

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect perioada 2020-2023

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

Cifrul proiectului 20.8009.5007.27

Proiectul a abordat o serie de studii complexe în domeniul chimiei cuantce, ecologice alimentare. Inițial, a fost realizat un studiu computațional amănunțit asupra acidului dihidroxifumaric, identificându-se 45 de izomeri și analizându-se abundența lor relativă în diverse medii. A fost investigat procesul de izomerizare și tautomerizare a trei izomeri stabili, cu determinarea parametrilor cinetici și termodinamici. Au fost calculați indicii de reactivitate globală și locală, validând procedura KID și explorând mecanismul antioxidant al acidului.

Studiile au inclus analize predictive ale proprietăților farmacocinetice și potențialul de inhibare a proteazei principale a virusului SARS-CoV-2.

S-a demonstrat că transferul de protoni poate fi controlat de Pseudo-Efectul Jahn-Teller. S-au analizat interacțiunile antioxidante ale acizilor fenolici și flavonoidelor cu radicali liberi, evidențiind sinergii importante.

Proiectul a acordat atenție impactului condițiilor oxidative asupra oxidării lipidelor, cu relevanță pentru industria alimentară, și stabilizării microbiologice în vinificație, evidențiind eficiența antioxidantilor naturali. S-a studiat rolul substanțelor tiolice și al vitaminelor din grupul B în autopurificarea apelor. Studiile hidrochimice pe fluviul Nistru au identificat influențe negative și au propus metode de eliminare a poluanților emergenți.

În plus, proiectul a inclus studii pe mecanismele de oxidare cu reactivul Fenton a poluanților farmaceutici, analiza și monitorizarea poluării mediului ambiant și a produselor alimentare din Republica Moldova cu metale prin metoda de bombardare cu neutroni.

S-a utilizat o nouă metodologie pentru determinarea sinergiei antioxidantilor din struguri, analizând influența acestora asupra compoziției și calității. S-a investigat și influența antioxidantilor asupra procesului biochimic de fermentare.

Studiul a explorat oxidarea catehinelor naturali și rezistența lor la oxidare, obținându-se vinuri experimentale din soiuri diverse pentru a analiza oxidabilitatea polifenolilor și impactul transformărilor chimice asupra calității produselor vinicole.

The project addressed a series of complex studies in the field of quantum chemistry, ecological, and food sciences. Initially, a detailed computational study was conducted on dihydroxyfumaric acid, identifying 45 isomers and analyzing their relative abundance in various environments. The isomerization and tautomerization process of three stable isomers was investigated, determining the kinetic and thermodynamic parameters. Global and local reactivity indices were calculated, validating the KID procedure and exploring the antioxidant mechanism of the acid.

The studies included predictive analyses of the pharmacokinetic properties and the potential to inhibit the main protease of the SARS-CoV-2 virus. It was demonstrated that proton transfer can be controlled by the Pseudo-Jahn-Teller Effect. The antioxidant interactions of phenolic acids and flavonoids with free radicals were analyzed, highlighting significant synergies.

The project focused on the impact of oxidative conditions on lipid oxidation, relevant to the food industry, and on microbiological stabilization in winemaking, emphasizing the efficiency of natural antioxidants. The role of thiol substances and B-group vitamins in water self-purification was studied. Hydrochemical studies on the Nistru River identified negative influences and proposed methods to eliminate emerging pollutants.

Additionally, the project included studies on the oxidation mechanisms of pharmaceutical pollutants using the Fenton reagent, analysis, and monitoring of environmental pollution and food products in Moldova with metals using the neutron bombardment method. A new methodology was used to determine the synergy of antioxidants in grapes, analyzing their influence on composition and quality. The influence of antioxidants on the biochemical fermentation process was also investigated.

The study explored the oxidation of natural catechins and their resistance to oxidation, obtaining experimental wines from various grape varieties to analyze the oxidability of polyphenols and the impact of chemical transformations on the quality of wine products.