei, tehnologiei si chimiei. In: *Academica*. 2025, 6-7, pp. 416-417. https://acad.ro/institutia/ACADEMICA/2025/nr06_07/06_07_art13.pdf
2. GOREACIOU, T., NASTAS, R., LUPASCU, T. Removal of nitrite ions from water by adsorption on chemically activated carbon. In: *Romanian Journal of Ecology & Environmental Chemistry* 2025, 7, no.2, pp. 68÷76. <https://doi.org/10.21698/rjeec.2025.207>

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

Categoria B

1. BLONSCHI, V., CISTEACOV, M., GLADCHI, V., BUNDUCHI, E., LIS, A. Transformări chimice ale vitaminei B2 în sistemele acvatic. In: *Revista de Știință, Inovare, Cultură și Artă „Akademos”*. 2025, 3(78), pp. 61-65. ISSN 1857-0461. <https://doi.org/10.52673/18570461.25.3-78.07>
2. POVAR, I., VIȘNEVSCHI, A., SPÎNU, O., SPĂTARU, P. Evaluarea și optimizarea sistemelor de epurare a apelor uzate prin crearea în premieră în Republica Moldova a departamentului de expertiză și audit tehnologic. In: *Revista de Știință, Inovare, Cultură și Artă „Akademos”*. 2024, 4(75), pp. 43-55. ISSN 1857-0461. <https://doi.org/10.52673/18570461.24.4-75.04> (Disponibil în IBN: 15 ianuarie 2025)

în alte reviste naționale

1. MOCANU, L., GONȚA, M. Degradarea și mineralizarea poluanților emergenți prin procese de oxidare catalitică omogenă. In: *Acta Universitatis Cahulensis*. 2025, Vol. XII, Partea I, Cahul, USC, pp. 285-291. ISSN 2587-3563, E-ISSN 2587-3571

5. Articole în culegeri științifice naționale/internaționale

5.1. culegeri de lucrări științifice editate peste hotare

Nu sunt

5.2. culegeri de lucrări științifice editate în Republica Moldova

Nu sunt

6. Articole în materiale ale conferințelor științifice

6.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

1. DUCA, Gh., ROMANCIUC, L., COVALIOVA, O., DUCA, M. Regular Scientific Events Organization within the Long-Term Period and its Role in Research Management. In: *Book of Abstracts of XIXth International Conference on Management Science and Engineering Management*, 15-18 July 2025, Lille, France, pp. 1370-1380. https://doi.org/10.1007/978-981-95-1595-0_97
2. DUCA, Gh., TRAVIN, S., ROMANCIUC, L., COVALIOVA, O. Dielectric Barrier Discharge Technology Applications for the Treatment of Micro- and Nanoplastic-Polluted Water

- Compartments. In: Book of Proceedings of *IXth Intl. Symposium on Dielectric Materials and Applications (ISyDMA)*, 7-9 May 2025, Marrakech, Morocco, Conf21- Invited Speaker: Gheorghe Duca. https://doi.org/10.1007/978-3-031-84809-4_3
3. MOCANU, L., GONTA, M. Gallic acid in wastewater: Environmental risks and advanced oxidation-based mitigation strategies. In: *Proceedings of the XXIII International Scientific-Practical Conference RNWCR-2025 „Resources of Natural Waters of the Carpathian Region” (Problems of protection and rational use)*, 29-30 May 2025, Lviv, Ukraine, pp. 240-242. https://www.researchgate.net/publication/392445254_Redox_equilibria_and_thermodynamics_in_natural_multicomponent_aqueous_systems
 4. POVAR, I., SPÎNU, O. Redox equilibria and thermodynamics in natural multicomponent aqueous systems. In: *Proceedings of the XXIII International Scientific-Practical Conference RNWCR-2025 „Resources of Natural Waters of the Carpathian Region” (Problems of protection and rational use)*, 29-30 May 2025, Lviv, Ukraine, pp. 7-11. https://www.researchgate.net/publication/392445254_Redox_equilibria_and_thermodynamics_in_natural_multicomponent_aqueous_systems
 5. SPĂȚARU, P., SPÎNU, O., VIȘNEVSCHI, A., POVAR, I. Eco-friendly and cost-effective treatment of organic sediments from wastewater. In: *Proceedings of the XXIII International Scientific-Practical Conference RNWCR-2025 „Resources of Natural Waters of the Carpathian Region” (Problems of protection and rational use)*, 29-30 May 2025, Lviv, pp. 243-248. https://www.researchgate.net/publication/392445325_Eco-friendly_and_cost-effective_treatment_of_organic_sediments_from_wastewater
 6. SPĂȚARU, P., SPÎNU, O., POVAR, I. Environmental impact of storage and remediation methods for POP-contaminated in the Republic of Moldova. In: *Proceedings of the XXIII International Scientific-Practical Conference RNWCR-2025 „Resources of Natural Waters of the Carpathian Region” (Problems of protection and rational use)*, 29-30 May 2025, Lviv, pp. 12-16. https://www.researchgate.net/publication/392445049_Environmental_impact_of_storage_and_remediation_methods_for_POP-contaminated_in_the_Republic_of_Moldova
 7. SPĂȚARU, P., VIȘNEVSCHI, A., SPÎNU, O., POVAR, I. Synergistic sludge–flotation integration for circular wastewater management and agricultural resource recovery. In: *Proceedings of the XX International Scientific Conference "Radiation, Technogenic-Ecological and Biological Safety: condition, ways and measures of improvement"*, June 19-21, 2025, Mykolaiv, Ukraine, pp. 112-114. <https://dspace.chmnu.edu.ua/jspui/bitstream/123456789/2973/1/%d0%9e%d0%a4-2025.%20%d0%a0%d0%b0%d0%b4%d1%96%d0%b0%d1%86%d1%96%d0%b9%d0%bd%d0%b0%2c%20%d1%82%d0%b5%d1%85%d0%bd%d0%be%d0%b3%d0%b5%d0%bd%d0%bd%d0%be-%d0%b5%d0%ba%d0%be%d0%bb%d0%be%d0%b3%d1%96%d1%87%d0%bd%d0%b0%20%d1%82%d0%b0%20%d0%b1%d1%96%d0%be%d0%bb%d0%be%d0%b3%d1%96%d1%87%d0%bd%d0%b0%20%d0%b1%d0%b5%d0%b7%d0%bf%d0%b5%d0%ba%d0%b0.pdf>
 8. SPÎNU, O., SPĂȚARU, P., POVAR, I. Investigation of halogenated organic pesticide contamination sources across the Republic of Moldova. In: *Proceedings of the XXIII International Scientific-Practical Conference RNWCR-2025 „Resources of Natural Waters of*

the Carpathian Region” (Problems of protection and rational use), 29-30 May 2025, Lviv, pp. 17-23.

https://www.researchgate.net/publication/392445152_Investigation_of_halogenated_organic_pesticide_contamination_sources_across_the_Republic_of_Moldova

9. TRAVIN, S., DUCA, Gh., VASEASHTA, A., COVALIOVA, O., ROMANCIUC, L. Dielectric Barrier Discharge: Generation and Enhancement of Hydrogen Peroxide Action. In: Proceedings of the *Eighth International Symposium on Dielectric Materials and Applications (ISyDMA'8)* ISyDMA 2024. Springer, Cham. pp. 19-43. https://doi.org/10.1007/978-3-031-84809-4_3 (Publicat 29 April 2025)

6.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

1. ARSENE, I., PURCEL, V. Study of molecular structures of highly stable conformers of ascorbic acid. In: Culegerea *Conferinței Științifico-Practice Internațională „Educație prin cercetare pentru o societate prosperă”*, ediția a XII-a, 1-2 martie, 2025, Chișinău, Republica Moldova, pp. 165-171. ISBN 978-9975-48-246-2. <https://doi.org/10.46727/c.v1.01-02-03-2025>
2. GORBACHEV, M., GORINCHOY, N., BALAN, I. Rolul tautomerului de carnitină în reacția sa cu acidul alimentar gentisic: studiu DFT. In: Culegerea *Conferinței Științifico-Practice Internațională „Educație prin cercetare pentru o societate prosperă”*, ediția a XII-a, 1-2 martie, 2025, Chișinău, Republica Moldova, pp. 132-135. <https://doi.org/10.46727/c.v1.01-02-03-2025>
3. GUȚANU., V. Unusual processes on anionites. In: Book of Abstracts of the *International Scientific Congress Research-Innovation-Innovative Entrepreneurship*, June 7-8, 2025, Chișinău, Republica Moldova, vol. I, pp. 315-324. <https://doi.org/10.46727/c.v1.07-08-06-2025.p315-324>. <https://dir.upsc.md/handle/123456789/8036/Congress-UPSC-07-08-06-2025-V1.pdf>
4. LIS, A., BUNDUCHI, E., GLADCHI, V., BLONSCHI, V., CISTEACOV, M. Modelarea proceselor de autopurificare a apelor în prezența vitaminelor din grupul B. În: Conferința științifică internațională *”Perspectivele și Problemele Integrării în Spațiul European al Cercetării și Educației”*, Universitatea de Stat „Bogdan Petriceicu Hasdeu” din Cahul, 2025, Vol.12, Partea 1, pp. 291-296. ISSN 2587-3563. E-ISSN 2587-3571. <https://ppr.usch.md/wp-content/uploads/2025/12/Volumul-XII-Partea-I.pdf>
5. MOCANU, L., GONȚA, M. Degradarea și mineralizarea poluanților emergenți prin procese de oxidare catalitică omogenă. In: Conferința științifică internațională *”Perspectivele și Problemele Integrării în Spațiul European al Cercetării și Educației”*, Universitatea de Stat „Bogdan Petriceicu Hasdeu” din Cahul, Volumul XII, Partea I, Cahul, USC, pp. 285-291. ISSN 2587-3563, E-ISSN 2587-3571. <https://ppr.usch.md/wp-content/uploads/2025/12/Volumul-XII-Partea-I.pdf>
6. MOCANU, L., GONTA, M. Catalytic oxidation of gallic acid: Mechanisms, kinetics, and byproduct analysis. In: *XIIth edition of the International Congress of Geneticists and Breeders of the Republic of Moldova*, 17-18 September 2025, Chisinau, Republic of Moldova, pp. 412-416. ISBN 978-9975-62-897-6. <https://doi.org/10.53040/cga12.60>
7. POVAR, I., SPÎNU, O. Analiza termodinamică a efectelor sinergice și antagoniste în extracția metalelor cu solvent. In: Culegerea *Conferinței Științifico-Practice Internațională „Educație prin*

cercetare pentru o societate prosperă”, ediția a XII-a, 1-2 martie, 2025, Chișinău, Republica Moldova, pp. 159-164. ISBN 978-9975-48-246-2. <https://doi.org/10.46727/c.v1.01-02-03-2025.p159-164>

8. POVAR, I., SPÎNU, O. Buffering capacity as a key indicator of soil resilience and stability under environmental stress. In: Book of Abstracts of the *International Scientific Congress Research-Innovation-Innovative Entrepreneurship*, June 7-8, 2025, Chișinău, Republica Moldova, vol. II, pp. 217-225. ISBN 978-9975-48-282-0. <https://doi.org/10.46727/c.v2.07-08-06-2025.p217-225>
<https://dir.upsc.md/handle/123456789/8040>

6.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

1. BALAN, I.; GORBACHEV, M.; GORINCHOY, N.; MOROZ, O. Activitatea antioxidantă a lichidelor ionice formate ca urmare a interacțiunii carnitinei cu acizii alimentari. In: Culegerea *Conferinței științifice naționale cu participare internațională „INTEGRARE PRIN CERCETARE ȘI INOVARE”*, dedicată Zilei Internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare, 6-7 noiembrie 2025, Chișinău, Republica Moldova, pp. 640-645. ISBN 978-9975-62-687-3. <https://doi.org/10.59295/spd2025e.83>. <https://drive.google.com/file/d/1QeiqRSrG-o9csFOAVwPupbQRs6X3hTvf/view>.
2. BLONSCHI, V., GLADCHI, V., CISTEACOV, M., BUNDUCHI, E., LIS, A. Estimarea proceselor de autopurificare a apelor lacului Dănceni prin conținutul de substanțe biogene (perioada anilor 2015-2024). In: Culegerea *Conferinței științifice naționale cu participare internațională „INTEGRARE PRIN CERCETARE ȘI INOVARE”*, dedicată Zilei Internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare, 6-7 noiembrie 2025, Chișinău, Republica Moldova, pp. 646-652. ISBN 978-9975-62-687-3. <https://doi.org/10.59295/spd2025e.84>. <https://drive.google.com/file/d/1QeiqRSrG-o9csFOAVwPupbQRs6X3hTvf/view>
3. GONTA, M., MOCANU, L., LEONTIEVA, E. Procese de oxidare avansată a surfactantului anionic dodecilbenzosulfonat de sodiu. In: Culegerea *Conferinței științifice naționale cu participare internațională „INTEGRARE PRIN CERCETARE ȘI INOVARE”*, dedicată Zilei Internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare, 6-7 noiembrie 2025, Chișinău, Republica Moldova, pp. 670-676. ISBN 978-9975-62-687-3. <https://doi.org/10.59295/spd2025e.87>. <https://drive.google.com/file/d/1QeiqRSrG-o9csFOAVwPupbQRs6X3hTvf/view>
4. LIS, A., GLADCHI, V., BUNDUCHI, E., BLONSCHI, V. Optimizarea extracției asistate cu ultrasunete a compușilor bioactivi din semințele de *Cannabis Sativa L.* In: Culegerea *Conferinței științifice naționale cu participare internațională „INTEGRARE PRIN CERCETARE ȘI INOVARE”*, dedicată Zilei Internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare, 6-7 noiembrie 2025, Chișinău, Republica Moldova, pp. 706-713. ISBN 978-9975-62-687-3. <https://doi.org/10.59295/spd2025e.92>. <https://drive.google.com/file/d/1QeiqRSrG-o9csFOAVwPupbQRs6X3hTvf/view>
5. MOCANU, L., GONTA, M. Oxidarea și mineralizarea catecolului din soluții apoase utilizând procese omogene. In: Culegerea *Conferinței științifice naționale cu participare internațională „INTEGRARE PRIN CERCETARE ȘI INOVARE”*, dedicată Zilei Internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare, 6-7 noiembrie 2025, Chișinău, Republica Moldova, pp. 722-729. ISBN 978-

9975-62-687-3.

<https://doi.org/10.59295/spd2025e.94>.

<https://drive.google.com/file/d/1QeiqRSrG-o9csFOAVwPupbQRs6X3hTvf/view>

6. POVAR, I., SPÎNU, O. Analiza variațiilor funcțiilor termodinamice în sisteme reale de tip „Sare precipitată – soluție apoasă”. In: Culegerea *Conferinței științifice naționale cu participare internațională „INTEGRARE PRIN CERCETARE ȘI INOVARE”*, dedicată Zilei Internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare, 6-7 noiembrie 2025, Chișinău, Republica Moldova, pp. 735-742. ISBN 978-9975-62-687-3. <https://doi.org/10.59295/spd2025e.96>. <https://drive.google.com/file/d/1QeiqRSrG-o9csFOAVwPupbQRs6X3hTvf/view>
7. SHEPEL, D., SPĂTARU, P., VIȘNEVSCHI, A. Study of the composition and distribution of sulfur-containing compounds in wastewater treatment and methods for their determination. In: *Conferința științifică națională cu participare internațională „Integrare prin cercetare și inovare”*. 7-8 noiembrie, 2024, Chișinău, Republica Moldova, pp. 697-703. ISBN 978-9975-62-808-2. <https://doi.org/10.59295/spd2024n.96> https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare_articol/220676 (Publicat în 27 ianuarie 2025)
8. ȘUBĂ A., PUȚUNTICĂ V. Cubic differential systems with a bundle of three invariant straight lines and the line at infinity of multiplicity two. In: Culegerea *Conferinței științifice naționale cu participare internațională „INTEGRARE PRIN CERCETARE ȘI INOVARE”*, dedicată Zilei Internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare, 6-7 noiembrie 2025, Chișinău, Republica Moldova, pp. 807-812. ISBN 978-9975-62-687-3. <https://doi.org/10.59295/spd2025e.106>. <https://drive.google.com/file/d/1QeiqRSrG-o9csFOAVwPupbQRs6X3hTvf/view>

6.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

Nu sunt

6.5. Materiale la Saloane de invenții:

1. **Premiu special „Lifetime Achievement Award”** LUPASCU, T. In: *Ediția a XVII-a a Salonului European de Creativitate și Inovație EUROINVENT 2025*, 8-10 mai 2025, Iași, România.
2. **Medalia de Aur:** LUPASCU, T., DUCA, GH., LUPASCU, L. Antimicrobial properties of ozone-oxidized enotannins. In: *Ediția a XVII-a a Salonului European de Creativitate și Inovație EUROINVENT 2025*, 8-10 mai 2025, Iași, România.
3. **Medalia de Aur:** BLONSCHI, V., GLADCHI, V., DUCA, Gh. Cartea „Participarea substanțelor tiolice în procesele de autopurificare chimică a apelor naturale”. In: *Salonul Internațional de Invenție și Antreprenariat Inovativ*, organizat de Universitatea Pedagogică de Stat "Ion Creangă", 6-7 iunie 2025, Chișinău, Republica Moldova.
4. **Medalia de Aur:** LIS, A., GLADCHI, V., DUCA, Gh. Monografie „Legități de transformare fotochimică a unor substanțe tiolice în sistemele acvatice”. In: *Salonul Internațional de Invenție și Antreprenariat Inovativ*, organizat de Universitatea Pedagogică de Stat "Ion Creangă", 6-7 iunie 2025, Chișinău, Republica Moldova.

5. **Medalia de Aur:** MOCANU, L., DUCA, GH., GONTA, M. Aplicarea metodelor fizico-chimice combinate la înlăturarea poluanților textili din soluții apoase. In: *Salonul Internațional de Inventică și Antreprenoriat Inovativ*, organizat de Universitatea Pedagogică de Stat "Ion Creangă", 6-7 iunie 2025, Chișinău, Republica Moldova.
6. **Medalia de Aur:** VIȘNEVSCHI, A., SPĂȚARU, P., SPÎNU, O., **POVAR, I.** Improving wastewater treatment efficiency in the meat processing industry. In: *Salonul Internațional de Inventică și Antreprenoriat Inovativ*, organizat de Universitatea Pedagogică de Stat "Ion Creangă", 6-7 iunie 2025, Chișinău, Republica Moldova.
7. **Medalia de Aur:** VIȘNEVSCHI, A., SPĂȚARU, P., SPÎNU, O., POVAR, I. Improving wastewater treatment efficiency in the dairy processing industry. In: *Salonul Internațional de Inventică și Antreprenoriat Inovativ*, organizat de Universitatea Pedagogică de Stat "Ion Creangă", 6-7 iunie 2025, Chișinău, Republica Moldova.
8. **Medalia de Aur:** VIȘNEVSCHI, A. Process and apparatus for the biological treatment of domestic wastewater with simultaneous nitrification and denitrification. In: *Salonul Internațional de Inventică și Antreprenoriat Inovativ*, organizat de Universitatea Pedagogică de Stat "Ion Creangă", 6-7 iunie 2025, Chișinău, Republica Moldova.
9. **Medalia de Aur:** GUȚANU, V. Process for modifying cross-linked ionic polymers containing R_4N^+ groups with Cr(III) compounds. In: *Salonul Internațional de Inventică și Antreprenoriat Inovativ*, organizat de Universitatea Pedagogică de Stat "Ion Creangă", 6-7 iunie 2025, Chișinău, Republica Moldova.
10. **Medalia de aur // Diplomă de excelență:** POVAR, I., SPÎNU, O., proiectul „*Elucidarea termodinamică și prezicerea sinergismului chimic în procese chimice complexe*”, cifrul 24.80012.5007.19SE. In: Salonul Internațional al Cercetării Științifice, Inovării și Inventicii PRO INVENT, ediția a XXII-a, 15-17 octombrie 2025, Cluj-Napoca, România, p. 215-216.
<https://proinvent.utcluj.ro/assets/docs/catalogs/2025.pdf>
11. **Medalia de Aur // Diplomă de Excelență:** VIȘNEVSCHI, A. *Procedeu și instalație de epurare biologică a apelor uzate menajere cu nitrificare și denitrificare simultană*. In: Salonul Internațional al Cercetării Științifice, Inovării și Inventicii PRO INVENT, ediția a XXII-a, 15-17 octombrie 2025, Cluj-Napoca, România, p. 215-216.
<https://proinvent.utcluj.ro/assets/docs/catalogs/2025.pdf>
12. **Medalia de Aur// Diplomă de Excelență:** GUȚANU V., BOTNARU, M. *Procedeu de modificare cu compuși de Cr(III) a polimerilor ionogeni reticulați ce conțin grupe R_4N^+* . In: Salonul Internațional al Cercetării Științifice, Inovării și Inventicii PRO INVENT, ediția a XXII-a, 15-17 octombrie 2025, Cluj-Napoca, România, p. 223.
<https://proinvent.utcluj.ro/assets/docs/catalogs/2025.pdf>
13. **Medalia de Aur:** GUȚANU, V., BOTNARU, M. *Procedeu de modificare cu compuși de Cr(III) a polimerilor ionogeni reticulați ce conțin grupe R_4N^+* . In: Expoziția Internațională Specializată INFOINVENT 2025, 03-05 decembrie 2025, Chișinău, Republica Moldova.
14. **Medalia de Aur:** VIȘNEVSCHI, A. „*Procedeu și instalație de epurare biologică a apelor uzate menajere cu nitrificare și denitrificare simultană*”. In: Expoziția Internațională Specializată INFOINVENT 2025, 03-05 decembrie 2025, Chișinău, Republica Moldova.
15. **Medalia de Argint // Diplomă:** NASTAS, R., LUPAȘCU, T., PETUHOV, O., ȚÎMBALIUC, N., CEBAN, I., BOLDURESCU, N., MITINA, T. CLEANWATER – Technologies and

- intelligent monitoring system for wastewater treatment and real-time assessment of water quality. In: *Ediția a XVII-a a Salonului European de Creativitate și Inovație EUROINVENT 2025*, 8-10 mai 2025, Iași, România.
16. **Medalia de Argint:** GUȚANU, V., BOTNARU, M. *Process for modifying cross-linked ionic polymers containing R_4N^+ groups with Cr(III) compounds*. In: The 29th International Exhibition of Inventions “INVENTICA 2025”, June 25-27, 2025, Iasi, Romania.
 17. **Medalia de Bronz:** GUȚANU, V., BOTNARU, M. *Process for modifying cross-linked ionic polymers containing R_4N^+ groups with Cr(III) compounds*. In: *Ediția a XVII-a a Salonului European de Creativitate și Inovație EUROINVENT 2025*, 8-10 mai 2025, Iași, România.
 18. **Medalia de Bronz:** SPATARU, P., VISNEVSCHI, A., SPINU, O., SPATARU, T., POVAR, I. „*Procedeu de tratare a nămolului activ provenit în urma epurării apelor reziduale*”. In: Expoziția Internațională Specializată INFOINVENT 2025, 03-05 decembrie 2025, Chișinău, Republica Moldova.

7. Teze ale conferințelor științifice

7.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

1. DUCA, Gh., ROMANCIUC, L., COVALIOVA, O., NICA, S. The Role of Redox Processes in Sustaining Life on Earth. In: *Book of the 2nd International Conference on Science for the Planet – SciPlanet-2025*, Campobasso, Italy, 23-25 June 2025, p. 76. (<http://www.congresso-sciplanet.org>), <https://www.congresso-sciplanet.org/>, <https://storage.e.jimdo.com/file/8d46f451-73b1-4fcc-8ff8-35a162b7167a/Atti%20della%20II%20Edizione.pdf>.
2. BOLOCAN, N., POVAR, I., SPÎNU, O. Thermodynamic Framework for Quantifying Drug Precipitation and Solubility in Cyclodextrin-Based Systems. In: *The 1st International Electronic Conference on Medicinal Chemistry and Pharmaceuticals*, 1–30 November 2025, Submission ID: sciforum-151609. <https://sciforum.net/paper/view/25769>.
3. CEBAN, I., NASTAS, R., PETUHOV, O., LUPASCU, T. Testing of metal-carbon composites for environmental applications. In: *Book of Abstracts of the Ukrainian conference with international participation "Chemistry, Physics and Technology of Surface"* dedicated to the 95th birthday of Oleksii Chuiko, Academician of NAS of Ukraine, 28-29 May, 2025, Kyiv, Ukraine, p. 45. ISBN 978-617-95367-2-4 https://drive.google.com/file/d/1kS_ZoxnrTez-yF9xru-4_QKGAE78CDP9/view
4. GORINCHOY, N., BALAN, I., POLINGER, V. Jahn–Teller and Pseudo Jahn–Teller Effects in van der Waals complexes CH₄-OX (X=C, N, O). *The 26th International Conference on the Jahn-Teller Effect*, York University (Toronto, CA) and University of Louisville (US), May 5 - 9, 2025 (online). <https://sites.google.com/view/jt26th-2025/program>
5. GUTSANU, V. Metal compounds in the phase of cross-linked ionic polymers. In: *Proceeding of Anual Internațional Congress on Chemistry*, March 27–28, 2025, Oxford, United Kingdom, p. 19. <https://www.researchgate.net/publication/390411452>
6. GUTSANU, V., COSTIS, V. Sorption of thiocyanate ions on commercial polymer and comp ositete. In: *Book of Abstracts of the Ukrainian conference with international participation "Chemistry, Physics and Technology of Surface"* dedicated to the 95th birthday of Oleksii

- Chuiko, Academician of NAS of Ukraine, 28-29 May, 2025, Kyiv, Ukraine, p. 57. ISBN 978-617-95367-2-4 https://drive.google.com/file/d/1kS_ZoxnrTez-yF9xru-4_QKgAE78CDP9/view
7. LIS, A., GLADCHI, V., BUNDUCHI, E., BLONSCHI, V. Volatile lavender oil extraction for Cosmetic applications. In: *International Symposium "The Environment and the Industry", SIMI 2025*. Bucuresti: 2025, 23-24 OCTOBER 2025, pp. 126-127. DOI: <http://doi.org/10.21698/simi.2025.ab55>
 8. LUPASCU, T., DUCA Ch., L. LUPASCU, L. Antimicrobial properties of ozone-oxidized enotannins. In: Book of Abstracts of the *Ukrainian conference with international participation "Chemistry, Physics and Technology of Surface"* dedicated to the 95th birthday of Oleksii Chuiko, Academician of NAS of Ukraine, 28-29 May, 2025, Kyiv, Ukraine, p. 224. ISBN 978-617-95367-2-4 https://drive.google.com/file/d/1kS_ZoxnrTez-yF9xru-4_QKgAE78CDP9/view
 9. MOCANU, L., GONTA, M. Comparative study on the Fenton oxidation of gallic acid and catechol in aqueous solutions. In: Book of Abstracts of the *28th International Symposium "Environment and Industry" SIMI 2025*, October 23rd-24th 2025, Bucharest, Romania, pp. 27-28. <http://doi.org/10.21698/simi.2025.ab07>
 10. PETUHOV, O., NASTAS, R., LUPASCU, T., N. ȚIMBALIUC, N., CEBAN, I., BOLDURESCU, N. Advanced carbon adsorbents for the removal of emerging contaminants from wastewater. In: Book of Abstracts of the *Ukrainian conference with international participation "Chemistry, Physics and Technology of Surface"* dedicated to the 95th birthday of Oleksii Chuiko, Academician of NAS of Ukraine, 28-29 May, 2025, Kyiv, Ukraine, p. 81. ISBN 978-617-95367-2-4. https://drive.google.com/file/d/1kS_ZoxnrTez-yF9xru-4_QKgAE78CDP9/view
 11. PETUHOV, O., VLASE, T., LUPASCU, T., ȚIMBALIUC, N., BOLDURESCU, N. Sustainable production of carbon-based adsorbents from waste tires for water purification. In: Book of Abstracts of the *Ukrainian conference with international participation "Chemistry, Physics and Technology of Surface"* dedicated to the 95th birthday of Oleksii Chuiko, Academician of NAS of Ukraine, 28-29 May, 2025, Kyiv, Ukraine, p. 80. ISBN 978-617-95367-2-4. https://drive.google.com/file/d/1kS_ZoxnrTez-yF9xru-4_QKgAE78CDP9/view
 12. POVAR, I., SPÎNU, O. Thermodynamic modeling of heterogeneous chemical processes in multicomponent aquatic systems. In: Book of Abstracts of the *Ukrainian conference with international participation "Chemistry, Physics and Technology of Surface"* dedicated to the 95th birthday of Oleksii Chuiko, Academician of NAS of Ukraine, 28-29 May, 2025, Kyiv, Ukraine, p. 83. ISBN 978-617-95367-2-4. https://drive.google.com/file/d/1kS_ZoxnrTez-yF9xru-4_QKgAE78CDP9/view
 13. POVAR, I., SPÎNU, O., BOLOCAN, N. Unified thermodynamic methodology for modeling chemical reactions in heterogeneous equilibria applied to wastewater treatment and reuse. In: Abstract Book of *The 6th International Electronic Conference on Applied Sciences*, 9–11 December 2025, p. 201. https://sciforum.net/events_files/1346/customs/0bbbb3438893495ca0d25a42c408209a.pdf
 14. POVAR, I., SPÎNU, O., BOLOCAN, N. Fundamentals of synergism in chemistry. In: Book of Abstracts of the *28th International Symposium "Environment and Industry" SIMI 2025*, October 23rd-24th 2025, Bucharest, Romania, pp. 122-123. <http://doi.org/10.21698/simi.2025.ab53>

15. POVAR, I., SPÎNU, O., BOLOCAN, N. Thermodynamic response of soluble and insoluble heavy metal species in soils to external perturbations. In: Book of Abstracts of the *28th International Symposium "Environment and Industry" SIMI 2025*, October 23rd-24th 2025, Bucharest, Romania, pp. 111-112. <http://doi.org/10.21698/simi.2025.ab48>
16. SPATARU, P., SHEPEL, D., VISNEVSCHI, A. Nitrogen and sulfur relationships in flotation of organic sludge residues in wastewater treatment technology. In: Book of Abstracts of the *Ukrainian conference with international participation "Chemistry, Physics and Technology of Surface"* dedicated to the 95th birthday of Oleksii Chuiko, Academician of NAS of Ukraine, 28-29 May, 2025, Kyiv, Ukraine, p. 91. ISBN 978-617-95367-2-4. https://drive.google.com/file/d/1kS_ZoxnrTez-yF9xru-4_QKgAE78CDP9/view
17. SPATARU, P., VISNEVSCHI, A., SPÎNU, O., POVAR, I. Sustainable low energy treatment of municipal sludge through mesothermophilic aerobic anaerobic processing. In: Proceedings of the *IX International Scientific and Technical Conference "Pure Water. Fundamental, Applied and Industrial Aspects"*, dedicated to the 25th anniversary of the Faculty of Biotechnology and Biotechnics, National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", 20-21 November, 2025, Kyiv, Ukraine, p. 52-54. <http://en.purewater.net.ua/wp-content/uploads/2025/11/materiali-2025.pdf>
18. TIMBALIUC, N., PETUHOV, O., LUPAȘCU, T. Adsorption of quinacrine dihydrochloride on locally produced lignocellulosic activated carbons: effects of porosity, pH, and temperature. In: Book of Abstracts of the *28th International Symposium "Environment and Industry" SIMI 2025*, October 23rd-24th 2025, Bucharest, Romania, pp. 15-16, <http://doi.org/10.21698/simi.2025.ab01>

7.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

1. BALAN, I.; FILIP, P.; ANDRUH, M.; DUCA, Gh.; NICA, S. DFT study of photoswitching systems based on fluorescent azulenyl-substituted dithienylcyclopentenones. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15 2025, Chișinău, Republica Moldova, p. 105. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF). https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>
2. BOGDEVICI, O, CULIGHIN, E, NICOLAU, E, GRIGORAS, M. The study of groundwater and surface water interaction using geochemical and isotope composition. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15 2025, Chișinău, Republica Moldova, p. 76. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF). https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>
3. BOGDEVICI, O, RASTIMESINA, I., POSTOLACHI, O., CULIGHIN, E., NICOLAU, E., VORONA, V., GRIGORAS, M. The remediation of high contaminated soil by POPs using biotechnology approach In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15 2025, Chișinău, Republica Moldova, p. 181. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF).

- https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf.
<https://doi.org/10.19261/medmol25>
4. BOLOCAN, N., SPÎNU, O., POVAR, I. Thermodynamic insights into synergistic enhancement of drug solubility. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15 2025, Chişinău, Republica Moldova, p. 62. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF).
https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf.
<https://doi.org/10.19261/medmol25>
 5. BOLOCAN, N., SPÎNU, O., POVAR, I. Quantitative thermodynamic modeling of drug precipitation-dissolution in cyclodextrin-based multicomponent aqueous systems. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republica Moldova, p. 87. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF).
https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>
 6. CEBAN, I., NASTAS, R., PETUHOV, O., BOLDURESCU, N., MOLDOVANU, S., LUPASCU, T. Carbonaceous composites from plant materials: production and characterization. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republica Moldova, p. 166. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF).
https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>
 7. CEBAN, I., PETUHOV, O., BUGA, M., MORARU, E. Obtaining activated carbon by chemical method by utilizing local waste. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republica Moldova, p. 166. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF).
https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf.
<https://doi.org/10.19261/medmol25>
 8. CEBAN, I., NASTAS, R. Testing of carbonaceous composites obtained by the hydrothermal method for the removal of nitrite ions from water. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republica Moldova, p. 180. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF).
https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf.
<https://doi.org/10.19261/medmol25>
 9. DUCA, Gh.; ROMANCIUC, L.; COVALIOVA, O. Reduced forms of oxygen and their role in the redox-catalytic reactions *in vivo*. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republica Moldova, p. 103. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF).
https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf.
<https://doi.org/10.19261/medmol25>
 10. GLADCHI V., DUCA Gh., LIS, A., BLONSCHI, V., BUNDUCHI, E. Self-Purification Processes in Natural Waters: Ecochemical Mechanisms and Environmental Protection

- Perspectives. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republica Moldova, p. 20. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF). https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>
11. GLADCHI, V., BLONSCHI, V., LIS, A., BUNDUCHI, E., DUCA, GH. Chemical composition and pollution level of the Dniester river in the section town of Dubăsari – town of Vadul lui Vodă. Period 2020-2024. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republica Moldova, p. 182 ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF). https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>
 12. GONTA, M., LEONTIEVA, E., MOCANU, L. Optimization of anionic surfactant removal using gallic acid-assisted Fenton oxidation. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republica Moldova, p. 47. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF). https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>
 13. LIS, A., GLADCHI, V., BUNDUCHI, E., BLONSCHI, V. Hydrogen peroxide-induced photolysis of vitamin B9 in aquatic systems. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republica Moldova, p. 174 ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF). https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>
 14. LUPASCU, T., PETUHOV, O., NASTAS, R., TIMBALIUC, N., MITINA, T. Synthesis and application of new adsorptive nanomaterials for environmental protection and human health. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republica Moldova, p. 18 ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF). https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>
 15. MOCANU, L., GONTA, M. Optimization and kinetic evaluation of catechol degradation in aqueous solutions. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republica Moldova, p. 68. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF). https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>
 16. NASTAS, R., CEBAN, I., GOREACIOC, T., LUPASCU, T. Modified carbonaceous adsorbents for removal of sulphide and nitrite ions from water. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republica Moldova, p. 179 ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF). https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>

17. SHEPEL, D. Infrared spectroscopy of human urinary stones in Republic of Moldova. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republic of Moldova, p. 92. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF). https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>
18. SHEPEL, D. Spectrophotometric method for quantitative determination of the drug "mabipan". In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republic of Moldova, p. 93. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF). https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>
19. SHEPEL, D., VIŞNEVSCHI, A., SPĂTARU, P. Determination of humic substances content in the wastewater of the treatment facilities of Cricova, Republic of Moldova. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republic of Moldova, p. 176. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF). https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>
20. SHEPEL, D. Application of a new herbal drug based on fennel seed extract for the treatment of dental diseases. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republic of Moldova, p. 192. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF). https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>
21. SHEPEL, D. Application of thin layer chromatography for the analysis of sclareol in clary sage concrete. In: Book of Abstracts of the *MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES congress* (MedMolMed 2025), November 10-15, 2025, Chişinău, Republic of Moldova, p. 193. ISBN 978-9975-62-925-6 (PDF). https://ichem.md/sites/default/files/2025-12/MedMolMed_2025_Book%20of%20abstracts.pdf. <https://doi.org/10.19261/medmol25>

7.3. în lucrările conferinţelor ştiinţifice naţionale cu participare internaţională

1. BUNDUCHI, E., MOCANU, L. Redox-catalytic transformation of persistent textile dyes in simulated natural aquatic environments. In: Book of Abstracts *National Conference with International Participation "Natural Sciences in the Dialogue of Generations - 2025"*, 17-19 September, 2025, Chisinau, Republic of Moldova, p. 142. ISBN 978-9975-62-898-3. https://agarm.md/wp-content/uploads/2025/09/2_Conference_Abstract-book_final-22.09.2025.pdf
2. CISTEACOV, M.; BLONSCHI, V.; GLADCHI, V. Intensity of photochemical transformation of vitamin B₂ in aqueous systems. In: Book of Abstracts *National Conference with International Participation "Natural Sciences in the Dialogue of Generations - 2025"*, 17-19 September, 2025, Chisinau, Republic of Moldova, p. 145. ISBN 978-9975-62-898-3. https://agarm.md/wp-content/uploads/2025/09/2_Conference_Abstract-book_final-22.09.2025.pdf

3. GLADCHI, V.; BLONSCHI, V.; CISTEACOV, M.; LIS, A. DUCA, Gh. Chemical degradation of vitamin B₆ in the aquatic environment. In: Book of Abstracts *National Conference with International Participation "Natural Sciences in the Dialogue of Generations - 2025"*, 17-19 September, 2025, Chisinau, Republic of Moldova, p. 151. ISBN 978-9975-62-898-3. https://agarm.md/wp-content/uploads/2025/09/2_Conference_Abstract-book_final-22.09.2025.pdf
4. GRIGORAS, C., GONTA, M., CIOCÂRLAN, Al. Standardization of propolis as a raw material of medical and cosmetic interest. In: Book of Abstracts *National Conference with International Participation "Natural Sciences in the Dialogue of Generations - 2025"*, 17-19 September, 2025, Chisinau, Republic of Moldova, p. 152. ISBN 978-9975-62-898-3. https://agarm.md/wp-content/uploads/2025/09/2_Conference_Abstract-book_final-22.09.2025.pdf
5. LIS A., GLADCHI V., BUNDUCHI E. Obtaining and evaluation of Cannabis Sativa seeds extract as an ingredient in cosmetic products. In: Book of Abstracts *National Conference with International Participation "Natural Sciences in the Dialogue of Generations - 2025"*, 17-19 September, 2025, Chisinau, Republic of Moldova, p. 156. ISBN 978-9975-62-898-3. https://agarm.md/wp-content/uploads/2025/09/2_Conference_Abstract-book_final-22.09.2025.pdf
6. MOCANU, L. GONTA, M., LEONTIEVA, E., Catalytic degradation of sodium dodecylbenzenesulfonate: A comparative assessment of Fenton and Photo-Fenton oxidation. In: Book of Abstracts *National Conference with International Participation "Natural Sciences in the Dialogue of Generations - 2025"*, 17-19 September, 2025, Chisinau, Republic of Moldova, p. 157. ISBN 978-9975-62-898-3. https://agarm.md/wp-content/uploads/2025/09/2_Conference_Abstract-book_final-22.09.2025.pdf
7. POVAR, I., SPÎNU, O. Modelare termodinamică a interacțiunilor fizico-chimice în ecosisteme acvatice multicomponente eterogene. In: Book of Abstracts *National Conference with International Participation "Natural Sciences in the Dialogue of Generations - 2025"*, 17-19 September, 2025, Chisinau, Republic of Moldova, p. 162. ISBN 978-9975-62-898-3. https://agarm.md/wp-content/uploads/2025/09/2_Conference_Abstract-book_final-22.09.2025.pdf
8. POVAR, I., SPÎNU, O., BOLOCAN, N. Investigație termodinamică a interacțiunilor sinergice și antagoniste în extracția metalelor în sistemele lichid – lichid. In: Book of Abstracts *National Conference with International Participation "Natural Sciences in the Dialogue of Generations - 2025"*, 17-19 September, 2025, Chisinau, Republic of Moldova, p. 161. ISBN 978-9975-62-898-3. https://agarm.md/wp-content/uploads/2025/09/2_Conference_Abstract-book_final-22.09.2025.pdf

7.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

Nu sunt

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

8.1. cărți (cu caracter informativ)

1. BOGDEVICI, O. Report on spatial mapping of emission for 2022. Pre-print cu 15 Hărți digitale.

2. DRUCIOC, S., BOGDEVICH, O., BYKOVA, E., VASILIEV, I., KIRILLOVA, T., MOSANU, E KUZNETSOV, E. Informative Inventory Report of the Republic of Moldova, 1990-2022. Chișinău: Primex-Com, 2024, 69 p. ISBN 978-9975-3347-8-5. <https://ichem.md/sites/default/files/2025-01/Informative%20Inventory%20Report%20of%20RM%201990-2022.pdf> (publicat în ianuarie 2025)

8.2. enciclopedii, dicționare

Nu sunt

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

Nu sunt

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

9.1. eliberate de către oficii de peste hotare de protecție a proprietății intelectuale

Nu sunt

9.2. eliberate de Agenția de Stat pentru Proprietatea Intelectuală

1. BLONSCHI, V., GLADCHI, V., BUNDUCHI, E., CISTEACOV, M., LIS, A., DUCA, G. *Procedeu de evaluare a gradului de poluare a apelor de suprafață*. Nr. depozit: s 2025 0047, Hotărâre nr. 11893 din 2025.09.19. https://agepi.gov.md/sites/default/files/bopi/BOPI_11_2025.pdf
2. GUȚANU, V., BOTNARU, M. *Procedeu de modificare cu compuși de Cr(III) a polimerilor ionogeni reticulați ce conțin grupe R_4N^+* . Cerere de brevet de invenție. Nr. Depozit: s 2025. 001
3. GUȚANU, V., COSTIȘ, V. *Sorbent pe bază de compozit Cr-polimer pentru îndepărtarea metalelor grele din soluții*. Cerere de brevet de invenție. Nr. Depozit: s 2025 0046.
4. PETUHOV, O., BOLDURESCU, N., ȚIMBALIUC, N., NASTAS, R., CEBAN, I., LUPĂȘCU, T. *Procedeu de mărire a capacității de schimb ionic a pectinelor prin oxidare*. Cerere de brevet de invenție. Nr. Depozit: a 2025 0022.
5. LUPASCU, T., DUCA, GH., LUPASCU, L. *Proprietăți antimicrobiene a enotaninurilor oxidate cu ozon*. Cerere de brevet de invenție. Nr. depozit: a 2025 0012.
6. VISNEVSCHI, A. *Procedeu și instalație de epurare biologică a apelor uzate menajere cu nitrificare și denitrificare simultană*. Brevet MD 1807 Z 2025.07.31. Nr. depozit: s 2024 0055; Data depozit: 2024.06.04. <https://db.agepi.md/inventions/Details.aspx?id=s%202024%200055>

10. Lucrări științifico-metodice și didactice

10.1. manuale pentru învățământul preuniversitar (aprobate de ministerul de resort)

Nu sunt

10.2. manuale pentru învățământul universitar (aprobate de consiliul științific/senatul instituției)

Nu sunt

10.3. alte lucrări științifico-metodice și didactice

1. GONȚA, M. Biofarmacia și farmacocinetica. Îndrumar pentru lucrările de laborator. Universitatea de Stat din Moldova, Facultatea de Chimie și Tehnologie chimică, Departamentul Chimie industrială și ecologică "Acad. Gh. Duca". Chișinău: Ed. CEP USM, 2025, 169 p. ISBN 978-9975-62- 852-5.
2. DUCA, M., DUCA, Gh., CLAPCO, S., DOMENCO, R. Metodologia si etica cercetării, repere teoretice și practice, etica cercetării. Ed.: Istros a Muzeului Brailei "Carol I", Academia Romana, Seria "Basarabica", 2025, 175 p. ISBN 978-606-654-550-1.

Coordonatorul subprogramului de cercetare POVAR Igor, dr. hab.

(numele, prenumele)


(semnătura)

Data: 19.01.2026

Componenta echipei de cercetare**Codul subprogramului 010603****Laboratorul: Chimie ecologica**

Echipa Laboratorului Chimie ecologica pentru 2025							
Nr	Nume, prenume	Anul nașterii	Titlul științific	Funcția	Norma de muncă	Data angajării	Data eliberării*
1.	Lupașcu Tudor	1950	Dr. hab.	Șef de laborator	1.0	02.01.2025	
2.	Ciobanu Mihail	1948	Dr. hab.	Cer. șt. principal	0.25	02.01.2025	
3.	Guțanu Vasile	1944	Dr.hab.	Cer. șt. coordonator	0.25 cumul intern	02.01.2025	
4.	Nastas Raisa	1952	Dr.	Cer. șt. coordonator	1.0	28.01.2025-27.01.2030	
5.	Petuhov Oleg	1985	Dr.	Cer. șt. coordonator	1.0	28.01.2025-27.01.2030	
6.	Țîmbaliuc Nina	1960	Dr.	Cer. șt. coordonator	1.0	02.01.2025	
7.	Ceban Irina	1991	Dr.	Cer. șt. superior	1.0	02.01.2024	
8.	Boldurescu Nina	1981		Cer. științific	1.0	02.01.2024	
9.	Costiș Valentina	1959		Cer. șt. stagiar	0.25	02.01.2025	
10	Goreacioc Tatiana	1980	Dr.	Cer. științific	0.25 cumul extern	02.01.2025	
11	Grigoraș Diana	1977		Cer. științific	1.0	02.01.2024	

Laboratorul: Laboratorul Monitoring Calității a Mediului

Echipa subprogramului pentru 2025							
Nr	Nume, prenume	Anul nașterii	Titlul științific	Funcția	Norma de muncă	Data angajării	Data eliberării*
1.	Bogdevici Oleg	1963	Dr. șt	Cerc. Șt. coord	1,0	02.01.2025	
2.	Culighin Elena	1989	Dr. șt	Cerc. șt	1,0	02.01.2025	
3.	Nicolau Elena	1980	Dr. șt	Cerc. șt	1,0	02.01.2025	
4.	Grigoraș Marina	1959		Cerc. șt	0,5	02.01.2025	

Laboratorul: Metode Fizico-chimice de Cercetare și Analiză

Echipa Laboratorul: Metode Fizico-chimice de Cercetare și Analiză pentru 2025							
Nr	Nume, prenume	Anul nașterii	Titlul științific	Funcția	Norma de muncă	Data angajării	Data eliberării*
1.	Povar Igor	1961	Dr. hab.	Șef de laborator	1,0	02.01.2024	
2.	Bolocan Natalia	1984	Dr.	Cerc. șt. sup.	0,5 cumul extern	02.01.2025	31.12.2025
3.	Ceban Vera	1963	Fără titlu	Inginer chimist	1,0	02.01.2024	
4.	Climova Ecaterina	1990	Fără titlu	Cerc. șt. stag.	1,0	Concediu de îngrijire a copilului	
5.	Gherghi Eudochia	1959	Fără titlu	Inginer chimist	1,0	02.01.2024	
6.	Puțuntică Vitalie	1980	Dr.	Cerc. șt.	0,5 cumul extern	02.01.2025	31.12.2025
7.	Rusu Maria	1959	Fără titlu	Cerc. șt.	0,5	02.01.2024	
8.	Spătaru Petru	1954	Dr.	Cerc. șt. coord.	0,5	02.01.2024	
9.	Spătaru Tudor	1952	Dr.	Cerc. șt. coord.	0,25	Deplasare de lungă durată	
10.	Spînu Oxana	1980	Fără titlu	Cerc. șt.	1,0	02.01.2024	
11.	Șepeli Diana	1979	Dr.	Cerc. șt. sup.	1,0	02.01.2024	
12.	Vișnevschi Alexandru	1964	Fără titlu	Cerc. șt.	1,0	02.01.2024	

Laboratorul: Chimie Fizică și Cuantică

Echipa Laboratorului Chimie Fizică și Cuantică pentru 2025							
Nr	Nume, prenume	Anul nașterii	Titlul științific	Funcția	Norma de muncă	Data angajării	Data eliberării*
1	Duca Gheorghe	1952	Dr. hab. în șt. chim.	Șef de laborator	1,00	02.01.2025	
2	Arsene Ion	1981	Dr. în șt. chim.	Cerc. st. super.	0,50 cumul extern	02.01.2025	
3	Balan Iolanta	1977	Dr. în șt. chim.	Cerc. st. coord.	1,00	02.01.2025	
4	Cazacu Lilia	1986	Dr. în șt. chim.	Cerc. st. super.	0,50	Concediu de îngrijire a copilului	
5	Covaliova Olga	1960	Dr.hab. în șt. chim.	Cerc. st. coord.	0,50	02.01.2025	
6	Gorbaciov Mihail	1959	Dr. în șt. chim.	Cerc. st. super.	0,50	02.01.2025	
7	Gorincioi Natalia	1951	Dr. în șt. chim.	Cerc. st. coord.	0,25	02.01.2025	
8	Romanciuc Lidia	1960	Dr. în șt. chim.	Cerc. st. super.	0,50	02.01.2025	
9	Vicol Crina	1994	Dr. în șt. chim.	Cerc. st.	0,50	02.01.2025	
10	Moroz Olga	1990	Fără titlu	Cerc. șt.	0,50	02.01.2025	
11	Gladchi Viorica	1964	Dr. în șt.	Cerc.șt. coord.	0,50	02.01.2025	

			chim.		cumul intern		
12	Bunduchi Elena	1974	Dr. în șt. chim.	Cerc. șt.	0,50 cumul intern	02.01.2025	
13	Borodaev Ruslan	1973	Dr. în șt. chim.	Cerc. șt.	0,25 cumul intern	02.01.2025	
14	Blonschi Vladislav	1994	Dr. în șt. chim.	Cerc. șt.	0,50 cumul intern	02.01.2025	
15	Gonța Maria	1948	Dr. hab. în șt. chim.	Cerc.șt. coord.	0,25 cumul intern	02.01.2025	
16	Lis Angela	1986	Dr. în șt. chim.	Cerc. șt.	0,50 cumul intern	02.01.2025	
17	Mocanu Larisa	1986	Dr. în șt. chim.	Cerc.șt. super.	1,00 cumul intern	02.01.2025	
18	Albert Boris	1950	Fără titlu	Inginer chimist	0,25 cumul intern	02.01.2025	

Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor	22.22%
--	--------

Directorul Institutului de Chimie al USM

ARÎCU Aculina, memb. cor., dr. hab.

(numele, prenumele)

(semnătura)

Coordonatorul subprogramului de cercetare

POVAR Igor, dr. hab.

(numele, prenumele)

(semnătura)

Data: 19.01.2026

*Se completează doar în cazul în care persoana s-a eliberat din funcție până la data de 30 decembrie.