

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în subprogram în anul 2024
CERCETĂRI AVANSATE ÎN CHIMIA COMPUTAȚIONALĂ ȘI ECOLOGICĂ,
IDENTIFICAREA PROCEDEELOR TEHNOLOGICE DE TRATARE,
FORMARE A CALITĂȚII ȘI CANTITĂȚII APELOR
(denumirea subprogramului)

Codul subprogramului **010603**

În cadrul cercetărilor actuale, au fost realizate 12 probe de compozite carbonice, dintre care 6 impregnate cu săruri de metale și activate în strat fluidizat, testate pentru stabilitatea reținerii ionilor de metale și pentru studiile catalitice privind descompunerea peroxidului de hidrogen. Compozitele impregnate cu $MnCl_2$, activate la $1000^\circ C$, au demonstrat cele mai bune rezultate în adsorbția ionilor de metale. Compozitele obținute din coji de nuci au avut un raport cost-eficiență favorabil pentru aplicațiile de tratare a apei. S-a propus optimizarea procesului de impregnare și activare pentru îmbunătățirea performanțelor materialelor catalitice.

În urma colaborărilor cu autoritățile locale și S.A. Apă-Canal Hâncești, au fost dezvoltate tehnologii de potabilizare pentru a îmbunătăți calitatea apei. Un alt studiu important a fost realizat pe compoziția izotopică a apelor de suprafață și subterane, în scopul evaluării formării resurselor de apă în contextul schimbărilor climatice. Rezultatele au arătat o variabilitate semnificativă a izotopilor în râul Prut, iar în perioada de secetă, râurile sunt alimentate din apele subterane. Analizele chimice au relevat nerespectarea standardelor naționale de calitate a apei.

S-au elaborat tehnologii avansate pentru îmbunătățirea proceselor de nitrificare și denitrificare, utilizând IFAS (Nămol activ integrat cu peliculă fixă) și biofiltre cu peliculă biologică. Rezultatele au demonstrat un succes semnificativ în îndepărtarea azotului și îmbunătățirea calității apei, în special la temperaturi scăzute. În paralel au fost studiate procesele de precipitare a struvitului și alte forme de fosfat, iar optimizarea pH-ului și adăugarea de Mg^{2+} și NH_4^+ au fost identificați ca factori esențiali pentru o recuperare eficientă a fosforului. Modelul termodinamic elaborat pentru îmbunătățirea proceselor de epurare a demonstrat o eficiență remarcabilă în eliminarea și recuperarea azotului și fosforului și îmbunătățirea nitrificării/denitrificării.

A fost optimizată structura moleculei de L-carnitină, demonstrându-i importanța în metabolismul mamiferelor, plantelor și bacteriilor. De asemenea, au fost analizate efectele antioxidanților precum acidul ascorbic și acidul galic, care stabilizează radicalii liberi și previn deteriorarea celulară.

Studiile de fotoliză au confirmat stabilitatea vitaminei B_{12} în ape naturale, favorizând conversia cianocobalaminei în hidroxocobalamină. Studiile de poluare cu vitamina B_6 au arătat impactul negativ asupra capacității de autopurificare a apelor. În plus, au fost identificați catalizatori optimi pentru oxidarea polifenolilor, iar oxidarea acidului galic a demonstrat reducerea semnificativă a CCO și concentrației substratului.

Cercetările de extracție a principiilor active din surse naturale au indicat condițiile ideale pentru obținerea extractelor de propolis cu activitate antioxidantă ridicată. Tehnologia DBD (descărcarea barieră dielectrică) a arătat perspective promițătoare pentru tratamentele apelor naturale și industriale. Cercetările asupra activității antioxidante a compușilor din struguri și vin au evidențiat influența mediului de reacție, oferind perspective valoroase pentru protecția mediului și aplicațiile farmaceutice.

Summary of the activity and results obtained in the subprogram in 2024

ADVANCED RESEARCH IN COLUMN AND ECOLOGICAL CHEMISTRY, IDENTIFICATION OF TECHNOLOGICAL PROCESSES FOR TREATMENT, FORMATION OF WATER QUALITY AND QUANTITY

(subprogram name)

Subprogram code **010603**

In the current research, 12 carbon composite samples were produced, 6 of which were impregnated with metal salts and activated in a fluidized bed, tested for metal ion retention stability and catalytic studies regarding hydrogen peroxide decomposition. The composites impregnated with MnCl_2 and activated at 1000°C showed the best results in metal ion adsorption. The composites obtained from walnut shells demonstrated a favorable cost-efficiency ratio for water treatment applications. The optimization of the impregnation and activation process was proposed to improve the performance of the catalytic materials.

In collaboration with local authorities and S.A. Apa-Canal Hancesti, water purification technologies were developed to improve water quality. Another significant study was conducted on the isotopic composition of surface and groundwater to assess water resource formation in the context of climate change. The results showed significant variability of isotopes in the Prut River, with rivers being supplied by groundwater during dry periods. Chemical analyses revealed non-compliance with national water quality standards.

Advanced technologies were proposed to improve the processes of nitrification and denitrification, using IFAS (Integrated Fixed-film Activated Sludge) and biofilters with a biological film. The results demonstrated significant success in nitrogen removal and water quality improvement, especially at low temperatures. At the same time, processes of struvite precipitation and other forms of phosphate were studied, with pH optimization and the addition of Mg^{2+} and NH_4^+ identified as essential factors for efficient phosphorus recovery.

The thermodynamic model developed for improving wastewater treatment processes demonstrated remarkable efficiency in nitrogen and phosphorus removal and recovery, as well as improved nitrification and denitrification. Experimental results confirmed the efficiency of ammonia and phosphorus recovery and struvite crystal formation. Thermodynamic modeling clarified the crystallization mechanisms of struvite, correlated with precipitation and prevailing conditions.

The structure of the L-carnitine molecule was optimized, demonstrating its importance in the metabolism of mammals, plants, and bacteria. The effects of antioxidants such as ascorbic acid and gallic acid, which stabilize free radicals and prevent cellular damage, were also analyzed. Photolysis studies confirmed the stability of vitamin B_{12} in natural waters, promoting the conversion of cyanocobalamin to hydroxocobalamin. Studies on vitamin B_6 pollution showed its negative impact on the self-purification capacity of water bodies. Additionally, optimal catalysts for polyphenol oxidation were identified, and the oxidation of gallic acid demonstrated a significant reduction in COD and substrate concentration.

Research on the extraction of active ingredients from natural sources revealed the ideal conditions for obtaining propolis extracts with high antioxidant activity. DDD (double dielectric discharge) technology showed promising prospects for treating natural and industrial waters.

Research on the antioxidant activity of compounds from grapes and wine highlighted the influence of the reaction environment, offering valuable perspectives for environmental protection and pharmaceutical applications.