

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2025

Cifra proiectului 24.80012.5007.19SE

Denumirea Proiectului „Elucidarea termodinamică și precizarea sinergismului chimic în procese chimice complexe”

Scopul proiectului a fost investigarea fenomenului de sinergism în procese chimice complexe printr-o abordare termodinamică riguroasă, cu aplicații în chimie, biochimie, știința mediului și domeniile farmaceutic și medical. Cercetările au vizat elucidarea mecanismelor interacțiunilor sinergice și antagonice, identificarea condițiilor care favorizează sau inhibă aceste efecte și promovarea utilizării amestecurilor sinergice ca alternative sustenabile la reactanții individuali costisitori. Prin dezvoltarea unor modele predictive, proiectul a urmărit optimizarea proceselor chimice și reducerea impactului asupra mediului.

Elementul central al metodologiei l-a constituit introducerea coeficientului sinergic (SC), un parametru termodinamic cantitativ care permite identificarea, compararea și cuantificarea directă a efectelor sinergice și antagonice. Coeficientul descrie modificarea stabilității sistemului la introducerea unui ligand auxiliar în prezența ligandului principal și oferă o evaluare numerică a influenței pH-ului, compoziției chimice, concentrațiilor și stabilității complexelor asupra solubilității și echilibrului fazelor. Definierea SC reprezintă o contribuție conceptuală originală, deoarece sinergismul era anterior descris preponderent calitativ.

Metodologia a fost validată în trei direcții aplicative majore. În extracția lichid-lichid a metalelor, modelarea termodinamică a permis precizarea domeniilor de pH și compoziție în care apar sinergismul și antagonismul, precum și optimizarea combinațiilor de extractanți, demonstrată pe sisteme model de tip Zn^{2+} -ligand chelator-TBP. În sistemele minerale care conțin fier, s-a demonstrat că sideroforii, în combinație cu liganzi auxiliari (oxalat, fenantrolină și derivați sulfonici), induc dizolvarea sinergică a mineralelor precum goethit, hematit și ferrihidrit, cu implicații directe asupra mobilității metalelor, fertilității solului și proceselor de remediere a mediului. În domeniul farmaceutic, studiile asupra sistemelor „medicament-ciclodextrină-ligand auxiliar” au arătat că formarea complexelor ternari crește semnificativ solubilitatea medicamentelor slab solubile, permițând proiectarea rațională a formulărilor și reducerea costurilor experimentale.

În ansamblu, rezultatele proiectului au furnizat un cadru teoretic unificat, predictiv și transferabil, cu aplicabilitate interdisciplinară, contribuind la dezvoltarea unor tehnologii chimice mai eficiente, sustenabile și competitive.

Rezumat în limba engleză pentru anul 2025

The aim of the project was to investigate chemical synergism in complex chemical processes through a rigorous thermodynamic approach, with applications in chemistry, biochemistry, environmental science, and the pharmaceutical and medical fields. The research focused on elucidating the mechanisms of synergistic and antagonistic interactions, identifying the conditions that promote or inhibit these effects, and promoting synergistic mixtures as sustainable alternatives to costly individual reagents. By developing predictive models, the project sought to optimize chemical processes while reducing environmental impact.

The central element of the methodology was the introduction of the synergistic coefficient (SC), a quantitative thermodynamic parameter that enables the clear identification, comparison, and direct quantification of synergistic and antagonistic effects. The coefficient describes changes in system stability upon the addition of an auxiliary ligand in the presence of a primary ligand and provides a numerical evaluation of how pH, chemical composition, concentrations, and complex stability influence solubility and phase equilibria. The definition of SC represents an original conceptual contribution, as synergism had previously been described mainly in qualitative or indirect terms.

The methodology was successfully validated in three major application areas. In liquid–liquid metal extraction, thermodynamic modeling enabled prediction of the pH and composition domains where synergism or antagonism occurs and supported rational optimization of extractant combinations, demonstrated on model systems such as Zn^{2+} –chelating ligand–TBP. In iron-containing mineral systems, it was shown that siderophores combined with auxiliary ligands (oxalate, phenanthrolines, and sulfonated derivatives) induce strong synergistic dissolution of minerals such as goethite, hematite, and ferrihydrite, with important implications for metal mobility, soil fertility, and environmental remediation. In the pharmaceutical field, studies of “drug–cyclodextrin–auxiliary ligand” systems demonstrated that ternary complex formation significantly enhances the solubility of poorly soluble drugs, enabling rational formulation design and reducing experimental development costs.

Overall, the project outcomes provided a unified, predictive, and transferable theoretical framework with interdisciplinary applicability, contributing to the development of more efficient, sustainable, and competitive chemical technologies.

Conducătorul de proiect  dr. hab. Povar Igor

Data: 28.01.2026

LȘ

