

## Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în subprogram în anul 2025

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

**Codul subprogramului 010603**

- Au fost realizate cercetări privind eficiența catalitică și adsorbțională a unor compozite carbonice și polimerice funcționalizate în procesele de eliminare a poluanților din medii apoase, precum și studii privind compoziția chimică a apelor naturale din diferite zone ale Republicii Moldova. Au fost elaborate și caracterizate compozite pe bază de carbon activ și polimeri reticulați, dopate cu ioni de Fe, Mn, Co și Cr, demonstrând o capacitate sporită de adsorbție și activitate catalitică în procese de oxidare avansată și de eliminare a coloranților organici și a ionilor metalici. Rezultatele experimentale au evidențiat influența parametrilor fizico-chimici (pH, temperatură, concentrație, timp de contact) asupra performanței materialelor obținute. Totodată, analiza calității apelor naturale a permis identificarea depășirilor valorilor admise pentru anumiți parametri, confirmând necesitatea implementării unor tehnologii eficiente de tratare și potabilizare. Cercetările realizate oferă suport științific pentru dezvoltarea de soluții sustenabile destinate protecției resurselor de apă și sănătății publice.
- Au fost stabiliți parametrii ecuației de regresie pentru izotopii stabili  $\delta^{18}\text{O}$  și  $\delta^2\text{H}$  a apei din precipitații, râuri, lacuri și apelor subterane. Acest rezultat a arătat particularitățile formării rezervelor apelor subterane din zona de aerare și zona adâncă a secțiunii geologice, a stabilit Linia de Evaporare Locală pentru modelarea balanței resurselor acvatice. Raportul izotopilor stabili  $\delta^{18}\text{O}$  și  $\delta^2\text{H}$  pentru apa de suprafață din râurile Prut și Nistru este similar raportului pentru apele subterane din zona de aerare. Acest fapt demonstrează relația existentă între apele de suprafață și apele subterane. Aceste rezultate poate fi utilizate în scopuri de modelare pentru elaborarea soluțiilor stabile în managementul resurselor acvatice.
- Au fost identificate toate instalațiile funcționale de epurare a apelor uzate în regiunile investigate. Evaluările efectuate au arătat că, din cele 272 de stații de epurare existente în Republica Moldova, doar o mică parte funcționează la parametri proiectați.
- În cadrul Stației de Epurare a municipiului Chișinău au fost testate proceduri de utilizare a soluțiilor de  $\text{FeCl}_3$  pentru reducerea emisiilor de hidrogen sulfurat și alte mirosuri pestilențiale. În perioada caldă (17–37°C), doza optimă a fost stabilită la 1 mL soluție 40%  $\text{FeCl}_3$  per 1 L de nămol, iar în perioada rece (sub 16°C), la 0.6–0.8 mL/L.
- În cadrul studiului, s-au analizat procesele din sistemele eterogene care conțin hidroxid de magneziu, amoniu, calciu și fosfați, stabilindu-se condițiile favorabile pentru formarea struvitului ( $\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ).
- Laboratorul de Chimie Fizică și Cuantică a realizat cercetări integrate în chimia computațională, chimia ecologică și procesele de autopurificare a apelor. Au fost optimizate lichide ionice antioxidante de tip [L-carnitină – acizi alimentari], stabilindu-se relații clare între activitatea antioxidantă și proprietățile electronice. Au fost studiate transformările redox ale vitaminelor B2, B6, B9 și B12 în sisteme model. Au fost efectuate expediții hidrochimice în bazinul Nistrului și în lacurile Ghidighici și Dănceni. S-au evaluat starea redox, poluarea biogenă, sulfuri și capacitatea radicalică a apelor. S-au studiat procesele anaerobe ale biomasei agroalimentare cu substanțe biologice active antioxidante. 21×2 combinații de antioxidanți naturali au fost testate, identificându-se efecte sinergice, aditive și antagoniste. Laboratorul a integrat cu succes modelarea cuantică și experimentele ecologice, oferind rezultate aplicabile în protecția mediului, epurarea apelor și optimizarea proceselor biochimice.

- Research activities focused on the catalytic and adsorption efficiency of functionalized carbonaceous and polymer-based composites for pollutant removal from aqueous media, alongside the chemical characterization of natural waters from different country regions. Synthesized carbon-based and cross-linked polymer composites doped with Fe, Mn, Co and Cr ions proved enhanced adsorption capacity and catalytic performance in advanced oxidation processes, as well as in the removal of organic dyes and metal ions. Experimental results revealed the decisive influence of key physicochemical parameters (pH, temperature, concentration and contact time) on material performance. The assessment of natural water quality identified exceedances of regulatory limits for several parameters, emphasizing the need for efficient and locally adapted water treatment technologies.
- The parameters of regression equations for stable water isotopes ( $\delta^{18}\text{O}$  and  $\delta^2\text{H}$ ) in precipitation, rivers, lakes and groundwater were established, allowing the definition of the Local Evaporation Line and improved modelling of water balance processes. The similarity between isotopic ratios in surface waters (Prut and Dniester rivers) and groundwater from the aeration zone confirms a strong hydraulic connection between these systems, supporting the use of isotopic tools in sustainable water resource management.
- All functional treatment facilities within the investigated regions were identified, and detailed evaluations of wastewater flows and pollutant loads were conducted. The analysis revealed profound infrastructural limitations: although 272 wastewater treatment plants are officially registered in the country, only a small fraction operates according to design specifications.
- All functional wastewater treatment facilities in the investigated regions were identified and evaluated in terms of flow rates and pollutant loads. The analysis revealed major infrastructural deficiencies, showing that although over 270 wastewater treatment plants are officially registered, only a limited number operate according to design specifications. At the Chisinau WWTP,  $\text{FeCl}_3$  solutions were tested for hydrogen sulfide and odor control, and optimal dosages were established for both warm and cold periods. The formation of iron sulfide precipitates in sludge was confirmed, leading to a substantial reduction of odor emissions.
- Thermodynamic modelling of heterogeneous systems containing  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$  and  $\text{PO}_4^{3-}$  ions enabled the prediction of favorable conditions for struvite ( $\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ) precipitation, supporting nutrient recovery strategies.
- Integrated computational and experimental studies on antioxidant ionic liquids based on L-carnitine and food acids revealed clear correlations between antioxidant activity and electronic properties. Redox transformations of vitamins B<sub>2</sub>, B<sub>6</sub>, B<sub>9</sub> and B<sub>12</sub>, seasonal surveys of major water bodies, and anaerobic fermentation of agro-biomass with bioactive antioxidants were also investigated. Binary mixtures of antioxidants displayed synergistic, additive or antagonistic effects, generating results relevant for water treatment, environmental protection and biochemical process optimization.