

Rezumatul proiectului

15.817.02.02F. Studiarea mecanismelor reacțiilor chimice, structurii electronice și proprietăților fizico-chimice ale unor compuși coordinativi ai metalelor de tranziție și a nanoparticulelor A_2B_6 .

Directorul proiectului: dr. Gorincioi Natalia

Au fost elaborate și implementate tehnologiile de sinteză ale punctelor cuantice coloidale CdSe, $Cd_{1-x}Mn_xSe$, ZnO și $ZnO:Mn^{2+}$. S-au determinat condițiile de sinteză a punctelor cuantice coloidale CdSe fără utilizarea în reacțiile chimice a substanței toxice trioctilfosfina, micșorându-se gradul de toxicitate a nanoparticulelor, ceea ce este important pentru aplicații biomedicale. A fost sintetizat un complex macromolecular nou stabil format dintr-un punct cuantic CdSe, o moleculă de acid oleic și o moleculă de γ -ciclodextrină. Acest complex macromolecular are proprietăți de biomarker, poate fi utilizat pentru testarea cancerului, dizolvă cristalele de colesterol cu concentrații crescute în sânge, ceea ce permite a fi aplicat în medicină pentru tratarea aterosclerozei.

A fost formulată problema combinată a Efectului Renner-Teller (ERT) și Pseudo Efectului Jahn-Teller (PEJT) pentru a explica instabilitatea configurației liniare și distorsionată a sistemelor moleculare lineare în stări degenerate și s-a arătat că contribuția PEJT la îndoirea moleculelor liniare este semnificativ mai mare decât cea a ERT, și, de asemenea, modifică divizarea termenului degenerat. A fost elaborată o metodă nouă de cercetare a influenței PEJT asupra mărimii deformării a compușilor bidimensionali. S-a demonstrat că schimbarea PEJT în procesele redox duce la schimbarea structurii electronice și geometrice a sistemelor moleculare, ceea ce oferă posibilitatea de a manipula cu structura lor geometrică și electronică cu obținerea proprietăților dorite ale sistemelor respective. S-a arătat că în cristalele perovskit de tip ABO_3 polarizarea spontană este declanșată de interacțiunile vibronice locale, și s-a demonstrat că starea multiferroică depinde și de starea de spin (înalt sau scăzut), care în condiții de spin crossover, conduce la un crossover magneto-feroelectric care poate fi manipulată de perturbații externe.

Au fost cercetate transformările fotochimice ale pesticidelor procimidon, iprodion, și insecticidului cipermetrina prin metodele cromatografice LC-MS, GS-MS cu și fără adaos de citratul feric de amoniu și dioxidul de titan pentru a stabili condițiile de accelerare descompunerii acestor substanțe, utilizate în agricultură în UE și în RM. S-a determinat mecanismul proceselor de fotodegradare a pesticidelor studiate și a fost explicat efectul TiO_2 asupra accelerării fototransformării acestora. S-a elucidat rolul nanoparticulelor de TiO_2 în îmbunătățirea proprietăților antioxidante ale compușilor organici cu conținut de acizi fumarici.

Au fost elaborate o serie de procese chimico-catalitice de modificare a suprafeței TiO_2 cu metale (Cu, Ni, W) pentru a lărgi domeniile de aplicare a materialelor de tip compozit pe baza de TiO_2 , care pot fi utilizate ca foto-catalizatori în procesele foto-chimice de destrugere a poluanților greu degradabile în sistemele apoase. A fost elaborat un proces de anodizare pentru obținerea peliculelor poroase cu conținut de Ti pe suprafața Al pentru obținerea peliculei poroase mixte $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{TiO}_2$.

A fost arătat că pentru realizarea interacțiunii ionilor de Fe(III) cu lactoferina umană este esențială prezența ionilor de carbonat care s-a dovedit a fi responsabili de conferirea stabilității complexului lactoferină umană-Fe(III). De asemenea, a fost demonstrat faptul că pH-ul are o influență directă asupra conformației moleculei proteice de lactoferină. S-a arătat că în soluție apoasă are loc redefinirea parțială a structurilor secundare în molecula de lactoferină - parte componentă a lactoferinei, ceea ce conduce la modificarea proprietăților moleculare ale lactoferinei. Pe baza analizei detaliate a activității antioxidante a α -tocoferolului și omologiei acestuia, a fost elaborat un model cinetic care include două căi ale reacțiilor caracteristice pentru oxidarea peroxidică a lipidelor (OPL) inclusiv calea fermentativă și nefermentativă.

Au fost sintetizați și studiați complecșii noi mono- și bimetalici ai Cu(II) și Ru pentru aplicarea în calitate de catalizatori și coloranți în sisteme fotoelectrocatalitice de descompunere a apei cu obținerea hidrogenului molecular. A fost propus mecanismul și etapele intermediare de formare a hidrogenului și oxigenului gazos din apă în prezența fotocatalizatorilor obținuți RuBiFen și $[\text{BiCuBpi}]2\text{H}_2\text{O}$.

A fost asigurat suportul pentru cercetările științifice pe proiecte instituționale cu spectrometrul RMN BRUKER Avance NMR 400. Au fost înregistrate 5259 de spectre D (^1H , ^{13}C , DEPT) și 2D homo- ($^1\text{H}/^1\text{H}$ COSY, $^1\text{H}/^1\text{H}$ NOESY) și heteronucleare ($^1\text{H}/^{13}\text{C}$ HSQC and $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ HMBC, $^1\text{H}/^{15}\text{N}$ HMQC and $^1\text{H}/^{15}\text{N}$ HMBC) pentru 2116 mostre de compuși sintetizați în cadrul Institutului de Chimie sau izolați din surse naturale.