

**RECEȚIONAT**

Agenția Națională pentru Cercetare  
și Dezvoltare \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ 2021

**AVIZAT**

Secția Științe Exacte și Inginerești a AȘM

\_\_\_\_\_ 2021

**RAPORT ANUAL**

**privind implementarea proiectului din cadrul Programului de Stat (2020-2023)  
cu titlul: "Mecanisme fizico-chimice a proceselor redox cu transfer de electroni  
implicate în sistemele vitale, tehnologice și de mediu"  
Cifrul proiectului: 20.80009.5007.04**

Prioritatea Strategică: Competitivitate economică și tehnologii inovative

Conducătorul proiectului:

Academician DUCA Gheorghe



Directorul Institutului de Chimie,  
Președintele Consiliului științific

Dr. habilitat ARÎCU Aculina



Chișinău 2021

## 1. Scopul etapei anuale conform proiectului depus la concurs:

**Institutul de Chimie:** Cercetările cuanto-chimice, relaxării nucleare spin-rețea, cineticii reacțiilor catehină-radicali liberi, influenței antioxidanților asupra procesului anaerob și interacțiunii asociative.

**USM:** Cercetarea aportului proceselor de oxidare a glutatationului la formarea stării redox ale mediului acvatic și cinetica transformării antibioticilor (azitromicină), surfactanților anionici în sisteme omogene și eterogene cu utilizarea UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub> și metodelor combinate.

**UTM:** Cercetarea impactului unor antioxidanți și factorilor de mediu asupra mecanismului de autooxidare a lipidelor.

## 2. Obiectivele etapei anuale:

1. Cercetarea influenței solventului și acidității mediului asupra interacțiunilor dintre catehină și acizi organici cu radicali liberi.
2. Studiul computațional al procesului de izomerizare și tautomerizare a acidului dihidroxifumaric, în gaz și în solvent (apă).
3. Cercetările privind influența antioxidanților asupra procesului anaerob.
4. Studiul posibilităților de interacțiune dintre polizaharide cu activitate antioxidantă și proteine.
5. Studiul cuantico-chimic al transferului parțial de sarcină în sistemele intermediare antioxidant-oxidant de tip ABTS și efectelor vibronice în stările activate.
6. Studiul teoretic al reglării selective a proceselor antioxidante prin intermediul vitaminelor hidrofobe -E și hidrofile -C.
7. Evaluarea poluării mediului ambiant prin metoda de activare cu neutroni și spectroscopie de absorbție atomică a metalelor grele din speciile de mușchi.
8. Cercetarea mecanismelor posibile de interacțiune dintre antioxidanții din vin prin metoda RMN.
9. Înregistrarea și asigurarea de suport la interpretarea spectrelor RMN a compușilor organici, înregistrate la spectrometrul RMN BRUKER Avance NMR 400.
10. Sinteza doturilor cuantice de carbon (DCC) prin metoda hidrotermală și testarea lor pe baza spectrelor optice.
11. Cercetarea aportului proceselor de oxidare a glutatationului la formarea stării redox ale mediului acvatic și determinarea mecanismelor de transformare chimică a antibioticilor (cefalexina) și surfactanților anionici (2-etil-hexil sulfat de sodiu) în procesele de oxidare avansată cu utilizarea reagentului Fenton, Foto-Fenton și oxidare combinată: sono-foto-Fenton.
12. Determinarea parametrilor hidrochimici a apelor de suprafață, aportului proceselor de oxidare a glutatationului la formarea stării redox ale mediului acvatic.
13. Studiul mecanismelor de transformare chimică a antibioticului (cefalexina) și surfactantului anionic (2-etil-hexil sulfat de sodiu) în procesele de oxidare avansată cu utilizarea reagentului Fenton și Foto-Fenton; în procesele de oxidare avansată în prezența semiconductorilor  $\text{TiO}_2$  și  $\text{ZrO}_2$ ; prin oxidarea electrochimică și metode combinate. Compararea rezultatelor prin evidențierea celei mai eficiente metode POAs studiate.
14. Studiul bibliografic privind mecanismul degradării oxidative a uleiurilor alimentare și căile de inhibare a proceselor oxidative.
15. Selectarea criteriilor de cercetare a proceselor de oxidare forțată a uleiului din semințe de struguri, uleiului din miez de nuci, ulei de porumb.
16. Studiul oxidabilității primare a uleiurilor nerafinate analizate prin modificarea valorii indicelui de hidrogen în funcție de timp.
17. Studiul oxidabilității forțate primare a uleiurilor nerafinate analizate prin modificarea valorii indicelui de hidrogen în funcție de concentrația  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ .
18. Analiza conținutului dienei și trienelor conjugate în uleiurile oxidate și neoxidate din semințe de struguri, nucă și germen de porumb.
19. Analiza dinamicii formării hexanalului, octenalului și hidroxi-nonenalului pe parcursul oxidării uleiurilor.
20. Analiza acțiunii antioxidanților ( $\alpha$ -tocoferolului, n-octyl galatului, L-ascorbic acid 6-palmitate și extractului de matcha (ceai verde)) asupra oxidării forțate a uleiurilor cercetate.

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

1. Obținerea și analiza datelor experimentale privind influența solventului și acidității mediului asupra interacțiunilor dintre catehină și acizi organici cu radicali liberi.
2. Studiul computațional al procesului de izomerizare și tautomerizare a acidului dihidroxifumaric, studiul computațional al descriptorilor reactivității globale și locale a acidului dihidroxifumaric și derivații acestuia: dimetil-2,3-dihidroxifumarat, 2,3-dihidroxi-N1,N4-bis(2-hidroxiethyl)fumaramidă și (E)-metil-2,3-dihidroxi-4-oxo-4-(fenilamino)but-2-enoat.
3. Analiza proceselor actuale de tratare a apelor uzate municipale și industriale, cu evidențierea metodelor de tratare de perspectivă; analiza metodelor de producere a hidrogenului, inclusiv procese electrochimice.
4. Identificarea posibilelor interacțiuni asociative dintre polizaharide cu activitate antioxidantă și proteine utilizând metodele de împrăștiere la unghiuri mici cu raze-X și neutroni.
5. Analiza comparativă a distribuției densității electronice și de spin pentru acizii AHC determinate prin calcule DFT.
6. Determinarea parametrilor vibronici ai procesului de migrare a atomului de hidrogen.
7. Modelarea matematică a procesului de poluare a atmosferei cu elemente chimice.
8. Asigurarea instrumentală a cercetărilor de analiză a mușchilor pentru determinarea poluanților din atmosferă.
9. Înregistrarea (spectrometrul RMN BRUKER Avance NMR 400) și interpretarea spectrelor RMN a compușilor organici obținuți în cadrul Institutului de Chimie.
10. Studiul legităților cinetice de fotooxidare a substanțelor tiolice pe sisteme model, ajustarea metodelor analitice de determinare a conținutului tiolilor și condițiile optime de fotoliză a glutatationului.
11. Determinarea compoziției chimice sezoniere și gradul de poluare a apelor de suprafață din bazinul Nistrului, conținutul de echivalenți oxidativi ( $H_2O_2$ , OH) și evaluarea proceselor redox din bazinele de apă studiate.
12. Suplinirea bazei de date (a. 2015-2021) privind compoziția chimică a apelor de suprafață din bazinul hidrografic al Nistrului; analiza schimbărilor anuale și sezoniere.
13. Determinarea încărcăturii de glutatation, care nu periclitează realizarea proceselor de autopurificare și proprietățile redox ale mediului natural acvatic adecvate valorii biologice de habitare.
14. Stabilirea conținutului de echivalenți oxidativi ( $H_2O_2$ , OH) și evaluarea dinamicii anuale a indicatorilor cinetici redox pentru unele bazine de apă naturală.
15. Studiul legităților cinetice a proceselor de oxidare avansată (POA) cu scopul degradării/oxidării maxime a cefalexinei (antibiotic) și 2 etil-hexil sulfatului de sodiu (surfactant anionic) prin aplicarea oxidării și electro-oxidării omogene (Poluant/ $Fe^{2+}/H_2O_2$ , poluant/ $Fe^{2+}/H_2O_2/UV$ ) și eterogene (Poluant/ $TiO_2/UV$ , Poluant/ $TiO_2/UV/H_2O_2$ , Poluant/ $TiO_2/ZrO_2/UV$ , Poluant/ $TiO_2/ZrO_2/UV/H_2O_2$ ).
16. Determinarea vitezelor și constantelor de reacție bimoleculare pentru radicalii OH și elaborarea mecanismelor de transformare ale acestora în sisteme omogene și heterogene prin aplicarea POAs și metodelor combinate.
17. Evaluarea POAs și stabilirea legităților cinetice ale proceselor studiate.
18. Organizarea și realizată Conferinței anuale a tinerilor cercetători „Chimie ecologică și a mediului”.
19. Analiza surselor bibliografice privind mecanismul degradării oxidative a uleiurilor alimentare și căile de inhibare a proceselor oxidative.
20. Planificarea etapelor studierii procesului de oxidare forțată a uleiurilor nerafinate (uleiului din semințe de struguri, uleiului din miez de nuci, ulei de porumb).
21. Planificarea selectării metodelor de analiză în laborator și rodarea acestora în vederea asigurării unei reproductivități și sensibilități înalte.
22. Studiul acțiunii antioxidanților ( $\alpha$ -tocoferolului, n-octyl galatului, L-ascorbic acid 6-palmitate și extractului de matcha (ceai verde)) asupra oxidării forțate a uleiurilor cercetate și înaintarea cererii de

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

1. Analiza cantitativă și calitativă a unor grupe de substanțe din strugurii și vinurile autohtone pentru estimarea concentrației catehinei din aceste surse naturale. Determinarea activității antioxidante a catehinei utilizând metoda DPPH.
2. Identificarea izomerilor enediolici și cetonici a acidului dihidroxifumaric termodinamic stabili și optimizarea geometriei moleculelor neutre, a cationilor, cation-radicalilor și a anionilor lor prin metoda DFT B3LYP/6-311++G(d,p) în gaz și în apă, folosind programul ORCA.
3. Prelucrarea matematică a rezultatelor experimentale obținute din experimentele de împrăștiere la unghiuri mici și analiza comparativă a acestora în vederea obținerii informației despre posibilele interacțiuni dintre moleculele de lactoferină umană și polizaharide cu activitate antioxidantă.
4. Au fost realizate cercetările experimentale privind influența diferitor tipuri de substanțe de origine naturală-vegetală asupra fermentării anaerobe a biomasei de câteva tipuri din sectorul agro-alimentar.
5. Optimizarea geometriei prin metoda DFT B3LYP/6-31G(d) a complexilor anionilor AHC cu cation-radicalul [ABTS]<sup>+</sup> și analiza comparativă a distribuției densității electronice și de spin.
6. Iradierea probelor de mușchi la reactorul IBR-2 (Rusia) și determinarea conținutului de Cd, Cu și Pb în probe folosind spectroscopia de absorbție atomică.
7. Utilizarea spectroscopiei <sup>13</sup>C RMN și a datelor cunoscute de literatură recentă, pentru modelarea interacțiunilor dintre resveratrol și acidul ascorbic, prezenți în vin.
8. Înregistrarea spectrelor <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C și <sup>15</sup>N 1D- și 2D- RMN la spectrometrul RMN BRUKER Avance NMR 400. Implicarea activă și colaborarea strânsă cu colegii din laboratoarele Institutului de Chimie, privind soluționarea problemelor structurale cu aportul spectroscopiei RMN.
9. Au fost deduse legități cinetice de fotooxidare a amestecurilor de tioli pe sisteme model, ajustate metodele analitice de determinare a conținutului tiolilor și condițiile optime de fotoliză a glutatationului.
10. A fost stabilită compoziția chimică sezonieră și gradul de poluare a apelor de suprafață din bazinul Nistrului, conținutul de echivalenți oxidativi (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, OH) și evaluate procesele redox din corpurile de apă studiate. Au fost obținute date despre compoziția chimică a apelor de suprafață din bazinul Nistrului, determinat conținutul substanțelor tiolice și intensitatea proceselor de autopurificare chimică a apelor.
11. A fost stabilit conținutul de echivalenți oxidativi (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, OH) și evaluată dinamica anuală a indicatorilor cinetici redox pentru unele bazine de apă naturală.
12. A fost studiată influența mineralizării și pH-ului mediului acvatic asupra proceselor de transformare fotochimică a glutatationului și cisteinei.
13. Au fost adaptate și optimizate metodele de analiză a antibioticului și surfactantului pentru condițiile experimentului cinetic, identificate și argumentate condițiile fizico-chimice de oxidare avansată ale acestora.
14. Parametrii optimizați au fost aplicați pentru evaluarea aportului proceselor de degradare/oxidare a poluanților organici (cefalexină și surfactant anionic).
15. A fost realizat studiul legităților cinetice a proceselor de oxidare avansată (POA) cu scopul degradării maxime a poluanților prin aplicarea POAs.
16. A fost organizată și realizată Conferința anuală a tinerilor cercetători „Chimie ecologică și a mediului”.
17. Au fost analizate sursele bibliografice privind procesele de oxido-reducere, criteriile de oxidabilitate, indicatorii senzoriali la oxidarea a lipidelor, modificarea parametrilor fizico-chimici la oxidarea forțată a lipidelor (uleiului din semințe de struguri, uleiului din miez de nuci, ulei de porumb).
18. S-a realizat selectarea metodelor de analiză în laborator și rodarea acestora în vederea asigurării unei reproductivități și sensibilități înalte.
19. S-a studiat procesul de oxidare forțată a uleiurilor analizate în funcție de timp, concentrația ionilor Cu<sup>2+</sup>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>; conținutul de diene și triene conjugate.
20. S-a stabilit acțiunea antioxidantilor - α-tocoferolului, n-octyl galatului, L-ascorbic acid 6-palmitate și

## 5. Rezultatele obținute:

Activitatea antioxidantă a catehinei a fost testată în matricea de vin, astfel concentrația eficientă s-a dovedit a fi de 0.18, ceea ce înseamnă că în solventul dat un mol de catehina are capacitatea de a anihila aproximativ 2.8 moli de DPPH. Testând influența acizilor tartric și citric asupra activității antioxidante a resveratrolului, a fost stabilită prezența unui efect antagonist. Astfel, concentrația eficientă a crescut până la max 1.22 la adăugarea 0.0016N acid tartric și 1.59 la adăugarea 0.0016N acid citric. A fost propusă o abordare analitică de elucidare a unor interacțiuni dintre doi antioxidanți naturali din vin- resveratrolul (Res) și acidul ascorbic (AA), prin metoda spectroscopiei  $^{13}\text{C}$  RMN. Au fost urmate două căi de realizare a reacției antioxidanților cu DPPH, care au precedat analiza  $^{13}\text{C}$  RMN. Experimentul  $^{13}\text{C}$  RMN, în care este modificată succesiunea interacțiunii antioxidanților cu DPPH a confirmat datele privind rolul AA ca antioxidant de referință. Pentru determinarea activității antioxidante a acidului ascorbic și a acidului dihidroxifumaric în matricea de vin a fost utilizată metoda modernă Stopped flow, prin intermediul căreia au fost obținute constantele de viteză observate ale reacțiilor dintre antioxidanți și DPPH. Comparativ cu datele obținute în 98% etanol, constantele de viteză observate în matricea de vin au fost de 10 ori mai mari în cazul acidului dihidroxifumaric și de 2 ori mai mari în cazul acidului ascorbic, ceea ce demonstrează îmbunătățirea semnificativă a activității antioxidante a compușilor studiați în matricea (Tabelul 1).

În cadrul cercetărilor computaționale, au fost identificați 22 izomeri enediolici și 23 izomeri cetonic ai acidului dihidroxifumaric, au fost calculați parametrii termodinamici ai acestora și s-a întocmit șirul stabilității structurilor izomerilor. Utilizând ecuația Boltzman, a fost calculată abundența relativă a izomerilor ceto- și enediolici. Calculele au demonstrat că aprox. 99.5% din populație sunt reprezentate de 3 structuri, notate E1, E2 și E3 conform stabilității în gaz. Rezultatele confirmă faptul că structura E1 este cea mai abundentă în gaz (87,4%), iar în apă cea mai abundentă este structura E2 (38,1%). Transformările enediol-enediol și ceto-ceto se pot desfășura prin două căi: transferul de protoni și rotația internă, iar energiile de activare calculate pentru căile de transfer de protoni sunt în intervalul de 135-160 kJ/mol, iar pentru căile de rotație interne sunt în intervalul de 0,15–75 kJ/mol, prin urmare interconversiile studiate au loc doar prin căile de rotație. Energiile de activare calculate ale interconversiilor ceto-enol sunt cuprinse între 230-310 kJ/mol, fiind în mediu de până la 10 ori mai mari decât energiile de activare ale interconversiilor enediolice sau cetonic. Energia de stabilizare datorată delocalizării electronilor în  $\pi^*$  (C1 – O12)  $\rightarrow$   $\pi^*$  (C2 – C3) și  $\pi^*$  (C4 – O5)  $\rightarrow$   $\pi^*$  (C2 – C3) crește de la 150,18 kcal/mol în E3 la 181,63 kcal/mol în E2 și la 194,5 kcal/mol în E1. Rezultatele demonstrează că mecanismul HAT (hydrogen atom transfer) este preferat în cazul reacțiilor în faza gazoasă, cea mai reactivă fiind structura E1. În apă, este preferat mecanismul SPLET, conform căruia are loc întâi transferul protonului, apoi cel al electronului, iar cea mai reactivă structură este E2.

Cercetările influenței substanțelor cu proprietăți biologice active asupra procesului de fermentare au fost realizate folosind borhotul rezultat la procesul de distilare a cerealelor de la întreprinderea "Garma Grup" (raionul Hâncești, R.Moldova), precum și borhotul de la producerea berii ("Vitanta", mun. Chișinău). La fel, au fost selectate pentru studii și alte tipuri de biomasă deșeurilor de la distilarea atât a cerealelor, cât și a porumbului. Amestecul biomasei a fost supus fermentării

alcoolice în condiții mezofile (20-32°C). S-a analizat volumul gazului degajat (CO<sub>2</sub>) care substituie baza NaOH, determinat prin metodă standard (titrare cu fenolftaleină). Rezultatele obținute demonstrează că substanțele de origine naturală cu proprietăți antioxidante prezintă efecte pronunțate asupra procesului de fermentare alcoolică a borhotului în condiții mezofile, introducerea cantităților mai mari în amestecul de fermentare nu este rațional, pentru că nu accelerează procesul de fermentare. Efectul adaosurilor studiate în accelerarea procesului de fermentare a deșeurilor din sectorul agro-alimentar este legat de structura moleculară și de proprietățile antioxidante, antihipoxante, antimitogene, etc. ale acestora.

Posibile interacțiuni dintre moleculele de lactoferină umană și polizaharide cu activitate antioxidantă (beta-glucan și arabinogalactan) au fost studiate utilizând tehnici sofisticate de interacțiune la unghiuri mici cu raze-X și cu neutroni. Rezultatele obținute denotă faptul că în sistemele model obținute, la o concentrație de 10 mg/ml de lactoferină umană și temperatura de 25°C și pH 6, are loc o interacțiune spontană de natură electrostatică ce rezultă în producerea de complecși lactoferină-polizaharidă.

Calcululele cuanto-chimice primare ale cation-radicalului [ABTS]<sup>+</sup> au arătat prezența unei delocalizări semnificative a electronului său nepereche atât în inelele sale tiazolice, cât și în puntea diazo. În plus, s-a arătat că atunci când acest cation-radical interacționează cu derivații acizilor alimentari, cantitatea de transfer de sarcină negativă de la aceștia către [ABTS]<sup>+</sup> depinde semnificativ atât de locul din [ABTS]<sup>+</sup> atacat de molecula-antioxidant, cât și de grupa funcțională a moleculei antioxidante. Prin calcululele cuanto-chimice a fost identificată starea moleculară a moleculei de antioxidant de acid alimentar ce interacționează cu cation-radicalul [ABTS]<sup>+</sup>. Figura 1 arată că atunci când o moleculă de acid galic neutră interacționează cu cation-radicalul [ABTS]<sup>+</sup> nu există transfer de densitate electronică de la molecula de acid galic cu „stingerea” corespunzătoare a radicalului [ABTS]<sup>+</sup>. O situație total diferită se prezintă la interacțiunea anionului acidului galic cu cation-radicalul [ABTS]<sup>+</sup> (Figura 2). În acest caz, prin un aranjament spațial dat al anionului acidului galic, are loc „stingerea” parțială a electronului nepereche al cation-radicalului [ABTS]<sup>+</sup> liber. Calcululele DFT au arătat că transferul maxim al densității electronice de la anionul acid alimentar la cation-radicalul [ABTS]<sup>+</sup> are loc dacă anionul studiat interacționează cu una dintre grupările –SO<sub>3</sub>H ale cation-radicalului. S-a dovedit că, în toate cazurile, anionii acizi sunt legați de cation-radicalul prin legătura de hidrogen O1-H-O2, unde atomul de oxigen O1 aparține grupului carboxil al anionului acid, iar atomii de H și atomul de O2 sunt incluși în grupul –SO<sub>3</sub>H al cation-radicalului care interacționează cu anionul acid. În acest sens, s-a găsit corelația între parametrii calculați ai acestei legături de hidrogen cu valorile IC<sub>50</sub> ale acizilor studiați.

Rolul Pseudo-Efectului Jahn-Teller (PEJT) asupra instabilității stărilor de tranziție a unor reacții intermediare a proceselor de oxido-reducere, a fost realizat printr-un studiu cuanto-chimic a migrării protonului de hidrogen în sistemele: anionul de bifluorură [FHF]<sup>-</sup> și dimerii protonați de piridină (C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>N)<sub>2</sub>H<sup>+</sup> și butanonă (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>CO)<sub>2</sub>H<sup>+</sup>. Rezultatele calcululelor *ab initio* pentru aceste sisteme au indicat o frecvență imaginară negativă în toate cazurile, iar suprafețele de energie potențială adiabatică (SEPA) devin dublu-curbate și descresc în direcția deplasării protonului central către unul dintre centrele electronegative.

Pe baza calcululelor DFT PBE utilizând software-ul GAUSSIAN 09 au fost studiate structurile geometrice și potențialul electrostatic molecular (MEP) pentru acidul dihidroxifumaric (DHFA) în

fază gazoasă precum și în metanol. Valorile maxime ale MEP s-au găsit în apropierea grupelor funcționale hidroxilice ale DHFA, ceea ce a făcut posibilă estimarea probabilității detașării atomilor de hidrogen capabili să interacționeze cu radicalul liber DPPH<sup>•</sup>. Au fost localizate stările de tranziție care corespund transferului intramolecular al atomului de hidrogen de la acidul dehidroxifumaric pe radicalul DPPH. Acest rezultat a fost confirmat prin prezența unei frecvențe imaginare în starea de tranziție atât pentru vid cât și pentru metanol.

A fost prezentat un model teoretic pentru cinetica peroxidării lipidelor (LPO), care ia în considerație efectul de sinergie al vitaminelor C și E. Modelul minim de descriere a cineticii LPO, ținând cont de contribuțiile  $\alpha$ -tocoferolului și ale sinergismului acestuia (acid ascorbic), conține ecuații diferențiale pentru 5 reactivi: InH, In<sup>•</sup>, R<sup>•</sup>, ROO<sup>•</sup> și ROOH:

$$dR/dt = w_i + k_{R1}SR_1 - k_{RYR} - k_i I_1 R, \quad (1)$$

$$dR_1/dt = k_{RYR} - k_{R1}SR_1 - k_{i1}I_1R_1 - k_{2r1}R_1^2, \quad (2)$$

$$dP_1/dt = k_{R1}SR_1 + k_{i1}I_1R_1 - (k_{d1} + k_{d2})P_1, \quad (3)$$

$$dI_1/dt = k_d I_2 A - k_i I_1 R - k_{i1} I_1 R_1, \quad (4)$$

$$dI_2/dt = k_i I_1 R + k_{i1} I_1 R_1 - k_d I_2 A, \quad (5)$$

aici se introduc următoarele notări: S=[RH], Y=[O<sub>2</sub>], R=[R<sup>•</sup>], R<sub>1</sub>=[ROO<sup>•</sup>], P<sub>1</sub>=[ROOH], I<sub>1</sub>=[InH], I<sub>2</sub>=[In<sup>•</sup>], A=[AscH<sup>-</sup>]. De asemenea, k<sub>d1</sub> și k<sub>d2</sub> sunt constantele de viteză pentru descompunerea hidroperoxidului lipidic, k<sub>i</sub> și k<sub>i1</sub> sunt constantele de viteză de inactivare a radicalilor R<sup>•</sup> și ROO<sup>•</sup>, k<sub>R1</sub> sunt constantele de viteză pentru oxidarea radicalică a substratului RH de către radicalul ROO<sup>•</sup>, k<sub>2r1</sub> este constanta de viteză pentru recombinarea pătratică a radicalului ROO<sup>•</sup>. În acest model, se crede că substratul lipidic RH, oxigenul O<sub>2</sub> și acidul ascorbic AscH<sup>-</sup> sunt prezenți în exces; în prima aproximare, concentrațiile lor pot fi considerate constante: S≈S<sub>0</sub>, Y≈Y<sub>0</sub>, A≈A<sub>0</sub>. Valoarea P> P<sub>cr</sub> corespunde modului „*in vitro*” (Figura 3), deoarece la astfel de concentrații de produse are loc moartea celulară. Pentru diferite tipuri de membrane celulare și condiții fizico-chimice de inițiere și cursul procesului de peroxidare. Astfel, atunci când se utilizează un set adecvat de valori ale parametrilor modelului (constantele vitezei de reacție și viteza de inițiere) devine posibilă determinarea concentrației optime de antioxidanți conjugați pentru a asigura un control eficient.

Evaluarea poluării mediului ambiant prin metoda de activare cu neutroni și spectroscopie de absorbție atomică a metalelor grele din speciile de mușchi (41 probe colectate pe teritoriul Republicii Moldova în 2020) a determinat conținutul a 37 de elemente chimice. Rezultatele monitorizării poluării atmosferice în Republica Moldova, vor fi incluse în „European Atlas of Heavy Metal Atmospheric Deposition” editat sub egida „ICP Vegetation Programme Coordination Center”.

În studiul participării substanțelor tiolice în procese de autopurificare chimică a apelor s-a arătat că GSH se supune fotolizei directe, induse și sensibilizate. Pentru cuantificarea fotolizei directe a GSH s-a determinat randamentul cuantic al GSH și s-a constatat că este mult subunitar, de ordinul 10<sup>-2</sup>-10<sup>-5</sup>, ceea ce se explică prin faptul că în soluții are loc dezactivarea moleculelor excitate fotochimic, în urma ciocnirii cu moleculele solventului și totodată spectrul de absorbție al GSH coincide mai puțin cu spectrele de emisie ale surselor de iradiere și probabilitatea inițierii reacțiilor fotochimice este mult mai mică. Pentru extrapolarea legităților la sistemele reale, în perioada vizată a fost evaluată starea redox a unor corpuri de apă ce fac parte din bazinul hidrografic al fluviului Nistru prin determinarea conținutului de reducători peroxidazici- compuși tiolici. După filtrarea probelor, conținutul tiolilor a scăzut în medie de 2 ori în cazul apelor râului Ichel și lacului Dănceni.



A fost arătat că apele naturale reprezintă un sistem deschis neechilibrat care include numeroase procese redox cu multiple stări staționare, regimuri instabile și dinamici aleatorii imprevizibile (Figura 4). Cercetările au demonstrat că pentru eliminarea poluării provocate de glutatation, sistemul de autopurificare a ecosistemului apelor lacului Dănceni consumă oxidanții din ape, oxigenul dizolvat și forma activă a oxigenului, radicalii OH. Din datele obținute pentru fluviul Nistru constatăm că echilibrul dinamic între echivalentul oxidativ  $H_2O_2$  și substanțele de natură reducătoare susceptibile la acțiunea acestui oxidant a fost deplasat spre echivalenții reducători, deoarece starea redox instabilă de durată îndelungată, cuprinzând sezonul de primăvară-vară, a trecut în reducătoare (sezonul de toamnă). Pe parcursul anului au fost inițiate 4 expediții hidrochimice de prelevare a probelor și determinare a compoziției chimice a apelor din diverse corpuri de apă din bazinul hidrografic al Nistrului. Dinamica parametrilor și legitățile formării compoziției chimice a apelor urmează să fie analizate după prelevarea probelor de apă din luna noiembrie. Calcule de bilanț pentru cupru și fier, inclusiv admisie de metale prin secțiunea Dubăsari și afluenții Nistrului, precum și emisie metalelor prin secțiunea Vadul-lui-Vodă, au făcut posibilă o evaluare aproximativă a acumulării de metale în zona studiată a Nistrului pe parcursul anului 2020.

În cadrul cercetărilor în proiectul dat a fost studiat procesul de degradare/mineralizare a antibioticului cefalexina (CLX), care este un preparat ce aparține clasei de cefalosporine de primă generație. Eficacitatea proceselor de oxidare avansată a poluanților emergenți este determinată de mai mulți parametri fizico-chimici, care în rezultatul efectuării cercetărilor experimentale trebuie să fie optimizați atât pentru sisteme model, cât și pentru compoziția reală a apelor reziduale, iar procesele fotocatalitice pot fi utilizate cu succes în aceste procese.

Oxidarea lipidelor este una dintre cauzele majore ale scăderii valorii nutriționale a alimentelor, limitând durata lor de valabilitate. Obiectul studiului este reprezentat de uleiuri nerafinate din semințe de struguri, nucă și germeni de porumb, obținute prin presare la rece. Prin metode spectrofotometrice de analiză au fost identificați produși ai oxidării lipidice în uleiurile vegetale: hexanal, octanal și hidroxi-nonadienal. A fost urmărită intensitatea formării acestor compuși pe parcursul procesului de oxidare forțată pentru o perioadă de 48 ore. Analizând dinamica formării hexanalului pe parcursul oxidării uleiurilor observăm că hexanalul format în urma oxidării lipidelor din uleiul de struguri are o evoluție constantă pe tot parcursul celor 48 ore.

Analizând evoluția formării octanalului pe parcursul oxidării lipidelor din uleiurile vegetale oxidate, observăm că până la oxidare conținutul de octanal format este mai mare pentru uleiul de struguri în comparație cu celelalte probe. După 48 ore de oxidare se atestă o creștere esențială a cantității de octanal pentru lipidele din uleiurile de nuci și porumb și o valoare neesențială mai mică pentru uleiul de struguri.

Creșterea conținutului de hidroxi-nonadienal (HNE) în cazul lipidelor din uleiul de struguri atestă o evoluție considerabilă în primele 12 ore de expunere la temperaturi ridicate. După 24 ore de expunere se atestă o scădere ușoară a conținutului de HNE ceea ce poate fi explicat prin degradarea ulterioară a aldehydelor și formarea unor noi compuși datorită temperaturilor ridicate.

La studierea procesului de inhibare a oxidării uleiurilor s-a analizat acțiunea  $\alpha$ -tocoferolului, n-octyl galatului, L-ascorbic acid 6-palmitate și extractului de matcha (ceai verde).

S-a constatat că probele de ulei cu adaos de antioxidanți atestă valori considerabil mai scăzute comparativ cu proba de ulei oxidat, ceea ce se explică prin încetinirea procesului de formare a produșilor oxidării lipidice: peroxizi și hidroperoxizi.

Capacitatea antioxidanților (acizi fenolici, carotenoide, vitamine) de a preveni oxidarea lipidelor este legată, fără îndoială, de caracteristicile lor structurale, în special de numărul de grupe funcționale cu eficacitate mare. Grupările OH sunt considerate substituenți cu capacitate mare de donare de electroni. Pe lângă număr, poziția pe inelele fenolice, precum și legăturile de hidrogen intramoleculare joacă un rol important în performanța lor antioxidantă.

Proba	Concentrația, mM	$k_{obs}, s^{-1}$	
		Etanol	Matricea de vin
DHF	0.06	$0.368 \pm 0.049$	$3.656 \pm 0.496$
	0.12	$0.350 \pm 0.030$	$3.863 \pm 0.155$
	0.18	$0.383 \pm 0.054$	$3.371 \pm 0.091$
	0.40	$0.167 \pm 0.024$	$2.277 \pm 0.049$
	0.60	$0.059 \pm 0.062$	$2.122 \pm 0.032$
	0.80	$0.040 \pm 0.016$	$2.181 \pm 0.057$
AA	0.06	$0.328 \pm 0.036$	$0.654 \pm 0.021$
	0.12	$0.327 \pm 0.017$	$0.653 \pm 0.006$
	0.18	$0.385 \pm 0.020$	$0.681 \pm 0.015$

**Tabelul 1.** Constantele de viteză observate în etanol și matricea de vin

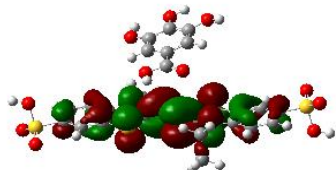


Fig. 1. Orbitalul HOMO al sistemului acid galic - ABTS<sup>+</sup>

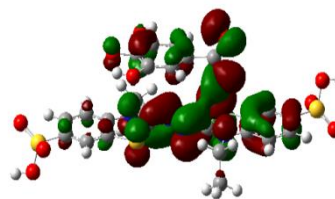


Fig. 2. Orbitalul HOMO al sistemului Anionul acidului galic - ABTS<sup>+</sup>

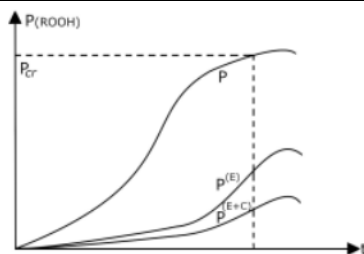


Fig. 3. Dependențe de timp ale produselor LPO în funcție de participarea vitaminelor E și C la proces

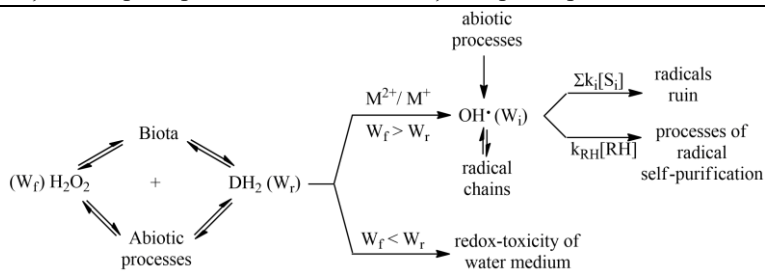


Figura 4. Modelul apelor naturale reprezintă un sistem deschis neechilibrat care include numeroase procese redox cu multiple stări staționare, regimuri instabile și dinamici aleatorii imprevizibile.

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

Lista publicațiilor din anul 2021 este prezentată în Anexa 1A.

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

Studiul proceselor de influența adaosurilor de substanțe biologice active (antioxidanți) asupra fermentării biomasei de deșeuri de la sectorul agro-alimentar cu identificarea mecanismului proceselor poate deschide o direcție științifică de perspectivă în acest domeniu. Produsele proceselor de digestive anaerobă în condiții tehnologice propuse pot avea o valoare adăugată în agricultură, dar totodată și în domeniul ecologic, prevenind aruncarea deșeurilor în mediu ambiant și poluarea acesteia. Așadar, bioxidul de carbon obținut la fermentare a biomasei poate fi utilizat, de exemplu, în bazinele de cultivare a microalgae, care, la rândul lor, pot servi pentru hrana păsărilor/animalelor în sectorul zootehnic, iar, apă separată de fracția solidă poate fi utilizată pentru scopuri tehnice la întreprinderi. Fracția solidă după fermentare, cu condiția determinării compoziției acesteia, poate fi utilizată în calitate de îngrășământ pentru culturi tehnice în agricultură.

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

Rezultatele monitorizării poluării atmosferice în Republica Moldova, vor fi incluse în „European Atlas of Heavy Metal Atmospheric Deposition” editat sub egida „ICP Vegetation Programme Coordination Center”

Rezultatele obținute indică despre variația sezonieră a conținutului de compuși tiolici în apele fluviului Nistru în primele 2 prize de captare, râurile Răut și Ichel. Astfel se poate concluziona despre proveniența naturală a tiolilor în aceste ape, ca rezultat al desfășurării proceselor biochimice ale hidrobionților. În corpurile de apă: fluviul Nistru aval de râul Ichel și lacurile de acumulare Ghidighici și Dănceni, variația sezonieră nu a fost depistată, ceea ce indică că procesele de autopurificare sunt încetinite și/sau sursa de compuși tiolici poate fi mixtă, atât naturală, cât și antropogenă. Pe cursul fluviului Nistru are loc o ușoară diminuare a conținutului de tioli pe perioada de primăvară și vară, respectiv afluenții acestuia, râurile Răut și Ichel nu contribuie cu încărcături suplimentare de reducători peroxidazici.

Ca rezultat al supravegherii obiectelor acvatice s-a demonstrat că lipsa peroxidului de hidrogen în apele investigate demonstrează că în toate ecosistemele au lipsit condițiile redox optime pentru dezvoltarea hidrobionților. Râul Ichel și lacul Dănceni au fost obiectele acvatice cele mai poluate cu substanțe ce întrerup procesul de autopurificare cu radicalii OH. Nu a fost constatat impactul afluenților, în sensul creșterii poluării, asupra apelor nistrene.

Calculul de bilanț orientativ, efectuat pentru cupru și fier, pentru sectorul Nistrului de Jos dintre secțiunile Dubăsari și Vadul-lui-Voda pe parcursul anilor 2020-2021 arată că în secțiunea investigată a fluviului Nistrului sa acumulat 26.184 tone de cupru și 2558.267 tone de fier în anul

2020. În anul 2021 a fost depistată emisia a cuprului în cantități de 1.97 tone de metal și acumularea fierului în cantități de 157.559 tone. În obiectele acvatice bazinului Nistrului fierul a migrat cu dominarea formelor suspendate a metalului, ajungând uneori nivelului 100 % de la conținutul total al metalului în proba de apă. Migrația cuprului a petrecut aproape în toate cazuri în formele coloidal-dizolvate a metalului. Concentrații limite admisibile igienice ale metalelor nu a fost depășite.

Prezența compușilor farmaceutici (CF) și surfactanților în apele uzate prezintă un mare pericol pentru mediul înconjurător. Contaminanții emergenți influențează asupra mediului și sănătății umane datorită faptului că sunt compuși nebiodegradabili, în consecință, sunt identificați în apele subterane, de suprafață, în sol etc. Astfel eliminarea compușilor farmaceutici din mediul apos este una dintre cele mai semnificative priorități în domeniul epurării apelor uzate. Eficacitatea proceselor de oxidare avansată a poluanților emergenți este determinată de mai mulți parametri fizico-chimici, care în rezultatul efectuării cercetărilor experimentale trebuie să fie optimizați atât pentru sisteme model, cât și pentru compoziția reală a apelor reziduale, iar procesele fotocatalitice pot fi utilizate cu succes în aceste procese.

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

Impactul științific obținut în cadrul realizării cercetărilor constă în cercetarea procesului de oxidare a oxidare forșată a uleiurilor nerafinate utilizate în activitatea economică și cotidiană și stabilirea condițiilor de inhibare a proceselor de oxidare.

Impactul economic potențial constă în determinarea parametrilor de stabilizare (concentrațiile antioxidanților) a uleiurilor studiate.

## **8. Infrastructura de cercetare utilizată în cadrul proiectului:**

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

- Fotometru HACH (portativ, regimul de lucru permite determinarea diferitor forme ale ionilor în probele analizate)
  - Fotometru de laborator
  - Spectrofotometru AAS (utilizat pentru determinarea concentrației metalelor grele în probele de apă naturală)
  - Spectrofotometru UV-VIS cu dublu fascicol și înregistrarea directă a raportului
  - Simulator Solar Oriel Solar Simulators (Newport,USA) (1 buc, destinat studierii proceselor fotochimice ce au loc în mediul ambiant)
  - Spectrofotometre T80 (înregistrarea spectrelor în domeniile UV și VIS)
  - Cromatograf gazos ERBA (dotat cu detector pentru compuși cancerigeni de tipul N-nitrozoaminelor) ș.a.
- ✓ Infrastructura disponibilă în cadrul Laboratorului de Fizică a Neutronului al Institutului Unificat de Cercetări Nucleare (Dubn, Federația Rusă)
  - ✓ Serverul Laboratorului European de Biologie Moleculară (EMBL, Hamburg, Germania) cu destinație specială pentru prelucrarea matematică a curbelor experimentale de împrăștiere la unghiuri mici
  - ✓ KWS-2 difractometrul de împrăștiere cu neutroni la unghiuri mici, din cadrul facilității internaționale MLZ, Germania
  - ✓ Spectrometrul de împrăștiere cu raze-X la unghiuri mici, din cadrul facilității internaționale Synchrotron Elettra, Trieste-Italia
  - ✓ Instalația pneumatică REGATA a reactorului cu neutroni rapizi IBR-2 și spectrometru de absorbție atomică iCE 3400 AAS (Thermo Fisher Scientific, Waltham, MA, SUA)

În cadrul proiectului au fost utilizată infrastructura de cercetare a departamentului Oenologie și Chimie – laboratorul „Analyze fizico-chimice”.

#### **9. Colaborare la nivel național în cadrul implementării proiectului:**

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

#### **10. Colaborare la nivel internațional în cadrul implementării proiectului:**

- ✓ Institutul de Chimie Macromoleculara “Petru Poni”, Iași, România
- ✓ Horia Hulubei National Institute for R&D in Physics and Nuclear Engineering, Reactorului 30, Bucharest - Magurele, P.O.BOX MG-6 Romania
- ✓ Jülich Centre for Neutron Science Outstation at MLZ, Forschungszentrum Jülich GmbH, Lichtenbergstraße 1, Garching, 85748 Germany

- ✓ Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Joliot-Curie 6, Dubna, 141980 Russian Federation
- ✓ Institute of Inorganic Chemistry, Graz University of Technology, Stremayrgasse 9, 8010, Graz, Austria
- ✓ Synchrotron Elettra, Trieste-Italia

În rezultatul colaborării au fost efectuate următoarele acțiuni:

- organizată lecția publică universitară,
- prezentarea lecțiilor publice științifice peste hotare
- publicarea articolelor științifice în reviste naționale și internaționale (ICMSEM, EUROINVENT, World Federation of Scientists etc.)
- asigurată participarea la evenimentele internaționale și întâlnirile științifice,
- organizată pregătirea conferinței internaționale "Chimia ecologică și a mediului",
- inițierea editării monografiei: *Encyclopedia Water Science and Society*, care va fi editată de Editură IGI Global, USA
- înaintarea documentelor: Short CV și Short Vision pentru funcția de delegat la Oficiul Prezidențial în Salzburg al Academiei Europene pentru Științe și Arte din Salzburg, Austria.
- Elaborarea și depunerea setului de documente pentru participarea la concursul anunțat de Agenția Română pentru asigurarea calității în învățământ superior - ARACIS pentru completarea bazei de date a experților internaționali.

## 11. Dificultățile în realizarea proiectului

Imposibilitatea de a participa la evenimentele științifice precum conferințe, workshop-uri care au fost amânate din cauza situației pandemice. Unele facilități științifice – centre științifice internaționale și-au sistat activitatea din cauza problemelor tehnice dar și din cauza pandemiei.

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

➤ Manifestări științifice internaționale (în străinătate)

- **DUCA Gheorghe**, academician - Conferința "Agriculture and Food – Current and Future Challenges", organizată de ICIA-INCDO, Subsidiary Research Institute for Analytical Instrumentation, Cluj Napoca, Romania, 08.10.2021.
- **DUCA Gheorghe**, academician - Ședința: "The Sixth Novel Coronavirus Session" organizată on-line de Federația mondială a oamenilor de știință/ World Federation of Scientists pe data de 11.01.2021
- **DUCA Gheorghe**, academician - Общероссийский семинар "Информатика, управление и системный анализ", Заседание №61, 20.04.2021, Москва, Российская Федерация/ Доклад он-лайн.

- **DUCA Gheorghe**, academician - Ene 9th International scientific and practical conference "Fundamental and applied research in the modern world", Boston, USA, 14-16 April 2021/ Raport și publicația.
- **DUCA Gheorghe**, academician - The Fifteenth International Conference on Management Science and Engineering Management, Toledo, Spania/ raport on-line.
- **DUCA Gheorghe**, academician - Congresul: "Mitigation Of Catastrophic Risk – Pandemic Novel Coronavirus", Tenth Session for Papers Fusing Global Science to Mitigate COVID-19. Medicine-Technology-Data- Behavior-Economics-Geopolitics Engineering for Survival., organizat de World Federation of Scientists Permanent Monitoring Panel - Mitigation of Catastrophic Risk cu prezentarea: "*Lost Opportunities Model - A New Approach To Monitoring, Analysis And Forecast Of The Government Statistics On Coronavirus Epidemic*". Autorii: Sergey Abramov, Russia, Sergei Travin, Russia, Gheorghe Duca, Moldova, Radu-Emil Precup, Romania
- ◆ **ANGHEL Lilia**, Dr. - Workshop - Northern Lights on Food II, June 9-11 2021 (Suedia); cu titlul "Small-angle neutron scattering study of proteins with antioxidant activity", 10 iunie - Prezentare pitch prin platforma Zoom.

#### ➤ Manifestări științifice internaționale (în Republica Moldova)

- ◆ **DUCA Gheorghe**, academician, profesor, lecția publică - "*Modelul Oportunităților Pierdute - O Nouă Abordare A Monitorizării, Analizei Și Prognozării Statisticilor Guvernamentale Privind Epidemia De Coronavirus*". Autorii: DUCA Gheorghe, ABRAMOV Serghei, TRAVIN Serghei, PREKUP Radu-Emil. Organizator: USM, 31 mai, 2021, seminar științific (în format online).
- ◆ **BERSUKER Isaac**, academician, profesor al Universității din Texas (SUA); "*Jahn-Teller and Pseudo-Jahn-Teller Effects: from particular features to general tools in exploring molecular and solid state properties*". Organizatori: Societatea Fizicienilor din Republica Moldova și Societatea de Chimie din Republica Moldova; 08 septembrie 2021, ora 11:00; Seminar științific (în format online).

<https://ichem.md/academicianul-isaac-bersuker-vizita-la-chisinau>

#### ➤ Manifestări științifice cu participare internațională

➤ În perioada 07-09 septembrie 2021 a fost organizat un seminar științific cu participare internațională cu genericul: "*Cele mai recente realizări științifice la nivel mondial în chimia cuantică și teoria efectelor vibronice în sistemele moleculare*", cu prilejul sosirii la Chișinău academicianului Isaac Bersuker, profesor la Universitatea din Texas, SUA, savant notoriu originar din Republica Moldova. <https://ichem.md/seminar-stiintific-cu-participarea-academicianului-isaac-bersuker> <https://www.youtube.com/watch?v=I4uM2Y3F-Y>.

În cadrul acestui seminar, executorii proiectului au prezentat următoarele rapoarte științifice:

- ◆ **BERSUKER Isaac**, academician, profesor al Universității din Texas (SUA); *"Efectele Jahn-Teller asupra bistabilității și reactivității compușilor chimici. Constatări noi"*. Organizator: Institutul de Chimie, în cadrul proiectului cu titlul: „Mecanisme fizico-chimice a proceselor redox cu transfer de electroni implicate în sistemele vitale, tehnologice și de mediu” (20.80009.5007.27), Program de Stat (2020-2023); 09 septembrie 2021, ora 9:45; Prelegere publică (în format online).

<https://ichem.md/academicianul-isaac-bersuker-vizita-la-chisinau>

<https://ichem.md/seminar-stiintific-cu-participarea-academicianului-isaac-bersuker>

- ◆ **GORINCIOI Natalia**, dr. în șt. chimice, conf. cerc.; *"Instabilități structurale în molecule și cristale, induse de efectul Jahn-Teller"*. Organizator: Laboratorul Chimie Fizică și Cuantică; 07 septembrie, ora 12:00; Raport științific (oral, în format online).

<https://ichem.md/academicianul-isaac-bersuker-vizita-la-chisinau>

- ◆ **BOLOCAN Natalia**, drd.; *"Calculare computațională a izomerilor și tautomerilor ai acidului dehidroxifumaric"*. Organizator: Laboratorul Chimie Fizică și Cuantică; 09 septembrie, ora 12:00; Raport științific (oral, în format online).

<https://ichem.md/academicianul-isaac-bersuker-vizita-la-chisinau>

- ◆ **ZINICOVSCAIA Inga**, dr. în șt. chimice; *"Impactul unor metale determinate prin analiza de activare cu neutroni asupra calității mediului ambiant"*. Organizator: Laboratorul Chimie Fizică și Cuantică; 08 octombrie 2021, ora 14:30; Raport științific (oral, în format online).

<https://ichem.md/aviz>

### 13. Aprecierea și recunoașterea rezultatelor obținute în proiect:

- ◆ **COVALIOVA Olga**, Medalia de aur pentru invenția "Efficient Method of Organic Sewage Sludge Dezodoration", autorii V.Covaliov, V.Sachevici, O.Covaliova, A.Rusnac, Gh.Poleschuk; XIIIth Exhibition of Creativity and Innovation "EUROINVENT 2021", Iași, România, 20-21 mai 2021.
- ◆ **DUCA Gheorghe; COVALIOVA Olga**, Medalia de bronz pentru invenția "Sewage Sludge Deworming Method", autorii V.Covaliov, O.Covaliova, D.Ungureanu, N.Ciobanu, Gh.Duca; XIIIth Exhibition of Creativity and Innovation "EUROINVENT 2021", Iași, România, 20-21 mai 2021.
- ◆ **COVALIOVA Olga**, Diploma de excelență pentru invenția "Electrochemical Generator of Hydrogen Water", autorii V.Covaliov, O.Covaliova; XIIIth Exhibition of Creativity and Innovation "EUROINVENT 2021", Iași, România, 20-21 mai 2021.
- ◆ **GORINCIOI Elena**, Medalia de aur pentru invenția *"Zinc coordination compound with antifungal and antibacterial activity"*, autori Vitiu A., Chișc, D., Gorincioi E., Coropceanu E., Bouroș P.; XIIIth Exhibition of Creativity and Innovation "EUROINVENT 2021", Iași, România, 20-21 mai 2021.
- ◆ **GORINCIOI Natalia, YALTYCHENKO Olga**, Diploma de gradul 1 pentru lucrarea *"Kinetic model of lipid peroxidation in cell membranes involving antioxidants and complexes of cytochrome c and cardiolipin – quasi-stationary approach"*, autori - Yaltychenko O.V.,



Kanarovskii E.Yu., Gorinchoy N.N.; concursul Societății Ruse de Cercetare Științifică, la nominalizarea științe biologice. ONR PTSINS, aprilie 2021, Moscova.

- ◆ **BĂLAN Iolanta**, Premiul „Constantin Turtă” pentru Teza de doctor de excelență GRADUL III (trei) „Studiul ab initio al efectelor vibronice în molecule și procese chimice”, specialitatea 144.01. -Chimie fizică, 23 aprilie 2021.
- ◆ **GORINCIOI Natalia**, Diplomă de merit consultantilor științifici ai tezelor laureaților concursului „Teza de doctorat de excelență a anului 2020”, consultant științific la teza de doctor de excelență în științe chimice a dnei Iolanta BĂLAN, 23 aprilie 2021.
- ◆ **GORINCIOI Natalia**, dr, conf. cercet.; Diploma „Meritul academic”, Nr. 218 din 4 iunie 2021.
- ◆ **COVALIOVA Olga**, Diploma de Realizare, Medalie de Bronz pentru ”Sewage sludge deworming method”, autori Covaliov, Victor; Covaliova, Olga; Ungureanu, Dumitru; Ciobanu, Natalia; Duca, Gheorghe; Salonul Internațional de Invenții și Transfer Tehnologic “INVENTICA 2020”, Ed. a XXV-a, 23-25 iunie 2021, Iasi, Romania.
- ◆ **COVALIOVA Olga**, Diploma de Excelență, Medalie de Argint pentru ”Efficient method of organic sewage sludge deodorization”, autori Covaliov, Victor; Sachevici, Veaceslav; Covaliova, Olga; Rusnac, Arcadie; Poleschuc Gheorgii; Salonul Internațional de Invenții și Transfer Tehnologic “INVENTICA 2020”, Ed. a XXV-a, 23-25 iunie 2021, Iasi, Romania.
- ◆ **COVALIOVA Olga**, Medalie de Bronz pentru ”Procedeu de deparazitare a nămolurilor de epurare a apelor uzate”, autori Covaliov, Victor; Covaliova, Olga; Ungureanu, Dumitru; Ciobanu, Natalia; Duca, Gheorghe; Salonul Internațional al Cercetării Științifice, Inovării și Inventicii ”PROINVENT”, Ed. a XIX-a, 20-22 octombrie 2021, Cluj-Napoca, România.
- ◆ **COVALIOVA Olga**, Medalie de Aur pentru ”Procedeu efficient de deodorizare a nămolului organic de canalizare”, autori Covaliov, Victor; Sachevici, Veaceslav; Covaliova, Olga; Rusnac, Arcadie; Poleschuc Gheorgii; Salonul Internațional al Cercetării Științifice, Inovării și Inventicii ”PROINVENT”, Ed. a XIX-a, 20-22 octombrie 2021, Cluj-Napoca, România
- ◆ **MOCANU Larisa**, Diplomă de participare pentru lucrarea „Catalytic oxidation of amoxicillin and cephalexin in aqueous Solution using Fenton process—a comparative study” (raportare orală), 6th International Youth Congress “Sustainable development: Environmental protection. Energy saving. Sustainable environmental management, Lvov, 10 February, 2021
- ◆ **PORUBIN-SCHIMBĂTOR Veronica**, Diplomă de participare pentru „Comparative oxidation of surfactants Cetyltrimethylammonium bromide and sodium 2-ethyl-hexyl Sulfate in aqueous solutions by using AOPs” (raportare orală), 6th International Youth Congress “Sustainable development: Environmental protection. Energy saving. Sustainable environmental management, Lvov, 10 February, 2021
- ◆ **GONȚA Maria și PORUBIN-SCHIMBĂTOR Veronica**, Diplomă de participare pentru lucrarea „Advanced oxidation processes for mineralization of cationic trimethyl-ammonium bromide cationic surfactant” (raportare orală), 3rd International European Conference on Interdisciplinary Scientific Researches JANUARY 16, 2021/ COMRAT STATE UNIVERSITY, MOLDOVA
- ◆ **GONȚA Maria**, Diplomă de participare pentru lucrarea „Hydrogen peroxide heat treatment of chitosan and obtaining copolymers with antioxidant properties” (raportare orală), 6th International

Youth Congress “Sustainable development: Environmental protection. Energy saving. Sustainable environmental management, Lvov, February 9-10, 2021

- ◆ **GONȚA, Maria, GUȚU, Iacob, CEACÎRU, Mihail.** Medalie de argint, Salonul Internațional al Cercetării Științifice, Inovării și Invenției PRO INVENT, ediția a XIX-a, 20-22 octombrie 2021, Cluj-Napoca
- ◆ **GONȚA, Maria, GUȚU, Iacob, CEACÎRU, Mihail.** Diplomă de participare, Salonul Internațional de Invenții și Inovații „TRAIAN VUIA” TIMIȘOARA, ediția a VII-a, 06-08 Octombrie 2021.
- ◆ **LIS Angela,** Certificat de participare la Conferință. XXVIII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов», Московский Государственный Университет, Россия
- ◆ **BLONSCHI Vladislav,** Certificate of Participation. The 7<sup>th</sup> International Scientific and Practical Conference SCIENTIFIC HORIZON IN THE CONTEXT OF SOCIAL CRISES, TOKYO, JAPAN, 6-8.02.2021
- ◆ **CISTEACOV Maxim,** Certificate of Participation. The 7<sup>th</sup> International Scientific and Practical Conference SCIENTIFIC HORIZON IN THE CONTEXT OF SOCIAL CRISES, TOKYO, JAPAN, 6-8.02.2021
- ◆ **DEȘAN Cristina,** Certificate of Participation. The 7<sup>th</sup> International Scientific and Practical Conference SCIENTIFIC HORIZON IN THE CONTEXT OF SOCIAL CRISES, TOKYO, JAPAN, 6-8.02.2021
- ◆ **GLADCHI Viorica,** Certificate of Participation. The 7<sup>th</sup> International Scientific and Practical Conference SCIENTIFIC HORIZON IN THE CONTEXT OF SOCIAL CRISES, TOKYO, JAPAN, 6-8.02.2021
- ◆ **BUNDUCHI Elena,** Certificate of Participation. The 7<sup>th</sup> International Scientific and Practical Conference SCIENTIFIC HORIZON IN THE CONTEXT OF SOCIAL CRISES, TOKYO, JAPAN, 6-8.02.2021
- ◆ **BORODAEV Ruslan,** Certificate of Participation. The 7<sup>th</sup> International Scientific and Practical Conference SCIENTIFIC HORIZON IN THE CONTEXT OF SOCIAL CRISES, TOKYO, JAPAN, 6-8.02.2021

#### 14. Promovarea rezultatelor cercetărilor obținute în proiect în mass-media:

##### ➤ Emisiuni radio/TV de popularizare a științei

- ◆ **DUCA Gheorghe,** academician, profesor, *”Națiunile produc știință și tehnologie pentru a sprijini dezvoltarea proprie într-un sistem economic global”* - interviu realizat de către Dr. Victor Doraș în cadrul emisiunii "Точки роста", portalul informativ-analitic AVA TV, 12.07.2021

<https://ichem.md/natiunile-produc-stiinta-si-tehnologie-pentru-sprizini-dezvoltarea-proprie-intr-un-sistem-economic>

- ◆ **DUCA Gheorghe,** academician, profesor, *”Точки роста – Știința în Republica Moldova”* - interviu realizat de către Dr. Victor Doraș în cadrul emisiunii "Точки роста", portalul informativ-analitic AVA TV, 16.07.2021

<https://ichem.md/interviul-domnului-dr-victor-doras-cu-academicianul-gheorghe-duca>

- ◆ **BERSUKER Isaac**, academician, profesor al Universității din Texas (SUA), "*Точки роста – о проблемах молдавской науки с Академиком Исааком Берсукером*" - interviu realizat de către Dr. Victor Doraș în cadrul emisiunii "Точки роста", portalul informativ-analitic AVA TV, 10.09.2021.

<https://ichem.md/tochki-rosta-o-problemakh-moldavskoy-nauki-s-akademikom-isaakom-bersukerom>

## 15. Teze de doctorat / postdoctorat susținute și confirmate în anul 2021 de membrii echipei proiectului

În anul 2021 au fost organizate 2 seminare științifice (în regim online) privind avizarea tezelor de doctor habilitat în științe chimice la unitatea primară - laboratorul Chimie Fizică și Cuantică și o ședință lărgită a Departamentului Chimie Industrială și Ecologică în vederea susținerii tezelor de doctor habilitat:

- a) **GORINCIOI Natalia** (dr. în șt. chimice, conf. cerc.) "*Instabilități structurale în molecule și cristale, induse de efectul Jahn-Teller*" - pretendentă la titlul de doctor habilitat în științe chimice, specialitatea-chimie fizică. Consultant științific: acad., dr. habilitat, prof. Isaac BERSUKER.
- b) **ZINICOVSCAIA Inga** (dr. în șt. chimice) "*Impactul unor metale determinate prin analiza de activare cu neutroni asupra calității mediului ambiant*" - pretendentă la titlul de doctor habilitat în științe chimice, specialitatea-chimie ecologică. Consultant științific: acad., dr. habilitat, prof. Gheorghe DUCA.
- c) **BLONSCHI Vladislav** „*Transformările fotochimice ale unor substanțe tiolice și participarea acestora în procese de autopurificare chimică a apelor naturale*” - Teză de doctorat, Gladchi Viorica, Duca Gheorghe. Pe 12.10.2021 teza a fost audiată preliminar la ședința lărgită a departamentului Chimie industrială și ecologică și a obținut avizul favorabil în vederea susținerii la Comisia de doctorat.

## 16. Materializarea rezultatelor obținute în proiect:

1. *Actul de implementare a rezultatelor din cadrul proiectului* din 21.05.2021, semnat de primarul s. Olănești, r. Ștefan Vodă
2. *Actul de implementare a rezultatelor din cadrul proiectului* din 28.06.2021, semnat de șef departament Chimie Industrială și Ecologică, USM
3. *Actul de implementare a rezultatelor din cadrul proiectului* din 15.06.2021, semnat de reprezentantul grupului-client al GȚ din s. Hagimus, r. Căușeni

## 17. Informație suplimentară referitor la activitățile membrilor echipei în anul 2021

➤ **Membri/președinte al comitetului organizatoric/științific, al comisiilor, consiliilor științifice de susținere a tezelor:**

- ◆ **DUCA Gheorghe** - ședința Comisiei de Îndrumare Extinsă din data de 03.06.21, în cadrul căreia a fost prezentată teza de doctorat a dnei Irina Gînsari cu titlul *Evaluarea influenței chimiei suprafeței adsorbanților carbonici în procesul de adsorbție a poluanților* conducător R. Nastas,

- dr., conf. cerc. (**Presedinte**)
- ◆ **DUCA Gheorghe** - ședința din cadrul unității primare laboratorului de Chimie Fizică și Cuantică (ICh) din data de 25.05.21, în cadrul căreia a fost prezentată teza de doctorat a dnei Elena Nicolau cu titlul "*Estimarea riscului de poluare chimica cu substanțe organice persistente in districtul hidrografic Dunăre-Prut și Marea Neagra din regiunea de sud a RM si elaborarea recomandărilor de remediere*". (**Conducător**)
  - ◆ **DUCA Gheorghe** - ședința din cadrul unității primare USM - Vlad Blonschi - "*Transformările fotochimice ale unor substanțe tiolice și participarea acestora în procesele de autopurificare chimică a apelor naturale*". (**Consultant**)
  - ◆ **DUCA Gheorghe** /Conferinta Internațional ICMSEM, 3-4 august 2021, Toledo, Spania/ membru comitetului științific internațional.
  - ◆ **ANGHEL Lilia** - ședința din cadrul unității primare laboratorului de Chimie Fizică și Cuantică (ICh) din data de 25.05.21, în cadrul căreia a fost prezentată teza de doctorat a dnei Elena Nicolau cu titlul "*Estimarea riscului de poluare chimica cu substanțe organice persistente in districtul hidrografic Dunăre-Prut și Marea Neagra din regiunea de sud a RM si elaborarea recomandărilor de remediere*", conducător acad. Gh. Duca. (**Secretar**)
  - ◆ **ANGHEL Lilia** – ședința Comisiei de Îndrumare Extinsă din data de 03.06.21, în cadrul căreia a fost prezentată teza de doctorat a dnei Irina Gînsari cu titlul *Evaluarea influenței chimiei suprafeței adsorbanților carbonici în procesul de adsorbție a poluanților* conducător R. Nastas, dr., conf. cerc. (**Secretar**)
  - ◆ **ANGHEL Lilia** – ședința Comisiei de Doctorat din data de 17.09.21, privind susținerea publică a tezei de doctorat a dnei Irina Gînsari cu titlul *Evaluarea influenței chimiei suprafeței adsorbanților carbonici în procesul de adsorbție a poluanților* conducător R. Nastas, dr., conf. cerc. (**Secretar științific**)
  - ◆ **COVALIOVA Olga** - Membru al Consiliului Consultativ al Water JPI (Member of the JPI Advisory Board), Participarea la Water JPI Advisory Board's Meeting, în calitate de membru ai Consiliului Consultativ water JPI – 24 martie și 17 septembrie, 2021 și Participarea la MEP Water Group Online Event "Valuing Water" – The UN World Water Development Report 2021"
  - ◆ **COVALIOVA Olga** - Membru al Follow-Up Group pentru WaterWorks 2017, Participare la Ședința Follow-Up Group 19 aprilie 2021
  - ◆ **GORINCIOI Elena** - ședința de susținere a tezei de doctor în științe chimice a pretendentului CURLAT Serghei cu titlul „Синтез и исследование азотсодержащих производных 3,7,7-триметилбицикло[4.1.0]гептанов на основе (+)-3 карена”, la specialitatea 143.01 – *chimie organică*”, 18 februarie, 2021, Secretar Științific
  - ◆ **GORINCIOI Elena** - ședința de susținere a tezei de doctor în științe tehnice BÎLICI Constantin cu titlul „Argumentarea producerii și protecția spumantelor clasice cu Denumire de Origine „CRICOVA” , elaborată de dl la specialitatea 253.04. *Securitatea produselor alimentare*, data discuției tezei- 28 mai, 2021, Referent Oficial
  - ◆ **GORINCIOI Elena** - ședința de susținere a tezei de master GALERU Vioricacu titlul "Implicații biochimice în utilizarea anesteticului Septanest pentru unele proceduri dentare", Facultatea Biologie și Chimie, Universitatea de Stat Tiraspol, teza a fost susținută și apreciată

- cu nota noua, data susținerii 09 iunie 2021, coordonator al lucrărilor la teza de master
- ◆ **GONȚA Maria** - membru al Comisiei de susținere publică a tezei de doctor în chimie a dnei Gînsari Irina cu titlul *Evaluarea influenței chimiei suprafeței adsorbanților carbonici în procesul de adsorbție a poluanților*, la specialitatea 144.01 Chimie fizică
  - ◆ **GONȚA Maria** - membru al Consiliului Științific Specializat D 211.03-27, privind susținerea tezei de doctor în științe inginerești a dnei CIOBANU Natalia cu tema: „Aplicarea sistemelor informaționale în dirijarea și optimizarea stațiilor de epurare biologică a apelor uzate (SCADA)”, specialitatea 211.03. Rețele inginerești în construcții
  - ◆ **STURZA Rodica**, prof. univ., dr. hab. – conducător științific, teza de doctor „Stabilizarea uleiurilor vegetale cu compuși biologic activi din surse regenerabile”, Popovici Violina – prezentarea octombrie 2021
  - ◆ **STURZA Rodica** - Simpozion Internațional EuroAliment, 7-8 octombrie 2021/ membru comitetului științific.
  - ◆ **STURZA Rodica** - Conferința Internațională INTELWASTES, 7-8 octombrie 2021/membru comitetului științific.
  - ◆ **DRUȚĂ Raisa** - Conferința Internațională INTELWASTES, 7-8 octombrie 2021/membru comitetului științific
  - ◆ **SUBOTIN Iurie** - Conferința Internațională INTELWASTES, 7-8 octombrie 2021/membru comitetului științific.
  - ◆ **STURZA Rodica** - Susținerea tezei de doctorat cu titlu „Compoziții alimentare pe baza uleiului de nucă (*Juglans regia* L.) rezistente la degradări oxidative”, autor Radu Oxana, UTM/ președinte consiliului științific
  - ◆ **STURZA Rodica** - Susținerea tezei de doctor habilitat cu titlu Obținerea și stabilizarea unor coloranți, antioxidanți și conservanți de origine vegetală pentru alimente funcționale/membru consiliului științific.
  - ◆ **STURZA Rodica** - membru al Comisiei de experți în domeniul atestării Științe inginerești și tehnologii: ramurile științifice 21-28.
  - ◆ **STURZA Rodica** - Consiliul Școlii Doctorale Știința Alimentelor, Inginerie Economică și Management/ Membru
  - ◆ **STURZA Rodica** - Seminar științific de profil/ Președinte
    - **Redactor / membru al colegiilor de redacție al revistelor naționale / internaționale (Opțional)**
  - ◆ **DUCA Gheorghe** - revista de categoria A – Chemistry Journal of Moldova, Redactor-șef
  - ◆ **DUCA Gheorghe** – revista ”Environmental Engineering”, Iași, Romania, membru colegiului de redacție
  - ◆ **DUCA Gheorghe** – revista ”Chimia și tehnologia apei”, Kiev, Ucraina, membru colegiului de redacție
  - ◆ **DUCA Gheorghe** – revista ”Chimia Ecologica”, Sanct-Petersburg, membru colegiului de redacție
  - ◆ **GORINCIOI Natalia** - revista de categoria A – Chemistry Journal of Moldova, membru al

- colegiului de redacție
- ◆ **ANGHEL Lilia** - revista de categoria A – Chemistry Journal of Moldova, Membru al oficiului editorial
  - ◆ **ANGHEL Lilia** – revista internațională FOOD CHEMISTRY JOURNAL (IF 6.3), Recenzent oficial la manuscrisul *Ms. Ref. No.: FOODCHEM-D-20-09457R1*
  - ◆ **BARBA Alic** - revista de categoria A – Chemistry Journal of Moldova, Recenzent oficial
  - ◆ **GORINCIOI Elena** - revista de categoria A – Chemistry Journal of Moldova, Recenzent oficial la manuscrisul Ref. No.: *CJM-0728*
  - ◆ **GORINCIOI Elena** - revista Acta et Commentationes, seria Științe Exacte și ale Naturii, Recenzent oficial la lucrarea „Studiul fitochimic al substanțelor biologice active din componența semințelor și uleiului de în *Linum usitatissimum L.*” autori Eugenia Melentiev, Lidia Calmuțchi, Sergiu Codreanu, Alina Pituscan
  - ◆ **BĂLAN Iolanta** - revista de categoria A – Chemistry Journal of Moldova, Membru al oficiului editorial
  - ◆ **GLADCHI Viorica** – redactor-șef adjunct a revistei științifice Chemistry Journal of Moldova
  - ◆ **GLADCHI Viorica** - redactor-șef adjunct a revistei științifice Studia Universitatis Moldaviae, Seria *Științe Reale și ale Naturii*
  - ◆ **GLADCHI Viorica** – recenzent la revista științifică *Academos*
  - ◆ **GONȚA Maria** - membru al colegiului de redacție a revistei științifice Chemistry Journal of Moldova
  - ◆ **GONȚA Maria** - membru al colegiului de redacție a revistei științifice Studia Universitatis Moldaviae, Seria *Științe Reale și ale Naturii*
  - ◆ **GONȚA Maria** - membru al Colegiului de redacție al revistei Environmental Problems, Livov, ISSN: 2414-5955 (print), 2522-4417 (online)
  - ◆ **STURZA Rodica** - Journal of Engineering Science/ Editor responsabil
  - ◆ **STURZA Rodica** - Journal of Social Science/ Editor responsabil
  - ◆ **STURZA Rodica** - Chemistry Journal of Moldova/ Membru de redacție

**Altele:**

1. **DUCA Gheorghe** – membrul Comisiei de Experți ANACEC
2. **GLADCHI Viorica** – membrul Comisiei de profil în învățământul superior ANACEC
3. **GONȚA Maria** – membrul Comisiei de Experți ANACEC

**18. Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect**

Rezultatele cercetărilor în cadrul proiectului nr. **20.80009.5007.27** din anul 2021 au avut o abordare interdisciplinară în studierea mecanismelor cu participarea antioxidanților și

intermediarilor formați, au lărgit și îmbunătățit teoriile existente referitoare la actul elementar al transferului de electroni și protoni. Pentru aceasta a fost implicată combinația de tehnici, care a cuprins metode experimentale cinetice, calcule cuanto-chimice și modelare matematică.

A fost lansată o nouă etapă în studiile noastre avansate în domeniul chimiei ecologice a mediului acvatic, a fost dezvăluit rolul substanțelor cu proprietăți oxidante și reducătoare precum și al unui șir întreg de elemente chimice, determinate prin metoda de activare a neutronilor. Aceste cercetări ambițioase s-au bazat pe abordări total noi, atragerea altor discipline, parteneri și a completat teoria proceselor redox cu viziuni și idei justificate de cercetătorii din ICh, USM și UTM.

Au fost identificați 45 de izomeri ai acidului dihidroxifumaric, inclusiv 23 forme ceto- și 22 enediolice, trei forme enediolice fiind cele mai stabile, iar izomerizarea și tautomerizarea lor geometrică au fost studiate la nivelul teoriei B3LYP, folosind setul 6-311++G(2df,2p) în fază gazoasă și soluție apoasă. Au fost calculate constantele de echilibru, împreună cu vitezele de reacție directă și inversă pentru reacțiile de izomerizare și tautomerizare.

A fost inițiată cercetarea mecanismelor ce descriu activitatea antioxidantă a acidului dihidroxifumaric și a derivaților acestuia. Activitatea antioxidantă a catehinei a fost testată în matricea de vin și în prezența acidului ascorbic, care îmbunătățește puterea reducătoare a catehinei. În prezența acizilor tartric și citric, resveratrolul are o activitate antioxidantă redusă, ceea ce atestă un efect antagonist dintre compușii dați.

Acizii fenoxilici alimentari studiați demonstrează activitatea antioxidantă în testul cu cation-radicalul ABTS<sup>\*+</sup> exclusiv sub formă de anioni, care formează complecși cu transfer de sarcină cu acest cation radical. O evaluare cantitativă a activității lor antioxidante este posibilă luând în considerare caracteristicile geometrice și electronice ale acestor complecși, inclusiv a dependenței de natura solventului utilizat, precum și de posibilele forme tautomerice a anionilor acizilor studiați. A fost prezentat un model teoretic pentru cinetica peroxidării lipidelor, care ia în considerare efectul sinergetic al vitaminelor C și E.

Posibile interacțiuni dintre moleculele de lactoferină umană și polizaharide cu activitate antioxidantă (beta-glucan și arabinogalactan) au fost studiate utilizând tehnici sofisticate de interacțiune la unghiuri mici cu raze-X și cu neutroni. Rezultatele obținute denotă faptul că în sistemele model obținute, la o concentrație de 10 mg/ml de lactoferină umană și temperatura de 25°C și pH 6, are loc o interacțiune spontană de natură electrostatică ce rezultă în producerea de complecși lactoferină-polizaharidă.

S-a constatat, că procesul de oxidare forțată a uleiurilor din semințe de struguri, miez de nucă, germeni de porumb se finalizează în aproximativ 600 ore. Acțiunea de inhibiție a fost demonstrată prin aplicarea antioxidantilor  $\alpha$ -tocoferol, L-ascorbic acid 6-palmitat, n-octyl galat, extract matcha.

Au fost determinate legitățile cinetice și constantele de transformare fotochimică a substanțelor tiolice în mediul acvatic, care vor fi utilizate pentru prognozarea proceselor ecochimice în apele de suprafață. Rezultatele cercetării au justificat un set de indicatori noi pentru evaluarea și prezicerea calității apei naturale pe baza stării sale redox, a capacității de autoepurare și de inhibare a generării radicalilor liberi pentru ajustarea și monitorizarea mediului acvatic natural, care au fost propuși în RM pentru evaluarea calității apelor de suprafață. S-a studiat procesul de degradare al poluanților din sisteme omogene și eterogene ce conțin antibiotice și s-au stabilit parametri fizico-chimici care influențează performanța de epurare.

În baza unei noi abordări a cineticii proceselor chimice a fost dezvoltată strategia prelucrării statistice a infecțiilor virale și prognozei pandemiei COVID-19.

The research results within the project no. 20.80009.5007.27 from 2021 have had an interdisciplinary approach in the study of mechanisms with the participation of antioxidants and the formed intermediates, and have broadened and improved existing theories on the elementary act of electron and proton transfer. For this, combined techniques were involved, including kinetic experimental methods, quantum-chemical calculations and mathematical modeling.

A new stage has been launched in our advanced studies in the field of ecological chemistry of the aquatic environment, the role of substances with oxidizing and reducing properties as well as a whole series of chemical elements, determined by the neutron activation method, has been revealed. This ambitious research was based on completely new approaches, attracting other disciplines, partners and complemented the theory of redox processes with visions and ideas justified by researchers from IC, USM and UTM.

A number of 45 isomers of dihydroxyfumaric acid were identified, including 23 keto- and 22 enediolic forms, three enediolic forms being the most stable, and their geometric isomerization and tautomerization were studied in B3LYP theory, using the set 6-311++G(2df, 2p) in gas phase and aqueous solution. Equilibrium constants were calculated, along with direct and reverse reaction rates for isomerization and tautomerization reactions.

The investigation of the mechanisms describing the antioxidant activity of dihydroxyfumaric acid and its derivatives has been initiated. The antioxidant activity of catechin has been tested in the wine matrix and in the presence of ascorbic acid, which improves the reducing power of catechin. In the presence of tartaric and citric acids, resveratrol has a lower antioxidant activity, which attests to an antagonistic effect between the given compounds.

The studied food phenoxyl acids demonstrated the antioxidant activity in the test with the cation-radical ABTS<sup>\*+</sup> exclusively in the form of anions, which form complexes with charge transfer with this radical cation. A quantitative assessment of their antioxidant activity was possible taking into account the geometric and electronic characteristics of these complexes, including the dependence on the nature of the solvent used, as well as the possible tautomeric forms of the anions of the studied acids.

A theoretical model for the kinetics of lipid peroxidation was presented, which takes into account the synergistic effect of vitamins C and E.

Possible interactions between human lactoferrin molecules and polysaccharides with antioxidant activity (beta-glucan and arabinogalactan) were studied using small-angle X-ray/ neutron scattering techniques. The obtained results indicate that at a concentration of 10 mg/ml of human lactoferrin and a temperature of 25°C and pH=6, there is a spontaneous electrostatic interaction resulting in the production of lactoferrin-polysaccharide complexes.

It was found that the process of forced oxidation of oils from grape seeds, walnut kernels, corn germs is completed in about 600 hours. The inhibitory action was demonstrated by the application of the antioxidants  $\alpha$ -tocopherol, L-ascorbic acid 6-palmitate, n-octyl gallate, matcha extract.

The kinetic laws and constants of photochemical transformation of thiol substances in the aquatic environment have been determined, which will be used in the forecasting of ecochemical processes in surface waters. The research results justified a set of new indicators for assessing and predicting natural water quality based on its redox status, self-purification capacity and inhibition of free radical generation to adjust and monitor the natural aquatic environment, which were proposed in Moldova for quality assessment surface waters.

The process of degradation of pollutants from homogeneous and heterogeneous systems containing antibiotics was studied and the physico-chemical parameters that influence the treatment performance were established.

Based on a new approach to the kinetics of chemical processes, the strategy for the statistical processing of viral infections and the prognosis of the COVID-19 pandemic was developed.



## 11. Recomandări, propuneri

Prelungirea cercetărilor în direcția obținerii rezultatelor aplicative în ce țin de utilizarea unei game largi de atioxidanți pentru prevenirea oxidării uleiurilor vegetale utilizate în diverse domenii (industria alimentară, cosmetică, farmaceutică).

Conducătorul de proiect  / academician DUCA Gheorghe

Data: 15.11.21

LS



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

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

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

1.1.monografii internaționale

1. VASEASHTA, A., DUCA, Gh., TRAVIN, S. Encyclopedia of Water Sciences and Society. In: *IGI Global*, USA, 2022 - în process de editare

1.2. monografii naționale

**4. Capitle în monografii naționale/internaționale**

1. VASEASHTA, A., DUCA, Gh., COVALIOVA, O., ROMANCIUC, L. Water Safety, Security and Sustainability, Emerging Trends and Future Pathways. In *Encyclopedia Water Science and Society*, IGI Global, USA, 2022 - în process de editare
2. DUCA Gh., GLADCHI V., BUNDUCHI E. New Kinetic Parameters for Natural Water Quality Assessment. In: *Enciclopedia Water Science and Society*, Ed. IGI Global, USA, 2022 - în process de editare

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

**4. Articole în reviste științifice**

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

1. DUCA, Gh., TRAVIN, S., VASEASHTA, A., GLADCHI, V., KOZLOV, Yu. Global warming – pro and contrary interpretations using modelling and analysis of two cities. In: *Int. J. Global Warming*, vol. 24, No. 2, 2021, pp. 108-130. DOI: [10.1504/IJGW.2021.115894](https://doi.org/10.1504/IJGW.2021.115894) (SCOPUS)
2. Duca, Gh., Bolocan, N. Understanding the chemical reactivity of dihydroxyfumaric acid and its derivatives trough conceptual DFT. In: *Revista de Chimie*, 2021(4), 72, 162-174. <https://doi.org/10.37358/RC.21.4.8465> (IF 1,351)
3. ДУКА, Г., БЛОНСКИ, В., ГЛАДКИ, В., ТРАВИН, С. Фотохимические превращения тиолов на примере цистеина и их влияние на формирование редокс-состояния природных вод. В: *Экологическая химия*. 2021, 30(2); pp. 94–100. [https://chemjournals.thesa.ru/eco/a/30\\_2/p93.pdf](https://chemjournals.thesa.ru/eco/a/30_2/p93.pdf) (IF 0,395)

4. CIOCARLAN, A., HRISTOZOVA, G., ARICU, A., DRAGALIN, I., ZINICOVSCAIA, I., YUSHIN, N., GROZDOV, D., POPESCU, V. Determination of the elemental composition of aromatic plants cultivated industrially in the republic of moldova using neutron activation analysis. In: *Agronomy*. 2021, nr. 5(11), pp. 1-20. ISSN 2073-4395, DOI: <https://doi.org/10.3390/agronomy11051011> (IF 3,64)  
[https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare\\_articol/132488](https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare_articol/132488)
5. GORBACHEV, M.YU., GORINCHOY, N.N., ARSENE, I. Key Role of Some Specific Occupied Molecular Orbitals of Short Chain n-Alkanes in Their Surface Tension and Reaction Rate Constants with Hydroxyl Radicals: DFT Study. In: *International Journal of Organic Chemistry*, 2021, 11(1), pp. 1-13. DOI: <https://doi.org/10.4236/ijoc.2021.111001> (IF 0,58)
6. SUBOTIN, Iu., DRUȚĂ, R., POPOVICI, V., COVACI, E., STURZA, R. Kinetic of forced oxidation of grape seeds, walnuts and corn germs oils in the presence of antioxidants. In: *Food and Nutrition Sciences*, in print. <https://www.scirp.org/journal/paperinformation> (IF=1,04)
7. VICOL, C., CIMPOIU, C., DUCA, G. Investigation of synergic/anti-synergic interactions of dihydroxifumaric acid and ascorbic acid with DPPH. In: *Studia Universitatis Babeş-Bolyai Chemia*. 2021, 66 (2), p. 49-58. DOI: [10.24193/subbchem.2021.2.04](https://doi.org/10.24193/subbchem.2021.2.04) (IF=0,48)
8. ZINICOVSCAIA, I., HRAMCO, C., CHALIGAVA, O., YUSHIN, N., GROZDOV, D., VERGEL, K., DUCA, Gh. Accumulation of potentially toxic elements in mosses collected in the Republic of Moldova. In: *Plants*. 2021, nr. 3(10), pp. 1-13. ISSN 2223-7747, DOI: [10.3390/plants10030471](https://doi.org/10.3390/plants10030471) (IF 2,762)  
[https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare\\_articol/126134](https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare_articol/126134)
9. ZINICOVSCAIA, I. et.al. Removal of metals from synthetic and real galvanic nickel-containing effluents by *Saccharomyces cerevisiae*. In: *Chemistry and Ecology*. 2021, nr. 1(37), pp. 83-103. ISSN 0275-7540. DOI: 10.1080/02757540.2020.1817404 (IF 1,93)

[https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare\\_articol/126614](https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare_articol/126614)

#### 4.2. în alte reviste din străinătate recunoscute

1. ZINICOVSCAIA, I., IVLIEVA, A., PETRITSKAYA, E., ROGATKIN, D., YUSHIN, N., GROZDOV, D., VERGEL, K., MAMULOVA-KUTLÁKOVÁ, K. Assessment of TiO<sub>2</sub> Nanoparticles Accumulation in Organs and Their Effect on Cognitive Abilities of Mice. In: *Physics of Particles and Nuclei Letters*. 2021, nr. 3(18), pp. 378-384. ISSN 1547-4771. DOI: 10.1134/S1547477121030146  
[https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare\\_articol/133995](https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare_articol/133995)
2. STURZA, R., DRUȚĂ, R., COVACI, E., DUCA, Gh., SUBOTIN I. Mechanisms of sunflower oil transforming into forces thermal oxidation processes. In: *Journal of Engineering Science*, vol. XXVII, no.3, 2020. <https://doi.org/10.5281/zenodo.3949716>
3. BOLOCAN, N., DUCA, Gh. DFT study of geometric isomerization and keto–enol tautomerization of dihydroxyfumaric acid. Acceptat în *Studia Chemia* (Cluj)

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

1. GORINCHOY, N., BALAN, I., POLINGER, V., BERSUKER, I. Pseudo Jahn-Teller origin of the proton-transfer energy barrier in the hydrogen-bonded [FHF]- system. In: *Chemistry Journal of Moldova*. 2021, nr. 1(16), pp. 115-120. **Categoria A**. ISSN 1857-1727, DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/cjm.2021.834>

[https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare\\_articol/134262](https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare_articol/134262)

2. LIS, A., GLADCHI, V., DUCA, Gh., TRAVIN, S. Sensitized photolysis of thioglycolic acid in aquatic environment. In: *Chemistry Journal of Moldova*. 2021, nr. 1(16), pp. 46-59. **Categoria A**. ISSN 1857-1727, DOI: [10.19261/cjm.2021.796](http://dx.doi.org/10.19261/cjm.2021.796)

[https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare\\_articol/134252](https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare_articol/134252)

3. КОВАЛЕВ, В., КОВАЛЕВА, О. Биохимическая трансформация сероводорода и пути дезодорирования сточных вод. In: *Studia Universitatis Moldaviae. Ser. "Șt. reale și ale naturii"*. 2020, Nr.6 (136), pp. 177-185. **Categoria B**. ISSN 1814-3237, online 1857 498X. DOI: <http://doi.org/10.5281/zenodo.4431823>

4. КОВАЛЕВА, О., КОВАЛЕВ, В. Фотокаталитическое обеззараживание патогенных бактериальных систем в водной среде. In: *Intellectus*. 2021, Nr.3-4, pp. **Categoria C**. ISSN 1810-7079. <http://www.agepi.md/ro/intellectus>

5. SANDU, M., TĂRIȚĂ, A., GLADCHI, V., DRAGALINA, G. Conținutul amoniacului neionizat în apele din râul Prut și din afluenții lui de stânga. In: *Studia Universitatis Moldaviae*, 2021, nr.1(141) Seria "Științe reale și ale naturii" ISSN 1814-3237 ISSN online 1857-498X, p.137-145.

6. MOCANU, L., GONȚA, M., MATVEEVICI, V., DUCA, Gh., PORUBIN-SCHIMBĂTOR, V. Îndepărtarea cefalexinei din soluții apoase utilizând procesul fotocatalitic Fenton. In: *Revista de Știință, Inovare, Cultură și Artă „Akademos”*. 2021, nr. 2(61), pp. 53-60. ISSN 1857-0461, DOI: 10.52673/18570461.21.2-61.03

7. DUCA, Gh. Hydrogen Peroxide in Ecological and Environmental Chemistry. In: *Chemistry Journal of Moldova, General, Industrial and Ecological Chemistry*, **Categoria A**. 2021- în process de editare

## 6. Articole în materiale ale conferințelor științifice

6.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

1. BOLOCAN, N., DUCA, GH. Geometric isomerization of dihydroxyfumaric acid. A DFT study in gas and solvent (water). In: *Modern directions of scientific research development. Proceedings of the 3rd International scientific and practical conference*. BoScience Publisher. Chicago, USA, 2021, pp. 101-105. URL: <https://sci-conf.com.ua/iii-mezhdunarodnaya-nauchno-prakticheskaya-konferentsiya-modern-directions-of-scientific-research-development-1-3-sentyabrya-2021-goda-chikago-ssha-arhiv/>

2. BOLOCAN, N., DUCA, GH. DFT study of keto-enol tautomerism of dihydroxyfumaric acid in gas and water. In: *Innovations and prospects of world science. Proceedings of the 1st International scientific and practical conference*. Perfect Publishing. Vancouver, Canada, 2021,

pp. 65-69. URL: <https://sci-conf.com.ua/iii-mezhdunarodnaya-nauchno-prakticheskaya-konferentsiya-modern-directions-of-scientific-research-development-1-3-sentyabrya-2021-goda-chikago-ssha-arhiv/>

3. DUCA, Gh. Design of the Smart Objectives System in the Management of a Research Project. In: *Lecture Notes on Data Engineering and Communications Technologies: Proceedings of the Fifteenth International Conference on Management Science and Engineering Management*, 2-3 august 2021, Berlin, Germania, Vol. 79, 2021, pp. 452-462. DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-030-79206-0\\_34](https://doi.org/10.1007/978-3-030-79206-0_34)

[https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare\\_articol/137155](https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare_articol/137155)

4. GORINCHOY, N., GORBACIOV, M., BALAN, I. Quantitative relationship between antioxidant activity of some food acids and particularities of their electronic structure: DFT study. In: *Proceedings "V International Scientific and Practical Conference "World science: problems, prospects and innovations"* on-line, Toronto, Canada, 27-29 January 2021, pp.74-79.
  5. YALTYCHENKO, O.V., KANAROVSKII, E.YU., GORINCHOY, N.N. Kinetic model of lipid peroxidation in cell membranes involving antioxidants and complexes of cytochrome c and cardiolipin – quasi-stationary approach. In: *The V International Scientific and Practical Conference "World science: problems, prospects and innovations"* on-line, Toronto, Canada, 27-29 January 2021, pp. 239-245.
  6. ГЛАДКИЙ, В.И. Химический состав и загрязнение вод среднего Днестра в период 2015-2019 годов. In: *Proceedings of the 7<sup>th</sup> International Scientific and Practical Conference InterConf*, (41), February, 2021, TOKYO, JAPAN, с. 838-842, <https://ojs.ukrlogos.in.ua/index.php/interconf/article/view/8800>
  7. БЛОНСКИ, В., ЧИСТЯКОВ, М., ДЕШАН, К. Влияние автохтонных тиолов на радикальные процессы самоочищения водных систем. In: *The VII International Scientific and Practical Conference Scientific Horizon in the context of social crises*, Scientific collection Interconf, February 6-8, 2021. Tokyo: Scientific Publishing Center, 2021, N. 41, p. 951-957. <https://interconf.top/documents/2021.02.6-8.pdf>
  8. БОРОДАЕВ, Р.И., БУНДУКИ, Е.Г. О процессах самоочищения природных вод с участием пероксида водорода и продуктов активации растворённого кислорода. In: *Book of the 7<sup>th</sup> International Scientific and Practical Conference "Scientific horizon in the context of social crises"*, February 6-8 2021, Tokyo, p. 838-842. <https://interconf.top/documents/2021.02.6-8.pdf>
  9. ЯЛТЫЧЕНКО, О.В.; ГОРИНЧОЙ, Н.Н.; ДУКА, Г.Г. Динамическое моделирование в эпидемиологии. Модель SEIR, расширенная на случай двух сценариев протекания вирусной инфекции. In: *Proceedings of IX International Scientific and Practical Conference*, Boston, USA, 14-16 April 2021, pp. 741-748.
  10. DUCA, Gh. Design of the Smart Objectives System in the Management of a Research Project. In: *Proceedings of The Fifteenth International Conference on Management Science and Engineering Management*, Toledo, Spania. Paper ID: Gheorghe Duca-IC1145-202101020000150, aprobat pentru publicare.
- 6.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)
1. ARSENE, I., GORINCHOY, N., GORBACHEV, M. Identificarea teoretică a mecanismului la

- prima etapă a procesului de inhibare a radicalului liber DPPH• sub acțiunea acidului dihidroxifumaric. In: *Conferința științifico-practică cu participare internațională „Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă”*, 20-21 martie, 2021, Universitatea de Stat din Tiraspol, pp. 9-13.
2. BĂLAN, I, GORINCIOI, N., GORBACIOV, M. Studiul DFT al particularităților structurale și activității antioxidante a unui șir de aciz hidroxicinamici. In: *Conferința științifico-practică cu participare internațională „Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă”*, 20-21 martie, 2021, Universitatea de Stat din Tiraspol, pp. 14 -20.
  3. GLADCHI, V. Compoziția chimică și poluarea apelor afluentului Nistrului, râului Ichel (perioada anilor 2015-2020). В: *Академику Л. С. Бергу – 145 лет: Сборник научных статей, Бендеры: Eco-TIRAS, 2021 (Типограф. „Arconteh”), с. 321-324. ISBN 978-9975-3404-9-6.*  
[http://eco-tiras.org/books/academician\\_Leo\\_Berg%20%E2%80%93%20145\\_web.pdf](http://eco-tiras.org/books/academician_Leo_Berg%20%E2%80%93%20145_web.pdf)
  4. DRUȚĂ, R., DUCA, Gh., SUBOTIN, I. Sunflower oil oxidation into forced thermal processes. In: *Proceedings of the International conference „Intelligent valorisation of agro-industrial wastes”*, 7 october, Chisinau, RM.
  5. TASCA, C., COVACI, E., COVALIOVA, O. The influence of biocatalysts on biomass fermentation processes. In: *Proceedings of the „Intelligent valorisation of agro-industrial wastes”*, 7-8 October 2021.
  6. ЧИСТЯКОВ, М., БЛОНСКИ, В., ГЛАДКИ, В. Влияние тиолов (на примере глутатиона) на миграцию ионов меди (II) в водных системах. В: *Акад. Л.С. Бергу-145. Международная конференция*, 1 февраля 2021, Бендеры. Бендеры: Arconteh, 2021, pp. 256-258. ISBN 978-9975-3404-9-6.  
[http://eco-tiras.org/books/academician\\_Leo\\_Berg%20%E2%80%93%20145\\_web.pdf](http://eco-tiras.org/books/academician_Leo_Berg%20%E2%80%93%20145_web.pdf)
  7. БОРОДАЕВ, Р.И., БУНДУКИ, Е.Г. Оценка процессов самоочищения воды Данченского водохранилища. В: *Сборник научных статей „Academician Leo Berg-145: Collection of Scientific Articles=Академику Л. С. Бергу-145 лет”*. Бендер: Eco-TIRAS, 2021, стр. 298-300.  
[http://eco-tiras.org/books/academician\\_Leo\\_Berg%20%E2%80%93%20145\\_web.pdf](http://eco-tiras.org/books/academician_Leo_Berg%20%E2%80%93%20145_web.pdf)

## 7. Teze ale conferințelor științifice

### 7.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

1. ANGHEL, L., ERHAN, R.V., RADULESCU, A. On the interactions between lactoferrin and  $\beta$ -lactoglobulin: a small-angle neutron scattering study. In: *MLZ 2021 Neutrons for Life Sciences Contribution list* (Abstract ID 25, p. 23)  
<https://indico.frm2.tum.de/event/230/abstracts/2228/abstract.pdf>
2. DRUȚĂ, R., STURZA, R., SUBOTIN, I., COVACI, E. Temperature factor and sunflower oil oxidation. In: *Международная научно-практическая интернет-конференция «Тенденции и перспективы развития науки и образования в условия глобализации»*, 30.04.2021, Переяслав, Украина.



3. DRUȚĂ, R., COVACI, E., STURZA, R., SUBOTIN, I.. Study of oxigability of some vegetables oils. In: *Proceedings of the 10th Edition of the International Euro-Aliment Symposium*, 7-8 octombrie, 2021, Galați, România. [http://www.euroaliment.ugal.ro/files/Book\\_of\\_abstracts.pdf](http://www.euroaliment.ugal.ro/files/Book_of_abstracts.pdf)
4. ERHAN, R.V., ANGHEL, L., RADULESCU, A. Observing the conformational changes of human lactoferrin using small angle neutron scattering. In: *MLZ 2021 Neutrons for Life Sciences Contribution list* (Abstract ID 26, p. 24) <https://indico.frm2.tum.de/event/230/abstracts/2229/abstract.pdf>
5. GONȚA, M., CEACIRU, M. Hydrogen peroxide heat treatment of chitosan and obtaining copolymers with antioxidant properties. In: *6th International Youth Congress "Sustainable development: Environmental protection. Energy saving. Sustainable environmental management*, Lvov, February 9-10, 2021, p. 114. ISBN 978-617-655-206-2. DOI: [10.23939/book.ecocongress.2021](https://doi.org/10.23939/book.ecocongress.2021)
6. ЛИС, А.С., ГЛАДКИ, В.И., ДУКА, Г.Г. Влияние тиогликолевой кислоты и тиомочевины на процессы самоочищения водных систем. In: *Материалы международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных, Ломоносов-2021. Секция «Химия»*, 12-23 апреля, 2021. Москва, Московский Государственный Университет, Россия. ISBN 978-5-317-06593-5
7. MOCANU, L., GONȚA, M., PORUBIN-SCHIMBĂTOR, V. Catalytic oxidation of amoxicillin and cephalixin in aqueous Solution using Fenton process – a comparative study. In: *6th International Youth Congress "Sustainable development: Environmental protection. Energy saving. Sustainable environmental management*, Lvov, February 9-10, 2021, p. 126. ISBN 978-617-655-206-2. DOI: [10.23939/book.ecocongress.2021](https://doi.org/10.23939/book.ecocongress.2021)
8. PORUBIN-SCHIMBĂTOR, V., GONȚA, M., MOCANU, L. Comparative oxidation of surfactants Cetyltrimethylammonium bromide and sodium 2-ethyl-hexyl Sulphate in aqueous solutions by using AOPs. In: *6th International Youth Congress "Sustainable development: Environmental protection. Energy saving. Sustainable environmental management*, Lvov, February 9-10, 2021, p. 127. ISBN 978-617-655-206-2. DOI: [10.23939/book.ecocongress.2021](https://doi.org/10.23939/book.ecocongress.2021)
9. SUBOTIN, I., DRUȚĂ, R., COVACI, E., STURZA, R. Analysis of the forced oxidability of grape seed, walnut and corn oils. In: *The 16th International Conference of Constructive Design and Technological Optimization in Machine Building Field "OPROTEH 2021"*, Univ. "V.Alecsandri", Bacau, 25-27 May, 2021.

## 7.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

1. COVALIOV, V.; COVALIOVA, O., TASCA, C.. Biochemical production of vitamin B<sub>12</sub> from the agro-industrial wastes. (P1.8). In: *International Conference "Intelligent Valorization of Agro-Food Industrial Wastes"*, Chisinau, Moldova, 7-8 October, 2021, p. 23. ISBN 978-9975-3464-2-9. [https://intelwastes.utm.md/wp-content/uploads/2021/10/Book-of-Abstracts\\_Intelwastes-oct-2021.pdf](https://intelwastes.utm.md/wp-content/uploads/2021/10/Book-of-Abstracts_Intelwastes-oct-2021.pdf)
2. TASCA, C.; COVACI, E.; COVALIOVA, O. The influence of phyto-catalysts on biomass fermentation processes. In: *International Conference "Intelligent Valorization of Agro-Food Industrial Wastes"*. Chisinau, Moldova, 7-8 October, 2021, p. 72. ISBN 978-9975-3464-2-9.

[https://intelwastes.utm.md/wp-content/uploads/2021/10/Book-of-Abstracts\\_Intelwastes-oct-2021.pdf](https://intelwastes.utm.md/wp-content/uploads/2021/10/Book-of-Abstracts_Intelwastes-oct-2021.pdf)

3. MOCANU, L., GONȚA, M., MATVEEVICI, V. Catalytic and photocatalytic degradation of amoxicillin from aqueous solution by Fenton reagent and titanium dioxide. In: *3rd International European Conference on Interdisciplinary Scientific Researches*. Comrat, JANUARY 15-16, 2021/ COMRAT STATE UNIVERSITY, MOLDOVA, p. 289. ISBN: 978-605-70216-4-9 [https://16e300a7-e9f6-4937-a7f0-793b8a4a3bf4.filesusr.com/ugd/614b1f\\_ab5670b8be0f44d0bb0c4c91e7b83cc5.pdf](https://16e300a7-e9f6-4937-a7f0-793b8a4a3bf4.filesusr.com/ugd/614b1f_ab5670b8be0f44d0bb0c4c91e7b83cc5.pdf)
4. GONȚA, M., PORUBIN-SCHIMBĂTOR, V. Advanced oxidation processes for mineralization of cationic trimethyl-ammonium bromide cationic surfactant. In: *3rd International European Conference on Interdisciplinary Scientific Researches*. Comrat, JANUARY 15-16, 2021/ COMRAT STATE UNIVERSITY, MOLDOVA, p. 290. ISBN: 978-605-70216-4-9 [https://16e300a7-e9f6-4937-a7f0-793b8a4a3bf4.filesusr.com/ugd/614b1f\\_ab5670b8be0f44d0bb0c4c91e7b83cc5.pdf](https://16e300a7-e9f6-4937-a7f0-793b8a4a3bf4.filesusr.com/ugd/614b1f_ab5670b8be0f44d0bb0c4c91e7b83cc5.pdf)
5. DUCA, Gh. Ecological and Environmental Chemistry Research in the Republic of Moldova. In: *EEC-2022 Abstract Book of the 7th International Conference on Ecological and Environmental Chemistry*, 2022, Chisinau: CET USM - în process de editare.
6. GORBACHEV, M.YU., GORINCHOY, N.N., BALAN, I.I. "Ionic character of the so-called "quasi-SPLET" mechanism of interaction between some organic antioxidant acids and the radicals DPPH\* and ABTS\*+". n: *EEC-2022 Abstract Book of the 7th International Conference on Ecological and Environmental Chemistry*, 2022, Chisinau: CET USM - în process de editare.
7. GORBACHEV, M.YU., GORINCHOY, N.N. "Molecular Orbital Nature of the Atmospheric Reactions Between the NO<sub>3</sub> radical and C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub> n-Alkanes: DFT Study". n: *EEC-2022 Abstract Book of the 7th International Conference on Ecological and Environmental Chemistry*, 2022, Chisinau: CET USM - în process de editare.
8. ARSENE, I., GORINCHOY, N.N., GORBACHEV, M.Yu. "Theoretical Study of the Three- Stages Radical Mechanism of the Reaction of Dihydroxyfumaric Acid with the Stable Radical DPPH\*.". n: *EEC-2022 Abstract Book of the 7th International Conference on Ecological and Environmental Chemistry*, 2022, Chisinau: CET USM - în process de editare.

### 7.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

1. BLONSCHI, V., CISTEACOV, M., GLADCHI, V., BUNDUCHI, E.. Evaluarea impactului compușilor tiolici asupra stării redox a apelor fluviului Nistru în perioada anilor 2015-2019. In: *Materialele Conferinței naționale cu participare internațională "Integrare prin cercetare și inovare"*, dedicată aniversării a 75-a a Universității de Stat din Moldova. Chișinău, Ediția 2021, 10-11 noiembrie 2021
2. BUNDUCHI, E., BORODAEV, R., LIS, A. Dinamica capacității de autopurificare a apelor lacului dănceni în prezența glutatationului. In: *Materialele Conferinței naționale cu participare internațională "Integrare prin cercetare și inovare"*, dedicată aniversării a 75-a a Universității de Stat din Moldova. Chișinău, Ediția 2021, 10-11 noiembrie 2021



3. CISTEACOV, M., BLONCHI, V., GLADCHI, V. Monitoringul conținutului substanțelor tiolice în apele râurilor Răut și Ichel în perioada anilor 2015-2020. In: *Materialele Conferinței naționale cu participare internațională "Integrare prin cercetare și inovare"*, dedicată aniversării a 75-a a Universității de Stat din Moldova. Chișinău, Ediția 2021, 10-11 noiembrie 2021
4. LIS, A., GLADCHI, V., DUCA, Gh. Influența substanțelor humice asupra fotolizei cisteinei și glutatationului în sisteme acvatic. In: *Materialele Conferinței naționale cu participare internațională "Integrare prin cercetare și inovare"*, dedicată aniversării a 75-a a Universității de Stat din Moldova. Chișinău, Ediția 2021, 10-11 noiembrie 2021
5. MOCANU, L., GONȚA, M., PORUBIN-SCHIMBĂTOR, V. Oxidarea cefalexinei prin fotoliză directă și indusă. In: *Materialele Conferinței naționale cu participare internațională "Integrare prin cercetare și inovare"*, dedicată aniversării a 75-a a Universității de Stat din Moldova. Chișinău, Ediția 2021, 10-11 noiembrie 2021
6. PORUBIN-SCHIMBĂTOR, V., GONȚA, M., MOCANU, L. Oxidarea catalitică cu reagentul fenton a surfactantului anionic 2-etil-hexil sulfat de sodium. In: *Materialele Conferinței naționale cu participare internațională "Integrare prin cercetare și inovare"*, dedicată aniversării a 75-a a Universității de Stat din Moldova. Chișinău, Ediția 2021, 10-11 noiembrie 2021

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

1. COVALIOVA, Olga; COVALIOV, Victor; UNGUREANU, Dumitru; COPTIUG, Eduard. *Instalație de decontaminare a toxinelor organice și bacteriilor din mediul acvatic*. Brevet MD Nr. 4738. <http://www.db.agepi.md/inventions/>
2. COVALIOV, Victor; COVALIOVA, Olga; UNGUREANU, Dumitru. *Instalație de obținere a biogazului*. Brevet MD Nr. 4744. 2021-09-30. <http://www.db.agepi.md/inventions/>
3. COVALIOV, Victor; SACHEVICI, Veaceslav; COVALIOVA, Olga; RUSNAC, Arcadie; POLESCHUK, Gheorgy. *Procedeu de deodorizare a deșeurilor organice*. Brevet MD nr.4750, 2021-10-31. <http://www.db.agepi.md/inventions/>
4. COVALIOV, Victor, COVALIOVA, Olga, NENNO, Vladimir, UNGUREANU, Dumitru, CIOBANU, Natalia, *Dispozitiv pentru arderea fără fum a combustibilului gazos cu conținut redus de metan*. Brevet MD Nr. 4766. 2021-08-31. <http://www.db.agepi.md/inventions/>
5. COVALIOV, Victor, COVALIOVA, Olga, NENNO, Vladimir, DUCA, Gheorghe, *Procedeu de obținere a biogazului*. Brevet MD Nr. 4767. 2021-09-30. <http://www.db.agepi.md/inventions/>
6. SUBOTIN, Iurie, DRUȚĂ, Raisa, COVACI, Ecaterina, STURZA, Rodica; Brevet *Procedeu de stabilizare a uleiului din semințe de struguri cu utilizarea L-acid ascorbic 6-palmitat – în proces*

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

**Cifrul proiectului: 20.80009.5007.27**

<b>Cheltuieli, mii lei</b>				
<b>Denumirea</b>	<b>Cod</b>		<b>Anul de gestiune</b>	
	<b>Eco (k6)</b>	<b>Aprobat</b>	<b>Modificat +/-</b>	<b>Precizat</b>
Remunerarea muncii angajaților conform statelor	211180	1 166,3		1 166,3
Contribuții de asigurări sociale de stat obligatorii	212100	338,2	-3,6	334,6
Prime de asigurare obligatorie de asistenta medicală achitate de angajator și angajați pe teritoriul țării	212210	-	3,6	3,6
Deplasări în interes de serviciu peste hotare	222720	78,6		78,6
Servicii de protocol	222920	3,2	-3,2	-
Servicii neatribuite altor aliniate	222990	40,0	-37,8	2,2
Indemnizații pentru incapacitatea temporară de muncă achitate din mijloacele financiare ale angajatorului	273500	5,0	3,5	8,5
Procurarea materialelor pentru scopuri didactice, științifice și alte scopuri	335110	41,5	37,5	79,0
<b>Total</b>		<b>1 672,8</b>		<b>1 672,8</b>

**Directorul  
Institutului de Chimie**

  
(semnătura)

**dr. hab. Aculina ARICU**  
(numele, prenumele)

**Contabil (economist)**

  
(semnătura)

**Viorica BOLOGA**  
(numele, prenumele)

**Conducătorul de proiect**

  
(semnătura)

**academician Gheorghe DUCA**  
(numele, prenumele)

Data: 15.11.2021



## Executarea devizului de cheltuieli, conform anexei nr. 2.3 din contractul de finanțare

Cifrul proiectului: 20.80009.5007.27

Cheltuieli, mii lei				
Denumirea	Cod		Anul de gestiune 2021	
	Eco (k6)	Aprobat	Modificat +/-	Precizat
Remunerarea muncii angajaților conform statelor	211180	381,3		381,3
Contribuții de asigurări sociale de stat obligatorii	212100	91,5		91,5
Deplasări în interes de serviciu în interiorul țării	222710	3,2	+3,6	6,8
Deplasări în interes de serviciu peste hotare	222720	3,6	-3,6	0,0
Servicii neatribuite altor aliniate	222990	3,0		3,0
Materiale pentru scopuri didactice, științifice și alte scopuri	335110	41,7		41,7
Procurarea materialelor de uz gospodăresc și rechizitelor de birou	336110	5,1		5,1
<b>Total</b>		<b>529,4</b>		<b>529,4</b>

Conducătorul organizației  / (Șarov Igor)Contabil șef  / (Cojocaru Liliana)Conducătorul de proiect  / (Duca Gheorghe)Data: 15.11.2021

L.S.



## Executarea devizului de cheltuieli, conform anexei nr. 2.3 din contractul de finanțare

Cifra proiectului 20.800009.5007.27Contract de finanțare: 164/3-PS din 04.01.2021

Cheltuieli, mii lei				
Denumirea	Codul economic	Anul de gestiune: 2021		
		Aprobat	Modificat (+/-)	Precizat
Remunerarea muncii angajaților conform statelor	211180	91,8		91,8
Contribuții de asigurări sociale de stat obligatorii	212100	22,0		22,0
Deplasări de serviciu în interiorul țării	222710			
Deplasări de serviciu peste hotare	222720			
Servicii editoriale	222910	10,0		10,0
Servicii de cercetări științifice contractate	222930			
Servicii neatribuite altor aliniate	222990			
Procurarea mașinilor și utilajelor	314110			
Procurarea produselor alimentare	333110			
Procurarea materialelor pentru scopuri didactice, științifice și alte scopuri	335110	10,2		10,2
Procurarea materiale de uz gospodăresc și rechizite de birou	336110			
<b>TOTAL</b>		<b>134,0</b>		<b>134,0</b>

Rector U.T.M.

  
 (semnătura)

dr. hab. Viorel BOSTAN

(numele, prenumele)

Contabil (economist)

  
 (semnătura)

Victoria IOVU

(numele, prenumele)

Conducătorul de proiect

  
 (semnătura)

Academician Gheorghe DUCA

(numele, prenumele)

Coordonator partener

  
 (semnătura)

dr. Iurie SUBOTIN

(numele, prenumele)





## Componența echipei proiectului

Cifrul proiectului 20.80009.5007.27

Echipa proiectului conform contractului de finanțare (la semnarea contractului)						
Nr	Nume, prenume (conform contractului de finanțare)	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării	Data eliberării
1.	Duca Gheorghe	1952	Acad.	1,0	04.01.2021	
2.	Duca Gheorghe	1952	Acad.	0,5	04.01.2021	
3.	Gorincioi Natalia	1951	Dr.	0,5	04.01.2021	
4.	Covaliova Olga	1960	Dr. hab.	1,0	04.01.2021	
5.	Gorbaciov Mihail	1959	Dr.	1,0	04.01.2021	
6.	Anghel Lilia	1986	Dr.	1,0	04.01.2021	
7.	Bălan Iolanta	1977	Dr.	1,0	04.01.2021	
8.	Romanciuc Lidia	1960	Dr.	0,75	04.01.2021	
9.	Vicol Crina	1994		1,0	04.01.2021	
10.	Barbă Alic	1958	Dr.	0,75	04.01.2021	
11.	Gorincioi Elena	1972	Dr.	0,5	04.01.2021	
12.	Arsene Ion	1981	Dr.	0,25	04.01.2021	
13.	Ialticenco Olga	1968	Dr.	0,25	04.01.2021	
14.	Bolocan Natalia	1984		0,5	04.01.2021	
15.	Scaletchi Valentina	1970		0,25	04.01.2021	26.08.2021
16.	Taşcă Corina	1992		0,25	04.01.2021	
17.	Zinicoscaia Inga	1986	Dr.	0,1	04.01.2021	
18.	Bersuker Isaac	1928	Acad.	-		
19.	Geru Ion	1937	Mem.cor.	-		
20.	Hramco Constantin	1990		-		

Pondereea tinerilor (%) din numărul total al executorilor conform contractului de finanțare


35

**Modificări în componența echipei pe parcursul anului 2021**

Nr	Nume, prenume	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării
1.	Gorincioi Natalia	1951	Dr.	1,0	
2.	Bălan Iolanta	1977	Dr.	0,75	
3.					

Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor la data raportării	35
---	----

**Directorul  
Institutului de Chimie**

  
(semnătura)

**dr. hab. Aculina ARICU**  
(numele, prenumele)

**Contabil (economist)**

  
(semnătura)

**Viorica BOLOGA**  
(numele, prenumele)

**Conducătorul de proiect**

  
(semnătura)

**academician Gheorghe DUCA**  
(numele, prenumele)



Data:

15.11.2021

## Componența echipei proiectului

Cifrul proiectului: 20.80009.5007.27

Echipea proiectului conform contractului de finanțare (la semnarea contractului)						
Nr.	Nume, prenume (conform contractului de finanțare)	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării	Data eliberării
1.	Gladchi Viorica	1964	doctor	0,5	04.01.2021	
2.	Bunduchi Elena	1974	doctor	0,5	04.01.2021	
3.	Borodaev Ruslan	1973	doctor	0,25	04.01.2021	
4.	Blonschi Vladislav	1994		0,5	01.03.2021	
5.	Gonța Maria	1948	doctor habilitat	0,5	04.01.2021	
6.	Matveevici Vera	1949	doctor	0,5	01.03.2021	
7.	Mocanu Larisa	1986		1	04.01.2021	
8.	Porubin Veronica	1994		0,5	01.03.2021	
9.	Covaliov Victor	1936	doctor	0,25	01.03.2021	26.08.2021
10.	Lis Angela	1985		0,5	04.01.2021	30.06.2021

Pondereea tinerilor (%) din numărul total al executorilor conform contractului de finanțare	30%
---	-----

Modificări în componența echipei pe parcursul anului 2021					
Nr.	Nume, prenume	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării
1.	Lis Angela	1985		0,5	01.09.2021

Pondereea tinerilor (%) din numărul total al executorilor la data raportării	33,3%
--	-------

Conducătorul organizației \_\_\_\_\_ / (Șarov Igor)  
 Contabil șef \_\_\_\_\_ / (Cojocaru Liliana)  
 Conducătorul de proiect \_\_\_\_\_ / (Duca Gheorghe)

Data: 15.11.2021

