**Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiectul Redoxpro**

**(director de proiect acad. Gheorghe DUCA)**

**Ro:** Rezultatele cercetărilor în cadrul proiectului nr. **20.80009.5007.27** din anul 2022 au fost focusate pe studiul experimental și teoretic al efectului sinergic manifestat de diverși antioxidanți.

A fost stabilită prezența efectului antagonist dintre varii combinații de acid dihidroxifumari – resveratrol și catehină – resveratrol. În amestecul de antioxidanți acid ascorbic – acid dihifroxifumaric, analizat prin spectroscopia RES, a fost depistată o puternică interacțiune sinergistică.

Prin calcule cuanto-chimice s-a constatat că efectul sinergic al formei reduse de glutation asupra reacției acidului cafeic cu cation-radicalul ABTS+∙ constă în ionizarea de către anionii glutationului a moleculelor de acid cafeic asociate cu grupările sulfonice ale cation-radicalilor ABTS+∙ cu transferul simultan al unui electron din fragmentul anionic nou format de acid cafeic pe fragmentul structural ABTS+∙.

S-a demonstrat că cel mai probabil mecanism prin care molecula de 2,3-dihidroxi-N1,N4-bis(2-hidroxietil)fumaramidă își manifestă activitatea antioxidantă în reactia cu DPPH, atât în gaz (in vacuo) cât și în apă, este mecanismul SPLET, care constă în pierderea inițială a protonului cu pierderea ulterioară a electronului.

S-a demonstrat că PEJT controlează reacțiile de transfer de protoni în sistemele cu legături de hidrogen. Calculele cuantice-chimice ale parametrilor de cuplare PEJT între starea fundamentală și starea excitată relevantă de-a lungul coordonatei transferului de protoni permit dezvăluirea mecanismului reacției și posibila manipulare a acesteia.

Pentru prima dată a fost evidențiat efectul factorilor de mediu precum pH-ul și prezența sării de NaCl asupra interacțiunilor dintre moleculele lactoferrină și polizaharide cu activitate antioxidantă utilizând metoda de împrăștiere la unghiuri mici. Rezultatele obținute demonstrează formarea complecșilor macromoleculari în baza interacțiunilor electrostatice.

Au fost determinate legitățile cinetice de transformare a vitaminelor din grupa B sub influența factorilor de mediu și s-a depistat eficiența proceselor redox și celor fotochimice. Au fost monitorizate 5 obiecte acvatice din bazinul Nistrului și s-a depistat influența r. Răut asupra compoziției chimice a apelor Nistrului. A fost studiată degradarea medicamentelor antiinflamatoare (diclofenac sodic) și a surfactanților anionici (sodiu dodecilbenzosulfonat) din soluțiile apoase prin aplicarea fotolizei și a proceselor de oxidare avansată. Au fost stabiliți parametrii cinetici optimi ai procesului catalitic și fotocatalitic de degradare/mineralizare în sisteme omogene și eterogene prin monitorizarea concentrației substratului oxidat, valorile CCO în funcție de diferiți parametri fizico-chimici. Având în vedere rezultatele menționate mai sus, procedeul Fenton poate fi utilizat la depoluarea apelor uzate cu conținut de medicamente antiinflamatoare și surfactanți anionic.

Pentru aprecierea calităţii vinurilor din r-nul Ștefan Vоdă, s. Purcari au fost studiaţi indicii fizico-chimici şi specifici, ce permit prognozarea stabilităţii și oxidabilităţii acestora. Parametrii fizico chimici și senzoriali: concentrația alcoolică, reziduul sec total, analiza senzorială indică că vinul din soiul ampelografic Feteasca Albă este mai bun în comparaţie cu alte vinuri albe studiate, iar vinul din soiul ampelografic Rara Neagră din cele roșii studiate.

**En:** The results of the research within project no. 20.80009.5007.27 from the year 2022 were focused on the experimental and theoretical study of the synergistic effect manifested by various antioxidants.

The presence of the antagonistic effect between various combinations of dihydroxyfumaric acid – resveratrol and catechin – resveratrol was established. In the mixture of antioxidants ascorbic acid - dihyphroxyfumaric acid, analyzed by RES spectroscopy, a powerful synergistic interaction was detected.

Through quantum-chemical calculations it was found that the synergistic effect of the reduced form of glutathione on the reaction of caffeic acid with the radical cation ABTS+∙ consists of the ionization by glutathione anions of the caffeic acid molecules associated with the sulfonic groups of the radical cation ABTS+∙ with the transfer simultaneously of an electron from the newly formed anionic fragment of caffeic acid on the ABTS+∙ structural fragment.

It was demonstrated that the most likely mechanism by which the molecule of 2,3-dihydroxy-N1,N4-bis(2-hydroxyethyl)fumaramide manifests its antioxidant activity in reaction with DPPH, both in gas (in vacuo) and in water is the SPLET mechanism, which consists in the initial loss of the proton with the subsequent loss of the electron.

The PJTE was shown to control the proton transfer reactions in hydrogen-bonded systems. Quantum-chemical calculations of the parameters of PJTE coupling between the ground and the relevant excited state along the coordinate of the possible proton transfer allow for revealing the mechanism of the reaction and its possible manipulation.

For the first time, the effect of environmental factors such as pH and the presence of NaCl salt on the interactions between lactoferrin molecules and polysaccharides with antioxidant activity has been highlighted by using the small angle scattering method. The obtained results demonstrate the formation of macromolecular complexes based on electrostatic interactions

The kinetic laws of transformation of group B vitamins under the influence of environmental factors were determined and the efficiency of redox and photochemical processes was detected. 5 aquatic objects from the Dniester basin were monitored and the influence of the Răut River on the chemical composition of the Dniester waters was detected. The degradation of anti-inflammatory drugs (diclofenac sodium) and anionic surfactants (sodium dodecylbenzosulfonate) from aqueous solutions was studied by applying photolysis and advanced oxidation processes. The optimal kinetic parameters of the catalytic and photocatalytic process of degradation/mineralization in homogeneous and heterogeneous systems were established by monitoring the concentration of the oxidized substrate, and the CCO values according to different physicochemical parameters. It was demonstrated that, the Fenton process can be used for the depollution of wastewater containing anti-inflammatory drugs and anionic surfactants.

In order to assess the quality of the wines from the Ștefan Vоdă district, Purcari village, physicochemical and specific indices were studied, which allow forecasting their stability and oxidizability. The physicochemical and sensory parameters: alcohol concentration, total dry residue and sensory analysis indicate that the wine from the ampelographic variety Feteasca Alba is better compared to other white wines studied and the wine from the ampelographic variety Rara Neagra to the red ones studied.