

## 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”**

Cifrul 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<sup>•+</sup> 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 + glutatation” și „acid genticic + epicatechină”.

Analiza moleculelor X<sub>2</sub>CE (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.

Procesele 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  $\text{ABTS}^{++}$  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  $\text{X}_2\text{CE}$  molecules ( $\text{X}=\text{H}, \text{F}; \text{E}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}$ ) 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.