

RECEȚIONAT

Agencia Națională pentru Cercetare
și Dezvoltare _____

_____ 2024

AVIZAT

Secția AȘM _____

_____ 2024

RAPORT ȘTIINȚIFIC ANUAL
pentru etapa 2023
privind implementarea proiectului din cadrul
Programului de Stat (2020–2023)

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

Cifra proiectului **20.8009.5007.27**

Prioritatea Strategică V. Competitivitate economica și tehnologii inovative

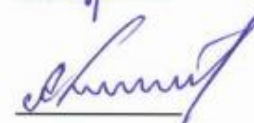
Rectorul

ȘAROV Igor



Consiliul științific

ARÎCU Aculina



Conducătorul proiectului

DUCA Gheorghe



L.Ș.

Chișinău 2024

1. Scopul etapei anuale conform proiectului depus la concurs

Institutul de Chimie: Fundamentarea teoretică a mecanismelor fizico-chimice și recomandări privind utilizarea antioxidantilor și cineticii reacțiilor redox.

USM: Aportul proceselor de oxidare a vitaminelor din grupul B la formarea proprietăților redox ale mediului acvatic și stabilirea legăturilor cinetice și mecanismelor proceselor redox de transformare a contaminanților emergenți în sistemele mixte: medicamente-surfactanți.

UTM: Descrierea mecanismului oxidării polifenolilor din produse vitivinicole sub influența factorilor de mediu și compoziționali.

2. Obiectivele etapei anuale

- 1) Studiul cuanto-chimic al izomerilor acidului dihidroxifumaric cu determinarea indicilor de reactivitate globală și locală, și a mecanismelor interacțiunii antioxidantilor cu radicalii liberi și influenței mediului de reacție asupra stabilității speciilor reactante și proprietăților antioxidante.
- 2) Studiul DFT a influenței naturii chimice a mediului de reacție asupra stabilității speciilor reactante și proprietăților antioxidante.
- 3) Calculele cuanto-chimice, efectuate prin metoda DFT/B3LYP folosind setul 6-31G(d), cu cation-radicalul ABTS•+ și antioxidanți precum glutationul sau epicatechina, o flavonoidă notabilă.
- 4) Obținerea și analiza datelor experimentale privind influența solventului și acidității mediului asupra interacțiunilor dintre ENOXIL, acizi organici cu radicali liberi și elaborată analiza comparativă a mecanismelor proceselor studiate.
- 5) Determinarea condițiilor optime de formare a vitaminei B12 în procesele anaerobe mezofile de fermentare a biomasei în sistemele de producere a biogazului, identificarea stabilității și conformației a combinațiilor de polizaharide, molecule proteice de lactoferină și polifenoli, formularea recomandărilor cu privire la posibilitatea îmbunătățirii alimentelor funcționale și suplimentelor alimentare cu adaos de antioxidanți.
- 6) Adaptarea și optimizarea metodelor de analiză a vitaminelor din grupul B pentru condițiile experimentului cinetic; ajustarea echipamentului tehnic la specificul experimentului; identificarea și argumentarea condițiilor fizico-chimice ale experimentului; modelarea proceselor redox și fotochimice cu participarea vitaminelor din grupul B; stabilirea legăturilor cinetice și propunerea mecanismelor ipotetice ale proceselor redox și fotochimice studiate; aplicarea microcosmelor și parametrilor redox pentru evaluarea aportului proceselor de transformare a vitaminelor din grupul B la formarea proprietăților redox ale mediului acvatic.
- 7) Determinarea experimentală a conținutului de aldehide și impactul transformărilor oxidative asupra culorii aromei produselor vinicole cercetate din soiurile Cabernet-Sauvignon, Saperavi, etc.
- 8) Analiza fizico-chimică și caracteristica organoleptică a produselor vinicole elaborate la diferite etape tehnologice de cercetare. Propunerea unor recomandări practice privind procesul de oxidare a polifenolilor din produsele vitivinicole sub influența factorilor de mediu și compoziționali.

3. Acțiunile planificate pentru realizarea scopului și obiectivelor etapei anuale

- 1) Organizarea webinarului "Spontaneous Symmetry Breaking and Jahn-Teller effects" dedicat jubileului de 95 ani a academicianului Isaac Bersuker.
- 2) Studiul mecanismelor prin care se manifestă activitatea antioxidantă a acidului dihidroxifumaric și a trei derivați ai acestuia, în dependență de natura chimică a mediului de reacție.
- 3) Studiul influenței solventului și acidității mediului asupra interacțiunilor dintre ENOXIL, acizi organici cu radicali liberi și elaborarea analizei comparative a mecanismelor proceselor studiate.
- 4) Analiza teoretică a influenței naturii chimice a mediului de reacție asupra stabilității speciilor reactante și proprietăților antioxidante.
- 5) Studiul cuanto-chimic al barierei de inversie în formele anionice ale sistemelor H_2CE .
- 6) Aplicarea abordărilor de aproximare (teorema lui Tihonov, metoda King-Altman) în descrierea efectului sinergic în sistemele antioxidantilor, vitaminelor E și C pe exemplul reacției de peroxidare a lipidelor.
- 7) Extinderea modelului cinetic al răspunsului imun la acțiunea virală: luarea în considerare a efectelor de cooperare și a efectelor de întârziere.
- 8) Analiza interacțiunilor și a speciilor reactante în sistemele antioxidantilor naturali din vin, prin metoda RMN, pe baza testului cu DPPH.
- 9) Studiul procesului de formare a vitaminei B_{12} în procesele de fermentare a biomase.
- 10) Identificarea posibilelor interacțiuni asociative dintre polizaharide cu activitate antioxidantă, proteine și polifenoli utilizând metodele de împrăștiere la unghiuri mici cu raze-X și neutroni.
- 11) Studierea transformărilor 16-azido-3,17-dihidroxi-10,13-dimetil-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-17-iletanone și derivatilor săi heterociclici prin metoda RMN.
- 12) Calculul cineticii, echilibrului și termodinamicii procesului de sorbtie a ionilor de gadolinu și praseodimiu pe sorbenti biologici.
- 13) Efectuarea expedițiilor hidrochimice pentru prelevarea probelor de apă din 5 obiecte acvatice (7 prize de captare).
- 14) Monitorizarea parametrilor hidrochimici, cinetici și a stării redox a apelor lotice și lentice din bazinul fl. Nistru
- 15) Efectuarea experiențelor de laborator și analiza datelor primare despre migrarea Fe(III) și Cu(II) în apa fluviului Nistru, Răut, Ichel, Ghidighici, Dănceni.
- 16) Analiza probelor de apă și elaborarea sintezei rezultatelor analizelor privind parametrii redox și conținutul substanțelor tiolice.
- 17) Efectuarea experimentului în vederea modelării proceselor de transformare a vitaminelor din grupul B.
- 18) Organizarea și realizarea modelărilor cu participarea vitaminelor complexului B pe sisteme de tip microcosme. Prelucrarea și prezentarea datelor experimentale.
- 19) Determinarea condițiilor optime de înlăturare a poluanților emergenți (PE) din sisteme model mixte (medicamente-surfactanți) prin oxidare avansată catalitică în sisteme omogene cu utilizarea reagentului Fenton și sono-Fenton.
- 20) Stabilirea legăturilor cinetice de oxidare/ mineralizare a PE în sisteme model mixte prin oxidare catalitică avansată în sisteme omogene cu utilizarea reagentului Fenton și sono-Fenton și propunerea mecanismelor de transformare chimică în sistemele studiate. Analiza datelor experimentale și elaborarea concluziilor.
- 21) Elaborarea schemei tehnologice de înlăturare a PE din sisteme model mixte prin oxidare/ mineralizare catalitică omogenă cu utilizarea reagentului Fenton și sono-Fenton.
- 22) Determinarea condițiilor optime de înlăturare a poluanților emergenți (PE) din sisteme model mixte

- (medicamente-surfactanți) prin oxidare avansată fotocatalitică în sisteme omogene cu utilizarea reagentului foto-Fenton și sono-Fenton. Aprecierea gradului de epurare prin oxidarea avansată fotocatalitică în funcție de diferiți parametri fizico-chimici.
- 23) Propunerea mecanismelor de transformare foto-chimică prin oxidare avansată fotocatalitică a PE în sisteme model mixte prin procesele de oxidare avansată.
 - 24) Determinarea condițiilor optime de înlăturare a poluanților emergenți (PE) din sisteme model mixte (medicamente-surfactanți) prin oxidarea avansată fotocatalitică în sisteme eterogene: PE/UV/TiO₂, PE/UV/H₂O₂/TiO₂. Analiza datelor experimentale și elaborarea concluziilor.
 - 25) Determinarea diferitor parametri cinetici în procesul de oxidare/ mineralizare fotocatalitică a PE în sisteme model mixte (PE/UV/TiO₂, PE/UV/H₂O₂/TiO₂) și compararea lor în funcție de complexitatea sistemelor model.
 - 26) Propunerea mecanismelor de fotodegradare/oxidare a poluanților emergenți în sisteme mixte eterogene (medicamente-surfactanți).
 - 27) Elaborarea schemei tehnologice de înlăturare a PE din sisteme model mixte prin procedeul de fotooxidare eterogenă în sistemele UV/TiO₂, UV/H₂O₂/TiO₂.
 - 28) Organizarea conferinței științifice studentești “Chimie ecologică și a mediului”.
 - 29) Determinarea experimentală a conținutului de aldehide și impactul transformărilor oxidative asupra culorii și aromei produselor vinicole cercetate din soiurile *Cabernet-Sauvignon*, *Pinot Grigio*, *Saperavi*, etc.
 - 30) Analiza fizico-chimică și caracteristica organoleptică a produselor vinicole elaborate la diferite etape tehnologice de cercetare. Propunerea unor recomandări practice privind procesul de oxidare a polifenolilor din produse vitivinicole sub influența factorilor de mediu și compoziționali.
 - 31) Analiza organoleptică și senzorială a probelor de vin studiate (Rară Neagră, Feteasca Neagră, Feteasca Regală, Feteasca Albă, Viorica).
 - 32) Conținutul de polifenoli totali, flavonoide totale, capacitatea antioxidantă în probele de vin analizate.

4. Acțiunile realizate pentru atingerea scopului și obiectivelor etapei anuale

1. S-a desfășurat seminarul științific ”Metode RMN în chimie” prezentat de profesorul Janez Plavec, Slovenia, 19.01.2023.
2. S-a organizat webinarului “Spontaneous Symmetry Breaking and Jahn-Teller effects” dedicat jubileului de 95 ani a academicianului Isaac Bersuker, la care au fost deseminate rezultatele obținute pe tematica proiectului (9 prezentări orale din diverse țări), 10.02.2023, coordonatori - Bălan I., Gorincioi N.
3. A fost organizată lectia publică Dr. A. Vaseashta (SUA) “Future of Water. Challenges and Solutions using Nature-Inspired Solutions. Nexus of Exponential Technologies”, 08.02.2023.
4. Participarea cu prezentare orală la seminarul ”Chimie supramoleculară”, Polonia, 03.02.2023.
5. A fost studiată influența naturii chimice a mediului de reacție asupra proprietăților antioxidante utilizând metode cuanto-chimice.
6. În baza rezultatelor obținute au fost pregătite 8 capitole în monografiile ”Aspecte fundamentale ale proceselor redo și ”Aspecte tehnologice și de mediu a proceselor redox” publicată în IGI Global.
7. A fost studiată bariera de inversie în formele anionice ale sistemelor H₂CE.
8. A fost studiat din punct de vedere a teoriei PJT transferul dublu de protoni în DAF.
9. Au fost prezentate 4 rezumate La Conferința Științifico-Practică Internațională „Instruire Prin Cercetare Pentru O Societate Prosperă” Martie 2023.
10. Au fost studiate posibilele interacțiuni asociative dintre polizaharide cu activitate antioxidantă, proteine și polifenoli utilizând metoda de împrăștiere la unghiuri mici.

11. Utilizând metoda RMN, sau analizat 290 de mostre de compuși organici sintetizați în Institutul de Chimie, pentru care au fost înregistrate 725 1D și 2D spectre RMN.
12. Au fost prezentate 2 lucrări (comunicare orală și poster) la 25th International Conference on the Jahn-Teller Effect (Virtual Conference), 14-18 mai, 2023.
13. Au fost susținute o teză de doctor - Bolocan Natalia (25 mai, 2023).
14. A fost studiată formarea Vitaminei B12 în procesul de fermentare a biomasei din sectorul agro-alimentar în prezența complexilor de Co(III) și adaosurilor substanțelor biologice active.
15. A fost publicat articol în revista Journal of Engineering Science (UTM).
16. A fost organizată lecția publică a dlui Prof. Fanica Cimpoesu de la Institutul de Chimie Fizică "Ilie Murgulescu" al Academiei Române cu titlul: "A journey to the end of periodic table: the quantum chemistry of lanthanides" ("O călătorie la capătul sistemului periodic: chimia cuantică a lantanidelor"), 26 mai, 2023.
17. A fost organizată lecția publică dlui Prof. Radu SILAGHI-DUMITRESCU de la Universitatea Babeș-Bolyai din Cluj-Napoca, România cu titlul: "Old dogs, old tricks, new glasses: new chemistry with cobalamin and redox agents", 4 mai, 2023.
18. Au fost aduse contribuții esențiale la elucidarea structurală a compușilor din seria steroidică, în particular, a compusului clorură de 3-(2-((3S,10R,13S)-3-hidroxi-10,13-dimetil-2,3,4,7,8,9,10,11,12,13,14,15-dodecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-17-il)-2-oxoetil)-1-vinil-1H-imidazol-3-ium care a demonstrat activitate biologică pentru cancerul de prostată.
19. Au fost realizate experimente de împrăștiere la unghiuri mici cu raze-X și neutroni.
20. Au fost analizate datele experimentale obținute, calculul valorii razei de rotație din aproximația Guinier, modelarea funcției de distribuție și modelarea 3D de rezoluție joasă a moleculelor individuale și complexilor formați în soluție utilizând curbele de împrăștiere.
21. S-au publicat articole în reviste științifice cu factor de impact Analytical Letters (IF 2,267), International Journal of Organic Chemistry (IF 1,26), Journal of Physics, Conference Series (IF 0,5). (a se vedea Anexa 2)
22. Participare la conferința internațională *MLZ Conference Neutrons for Biomaterials 2023* <https://indico.frm2.tum.de/event/391/> cu prezentare orală cu titlul "Heteroprotein complex formation based on lactoferrin and β -lactoglobulin: a small-angle neutron scattering study", autori: Lilia ANGHEL, Aurel RADULESCU, Raul-Victor ERHAN
23. A fost analizată reacția de anihilare a radicalilor DPPH de către soluțiile compuse din preparatul ENOXIL și acidul ascorbic și a fost calculată amploarea efectului sinergic dintre ENOXIL și acidul ascorbic.
24. Au fost testate 3 abordări de realizare a experimentului, care au presupus modificarea consecutivității adăugării antioxidanților, pentru a stabili cea mai eficientă metodă de aplicare a antioxidanților.
25. S-a realizat studiul DFT al sinergismului perechii „acizi fenolici și flavonoide” în reacție cu ABTS+•.
26. Participare la Seminarul științific "Materiale avansate pentru reducerea impactului substanțelor chimice toxice asupra mediului și sănătății (ADMATEH)", 21 septembrie 2023, Institutul de Chimie, eveniment online, cu prezentarea- GORBACHEV, M.YU.; GORINCHOY, N.N.; BALAN, I.I. "DFT evidence of mutual antioxidant action of caffeic acid and glutathione in their reactions with ABTS+•". DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/admateh.2023.ab17>
27. Participarea la conferința Iasi CHEM 5-MIT 2023 consacrată aniversării a 163 de ani de la înființarea Universității "A.I. Cuza" și a 145 de ani de la înființarea Facultății de Chimie, Iași, România, 26-28 octombrie, cu prezentarea orală: O. Covaliova "Perspectivele utilizării proceselor naturale de tartare a apelor uzate municipale".
28. Deplasare la Universitatea Babeș Boyai, Cluj Napoca, România, 7-10 septembrie, 2023: Duca Gh., Covaliova O., Romanciuc L. și prezentarea unei conferințe cu titlul: "Peroxidul de hidrogen în mediul ambiant și biomedicină"
29. Participare la Conferința științifică națională cu participare internațională Integrare prin Cercetare și Inovare, USM cu prezentare poster - GORBACHEV, M.YU.; GORINCHOY, N.N.; BALAN, I.I.

- “DFT evidence of mutual antioxidant action of caffeic acid and glutathione in their reactions with ABTS+•”, 9-10 noiembrie 2023, 6 p.
30. Prezentare orală- VICOL, C., DUCA, Gh. Antioxidant Activity Of Enoxil Determined Via Interaction With Various Free Radicals. Abstract Book of the The National Conference with international participation Natural Sciences In The Dialogue Of Generations, 14-15 September, 2023, Chisinau, Republic of Moldova
 31. Prezentare orală- Natalia BOLOCAN *Molecular Docking, Druglikeness Analysis, and ADMET Prediction of Dihydroxyfumaric acid and its derivatives as potential antiviral compounds.* International conference of Physical Chemistry ROMPHYSICHEM 17 -2023, 25-27 Septembrie, București, România.
 32. Prezentarea în tipar a Monografiei ”Procesele redox cu transfer de electroni și protoni.” (Ed. DUCA, Gh.) CEP USM: Chisinau, 2023, 493 p.
 33. Prezentarea în tipar a monografiei Natalia Bolocan și Gheorghe Duca ”Derivați noi ai acidului dihidroxifumaric: Cercetări cinetice și computaționale”
 34. Au fost monitorizate obiectele acvatice preconizate în proiect; s-au efectuat 4 expediții hidrochimice pentru prelevarea probelor de apă.
 35. S-au stabilit condițiile optime de înlăturare a poluanților emergenți (PE) din sisteme model mixte (medicamente-surfactanți) prin oxidare avansată catalitică și fotocatalitică omogenă cu utilizarea reagentului Fenton, Foto-Fenton și sono-Fenton;
 36. S-au stabilit legăturile cinetice de oxidare/ mineralizare a PE în sisteme model mixte;
 37. Au fost propuse mecanismele de transformare chimică și foto-chimică a PE în sisteme model mixte prin procesele de oxidare avansată în sisteme model mixte;
 38. S-a elaborat schema tehnologică de înlăturare a PE din sisteme model mixte prin oxidare/ mineralizare catalitică și fotocatalitică omogenă cu utilizarea reagentului Fenton, Foto-Fenton și sono-Fenton.
 39. S-a organizat Conferința Științifică Studentească “Chimie ecologică și a mediului”, 21 noiembrie 2023 USM.
 40. A fost determinat experimental conținutul de aldehide în probele de Rara Neagră, Cabernet-Sauvignon, Cabernet Petit, Rara Neagră zona Purcari, Feteasca Alba, Feteasca Regala, Viorica.
 41. A fost analizat impactul transformărilor oxidative asupra culorii și aromei produselor vinicole cercetate.
 42. A fost efectuată analiza organoleptică și senzorială a probelor de vin studiate (Rară Neagră, Feteasca Negră, Feteasca Regală, Feteasca Albă, Viorica).
 43. S-a determinat conținutul de polifenoli totali, flavonoide totale, capacitatea antioxidantă în probele de vin analizate.

5. Rezultatele obținute

Proiectul a adus contribuții semnificative în 2023 prin descoperiri inovatoare și colaborări internaționale. Rezultatele cercetărilor noastre nu numai că au avansat înțelegerea proceselor chimice și antioxidante, dar au și deschis calea pentru noi aplicații în domeniul sănătății, tehnologiei și sustenabilității mediului. Aceste realizări subliniază importanța continuării cercetărilor interdisciplinare și a colaborării internaționale pentru a aborda provocările complexe ale lumii contemporane.

Pentru a facilita o înțelegere mai clară și o evidență mai adecvată a progreselor realizate în cadrul proiectului nostru, rezultatele au fost structurate în mod strategic, împărțindu-l în secțiuni dedicate fiecărui aspect cheie al cercetării. Această abordare permite o prezentare detaliată și

organizată a fiecărui domeniu de studiu, evidențiind importanța și impactul fiecărei descoperiri în parte. Astfel, fiecare segment al textului se concentrează asupra unui anumit subiect, oferind o perspectivă cuprinzătoare asupra rezultatelor obținute și a contribuțiilor semnificative aduse în domeniile respective. Această împărțire tematică asigură o navigare ușoară prin material și o apreciere mai profundă a complexității și relevanței lucrărilor efectuate în cadrul proiectului.

1) Progresele și descoperiri importante în studiul mecanismelor antioxidante

Unul dintre obiectivele principale ale proiectului nostru în 2023 a fost de a aprofunda înțelegerea mecanismelor antioxidante. Ne-am concentrat asupra a trei mecanisme principale: transferul de atom de hidrogen (HAT), transferul de electron, urmat de transferul de protoni (SET-PT) și transferul inițial de proton, urmat de transferul de electron (SPLET). Analiza noastră s-a axat pe patru compuși specifici, selectați datorită relevanței lor în contextul biochimic și tehnologic: acidul dihidroxifumaric, esterul dimetilic al acestuia, (E)-metil-2,3-dihidroxi-4-oxo-4-(fenilamino)but-2-enoat și acidul (E)-3-(1H-benzo[d]imidazol-2-il)-2,3-dihidroxiacrilic. Am calculat valorile BDE, IP, PDE, PA și ETE folosind metoda B3LYP/6-311+G(d,p) la 298.15 K, cu scopul de a identifica mecanismul predominant de activitate antioxidantă pentru fiecare compus. Aceste cercetări au avut un rol esențial în aprofundarea înțelegerii noastre despre modul în care antioxidanții protejează structurile biologice și tehnologice de efectele dăunătoare ale radicalilor liberi.

2) Descoperiri în Interacțiunea ABTS^{•+} cu Acizii Alimentari

Studiul nostru asupra interacțiunii dintre cationul radical ABTS^{•+} și acizii alimentari a fost un punct de referință în înțelegerea dinamicilor redox complexe. Prin metodele DFT, am analizat interacțiunea dintre moleculele neutre ale acizilor alimentari și ABTS^{•+}, descoperind că această interacțiune nu conduce la transferul de sarcină. Acest lucru a adus o lumină nouă asupra modului în care diferiți compuși reacționează în contexte chimice diverse. De asemenea, studiul efectului sinergic al diferitelor perechi de antioxidanți, precum „acid cafeic + glutation” și „acid gentisic + epicatechină”, a demonstrat că sinergia dintre antioxidanți poate conduce la efecte antiradicalice intensificate, un aspect crucial în dezvoltarea unor noi terapii antioxidante.

3) Analiza Teoretică a Moleculelor X₂CE

Un alt domeniu important al cercetării noastre a fost studiul moleculelor X₂CE (X=H, F; E=O, S, Se) în diverse stări electronice. Am observat că, în starea electronică fundamentală, aceste molecule prezintă o configurație nucleară planară de simetria C_{2v}, în timp ce în stările excitate și reduse capătă o structură piramidală (simetria C_s). Acest fenomen se datorează modificărilor în distribuția electronilor în urma excitării sau a adității electronilor liberi. Aceste descoperiri au avut implicații semnificative în înțelegerea proceselor de transfer de electroni la nivel molecular.

4) Inovații în testarea preparatelor medicinale: cazul enoxil

Un moment important în proiectul nostru a fost testarea inovatoare a preparatului medicinal ENOXIL, sintetizat de Acad. T. Lupașcu în colaborare cu Acad. Gh.Duca, care reprezintă taninuri oxidate. Utilizând metodele Folin-Ciocalteu și FRAP, am evaluat activitatea sa antioxidantă. Rezultatele obținute au fost nu doar promițătoare, ci și revelatoare. Am descoperit că ENOXIL

manifestă o activitate antioxidantă considerabilă în toate cele patru teste utilizate, cu performanțe remarcabile în soluția tampon fosfat. Mai mult, am observat un efect sinergic între ENOXIL și acidul ascorbic, ceea ce deschide noi perspective pentru utilizarea acestuia în combinații terapeutice.

5) Studiu Asupra Interacțiunilor Asociative între Polizaharide cu Activitate Antioxidantă, Proteine și Polifenoli

S-a explorat interacționarea dintre lactoferină umană și epigallocatechin-3-gallate, folosind metoda de împrăștiere la unghiuri mici cu raze-X la Sincrotronul Elettra din Trieste, Italia. Rezultatele împrăștierei vor fi analizate prin metode matematice precum modelul Kratky, aproximația Guinier și funcția de distribuție prin Transformată Fourier Inversată. De asemenea, se va efectua o analiză comparativă a parametrilor de împrăștiere obținuți.

6) Analiza Cineticii, Echilibrului și Termodinamicii în Procesul de Sorbție a Ionilor de Gadolinu și Praseodimiu pe Sorbenți Biologici

S-a folosit analiza de activare cu neutroni pentru a detecta eficient și precis elemente chimice în probe de mediu din Republica Moldova. S-a determinat compoziția elementară a 45 de specii de plante din familia Lamiaceae, colectate din Grădina Botanică a Republicii Moldova. Aceste plante au prezentat conținut ridicat de K, Cl, Mg și Ca. Fe a fost cel mai abundent dintre elementele esențiale, urmat de Mn, Zn, Br, Cr, Mo și Co. Concentrațiile metalelor au fost în general conform cu literatura de specialitate, cu excepția As, care a depășit valorile stabilite de OMS în unele specii. Depășirea valorilor aportului zilnic tolerabil pentru As indică un potențial risc pentru sănătatea umană.

Poluarea apelor naturale cu metale toxice în Moldova poate fi redusă prin tratarea riguroasă a apelor reziduale industriale și menajere. Sorbenții biologici reprezintă o alternativă ecologică sigură, cost-eficientă și eficientă pentru îndepărtarea metalelor din apele uzate.

7) Eforturi pentru Sustenabilitate. Transformarea Deșeurilor și Tratarea Apelor

Proiectul nostru a inclus, de asemenea, inițiative orientate spre sustenabilitate, cum ar fi transformarea deșeurilor în resurse valoroase. Un exemplu notabil a fost utilizarea complexilor Co(III) pentru accelerarea fermentării vinasei, cu scopul de a obține nămol vitaminizat pentru industria furajelor. Această abordare nu numai că valorifică deșeurile, dar contribuie și la reducerea impactului asupra mediului.

6) Studiul Vitaminelor din Grupul B

Am investigat comportamentul redox și fotochimic al vitaminelor din grupul B, dezvoltând legile cinetice ale transformărilor acestora și modelând sisteme microcosmice. Studiile au reușit să estimeze persistența lor în apă. Cercetările au fost extinse în apele din lacul Dănceni, îmbogățite cu vitamine din grupul B, pentru a observa dinamica parametrilor cinetici redox. În plus, eforturi considerabile au fost dedicate monitorizării obiectelor acvatice din bazinul fluviului Nistru, aducând o înțelegere mai profundă a ecosistemelor acvatice.

9) Degradarea Antibioticelor și Oxidarea Fotocatalitică

Procesele de oxidare Fenton, foto-Fenton și sono-Fenton au fost aplicate pentru degradarea antibioticelor amoxicilină și cefalexină. S-a observat că degradarea amoxicilinei este mai rapidă și mai avansată (90%) comparativ cu cefalexina (70%). Prezența surfactanților a accelerat procesul de degradare/mineralizare. Degradarea amestecului de poluanți emergenți în sistemele PE/TiO₂/UV și PE/TiO₂/H₂O₂/UV s-a realizat prin scindarea inelelor benzenice și transformarea substraturilor în compuși mai simpli.

10) Studiul Vinurilor Moldovenești

Vinurile autohtone moldovenești, atât roșii cât și albe, au demonstrat a fi surse bogate de compuși bioactivi cu capacitate antioxidantă importantă. Vinurile roșii au avut un conținut de polifenoli de până la 10 ori mai mare decât cele albe, datorită unei extracții mai bune a compușilor fenolici, unui timp de contact mai mare cu pielea și semințele strugurilor, condițiilor de fermentare și temperaturii. Compușii majoritari identificați în toate probele au inclus acizii galic, resveratrol, acid cafeic, catehina, epicatehina și procianidina. De asemenea, am efectuat analize, utilizând metode precum CIELab și HPLC, evaluând proprietățile fizico-chimice-redox și senzoriale ale vinurilor, subliniind calitatea excepțională a soiurilor de struguri autohtone.

11) Webinarul Științific Internațional și Omagiul adus Academicianului Isaac Bersuker

La începutul anului 2023, 10 februarie, am organizat un webinar științific internațional de prestigiu, „Spontaneous Symmetry Breaking and Jahn-Teller Effects”. Acest eveniment a fost dedicat în mod special aniversării a 95 de ani de la nașterea Academicianului Isaac Bersuker, o figură emblematică în domeniul chimiei teoretice. Webinarul, găzduit de Academia de Științe a Moldovei și Institutul de Chimie, a reprezentat un punct de întâlnire pentru experți de renume din întreaga lume, cu participanți din SUA, Belgia, China, Japonia, Spania și Rusia. Prin prezentarea a 9 rapoarte științifice și discuțiile ulterioare, acest eveniment a fost nu doar o platformă de diseminare a cunoștințelor, ci și o sursă de inspirație pentru noi direcții de cercetare.

Proiectul „Mecanisme fizico-chimice ale proceselor redox cu transfer de electroni implicate în sistemele vitale, tehnologice și de mediu” a adus contribuții semnificative în 2023 prin descoperiri inovatoare și colaborări internaționale. Rezultatele cercetărilor noastre nu numai că au avansat înțelegerea proceselor chimice și antioxidante, dar au și deschis calea pentru noi aplicații în domeniul sănătății, tehnologiei și sustenabilității mediului. Aceste realizări subliniază importanța continuării cercetărilor interdisciplinare și a colaborării internaționale pentru a aborda provocările complexe ale lumii contemporane.

6. Impactul științific, social și economic al rezultatelor obținute în cadrul acestui proiect este vast și multidimensional.

Mentionăm câteva rezultate care au impact științific, social și economic.

a) Studiului mecanismelor antioxidante

Impact Științific. Studiul mecanismelor antioxidante oferă o înțelegere detaliată a modului în care antioxidanții neutralizează radicalii liberi și alte specii reactive de oxigen. Aceasta poate duce la noi descoperiri în biochimie și biologie celulară.

Inovații în Cercetare. Rezultatele pot stimula dezvoltarea de noi metode și tehnici de cercetare, care pot fi aplicate în studiul altor procese biochimice.

Impact Social. Cunoașterea mecanismelor antioxidante poate influența recomandările dietetice și promova stiluri de viață sănătoase. De exemplu, accentuarea importanței consumului de fructe și legume bogate în antioxidanți.

Educație și Conștientizare. Creșterea conștientizării publicului cu privire la rolul antioxidanților în prevenirea unor boli cronice, cum ar fi bolile cardiovasculare sau anumite tipuri de cancer.

Impact Economic. Cercetările pot impulsiona dezvoltarea de noi produse alimentare funcționale și suplimente nutritive bazate pe proprietățile antioxidanților.

Farma și Cosmetice. Avansurile în înțelegerea antioxidanților pot duce la inovații în produsele farmaceutice și cosmetice, cum ar fi dezvoltarea de noi medicamente și produse anti-îmbătrânire.

Protecția Mediului. Înțelegerea rolului antioxidanților în sistemele naturale poate contribui la strategii mai eficiente de protecție a mediului și la combaterea poluării.

Agricultură. Cercetările pot duce la dezvoltarea de soiuri de plante mai rezistente la stresul oxidativ, îmbunătățind randamentele culturilor și sustenabilitatea în agricultură.

b) Procesul biochimic de formare a vitaminei B12

Impact ecologic. Utilizarea biomasei deșeurilor din sectorul agro-alimentar pentru producerea vitaminei B12 contribuie la reducerea deșeurilor și susține principiile economiei circulare.

Impact economic. Introducerea vitaminei B12 în furajul bovinelor poate îmbunătăți eficiența creșterii animalelor, oferind beneficii economice în sectorul agricol. Aplicabilitatea rezultatelor în industria alimentară, cosmetică și farmaceutică extinde potențialul economic al acestor descoperiri.

c) Studiul proceselor de autopurificare a apelor

Impactul asupra mediului. Identificarea metodelor eficiente pentru eliminarea surfactanților și a compușilor farmaceutici din apele uzate adresează o problemă majoră de mediu, contribuind la protejarea surselor de apă.

Impact social și de sănătate. Reducerea contaminării apei cu antibiotice și alte substanțe dăunătoare previne dezvoltarea rezistenței bacteriilor la antibiotice, protejând sănătatea publică.

Impact științific și educațional. Rezultatele cercetărilor sunt valoroase pentru elaborarea de cursuri universitare și pot servi drept fundament pentru noi proiecte naționale și internaționale.

d) Studiul Enoxilului

Impact științific. Descoperirea capacității Enoxilului de a reduce Fe(III) și demonstrarea bioactivității sale sporite în soluție tampon fosfat reprezintă un progres semnificativ în înțelegerea proprietăților antioxidante ale compușilor naturali. Interacțiunile sinergice între resveratrol și acid ascorbic, precum și influența secvenței de adăugare a compușilor asupra activității antioxidante, deschid noi perspective în studiul biochimiei.

Impact social și economic. Rezultatele subliniază importanța compușilor naturali prezenți în fructe, legume și plante, ceea ce poate influența practicile alimentare și de sănătate publică, promovând utilizarea resurselor naturale în scopuri terapeutice și nutriționale.

e) Optimizarea producției de vinuri autohtone moldovenești.

Impact economic. Îmbunătățirea proceselor de vinificație, reducerea utilizării dioxidului de sulf și explorarea alternativelor cum ar fi dimetildicarbonatul, pot spori competitivitatea vinurilor moldovenești pe piața globală.

Impact social și cultural. Promovarea calităților unice ale vinurilor moldovenești, cum ar fi Rară Neagră și Fetească Neagră, îmbogățește patrimoniul cultural și contribuie la aprecierea tradițiilor locale.

Impact științific. Studiul diferențelor în conținutul de polifenoli între vinurile roșii și albe oferă noi cunoștințe despre proprietățile antioxidante ale vinurilor și despre procesele de vinificație.

Prin urmare, acest proiect demonstrează cum cercetările științifice din acest domeniu pot avea un impact profund și variat, influențând domenii precum sănătatea, mediul, agricultura, industria alimentară și vinificația. Aceste descoperiri subliniază valoarea investițiilor în cercetare și dezvoltare pentru progresul societății în ansamblu.

7. Colaborare la nivel național și internațional în cadrul implementării proiectului

Pe parcursul anului colectivul de cercetare a avut colaborări cu colegii din domeniul de la Institutul de Chimie, Institutul de Ecologie și Geografie, Universitatea de Stat din Moldova - laboratorul de chimie ecologică și tehnologii avansate, Universitatea Tehnică a Moldovei - centrul de oenologie, chimie și nutriție, Ministerul mediului și Apa-Canal Chișinău.

Colaborarea la nivel internațional a fost realizată cu mai multe instituții din România:

- ✓ Universitatea Tehnică "Gh.Asachi" din Iași,
- ✓ Universitatea "Alexandru Ion Cuza", Iași,
- ✓ Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni", Iași,
- ✓ Universitatea Babeș Bolyai, Cluj-Napoca,
- ✓ Universitatea Transilvania din Brașov,
- ✓ Institutul de Chimie Fizică "Ilie Murgulescu", București,
- ✓ Institutul de Chimie Organică și Supramoleculară "C. D. Nenițescu", București,
- ✓ Universitatea București, Facultatea de Chimie, București,
- ✓ Institutul National Horia Hulubei, București.

Și instituții din alte țări:

- ✓ International Clean Water Institute, USA,
- ✓ Newcastle University, School of Natural and Environmental Sciences, UK,
- ✓ Odessa I.I. Mechnikov National University, Odesa, Ukraine,
- ✓ Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Rusia,
- ✓ "N. Semenov" Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Science, Moscova, Rusia,
- ✓ Cardinal Stefan Wyszyński University in Warsaw, Polonia,
- ✓ Sichuan University, Chengdu, China.
- ✓ Universidad de Fernando Pessoa, Portugal
- ✓ Technical University Braunschweig, Germany
- ✓ Universitatea din Strasburg, France
- ✓ Universitatea Lun, Suedia
- ✓ Jülich Centre for Neutron Science Outstation at MLZ, Germany

- ✓ Institute of Inorganic Chemistry, Graz University of Technology, Austria
- ✓ Synchrotron ELETTRA, Trieste, Italia
- ✓ Universitatea "La Sapienza", Roma, Italia

8. Dificultățile în realizarea proiectului

Financiare, organizatorice, legate de resursele umane etc.

1. Întârziere considerabilă a finanțării, ceea ce are mai multe consecințe negative – întârzierea organizării licitației și aprovizionării cu reagenți chimici și consumabile.
2. Interzicerea angajării a masteranzilor, care posedă abilități suficiente pentru a activa în calitate de cercetător științific stagiar.

9. Diseminarea rezultatelor obținute în proiect în formă de publicații

Lista publicațiilor din anul 2023 este prezentată în Anexa 2 (pag. 20)

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

Lista forurilor la care au fost prezentate rezultatele obținute în cadrul proiectului de stat

- Manifestări științifice internaționale (în străinătate)
- ◆ ANGHEL Lilia, dr., - "Heteroprotein complex formation based on lactoferrin and β -lactoglobulin: a small-angle neutron scattering study". Autori: CAZACU (ANGHEL), L; RADULESCU, A.; ERHAN, R.-V. Organizator MLZ, Munich, Germania, conferința internațională "MLZ Conference Neutrons for Biomaterials 2023" <https://indico.frm2.tum.de/event/391/>, 22-25 mai 2023 (comunicare orală – 20 min)
- ◆ BĂLAN Iolanta, dr. în șt.chimice - „Pseudo Jahn-Teller Origin of the Double Proton Transfer Energy Barrier in Formic Acid Dimer” Autorii: BALAN, I; GORINCHOY, N.; POLINGER, V.; BERSUKER, I.B. Organizator: York University, Canada; 25th International Conference on the Jahn-Teller Effect (Virtual Conference), 14-18 mai, 2023 - în format online - poster/prezentare. <https://jahnteller2023-yorku.ca/index.html>
- ◆ DUCA Gheorghe, Natalia BOLOCAN- International conference Supramolecular chemistry – past, present, future organized on the occasion of the 80th birthday of Professor Janusz Lipkowski; organized by Cardinal Stefan Wyszyński University in Warsaw, Polish Academy of Sciences and Warsaw Scientific Society on 2 February 2023; Dihydroxyfumaric acid – quantum and supramolecular chemistry. -comunicare orală.
- ◆ DUCA Gheorghe, acad. - Prezentarea orală: "Chemistry in the context of transboundary research", Exploratory workshop: Transboundary chemistry at the forefront of molecular sciences, Timișoara, Romania, 10 aprilie, 2023.
- ◆ DUCA Gheorghe, acad. - Lecția publică "Chimia cuantică a peroxidului de hidrogen", Institutul de Chimia Fizică Ilie Murgulescu, București, România, 1-10 iunie, 2023.
- ◆ GORINCHOY, Natalia, dr. în șt.chimice - *Pseudo-Jahn-Teller Effect in Transition States of Chemical Reactions*. Autorii: GORINCHOY, N.; POLINGER, V.; BERSUKER, I.B. Organizator: York

University, Canada; 25th International Conference on the Jahn-Teller Effect (Virtual Conference), 14-18 mai, 2023 - în format online - comunicare orală.

➤ Manifestări științifice internaționale (în Republica Moldova)

- ◆ GORINCHOY, Natalia, dr. în șt.chimice - *Pseudo-Jahn-Teller Effect in Transition States of Redox Processes*. Autorii: GORINCHOY, N. Organizator: Institutul de Chimie și Academia de Științe, Webinarului “Spontaneous Symmetry Breaking and Jahn-Teller effects” dedicat jubileului de 95 ani a academicianului Isaac Bersuker, 10 februarie, 2023 - în format online - comunicare orală.
- ◆ VICOL, C., drd. - *Antioxidant Activity Of Enoxil Determined Via Interaction With Various Free Radicals*. Abstract Book of the The National Conference with international participation Natural Sciences In The Dialogue Of Generations, 14-15 September, 2023, Chisinau, Republic of Moldova. -comunicare orală.

➤ Alte evenimente științifice:

- ◆ DUCA Gheorghe, acad. - Online Meeting with EUChemS (European Chemical Society), 26 ianuarie 2023.
- ◆ DUCA Gheorghe, acad. - Online Lecture by Dr. A.Vaseashta (SUA) “Future of Water. Challenges and Solutions using Nature-Inspired Solutions. Nexus of Exponential Technologies”, 8 Februarie 2023, organizator, prezentare orală introductivă.
- ◆ DUCA Gheorghe, acad. - Lectia publică a dlui Prof. Radu Silaghi-Dumitrescu de la Universitatea Babeș-Bolyai din Cluj-Napoca, România cu titlul: "Old dogs, old tricks, new glasses: new chemistry with cobalamin and redox agents", 4 mai 2023.
- ◆ DUCA Gheorghe, acad. - Lectia publică a dlui Prof. Fanica Cimpoeșu (Institutul de Chimie Fizică “Ilie Murgulescu” al Academiei Române) cu titlul: "A journey to the end of periodic table: the quantum chemistry of lanthanides" (“O călătorie la capătul sistemului periodic: chimia cuantică a lantanidelor”), 26 mai 2023, organizator.

11. **Aprecierea și recunoașterea rezultatelor obținute în proiect** (premiu, medalii, titluri, alte aprecieri)

- 1) BLONSCHI Vladislav, GLADCHI Viorica, DUCA Gheorghe - **Medalie de argint**; Salonul internațional de invenție EUROINVENT 15th European Exhibition of Creativity and Innovation, Iasi, Romania, 11-13 May 2023.
- 2) LIS Angela, GLADCHI Viorica, DUCA Gheorghe - **Medalie de Bronz**; Legități de transformare fotochimică a unor substanțe tiolice în sistemele acvatice. Salonul de carte în cadrul Salonului internațional de invenție EUROINVENT 15th European Exhibition of Creativity and Innovation, Iasi, Romania, 11-13 May 2023.
- 3) BLONSCHI Vladislav, GLADCHI Viorica, DUCA Gheorghe - **Diplomă de excelență**; Transformări fotochimice ale unor substanțe tiolice și participarea acestora în procese de autopurificare chimică a apelor naturale. Salonul de carte în cadrul Salonului internațional de invenție EUROINVENT 15th European Exhibition of Creativity and Innovation, Iasi, Romania, 11-13 May 2023.

- 4) BĂLAN Iolanta - **Diplomă de onoare**, în semn de prețuire pentru merite deosebite în domeniul cercetării științifice și cu prilejul Zilei Internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare.

12. Promovarea rezultatelor cercetărilor obținute în proiect în mass-media:

13. Teze de doctorat / postdoctorat susținute și confirmate în anul 2023 de membrii echipei proiectului (opțional)

BOLOCAN Natalia - dr - "Cercetarea proprietăților antiradicalice ale acidului dihidroxifumaric și a unor derivați ai săi cu aplicarea metodelor cinetice și computaționale", specialitatea 144.01 Chimie fizică. Conducător științific – Duca Gheorghe, dr. hab. în șt. chimice, prof. univ., 25 mai, 2023.

14. Informație suplimentară referitor la activitățile membrilor echipei în anul 2023

- Membru/președinte al comitetului organizatoric/științific, al comisiilor, consiliilor științifice de susținere a tezelor
- ◆ DUCA Gheorghe - Președintele Societății de Chimie din Republica Moldova
- ◆ DUCA Gheorghe – Președintele Comisiei de susținerea a tezelor de doctor (Marzac Viorica, Ureche Dumitru)
- ◆ DUCA Gheorghe – Membrul Comisiei de evaluare și atestare ANACEC
- ◆ DUCA Gheorghe – Membrul Consiliului de Directori al Fondului Internațional al Chimiei
- ◆ DUCA Gheorghe – Delegat Național, Academia de Științe și Arte din Austria
- ◆ COVALIOVA Olga – membru al Follow-up Group WaterWorks 2017 a Comisiei Europene
- ◆ COVALIOVA Olga – referent oficial la susținerea tezei de doctor (Marzac Viorica)
- ◆ BUNDUCHI Elena – secretar științific al Seminarului Științific de profil;
- ◆ GLADCHI Viorica – membrul Comisiei de profil ANACEC
- ◆ GLADCHI Viorica – titlul de profesor universitar, diploma seria PU, nr. 000000065, eliberată de ANACEC pe 17.03.2023
- ◆ GONȚA Maria, dr hab., prof. univ. a fost numită președinte al CȘS D 144.01-23, prin decizia Consiliului de conducere al ANACEC nr. 2 din 24 februarie 2023, pentru susținerea tezei de doctor în științe chimice la specialitatea 144.01.- Chimie fizică, de către Bolocan Natalia cu tema: „Cercetarea proprietăților antiradicalice ale acidului dihidroxifumaric și a unor derivați ai săi cu aplicarea metodelor cinetice și computaționale”.
- ◆ GONȚA Maria, dr hab., prof. univ. a fost aprobată pentru dreptul de a conduce doctorate la specialitatea 145.01.- Chimie ecologică prin decizia Consiliului de conducere al ANACEC nr. 14 din 26 mai 2023.
- ◆ GONȚA Maria, dr hab., prof. univ., membru al grupului de lucru la elaborarea Standardului de calificare și competențe în domeniul general de studiu 071- Înginerie și activități inginerești.
- ◆ GONȚA Maria, dr hab., prof. univ., recenzarea unui articol științific In: Chemistry Journal Of Moldova, 2023.
- ◆ BĂLAN Iolanta - Consiliul Științific Specializat CȘS D 144.01-23-1, prezentarea tezei de doctor ”Cercetarea proprietăților antiradicalice ale acidului dihidroxifumaric și a unor derivați ai săi cu aplicarea metodelor cinetice și computaționale” dna BOLOCAN Natalia, 25 mai 2023, ora 14.00, sala 222, bloc IV, Universitatea de Stat din Moldova. (Membru CȘS)
- ◆ BĂLAN Iolanta - Consiliul Științific Specializat la examinarea tezei de doctor în științe

- chimice a dnei CURICHERU Galina, la specialitatea 144.01. Chimie fizică, Conducător științific – Șaragov Vasilii, doctor habilitat în științe chimice, conferențiar universitar. (Membru CȘS)
- ◆ GORINCIOI Elena - Seminarul Științific de Profil la specialitatea 143.01 – chimie organică”, evaluarea tezei de doctor în științe chimice „Sinteza și cercetarea 1-(1H-1,2,4-triazol-1-il)etan-2-onelor”, autor ZVEAGHINTEVA Marina, 24 februarie 2023, ora 14.00, Sala Mică, Institutul de Chimie, Universitatea de Stat din Moldova (Secretar Științific).
 - ◆ GORINCIOI Elena - Seminarul Științific de Profil la specialitatea 143.01 – chimie organică”, evaluarea tezei de doctor în științe chimice „Izotiocianatocalcone și derivații lor. Sintează și proprietăți”, autor POPUȘOI Ana, 06 iunie 2023, ora 14.00, Sala Mică, Institutul de Chimie, Universitatea de Stat din Moldova (Membru).
 - ◆ GORINCIOI Elena - teză de master „Evaluarea poluării lacului Valea Morilor din or. Chișinău în cadrul expertizelor judiciare ecologice cu implicarea algelor ca bioindicație și utilizarea spectroscopiei 1H RMN”, autor TRIFAUȚANU Viorica, 07 iunie 2023, ora 08.30, Facultatea Biologie și Chimie, Universitatea Pedagogică de Stat Ion Creangă (Coordonator al lucrărilor la teza de master).
 - ◆ GORINCIOI Elena - teză de licență „Abordări ecologice de sinteză organică fină privind reacția Biginelli pentru prepararea monastrolului”, autor VERDEȘ Anastasia, 05 iunie 2023, ora 08.30, Facultatea Biologie și Chimie, Universitatea Pedagogică de Stat Ion Creangă (Coordonator al lucrărilor la teza de licență).
 - ◆ GORINCIOI Elena - teză de licență „Implicații biochimice privind utilizarea preparatelor pe bază de alopurinol în tratamentul gutei”, autor MATEI Natalia, 05 iunie 2023, ora 08.30, Facultatea Biologie și Chimie, Universitatea Pedagogică de Stat Ion Creangă (Coordonator al lucrărilor la teza de licență).
- 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 internațională – Экологическая химия, St-Petersbourg, Rusia, Membru al Consiliul Editorial.
 - ◆ DUCA Gheorghe – Membru al Consiliului editorial al revistei academice: Present Environment and Sustainable Development, Romania.
 - ◆ DUCA Gheorghe – Membru al Colegiului redacțional internațional al revistei „Himia i tehnologia vodi" (Ucraina).
 - ◆ 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*
 - ◆ GONȚA, Maria, dr hab., prof. univ., - membru al colegiului de redacție a revistei științifice de categoria A - *Chemistry Journal of Moldova*.
 - ◆ GONȚA, Maria, dr hab., prof. univ., - membru al colegiului de redacție a revistei științifice de categoria B- *Studia Universitatis Moldaviae, Seria Științe Reale și ale Naturii*.
 - ◆ GONȚA, Maria, dr hab., prof. univ., - 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
- ◆ CAZACU(ANGHEL) Lilia - revista de categoria A – Chemistry Journal of Moldova, Membru al oficiului editorial
- ◆ BĂLAN Iolanta - revista de categoria A – Chemistry Journal of Moldova, Membru al oficiului editorial
 - Implicarea în procesul educațional
- ◆ DUCA Gheorghe – Cursul de lecții ”Procese chimice în mediul ambiant”, Universitatea Pedagogică de Stat ”Ion Creangă”, semestru 1, 2023.
- ◆ DUCA Gheorghe – Cursul de lecții ”Chimia Ecologică”, Universitatea Pedagogică de Stat ”Ion Creangă”, semestru 1, 2023.
- ◆ BĂLAN Iolanta - Cursul de lecții „Chimie Computațională”, ciclul I, USM, semestru 2, 2023.

Concluzii:

În lumea complexă a chimiei cuantice și ecologice, au fost efectuate o serie de studii inovative, aducând lumină asupra unor aspecte fundamentale ale interacțiunilor moleculare. Pe parcursul acestor explorări științifice, calculele cuantico-chimice, efectuate prin metoda DFT/B3LYP folosind setul 6-31G(d), au devenit o piatră de temelie în înțelegerea relațiilor dintre diverși acizi alimentari, precum galicul, ferulicul și alții, cu cation-radicalul ABTS•+ și antioxidanți precum glutatationul sau epicatechina, o flavonoidă notabilă. Aceste studii au deschis calea spre înțelegerea efectului sinergic și a mecanismului de interacțiune dintre aceste entități la nivel molecular.

În paralel, în laboratorul de Chimie fizică și Cuantică al Institutului de Chimie și laboratorul de Chimie ecologică și tehnologie chimică al USM, s-au derulat teste meticuloase prin intermediul metodelor Folin-Ciocalteu și FRAP. Aceste teste nu numai că au confirmat, dar și au completat studiile anterioare legate de preparatul ENOXIL. Rezultatele obținute nu doar că demonstrează clar activitatea antioxidantă a ENOXIL-ului, dar și susțin cu tărie utilitatea și eficacitatea acestuia ca preparat medicinal. Mai mult, aceste descoperiri au stimulat ideea interesantă de a folosi ENOXIL-ul în combinație cu antioxidanți naturali.

O altă frontieră de cercetare a fost abordarea detaliată a comportamentului redox și fotochimic al vitaminelor din grupul B. Studiile au reușit să dezvăluie legile cinetice ale transformărilor acestor vitamine și să estimeze persistența lor în apă. Cercetările au fost extinse prin modelarea unor sisteme microcosme bazate pe apă din lacul Dănceni, îmbogățite cu vitamine din grupul B, pentru a observa dinamica parametrilor cinetici redox. În plus, eforturi considerabile au fost dedicate monitorizării obiectelor acvatice din bazinul fluviului Nistru, aducând o înțelegere mai profundă a ecosistemelor acvatice.

Într-o altă arie de studiu, laboratorul de Oenologie și Chimie al UTM a întreprins analize detaliate chimice și redox ale vinurilor, cu o concentrare specială pe soiurile autohtone moldovenești. Utilizând metode moderne de analiză, echipa a evaluat proprietățile fizico-chimice-redox și senzoriale ale acestor vinuri, oferind o perspectivă nouă și valoroasă asupra potențialului lor. Identificarea parametrilor de culoare a fost realizată prin metoda CIELab, în timp ce compușii polifenolici au fost analizați prin metoda HPLC. Rezultatele acestor studii deschid noi orizonturi pentru înțelegerea și aprecierea vinurilor moldovenești, subliniind calitatea superioară a soiurilor de struguri autohtone în producerea vinurilor.

Astfel, prin aceste cercetări complexe și interdisciplinare, s-a avansat semnificativ în anul 2023 în cunoașterea lumii moleculare și a aplicațiilor practice ale acesteia, contribuind în mod substanțial la progresul științific și tehnologic.

Conducătorul de proiect _____ / DUCA Gheorghe

Data: _____

LȘ

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2023

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

Cifra proiectului **20.8009.5007.27**

În 2023, proiectul a avut ca obiectiv principal aprofundarea înțelegerii mecanismelor antioxidante, concentrându-se pe trei mecanisme principale: transferul de atom de hidrogen (HAT), transferul de electron urmat de transferul de protoni (SET-PT) și transferul inițial de proton urmat de transferul de electron (SPLET). Studiul s-a axat pe patru compuși specifici, evaluând valorile BDE, IP, PDE, PA și ETE folosind metoda B3LYP/6-311+G(d,p).

Studiul interacțiunii dintre ABTS^{•+} și acizii alimentari a fost esențial, indicând absența transferului de sarcină în aceste reacții. Acest lucru a contribuit la înțelegerea dinamicilor redox. De asemenea, am explorat efectele sinergice ale combinațiilor de antioxidanți precum „acid cafeic + glutatión” și „acid gentisic + epicatechină”.

Analiza moleculelor X₂CE (X=H, F; E=O, S, Se) a relevat schimbări structurale în diferite stări electronice, contribuind la înțelegerea transferului de electroni la nivel molecular.

Un moment interesant a fost testarea preparatului medicinal ENOXIL, analizând activitatea sa antioxidantă prin metodele Folin-Ciocalteu și FRAP. Rezultatele au indicat o activitate antioxidantă semnificativă, în special în soluție tampon fosfat și un efect sinergic cu acidul ascorbic.

Am abordat și studiul vitaminelor din grupul B, analizând comportamentul lor redox și fotochimic. Studiile au dezvăluit legile cinetice ale transformărilor acestor vitamine în apă, precum și dinamica parametrilor cinetici redox în microcosme bazate pe apa din lacul Dănceni.

S-au întreprins analize chimice și redox ale vinurilor moldovenești. Folosind metode moderne, precum CIELab și HPLC, s-au evaluat proprietățile acestor vinuri, punând în evidență calitatea soiurilor autohtone de struguri.

Proiectul a inclus și inițiative de sustenabilitate, cum ar fi transformarea deșeurilor în produs vitaminizat pentru industria furajelor.

Procese de oxidare Fenton, foto-Fenton și sono-Fenton au fost aplicate pentru degradarea antibioticelor amoxicilină și cefalexină.

În 2023, am organizat un webinar internațional, dedicat Academicianului Isaac Bersuker, subliniind importanța colaborării științifice internaționale și deschizând noi direcții de cercetare.

In 2023, the main objective of the project was to deepen the understanding of antioxidant mechanisms, focusing on three main mechanisms: hydrogen atom transfer (HAT), electron transfer followed by proton transfer (SET-PT) and initial proton transfer followed of electron transfer (SPLET). The study focused on four specific compounds, evaluating BDE, IP, PDE, PA and ETE values using the B3LYP/6-311+G(d,p) method.

The study of the interaction between ABTS^{•+} and food acids was pivotal, indicating the absence of charge transfer in these reactions. This contributed to the understanding of redox dynamics. We

also explored the synergistic effects of antioxidant combinations such as “caffeic acid + glutathione” and “gentisic acid + epicatechin”.

The analysis of X₂CE molecules (X=H, F; E=O, S, Se) revealed structural changes in different electronic states, contributing to the understanding of electron transfer at the molecular level.

An interesting moment was the testing of the medicinal preparation ENOXIL, analyzing its antioxidant activity by the Folin-Ciocalteu and FRAP methods. The results indicated a significant antioxidant activity, especially in phosphate buffer solution and a synergistic effect with ascorbic acid.

We also tackled the study of group B vitamins, analyzing their redox and photochemical behavior. The studies revealed the kinetic laws of the transformations of these vitamins in water, as well as the dynamics of the redox kinetic parameters in microcosms based on the water from Lake Dănceni.

Chemical and redox analyzes of Moldovan wines were undertaken. Using modern methods, such as CIELab and HPLC, the properties of these wines were evaluated, highlighting the quality of local grape varieties.

The project also included sustainability initiatives, such as turning waste into a vitaminized product for the feed industry.

Fenton, photo-Fenton and sono-Fenton oxidation processes have been applied to degrade the antibiotics amoxicillin and cephalixin.

In 2023, we organized an international webinar, dedicated to Academician Isaac Bersuker, emphasizing the importance of international scientific collaboration and opening new research directions.

**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) DUCA, Gh., VASEASHTA, A. (Eds.) Fundamental and Biomedical Aspects of Redox Processes. IGI Global: U.S.A., 2023, Vol.1, 495 p. DOI: <https://doi.org/10.4018/978-1-6684-7198-2> ISBN13: 9781668471982 | ISBN10: 1668471981 | EISBN13: 9781668472002.
- 2) DUCA, Gh., VASEASHTA, A. (Eds.) Environmental and Technological Aspects of Redox Processes. IGI Global: U.S.A., 2023, Vol.2, 435 p. DOI: <https://doi.org/10.4018/979-8-3693-0512-6> ISBN13: 9798369305126 | ISBN10: N/A | EISBN13: 9798369305140.

1.2. monografiile naționale

- 1) MOCANU, L., GONȚA, M., DUCA, Gh., MATVEEVICI, V. Aplicarea metodelor fizico-chimice combinate la înlăturarea poluanților textili din soluții apoase. CEP USM: Chisinau, 2023, 194 p. ISBN 978-9975-62-511-1
- 2) DUCA, Gh. (Ed.) Proceselor redox cu transfer de electroni și protoni. CEP USM: Chisinau, 2023, 493 p.
- 3) BOLOCAN, N. DUCA, Gh. "Derivați noi a acidului dihidroxifumaric: Cercetări cinetice și computazionale", CEP USM: Chisinau, 2023, 200 p.

2. Capítule în monografiile naționale/internaționale

- 1) TRAVIN, S., DUCA, Gh. Electron and Proton Transfer Mechanisms from Marcus to Supramolecular Constructions. In.: Fundamental and Biomedical Aspects of Redox Processes, Duca Gh., Vaseashta A., Ed.: U.S.A.IGI Global, 2023, Vol.1., Chapter 1, p.1-26.
- 2) DUCA, Gh., TRAVIN, S. Molecular Oxygen Activation Mechanisms in the Environmentally Significant Chemical Technologies. In.: Fundamental and Biomedical Aspects of Redox Processes, Duca Gh., Vaseashta A., Ed.: U.S.A.IGI Global, 2023, Vol.1., Chapter 2, p.27-38.
- 3) DUCA, Gh., TRAVIN, S. Hydrogen Peroxide, a Substance that Conquered the World. In.: Fundamental and Biomedical Aspects of Redox Processes, Duca Gh., Vaseashta A., Ed.: U.S.A.IGI Global, 2023, Vol.1., Chapter 3, pp. 39-70.
- 4) GORINCHOY, N.; BALAN, I.; GORBACHEV, M.; ARSENE, I.; POLINGER, V.; DUCA, GH.; BERSUKER, I.B. *Pseudo Jahn-Teller Effect in the Transition States of Redox Processes*. Gheorghe Duca, Ashok Vaseashta (Eds.) Fundamental and Biomedical Aspects of Redox Processes. IGI Global, USA, 2023, Ch.4, pp. 71-110.
- 5) GORBACHEV, M.; GORINCHOY, N.; BALAN, I.; ARSENE, I. *Relationships Electronic Structure-Antioxidant Action for Chemical Compounds: A Quantum Chemical Study*. Gheorghe Duca, Ashok Vaseashta (Eds.) Fundamental and Biomedical Aspects of Redox Processes. IGI Global, USA, 2023, Ch.6, pp. 143-158.

- 6) BOLOCAN, N., DUCA, Gh. Dihydroxyfumaric Acid. Transformations, Importance and Applications, New Derivatives: Review of Experimental and Theoretical Research. In.: Duca Gh., Vaseashta A. (Eds.) Fundamental and Biomedical Aspects of Redox Processes. IGI Global, USA, 2023, Vol.1, Chapter 9, p. 198-223.
- 7) VICOL, C., DUCA, Gh. Synergistic, Additive, Antagonistic Effects and the Prooxidant Character of Antioxidants. Interactions in Natural Compounds. In.: Fundamental and Biomedical Aspects of Redox Processes, Duca Gh., Vaseashta A., Ed.: U.S.A.IGI Global, 2023, Vol.1., Chapter 10, p. 224-249.
- 8) YALTYCHENKO, O.; GORINCHOY, N.; DUCA, G. The Immune Response Modeling to a Viral Load: A Minimal Model. Gheorghe Duca, Ashok Vaseashta (Eds.) Fundamental and Biomedical Aspects of Redox Processes. IGI Global, USA, 2023, Ch.13, pp. 302-314.
- 9) ANGHEL, L.; ERHAN, R.-V. Versatility and specificity of oxidoreductases in the electron transfer reactions. În: "Fundamental and Biomedical Aspects of Redox Processes". DUCA, Gh.; VASEASHTA, A., Editura IGI Global, USA, vol.1, 2023, pp. 327- 343.
- 10) GONTA, M., MOCANU, L., DUCA. Gh. Redox Technologies in Wastewater Treatment for Removal of Pharmaceutical (Cephalexin) Contaminants. In.: Fundamental and Biomedical Aspects of Redox Processes, Duca Gh., Vaseashta A., Ed.: U.S.A.IGI Global, 2023, Vol.1. Chapter 18, p. 400-416.
- 11) GLADCHI, V., BUNDUCHI, E., BLONSCHI, V., ROMANCIUC, L. Redox Processes in Natural Waters. In.: Redox Processes within Environmental and Technological Contexts. Duca Gh., Vaseashta A., Ed.: U.S.A.IGI Global, 2023, Vol.2, Chapter 2, pp. 20-42.
- 12) LIS, A., GLADCHI, V., DUCA, Gh., BUNDUCHI, E., BLONSCHI, V. Redox Self-purification Mechanism of Natural Waters with the Participation of Thioglycolic Acid and Thioure. In.: Redox Processes within Environmental and Technological Contexts. Duca Gh., Vaseashta A., Ed.: U.S.A.IGI Global, 2023, Vol.2, Chapter 3, pp. 43-67.
- 13) BLONSCHI, V., GLADCHI, V., DUCA, Gh., BUNDUCHI, E., LIS, A. Influence of Thiol Compounds on Redox State of Some Natural Waters in the Republic of Moldova. In.: Redox Processes within Environmental and Technological Contexts. Duca Gh., Vaseashta A., Ed.: U.S.A.IGI Global, 2023, Vol.2, Chapter 4, pp. 68-89.
- 14) CRETESCU, I., BORODAEV, R., LUTIC, D., SOREANU, G., DUCA, Gh., RATNAWEERA, H. Redox measurements, a cheap and fast tool for preliminary ecotoxicity assessment of the surface waters: An early warning system for water pollution monitoring. In.: Redox Processes within Environmental and Technological Contexts. Duca Gh., Vaseashta A., Ed.: U.S.A.IGI Global, 2023, Vol.2, Chapter 8, pp. 119-131.
- 15) DUCA, Gh., STURZA, R., COVALIOVA, O., COVACI, E., ROMANCIUC, L., TAȘCA, C. Modification of Waste Biomass Digestion in the Presence of Additives of Bioactive Substances. In.: Redox Processes within Environmental and Technological Contexts. Duca Gh., Vaseashta A., Ed.: U.S.A.IGI Global, 2023, Vol.2, Chapter 9, pp. 149-165.
- 16) POPOVICI, V., STURZA, R., GHENDOV-MOSANU, A. Technological and Environmental Factors Impact on the Antioxidation Mechanism of Oil Lipids. Handbook of Research on Environmental and Technological Aspects of Redox Processes, U.S.A. IGI Global, Vol.2, 2023, Chapter 15, p. 212-237.
- 17) DUCA, Gh., COVALIOVA, O., COVALIOV, V., ROMANCIUC, L., VASEASHTA, A.

- Combined Ferrite Treatment of Multi-Component Wastewaters. In.: Redox Processes within Environmental and Technological Contexts. Duca Gh., Vaseashta A., Ed.: U.S.A. IGI Global, 2023, Vol.2, Chapter 13, pp. 238-252. DOI: 10.4018/979-8-3693-0512-6.ch013
- 18) STURZA, R., SCUTARU, I., DUCA, Gh. Redox Processes in Grape Processing. In.: Redox Processes within Environmental and Technological Contexts. Duca Gh., Vaseashta A., Ed.: U.S.A.IGI Global, 2023, Vol.2, Chapter 15, pp. 276-306.
 - 19) DUCA, Gh. Modelarea matematica a proceselor chimice. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 19-25. (in tipar)
 - 20) BOLOCAN, N., BĂLAN, I., DUCA Gh. Metodologia calculelor cuanto-chimice. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 26-29. (in tipar)
 - 21) DUCA, Gh., GORBACEV, M. Teoriile de transfer de electroni si protoni si necesitatea dezvoltării lor. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 30-61. (in tipar)
 - 22) BALAN, I.; GORINCHOY, N.; GORBACHEV, M.; ARSENE, I.; BERSUKER, I.B. Originea Pseudo Jahn-Teller a barierei energetice a proceselor chimice. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, cap.6, pp. 62-97. (in tipar)
 - 23) GORBACIOV, M., GORINCIOI, N., BĂLAN, I., ARSENE, I. Studiul cuanto-chimic al relației structura electronică - acțiune antioxidantă a unor compușii chimici. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 98-122. (in tipar)
 - 24) IALTYCHENKO, O., GORINCHOY, N., DUCA, Gh. Modelarea răspunsului imun la o sarcină virală: Model minimal. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 123-134. (in tipar)
 - 25) BOLOCAN N., DUCA, Gh. Cercetarea proprietăților antiradicalice ale acidului dihidroxifumaric și a unor derivați ai săi cu aplicarea metodelor cinetice și computaționale. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 135-158. (in tipar)
 - 26) VICOL, C., DUCA, Gh. Interacțiuni antioxidante dintre unii compuși naturali din struguri. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 159-183. (in tipar)
 - 27) GORINCIOI, E., BARBA, A., VICOL, C. Datele spectrale RMN - mărturii notabile în studiile interacțiunilor antioxidante: Studii de caz privind unii metaboliți din struguri. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 184-198. (in tipar)
 - 28) CAZACU, L. Proprietăți structurale și mecanisme de interacțiune ale unor macromolecule cu activitate antioxidantă cercetate prin metoda de împrăștiere la unghiuri mici. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 199-210. (in tipar)
 - 29) DUCA, Gh., COVALIOV, V., COVALIOVA, O., ROMANCIUC, L., TASCA, C. Studiul proceselor redox în sisteme biochimice în prezența antioxidantilor. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 211-237. (in tipar)
 - 30) BUNDUCHII, E., DUCA, Gh. Mecanisme de autopurificare chimică a apelor naturale, cu utilizarea teoriei proceselor redox. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și

- protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 238-248. (in tipar)
- 31) BUNDUCHII, E., DUCA, Gh., GLADCHI, V. Monitorizarea, în baza indicatorilor cinetici, a proceselor de autopurificare chimică redox a apelor naturale. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 250-258. (in tipar)
 - 32) LIS, A., DUCA, Gh., GLADCHI, V., BUNDUCHI, E., BLONSCHI, V. Modelarea proceselor de autopurificare a apelor în prezența compușilor tiolici. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 259-289. (in tipar)
 - 33) BLONSCHI, V., GLADCHI, V., LIS, A., CULEA, M. Modelarea proceselor de autopurificare a apelor în prezența vitaminelor grupului B. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 290-301. (in tipar)
 - 34) BUNDUCHII, E., BORODAEV, R., GLADCHI, V., Lis, A. Evaluarea capacității sistemului redox de autopurificare a apelor lacului Dănceni la poluarea cu tioli și vitamine. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 302-316. (in tipar)
 - 35) GLADCHI, V., BLONSCHI, V., BUNDUCHI, E., LIS, A. Compoziția chimică, procese de poluare și autopurificare a fluviului Nistru în porțiunea barajul Dubăsari (amonte r. Răut) – or. Vadul lui Vodă (amonte r. Ichel). Perioada anilor 2020 – 2022. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 317-336. (in tipar)
 - 36) BLONSCHI, V., GLADCHI, V. Dinamica conținutului compușilor tiolici în apele lotice și lentice din Republica Moldova. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 337-345. (in tipar)
 - 37) BORODAEV, R. Continutul și legitățile migrării diverselor forme existenționale ale cuprului și fierului în apele bazinului Nistru de jos pe parcursul anilor 2015-2022. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 346-368. (in tipar)
 - 38) GONȚA, M., MOCANU, L., MATVEEVICI, V. Oxidarea fotocatalitică eterogenă cu dioxid de titan a antibioticelor și antiinflamatoarelor din soluții apoase. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 369-397. (in tipar)
 - 39) MOCANU, L., GONȚA, M., MATVEEVICI, V. Oxidarea catalitică omogenă a produselor medicamentoase din sisteme apoase model. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 398-422. (in tipar)
 - 40) STURZA, R., DRUȚĂ, R., COVACI, E., SUBOTIN, Iu. Cinetica oxidării forțate a uleiurilor de floarea soarelui, semințe de struguri, nuc, porumb sub acțiunea diferitor factori. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 423-442. (in tipar)
 - 41) STURZA, R., COVACI, E., SUBOTIN, Iu., DRUȚĂ, R., DUCA, Gh. Polifenolii din vinurile moldovenești și implicarea lor în procese antioxidante și anti-stres. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 443-474. (in tipar)
 - 42) ZINICOVSCAIA, I., DUCA, Gh. Impactul elementelor chimice determinate prin analiza de activare cu neutroni asupra calitatii mediului ambiant in Republica Moldova. In Monografia „Procese redox cu transfer de electroni și protoni”. CEP USM: Chisinau, 2023, pp. 475-489. (in tipar)

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) ANGHEL, L.; RADA, S.; ERHAN, R.-V. Structural Factors and Electron Transfer Mechanisms in Flavoenzymes. *Analytical Letters*, 2023, 56(15), pp. 2412-2425. DOI: <https://doi.org/10.1080/00032719.2023.2174131> (IF 2,267)
- 2) DUCA, Gh., LIS, A., GLADCHI, V., TRAVIN, S. Indirect photolysis of cysteine and thiourea in the aquatic environment. *Inorganica Chimica Acta*, 2023, 557, 121682. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2023.121682> (IF 2,8)
- 3) GORBACHEV, M.YU.; GORINCHOY, N.N.; BALAN, I.I. "Electronic aspects of the synergistic antioxidant interaction of various pairs 'phenolic food acid and glutathione' in their reactions with the stable radical cation ABTS^{•+}". *International Journal of Organic Chemistry (IJOC)*, Vol.13 No.3, 2023, pp. 96-108. DOI: <https://doi.org/10.4236/ijoc.2023.133008> (IF 1,26)
- 4) GORINCHOY, N.; BALAN, I.; POLINGER, V.; BERSUKER, I.B. "Inversion barrier in X2CE systems (X=H, F; E=O, S, Se) in their reduced and the first excited states as a Pseudo Jahn-Teller Effect". *Journal of Physics, Conference Series*, 2023, 13 p. (IF 0,5)
- 5) YALTYCHENKO, O.; KANAROVSKII, Ev. Consideration of the synergy of vitamins e and c in the kinetic model of lipid peroxidation. *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*, 59(4), 2023, pp. 473-478. DOI: <https://doi.org/10.3103/S1068375523040038> (IF 0,243)
- 6) LIS, A., GLADCHI, V., DUCA, Gh., TRAVIN, S. Indirect photolysis of cysteine and thiourea in the presence of metal ions in the aquatic environment. In: *Inorganica Chimica Acta*, 2023, 560, 121832. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2023.121832> (IF 2,8)
- 7) YUSHIN, N.; ZINICOVSCAIA, I.; CEPOI, L.; CHIRIAC, T.; RUDI, L.; GROZDOV, D. Praseodymium(III) Removal from Aqueous Solutions Using Living and Non-Living *Arthrospira platensis* Biomass. *Water*, 2023, 15(11), 2064, pp. 1-15. DOI: <https://doi.org/10.3390/w15112064> (IF 3,530)
- 8) PESHKOVA, A.; ZINICOVSCAIA, I.; CEPOI, L.; RUDI, L.; CHIRIAC, T.; YUSHIN, N.; SOHATSKY, A. Features of Copper and Gold Nanoparticle Translocation in *Petroselinum crispum* Segments. *Nanomaterials*, 2023, 13, 1754, pp. 1-14. DOI: <https://doi.org/10.3390/nano13111754> (IF 5,719)
- 9) IVLIEVA, A.L.; PETRITSKAYA, E.N.; ROGATKIN, D.A.; ZINICOVSCAIA, I.; YUSHIN, N.; GROZDOV, D. Impact of Chronic Oral Administration of Gold Nanoparticles on Cognitive Abilities of Mice. *International Journal of Molecular Science*, 2023, 24, 8962. DOI: <https://doi.org/10.3390/ijms24108962> (IF 6,208)
- 10) YUSHIN, N.; ZINICOVSCAIA, I.; CEPOI, L.; CHIRIAC, T.; RUDI, L.; GROZDOV, D. Cyanobacteria *Arthrospira platensis* as an Effective Tool for Gadolinium Removal from Wastewater. *Clean Technologies*, 2023, 5, pp. 638-651. DOI: <https://doi.org/10.3390/cleantechnol5020032>
- 11) ABULADZE, M.; ASATIANI, N.; KARTVELISHVILI, T.; KRIVONOS, D.; POPOVA, N.; SAFONOV, A.; SAPOJNIKOVA, N.; YUSHIN, N.; ZINICOVSCAIA, I. Adaptive Mechanisms

- of *Shewanella xiamenensis* DCB 2-1 Metallophilicity. *Toxics*, 2023, 11, 304. DOI: <https://doi.org/10.3390/toxics11040304> (IF 4,472)
- 12) CEPOI, L., ZINICOVSCAIA, I., CHIRIAC, T., RUDI, L., YUSHIN, N., GROZDOV, D., TASCA, I., KRAVCHENKO, E., TARASOV, K. Modification of Some Structural and Functional Parameters of Living Culture of *Arthrospira platensis* as the Result of Selenium Nanoparticle Biosynthesis. *Materials*, 2023, 16(2), 852. DOI: <https://doi.org/10.3390/ma16020852> (IF 3,748)
 - 13) VICOL, C.; DUCA Gh. Synergistic, Additive and Antagonistic Interactions of Grapes' Phenolic Compounds and Organic Acids. *Acta Chemica Slovenica*, 2023, 70, p. 588–600. (IF 1,2)
 - 14) DUCA, GH.; ARICU, A.; GORINCHOY, N.; BALAN, I. Celebration Of Academician Isaac Bersuker'S 95th Birthday! *Chemistry Journal of Moldova*, 2023, 18(1), pp. 7-8.
 - 15) GONȚA, M., DUCA, GH., SIRBU, E., ROBU, S., MOCANU, L. Synthesis of quercetin functionalized chitosan and determination of antioxidant properties. *Chemistry Journal of Moldova*, 2023, 18(1), pp. 38-45. DOI: <http://doi.org/10.19261/cjm.2023.910>
 - 16) TALMACI, N.; DRAGANCEA, D.; GORINCIOI, E.; BOUROSH, P.; KRAVTSOV; V. Crystal structure and NMR spectroscopic characterization of 1,5-bis(2-hydroxy-3-methoxybenzylidene)carbonohydrazide. *Chemistry Journal of Moldova*, 2023, 18(2), 8p. DOI: <https://doi.org/10.19261/cjm.2023.1074>

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

- 1) DUCA, GH.; BALAN, I.; GORINCHOY, N. Savantul afirmat pe două continente. Academicianul Isaak BERSUKER la 95 de ani. *Akademos*, 2023, 1(68), pp. 171-172. (categoria B)
- 2) COVALIOV, V., UNGUREANU, D., DUCA, Gh., COVALIOVA, O., ROMANCIUC, L. A New Concept Regarding the Selection of Sewerage Systems and Natural Treatment of Municipal Wastewaters: Case Study of Moldova. *Journal of Engineering Science (UTM)*, 2023, XXX(1), p.129-138. (Categoria B+, Open Science).
- 3) БЛОНСКИ, В., ГЛАДКИЙ, В., ЧИСТЯКОВ, М. Влияние химического состава поверхностных вод на интенсивность фотоллиза глутатиона. In: *Studia Universitatis Moldaviae (Seria Științe Reale și ale Naturii)*. 2022, nr. 6(156), pp. 182-189. ISSN 1814-3237. DOI: [10.5281/zenodo.7445875](https://doi.org/10.5281/zenodo.7445875)

5. Articole în culegeri științifice naționale/internaționale

5.1. culegeri de lucrări științifice editate peste hotare

5.2 culegeri de lucrări științifice editate în Republica Moldova

6. Articole în materiale ale conferințelor științifice

6.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

- 1) YALTYCHENKO, O.V.; KANAROVSKII, E.Yu. Simulation of the electron localization dynamics in a pentamer core-shell nanocluster in an external electric field. The 7th International scientific and practical conference “Science and technology: problems, prospects and innovations”, Osaka, Japan, April 13-15, 2023, pp. 198-201. <https://sci-conf.com.ua/wp->

6.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

- 1) BALAN, I; GORBACIOV, M.; GORINCIOI, N. Pseudo efectul Jahn-Teller în starea de tranziție a transferului dublu de protoni în dimerul acidului formic. Conferinței științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Universitatea Pedagogică ”Ion Creangă”, p. 65-68.
- 2) GORBACIOV, M.; GORINCIOI, N.; BALAN, I.; ARSENE, I. Unele proprietăți fizico-chimice ale n-alkanii cu lanț scurt cauzate de orbitalii lor moleculari specifici. Conferinței științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Universitatea Pedagogică ”Ion Creangă”, p. 89-94.
- 3) GORINCIOI, N.; ARSENE, I.; BALAN, I. Theoretical study of the most stable isomers of the IO_3^- and HIO_3 molecules. Conferinței științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Universitatea Pedagogică ”Ion Creangă”, p. 95-101.
- 4) VERDEȘ, A.; GORINCIOI, E.; MACAEV, F. Prepararea monastrolului bioactiv pe baza unui protocol de sinteza ecologica și convenabil. Conferinței științifico-practică internațională „INSTRUIRE PRIN CERCETARE PENTRU O SOCIETATE PROSPERĂ” Ediția a-X-a, 18-19 martie 2023, Universitatea Pedagogică ”Ion Creangă”, Vol.1, pp. 36-39.
- 5) YALTYCHENKO, O.; KANAROVSKII, E. Synergy Effect of Ascorbic Acid and α -Tocopherol in Kinetic Model of Lipid Peroxidation. The 6th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering, ICNBME 2023, Chisinau, Republic of Moldova, 2024, 92, pp. 326–332. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-031-42782-4_35

6.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

- 6) GORBACHEV, M.YU.; GORINCHOY, N.N.; BALAN, I.I. “DFT evidence of mutual antioxidant action of caffeic acid and glutathione in their reactions with ABTS^{•+}”. Conferința științifică națională cu participarea internațională Integrare prin Cercetare și Inovare: Științe ale naturii și exacte, USM, 9-10 noiembrie 2023, 6 p.
- 7) BUNDUCHI, E., LIS, A., GLADCHI, V., DUCA Gh. Studiul proceselor de autopurificare pe sisteme de tip microcosm pentru vitamine din complexul B. In: Integrare prin cercetare și inovare: Științe ale naturii și exacte, 9-10 noiembrie 2023, Chișinău. Chisinau, Republica Moldova: Centrul Editorial-Poligrafic al USM, 2023
- 8) GRIGORAȘ, C.; BLONSCHI, V. Valorificarea florei spontane autohtone cu potențial în producerea farmaceutică și cosmetică. In: Integrare prin cercetare și inovare: Științe ale naturii și exacte, 9-10 noiembrie 2023, Chișinău. Chisinau, Republica Moldova: Centrul Editorial-Poligrafic al USM, 2023.
- 9) BUNDUCHI, E., GLADCHI, V. Evaluarea potențialului antioxidant al unor ingrediente cosmetice cu acțiune de hidratare. In: Integrare prin cercetare și inovare: Științe ale naturii și exacte, 9-10 noiembrie 2023, Chișinău. Chisinau, Republica Moldova: Centrul Editorial-Poligrafic al USM, 2023
- 10) GONTA, M., MOCANU, L., MATVEEVICI, V. Oxidarea eterogenă cu TIO_2 a amestecului de antibiotice și antiinflamatoare din soluție apoasă. În: Conferința științifică națională cu

participare internațională „Integrare prin Cercetare și Inovare”, dedicată Zilei Internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare, 9-10 noiembrie 2023.

- 11) LIS, A., GLADCHI, V., BUNDUCHI, E. Transformări fotochimice ale izoniazidei în mediul acvatic. In: Integrare prin cercetare și inovare: Științe ale naturii și exacte, 9-10 noiembrie 2023, Chișinău. Chisinau, Republica Moldova: Centrul Editorial-Poligrafic al USM, 2023.
- 12) MOCANU, L., GONTA, M., MATVEEVICI, V. Oxidarea Fenton a amestecului de antibiotice și antiinflamatoare din sisteme model. În: Conferința științifică națională cu participare internațională „Integrare prin Cercetare și Inovare”, dedicată Zilei Internaționale a Științei pentru Pace și Dezvoltare, 9-10 noiembrie 2023.
- 13) ЧИСТЯКОВ, М., БЛОНСКИ, В., ГЛАДКИ, В. Мониторинг содержания тиоловых соединений в реке Икель на протяжении 2020-2022 годов. In: Integrare prin cercetare și inovare.: Științe ale naturii și exacte, 9-10 noiembrie 2023, Chișinău. Chisinau, Republica Moldova: Centrul Editorial-Poligrafic al USM, 2023.

6.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

7. Teze ale conferințelor științifice

7.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

- 1) ANGHEL, L.; RADULESCU, A; ERHAN, R.-V. *Heteroprotein complex formation based on lactoferrin and β -lactoglobulin: a small-angle neutron scattering study*. MLZ Conference Neutrons for Biomaterials, May 22-25, 2023, München, Germany, Report of Contribution Abstract ID 21, p. 22
- 2) BALAN, I; GORINCHOY, N.; POLINGER, V.; BERSUKER, I.B. *Pseudo Jahn-Teller Origin of the Double Proton Transfer Energy Barrier in Formic Acid Dimer*. 25th International Conference on the Jahn-Teller Effect (Virtual Conference), 14-18 mai, 2023, York University, Canada. https://jahnteller2023-yorku.ca/Abstracts/Balan_Iolanta_Poster.pdf
- 3) COVACI, E., STURZA, R., SUBOTIN, Iu., DRUTA, R. *Oxidative Stability of Dry White Wines Depending on Technological Factors: Sulfur Dioxide, Iron and Copper Ions*. In: OPROTEH 2023 Conference proceedings abstracts of 18th International Conference of Constructive Design and Technological Optimization in Machine Building, "Vasile Alecsandri" University of Bacau, Romania, May 11 - 13, pp. 76.
- 4) GORINCHOY, N.; POLINGER, V.; BERSUKER, I.B. *Pseudo-Jahn-Teller Effect in Transition States of Chemical Reactions*. 25th International Conference on the Jahn-Teller Effect (Virtual Conference), 14-18 mai, 2023, York University, Canada. https://jahnteller2023-yorku.ca/Abstracts/Gorinchoy_Natalia_Oral.pdf
- 5) GORINCIOI, E.; VERDEȘ, A.; ZVEAGHINTSEVA, M.; DUCA, Gh.; MACAEV, F. New non-natural bioactive heterocycles as promising binders to G-quadruplex DNA, International symposium on non-canonical nucleic acids ANNA-2023, 18-21 October, 2023, Maribor, Slovenia, pp. 50. https://slonmr.si/anna_2023/ANNA2023BookOfAbstracts.pdf
- 6) GORINCIOI, E.; VICOL, C.; BARBA, A.; DUCA, Gh. NMR spectral data as robust evidence in studies of the antioxidant's interplay: report on some grape metabolites. The Central European NMR Symposium & Bruker Users Meeting 2023/solid-state NMR workshop, 13th-15th September, 2023, Prague, Czech Republic. Book of Abstracts, pag. 35.

7.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

- 7) BUNDUCHI, E., GLADCHI, V. *Studiu privind implicare unor componenți ai tenului în procesele de oxidare activizate de radiațiile UV*. În: Conf. șt. intern. "Patrimoniul cultural de ieri – implicații în dezvoltarea societății durabile de mâine", Chișinău, Moldova, 9-10 februarie 2023, pp. 185-186
- 8) BLONSCHI, VL., GLADCHI, V., LIS, A., BUNDUCHI E. *Impactul unor forme farmaceutice cu principiul activ vitaminic asupra proceselor de autopurificare chimică a apelor*. În: Conf. șt. intern. "Patrimoniul cultural de ieri – implicații în dezvoltarea societății durabile de mâine", 9-10 februarie 2023, Chișinău, Moldova, pp. 182-183
- 9) GLADCHI, V., BLONSCHI, VL., LIS, A., BUNDUCHI, E. *Compoziția chimică și poluarea apelor de suprafață din bazinul fluviului Nistru în anul 2022*. În: Conf. șt. intern. "Patrimoniul cultural de ieri – implicații în dezvoltarea societății durabile de mâine", Chișinău, Moldova, 9-10 februarie 2023, pp. 200-201
- 10) LIS, A., GLADCHI, V., BUNDUCHI, E. *The influence of isoniazid on the self-purification capacity of aquatic systems*. In: Advanced materials to reduce the impact of toxic chemicals on the environment and health", 21 septembrie, 2023, p. 27. DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/admateh.2023.ab19>
- 11) LIS, A., GLADCHI, V., BUNDUCHI, E. *Utilizarea peroxidului de hidrogen în formularea dezinfectantelor*. În: Conf. șt. intern. "Patrimoniul cultural de ieri – implicații în dezvoltarea societății durabile de mâine", Chișinău, Moldova, 9-10 februarie 2023, pp. 206-207.
- 12) MOCANU, L., GONȚA, M. *Coagularea/flocularea efluenților sintetici textili cu utilizarea sulfatului de aluminiu*. În: Patrimoniul cultural de ieri – implicații în dezvoltarea societății durabile de mâine, Ed. 7, 9-10 februarie 2023, Chișinău. Iași – Chișinău-Lviv: 2023, Ediția 7, pp. 212-213.
- 13) GONȚA, M., MOCANU, L., POPAZ, I. *Oxidation/mineralization of drugs in mixed systems by applying heterogeneous photocatalytic processes*. In: the VIth National conference with international participation: NATURAL SCIENCES IN THE DIALOG OF GENERATIONS, September 14-15, Chisinau, 2023, p. 156.
- 14) LIS, A., GLADCHI, V., SPIRIDONOVA, T. *Influence of copper(II) ions on the photolysis of folic acid in aquatic systems*. In: Natural sciences in the dialogue of generations, 14-15 septembrie 2023, Chișinău, 2023, p. 164.
- 15) MOCANU, L., GONȚA, M., MATVEEVICI, V., POPAZ, I. *Fenton oxidation of sodium diclofenac*. In: the VIth National conference with international participation: NATURAL SCIENCES IN THE DIALOG OF GENERATIONS, September 14-15, Chisinau, 2023, p. 171.
- 16) SUBOTIN, I., DRUȚĂ, R., POPOVICI, E., COVACI, E., MUNTEANU, D. *The action of some antioxidants on the stability of vegetable oils*. 3th CASEE Conference Smart Life Sciences and Technology for Sustainable Development organized by the Technical University of Moldova, Chisinau, 28-30 June, 2023, pp. 39.

7.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

- 17) GORBACHEV, M.YU.; GORINCHOY, N.N.; BALAN, I.I. *"DFT evidence of mutual antioxidant action of caffeic acid and glutathione in their reactions with ABTS⁺"*. Seminar științific cu participare internațională "Materiale avansate pentru reducerea impactului

- substanțelor chimice toxice asupra mediului și sănătății (ADMATEH)”, 21 septembrie 2023, Chișinău, eveniment online, p. 25. DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/admateh.2023.ab17>
- 18) GONTA, M., MOCANU, L., POPAZ, I. *Removal mixture of drugs in aqueous solution by using titanium dioxide photocatalyst*. In: Abstract Book Scientific seminar Advanced materials to reduce the impact of toxic chemicals on the environment and health, Chisinau, 21 September, 2023, p. 45. DOI: <http://dx.doi.org/10.19261/admateh.2023.ab35>
- 19) VERDEȘ, A.; GORINCIOI, E.; LUPAȘCU, L.; DUCA; Gh.; MACAEV, F. Targeting the bioactive dihydropyrimidines by ecofriendly procedure of Biginelli reaction: study case of monastrol. Scientific seminar „NEW FRONTIERS IN NATURAL PRODUCT CHEMISTRY”, Chisinau, 12-13 October, 2023, Book of abstracts, pag. 31. <https://doi.org/10.19261/nfnpc.2023.ab24>

7.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

Notă: vor fi considerate teze și nu articole materialele care au un volum de până la 0,25 c.a.

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

8.1. cărți (cu caracter informativ)

8.2. enciclopedii, dicționare

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

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

1. A fost înaintat la Agenția de Stat pentru Proprietatea Intelectuală un brevet de invenție pe tema: *Materiale polimerice cu proprietăți antimicrobiene cu conținut de Rifampicină*. CIB⁹A61K31/345, C07D307/70, C08F259/02

10. Lucrări științifico-metodice și didactice

- 1) GLADCHI V. Tehnologie chimică organică: Note de curs. Chișinău, CEP USM, 2023. – 157 p. ISBN 978-9975-62-545-6.

**Executarea devizului de cheltuieli,
conform anexei nr. 2.3 din contractul de finanțare pentru anul 2023**

Cifrul proiectului: 20.80009.5007.27

Cheltuieli, mii lei						
Denumirea	Cod		Anul de gestiune		Cofin.	Cofin.
	Eco (k6)	Aprobat TOTAL	Modif. +/-	Precizat	Modif. +/-	Preciz.
Remunerarea muncii angajaților conform statelor	211180	1914,5		1914,5		
Contribuții de asigurări de stat obligatorii	212100	459,5		459,5		
Deplasări în interes de serviciu în interiorul țării	222710	7,2		-	-	7,2
Deplasări în interes de serviciu peste hotare	222720	88,6		88,6		
Servicii de editare	222910	45,5		43,5		2,0
Indemnizații pentru incapacitate temp. de muncă	273500	10,0		10,0		
Alte prestații sociale ale angajatorilor	273900		+60,0	60,0		
Procurarea mașinilor și utilajului	314110	4,5		-		4,5
Procurarea materialelor pentru scopuri științifice	335110	51,4		15,1		36,3
TOTAL		2581,2	+60,0	2591,2	-	50,0

Rectorul

SAROV Igor

(numele, prenumele)

21
(semnătura)

Contabil șef

COJOCARU Liliana

(numele, prenumele)

Cojocaru
(semnătura)

Conducătorul de proiect

DUCA Gheorghe

(numele, prenumele)

Duca
(semnătura)

Data: 10.01.2024

LȘ



Componența echipei conform contractului de finanțare 2023
Cifrul proiectului 20.8009.5007.27

Echipea proiectului conform contractului de finanțare (la semnarea contractului) pentru 2023						
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	02.01.2020	31.12.2023
2.	Gorincioi Natalia	1951	Dr.	1,0	02.01.2020	31.12.2023
3.	Covaliova Olga	1960	Dr. hab.	1,0	02.01.2020	31.12.2023
4.	Gorbaciov Mihail	1959	Dr.	1,0	02.01.2020	31.12.2023
5.	Anghel Lilia	1986	Dr.	1,0	02.01.2020	31.12.2023
6.	Bălan Iolanta	1977	Dr.	0,75	02.01.2020	31.12.2023
7.	Romanciuc Lidia	1960	Dr.	1,0	02.01.2020	31.12.2023
8.	Vicol Crina	1994		1,0	02.01.2020	31.12.2023
9.	Barbă Alic	1958	Dr.	0,75	02.01.2020	31.12.2023
10.	Gorincioi Elena	1972	Dr.	0,5	02.01.2020	31.12.2023
11.	Arsene Ion	1981	Dr.	0,25	02.01.2020	31.12.2023
12.	Ialtîcenco Olga	1968	Dr.	0,25	02.01.2020	31.12.2023
13.	Bolocan Natalia	1984	Dr.	0,5	02.01.2020	31.12.2023
14.	Taşcă Corina	1992		0,25	04.01.2021	31.12.2023
15.	Zinicovscaia Inga	1986	Dr. hab.	0,1	02.01.2020	31.12.2023
16.	Bersuker Isaac	1928	Acad.	-	02.01.2020	31.12.2023
17.	Hramco Constantin	1990		-	02.01.2020	31.12.2023
18.	Gladchi Viorica	1964	Dr	0,5	02.01.2020	31.12.2023
19.	Bunduchi Elena	1974	Dr	0,5	02.01.2020	31.12.2023
20.	Borodaev Ruslan	1973	Dr	0,25	02.01.2020	31.12.2023
21.	Blonschi Vladislav	1994	Dr	0,5	02.01.2020	31.12.2023
22.	Gonța Maria	1948	Dr	0,5	02.01.2020	31.12.2023
23.	Matveevici Vera	1949	Dr	0,5	02.01.2020	31.12.2023
24.	Mocanu Larisa	1986	Dr	1	02.01.2020	31.12.2023

25.	Lis Angela	1986	Dr	0,5	02.01.2020	31.12.2023
26.	Mereuța Aliona	1975	Dr	0,25	02.01.2020	31.12.2023
27.	Culea Maria	1978		0,25	02.01.2020	31.12.2023

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

Rectorul

ȘAROV Igor

(numele, prenumele)

(semnătura)

Contabil șef

COJOCARU Lujana

(numele, prenumele)

(semnătura)

Conducătorul de proiect

DUCA Gheorghe

(numele, prenumele)

(semnătura)

Data: 10.01.2024

LȘ




**Executarea devizului de cheltuieli,
conform anexe nr. 2.3 din contractul de finanțare pentru anul 2023**

Cifrul proiectului: **20.80009.5007.27**

Cheltuieli, mii lei				
Denumirea codurilor economice	Cod		Anul de gestiune	
	Eco (k6)	Aprobat	Modificat +/-	Precizat
Remunerarea muncii angajaților conform statelor	211180	118,2		118,2
Contribuții de asigurări sociale de stat obligatorii (24%)	212100	28,3		28,3
Deplasări de serviciu în interiorul țării	222710			
Deplasări de serviciu peste hotare	222720			
Servicii editoriale	222910			
Servicii de cercetări științifice contractate	222930			
Servicii neatribuite altor aliniate	222990			
Cheltuieli curente neatribuite la alte categorii	281900			
Procurarea mașinilor și utilajelor	314110			
Procurarea produselor alimentare	333110			
Procurarea materialelor pentru scopuri didactice, științifice și alte scopuri	335110	6,8		6,8
Procurarea materiale de uz gospodăresc și rechizite de birou	336110			
Procurarea altor materiale	339110			
TOTAL		153,3		153,3

Rector U.T.M.


(semnătura)

dr. hab. Viorel BOSTAN

(numele, prenumele)

Contabil (economist)


(semnătura)

Victoria IOVU

(numele, prenumele)

**Conducătorul proiectului
(partener)**


(semnătura)

Dr. Iurie SUBOTIN

(numele, prenumele)



Componenta echipei proiectului conform contractului de finanțare 2023

Cifrul proiectului 20.80009.5007.27

Echipa proiectului conform contractului de finanțare (la semnarea contractului) pentru a.2023						
Nr	Nume, prenume (conform contractului de finanțare)	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării	Data eliberării
1.	Subotin Iurie	1971	dr.	0,25	03.01.2023	31.12.2023
2.	Sturza Rodica	1960	dr.hab.	0,25	03.01.2023	31.12.2023
3.	Druta Raisa	1972	dr.	0,25	03.01.2023	31.12.2023
4.	Covaci Ecaterina	1985	dr.	0,25	03.01.2023	31.12.2023

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

Modificări în componența echipei pe parcursul anului 2023					
Nr	Nume, prenume	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării
1.					
2.					

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

Rector U.T.M.


 (semnătura)

dr. hab. Viorel BOSTAN

(numele, prenumele)

Contabil (economist)


 (semnătura)

Victoria IOVU

(numele, prenumele)

Conducătorul proiectului
(partener)

 (semnătura)

Dr. Iurie SUBOTIN

(numele, prenumele)

