

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2024

Scopul acestui proiect este investigarea sinergismului în procesele chimice complexe printr-o abordare termodinamică riguroasă, cu aplicații în chimie, biochimie și industriile farmaceutică, medicală și chimică. Cercetările s-au concentrat pe elucidarea interacțiunilor sinergice, identificarea condițiilor ce favorizează sau inhibă acest fenomen și promovarea amestecurilor sinergice ca alternativă sustenabilă la reactanții individuali costisitori. Printr-o înțelegere aprofundată a fenomenelor de sinergism și antagonism, proiectul urmărește dezvoltarea de procese chimice eficiente, cu impact redus asupra mediului.

A fost dezvoltată o metodologie complexă, bazată pe date termodinamice standard, ecuații de bilanț de masă și observații experimentale, pentru evaluarea condițiilor în care sinergismul și antagonismul se manifestă în timpul proceselor de extracție. Studiile teoretice și experimentale au vizat sisteme bine documentate, precum Zn^{2+} -tenoiltrifluoroacetonă-TBP, oferind informații detaliate despre distribuția speciilor chimice între faza apoasă și faza organică (benzen) în funcție de pH, temperatură și compoziție chimică. Analiza acestor sisteme a permis definirea unui indice de sinergism (SI) pentru cuantificarea fenomenului și identificarea condițiilor care determină tranziția de la sinergism la antagonism.

Calcululele termodinamice avansate și simulările teoretice au oferit o înțelegere detaliată a comportamentului sistemelor selectate, validând metodologia propusă prin corelarea rezultatelor cu datele experimentale din literatura de specialitate. Rezultatele obținute constituie o bază solidă pentru prezicerea fenomenelor de sinergism și antagonism în diverse condiții experimentale, cum ar fi compoziția chimică și pH-ul sistemelor eterogene lichid-lichid.

Aplicabilitatea rezultatelor se extinde în mai multe domenii:

Optimizarea proceselor industriale – Utilizarea amestecurilor sinergice poate reduce semnificativ costurile de producție și crește eficiența proceselor chimice.

Dezvoltarea de noi reactivi și produse – Sinergismul chimic reprezintă o alternativă viabilă la reactanții costisitori, promovând inovații în industriile farmaceutică și chimică.

Sustenabilitate – Reducerea consumului de resurse și a impactului ecologic prin utilizarea amestecurilor sinergice în locul proceselor convenționale mai puțin eficiente.

Proiectul a inclus și diseminarea rezultatelor în cadrul a trei conferințe internaționale: MARBLUE 2024 (Constanța, România), IasiCHEM 2024 (Iași, România) și SIMI 2024 (Constanța, România) și una națională cu participare internațională (Tiraspol 2024). Participarea la aceste evenimente a facilitat schimbul de idei și colaborări cu experți în domeniu, contribuind la avansarea cercetării în sinergismul chimic.

Prin aplicarea acestei metodologii, rezultatele proiectului oferă un cadru inovativ pentru designul și implementarea proceselor chimice durabile, având implicații semnificative în chimia analitică, farmaceutică, biochimie și chimia organică sintetică. Aceste contribuții sprijină dezvoltarea unui model sustenabil pentru utilizarea resurselor și reducerea impactului asupra mediului, răspunzând provocărilor actuale din cercetarea chimică și industrială.

