

# Raportul de activitate pentru anul 2014 a membrului titular Gheorghe Duca

## I. Titlul, numele și prenumele academician Gheorghe Duca

## II. Activitatea științifică

Conducător al programului de stat, proiectelor din cadrul programelor de stat, proiectelor de cercetări proiectelor bilaterale, internaționale:

1. Studiul structurii geometrice și electronice ale noilor compuși coordinativi și nanomateriale, dinamicii spinilor și proceselor redox (11.817.08.22F)
2. Designul substanțelor chimice și dirijarea arhitecturii materialelor pentru diverse aplicații. Proiect din cadrul programului de stat.
3. De la compuși naturali la analogiile lor și spre evaluarea preclinică a noilor compuși cu proprietăți antituberculoase (14.518.04.08A)
4. Studiul proceselor ecochimice și elaborarea tehnologiilor de tratare a mediului ambiant proiectelor bilaterale, internaționale- proiect instit.
5. Implementarea tehnologiei de tratare a deșeurilor medicale infecțioase utilizând sterilizatorul STERISHRED 250 (14.824.02.198T). Conducător al proiectului de transfer tehnologic.

## III. Rezultatele științifice principale

Monografii în ediții internaționale	1
Monografii în alte ediții din străinătate	1
Articole în reviste cu factor de impact mai mare de 1	1
Articole în reviste cu factor de impact 0,1-1,0	0
Articole în reviste cu factor de impact 0,01-0,1	0
Articole în alte reviste editate în străinătate	4
Monografii editate în țară	0
Articole în reviste naționale, categoria A	0
Articole în reviste naționale, categoria B	1
Articole în reviste naționale, categoria C	1
Articole în culegeri	8
Participarea la foruri științifice	9
<i>Activitatea inovativă</i>	
Numărul de cereri prezentate	1
Numărul de hotărâri pozitive obținute	0
Numărul de brevete obținute	3
Numărul de brevete implementate	0

## IV. Rezultatele științifice obținute în anul de referință ( până la 100 de cuvinte)

A fost demonstrată importanța calculelor cuanto-chimice (inclusiv DFT) pentru elaborarea mecanismelor de fototransformare a fungicidelor importante pentru industria vitivinicolă a Moldovei, la dezvoltarea teoriei generale ale distorsiunilor structurale ale moleculelor liniare coordonate în complexii metalelor de tip 3d și care se datorează pseudo efectului Jahn-Teller indus de donații retroactive HOMO-LUMO, precum și de transferuri de sarcină.

Au fost elaborate procedee noi de sinteză a 19 complexi ai Fe, Ni, Zn, Co de tip ferocenporfirinei, imidazolului, care au potențiale proprietăți de coloranți în celule solare de tip Gratsel (max cu voloarea TOF  $\geq 600 \text{ s}^{-1}$ ) și ca sorbenți de tip MOFs pentru molecule mici cu valori ale suprafeței specifice în limitele 4.6÷41.8 m<sup>2</sup>/g. Carboxi-clusterii heteronucleari

cu fragmentele {Dy <sub>2</sub> -Ba} și tetramerul {Mn <sub>2</sub> -Ca <sub>2</sub> } fac parte din lista claselor SMM de tip SCM (material spintronic) și SIM.
S-a confirmat perspectiva utilizării microorganismelor de tip microalge pentru obținerea nanoparticulelor metalelor și metaloizilor.
A fost efectuat studiul activității bacteriostatice și al toxicității pentru doi compuși β-carbolinici pe tulpinile sensibile și rezistente <i>Mycobacterium tuberculosis</i> și pe animalele de laborator. Rezultatele obținute pot fi aplicate în dezvoltarea preclinică și clinică a noilor compuși cu activitate antituberculoasă. Rezultatele cercetării compușilor complecși cu ciclodextrine pot fi aplicate atât în dezvoltarea noilor remedii medicamentoase, cât și în producerea noilor materiale și structuri nanodimensionale.
A fost evaluată situației în domeniul gestionării deșeurilor medicale și obținerea avizurilor necesare de la instanțele de resort. A fost elaborat proiectul și creat punctul autorizat de tratare a deșeurilor medicale infecțioase.
În rezultatul cercetărilor s-a constatat că la tratarea soluțiilor, care conțin amestec de coloranți textili și surfactanți, prin aplicarea metodelor de coagulare și adsorbție, electroflotare și adsorbție, electroflotocoagulare și adsorbție, epurarea are loc pina la normele sanitare. Cea mai eficientă este metoda de electroflotocoagulare și adsorbție pe cărbunii activi. S-a stabilit, că soluțiile, care conțin amestec de coloranți textili, surfactanți și polialcoolii pot fi epurate numai prin combinarea metodelor de coagulare sau electroflotocoagulare, oxidare și adsorbție pe cărbunii activi.
A fost elaborat procedeul pentru obținerea sedimentelor vitaminizante lichide cu vitamina B <sub>12</sub> cu aplicarea diatomitei ca sorbent natural, precum și tehnologia pentru tratarea anaerobă a deșeurilor organice pentru obținerea sedimentelor vitaminizante pentru hrana animalelor. A fost elaborat bioreactorul combinat pentru producerea adaosului nutritiv vitaminizat. Au fost elaborate și testate în condiții de laborator procedeele și reactoarele pentru tratarea apelor reziduale și naturale cu conținut de diferite forme a hidrogenului sulfurat, precum și coloranți orhganici.
A fost sintetizat actinometrul chimic, determinată intensitatea luminei pentru lampa DRT-400 și Simulatorul Solar; s-a calculat randamentul cuantic pentru tiouree la diferite surse de iradiere. S-a determinat constanta efectivă a vitezei de reacție a TU, ordinile de reacție, relația pentru viteză și timpul de înjumătățire. S-a constatat că la fotoliza indusă, viteza reacției de oxidare fotochimică crește o dată cu creșterea concentrației inițiale de TU și mai efectiv o dată cu creșterea concentrației de H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> . S-a elucidat rolul negativ al TU în procese de autopurificare a sistemelor acvaticice.

## V. Activitatea didactică

Numărul cursurilor ținute	5
Numărul total de persoane la care a fost conducător științific al tezei de doctorat	3
Numărul persoanelor la care a fost conducător științific și care au susținut teza	0
Numărul manualelor, materialelor didactice editate	0

## VI. Activitatea managerială

1. Membru al bordului de administrare al Centrului Comun de Cercetări (Joint Research Centre) al Uniunii Europene.
2. Membru al bordului de administrare al Inițiativei de Programare Comună „Provocările în domeniul apelor într-o lume în continuă schimbare”

## VII. Informații generale

1. Medalia Comisiei Naționale a Republicii Moldova pentru UNESCO
2. Medalia Mihai Eminescu. Liga Culturală Română

### **VIII. Alte activități**

1. Raport: Роль науки и инновации в устойчивом развитии Республики Молдова. Universitatea de Stat din Comrat. 3 octombrie 2014
2. Participarea la Inițiativa Centrului Comun de Cercetare: Suport științific pentru Strategia Dunării. 25 iunie 2014, Viena, Austria
3. Raport: Towards a Knowledge-Based Society in the Republic of Moldova. Conferința internațională – Transition to a new society. Academia de Științe și Arte din Montenegro. 21-22 Martie 2014.
4. Raport: Consolidarea eforturilor sistemului de cercetare - dezvoltare din Republica Moldova pentru integrarea în Spațiul European de Cercetare. Forul Moldo-Român „Promovarea participării comune la Programele Europene în domeniul științei și educației”. 21 februarie 2014

**Academician**

**Gheorghe Duca**

## Lista publicațiilor ale academicianului Gheorghe Duca publicate în 2014

### Cărți

1. Management of Water Quality in Moldova / ed. by Gheorghe Duca. – Dordrecht : Springer, 2014. – 241 p. – (Water Science and Technology Library ; Vol. 69). – ISBN ISBN 978-3-319-02707-4. – <http://link.springer.com/book/10.1007%2F978-3-319-02708-1>

### Articole

1. Application of Bioactive Substances in the Biogas Technology / Victor Covaliov, Joseph Francis Malina, Gheorghe Duca, Olga Covaliova, Valentin Bobeica // Management of Water Quality in Moldova. – Dordrecht, 2014. – Chapter 12. – P. 225-241. – Bibliogr.: 15 tit – [http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-02708-1\\_12](http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-02708-1_12)
2. Biochemical changes in cyanobacteria during the synthesis of silver nanoparticles / L. Cepoi, L. Rudi, T. Chiriac, A. Valuta, I. Zinicovscaia, Gh. Duca, E. Kirkesali, M. Frontasyeva, O. Culicov, S. Pavlov, I. Bobrikov // Canadian Journal of Microbiology. – 2014, Published on the web 14 October 2014. – doi:10.1139/cjm-2014-0450. – <http://www.nrcresearchpress.com/doi/abs/10.1139/cjm-2014-0450?src=recsys&journalCode=cjm#.VIIU3tKsW4R>
3. Boldescu, Veaceslav. Role of Cyclodextrins in new Antimycobacterial Formulations / Veaceslav Boldescu, Fliur Macaev, Gheorghe Duca // Chemistry Journal of Moldova. General, Industrial and Ecological Chemistry. – 2014. – Vol. 9, Nr 1. – P. 8-13. – Bibliogr.: 33 tit. – [http://www.cjm.asm.md/sites/default/files/article\\_files/Boldescu%208-13.pdf](http://www.cjm.asm.md/sites/default/files/article_files/Boldescu%208-13.pdf)
4. Chemical Composition of Right Bank Tributaries of Nistru River and Their General Impact / V. Gladchi, N. Goreaceva, Gh. Duca, E. Bunduchi, R. Borodaev, O. Șurîghina, A. Lis // Management of Water Quality in Moldova. – Dordrecht, 2014. – Chapter 6. – P. 81-96. – Bibliogr.: 19 tit. – [http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-02708-1\\_6](http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-02708-1_6)
5. Duca, Gheorghe. Allocation at the International Scientific Symposium „Conservation of Plant Diversity” / Gheorghe Duca // Journal of Botany = Revista Botanică. – 2014. – Vol. 6, Nr 1. – P. 5-7. – [http://www.gradinobotanica.asm.md/sites/default/files/revista\\_botanica%20%201-2014\\_Final%20final.pdf](http://www.gradinobotanica.asm.md/sites/default/files/revista_botanica%20%201-2014_Final%20final.pdf)
6. Duca, Gheorghe. Integrated Water Management in the Republic of Moldova / Gheorghe Duca, Oleg Bogdevich, Diana Porubin // Management of Water Quality in Moldova. – Dordrecht, 2014. – Chapter 1. – P. 3-19. – Bibliogr.: 13 tit – [http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-02708-1\\_1](http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-02708-1_1)
7. Duca, Gheorghe. Oportunități pentru dezvoltare: Institutul de Chimie la 55 de ani / Gheorghe Duca, Tudor Lupașcu, Aculina Arîcu // Akademos. – 2014. – Nr 2. – P. 23-28. [http://www.akademos.asm.md/files/Akademos\\_2\\_2014\\_PDF.pdf](http://www.akademos.asm.md/files/Akademos_2_2014_PDF.pdf)
8. Duca, Gheorghe. Știință performantă în serviciul societății / Gheorghe Duca // Akademos. – 2014. – Nr 2. – P. 3-6. – [http://www.akademos.asm.md/files/Akademos\\_2\\_2014\\_PDF.pdf](http://www.akademos.asm.md/files/Akademos_2_2014_PDF.pdf)
9. Electrochemical Solar Cells Based on Pigments / Constantin Turta, Gheorghe Duca, Ion Marin, Dumitru Sirbu // Management of Water Quality in Moldova. – Dordrecht, 2014. – Chapter 3. – P. 35-59. – Bibliogr.: 61 tit – [http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-02708-1\\_3](http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-02708-1_3)
10. Study of Chromium Adsorption onto Activated Carbon / Inga Zinicovscaia, Tatiana Mitina, Tudor Lupascu, Gheorghe Duca, Marina V. Frontasyeva, Otilia Ana Culicov // Water, Air, & Soil Pollution: An International Journal of Environmental Pollution. – 2014. – Vol.

225:1889. – DOI: 10.1007/s11270-014-1889-x ;  
<http://link.springer.com/article/10.1007/s11270-014-1889-x>

11. Textile Waste Water Treatment of Dyes by Combining the Coagulation and Catalytic Oxidation with Hydrogen Peroxide Methods / M. Gonta, Gh. Duca, V. Matveevici, V. Iambartev, L. Mocanu // Management of Water Quality in Moldova. – Dordrecht, 2014. – Chapter 10. – P. 197-208. – Bibliogr.: 7 tit. – [http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-02708-1\\_10](http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-02708-1_10)
12. The Diminishing of the Content of Textile Direct Dyes and Auxiliary Compounds During their Catalytic Oxidation / Maria Gonta, Gheorghe Duca, Vera Matveevici, Larisa Mocanu // Chemistry Journal of Moldova. General, Industrial and Ecological Chemistry. – 2014. – Vol. 9, Nr 1. – P. 85-92. – Bibliogr.: 10 tit. – [http://www.cjm.asm.md/sites/default/files/article\\_files/Gonta%2085-92.pdf](http://www.cjm.asm.md/sites/default/files/article_files/Gonta%2085-92.pdf)
13. MACAEV, F.; BOLDESCU, V.; POGREBNOI, S.; DUCA, GH. Chalcone scaffold based antimycobacterial agents. In: *Medicinal Chemistry*. 2014, 4 (5), 487-493. ISSN: 2161-0444.
14. ANGHEL, L.; DUCA, Gh. A review of the biogenesis of iron nanoparticles using microorganisms and their applications. In: *Chem. J. Moldova* 2013, 8 (2), 32-41. ISSN: 1857-1727 (n-a fost inclus în raportul din a. 2013)
15. MACAEV, F.; BOLDESCU V.; DUCA GH. Noi oportunități în dezvoltarea remediilor antituberculoase. In: *Academos*. 2014, 1 (32), 89-91. ISSN: 1857-0461

#### Teze la conferințe

1. Anghel, Lilia. A Study of conformational dynamics of the human lactoferrin protein based on molecular dynamics simulations / Lilia Anghel, Raul Victor Erhan, Gheorghe Duca // The International Conference dedicated to the 55<sup>th</sup> anniversary from the foundation of the Institute of Chemistry of the Academy of Sciences of Moldova, 28-30 May 2014 : abstr. of communic. – Ch., 2014. – P. 51. – <http://chem.asm.md/files/u1/PDF-Abstract.pdf>
2. Boldescu, Veaceslav. Role of cyclodextrins in new anti-mycobacterial compounds / Veaceslav Boldescu, Fliur Macaev, Gheorghe Duca // The International Conference dedicated to the 55<sup>th</sup> anniversary from the foundation of the Institute of Chemistry of the Academy of Sciences of Moldova, 28-30 May 2014 : abstr. of communic. – Ch., 2014. – P. 31. – <http://chem.asm.md/files/u1/PDF-Abstract.pdf>
3. Duca, Gheorghe. Factors, affecting the process of dealkalization of industrial glasses with fluorine- and chlorine-containing reagents / Gheorghe Duca, Vasilii Sharagov, Galina Curicheru // The International Conference dedicated to the 55<sup>th</sup> anniversary from the foundation of the Institute of Chemistry of the Academy of Sciences of Moldova, 28-30 May 2014 : abstr. of communic. – Ch., 2014. – P. 39. – <http://chem.asm.md/files/u1/PDF-Abstract.pdf>
4. Duca, Gheorghe. Perspectives of Development of Chemistry in the Republic of Moldova / Gheorghe Duca // The International Conference dedicated to the 55<sup>th</sup> anniversary from the foundation of the Institute of Chemistry of the Academy of Sciences of Moldova, 28-30 May 2014 : abstr. of communic. – Ch., 2014. – P. 5-6. – <http://chem.asm.md/files/u1/PDF-Abstract.pdf>
5. Free radicals of natural water and their influence in chemical transformation of dyes / Viorica Gladchi, Elena Bunduchi, Nelli Goreaceva, Gheorghe Duca, Nadejda Iovu // The International Conference dedicated to the 55<sup>th</sup> anniversary from the foundation of the Institute of Chemistry of the Academy of Sciences of Moldova, 28-30 May 2014 : abstr. of communic. – Ch., 2014. – P. 156. – <http://chem.asm.md/files/u1/PDF-Abstract.pdf>

6. Polymeric preparations with active biological properties based on nitrofurans derivatives / Vitalie Filip, Raisa Popusoi, Gheorghe Duca, Viorel Prisacari, Stefan Robu // The International Conference dedicated to the 55<sup>th</sup> anniversary from the foundation of the Institute of Chemistry of the Academy of Sciences of Moldova, 28-30 May 2014 : abstr. of communic. – Ch., 2014. – P. 200. – <http://chem.asm.md/files/u1/PDF-Abstract.pdf>
7. Quercetin extraction optimization and DNA-functionalized quercetin formation / Maria Gonța, Gheorghe Duca, Ștefan Robu, Anna Sefer, Larisa Mocanu, Alexandru Gonța, Aurelia Meghea, Ileana Rău // The International Conference dedicated to the 55<sup>th</sup> anniversary from the foundation of the Institute of Chemistry of the Academy of Sciences of Moldova, 28-30 May 2014 : abstr. of communic. – Ch., 2014. – P. 157. – <http://chem.asm.md/files/u1/PDF-Abstract.pdf>
8. Redox Transformation Processes of the Reactive Blue Dye / Elena Bunduchi, Viorica Gladchi, Gheorghe Duca, Nelly Goreaceva, Maria Lutenco // The International Conference dedicated to the 55<sup>th</sup> anniversary from the foundation of the Institute of Chemistry of the Academy of Sciences of Moldova, 28-30 May 2014 : abstr. of communic. – Ch., 2014. – P. 146. – <http://chem.asm.md/files/u1/PDF-Abstract.pdf>
9. Spirulina platensis as Biosorbent of Zinc in Water / Inga Zinicovscaia, Gheorghe Duca, Valeriu Rudic, Liliana Cepoi, Tatiana Chiriac, Ludmila Rudi, Marina V. Frontasyeva, Sergey S. Pavlov, Svetlana F. Gundorina // The International Conference dedicated to the 55<sup>th</sup> anniversary from the foundation of the Institute of Chemistry of the Academy of Sciences of Moldova, 28-30 May 2014 : abstr. of communic. – Ch., 2014. – P. 191-192. – Bibliogr.: 7 tit. – <http://chem.asm.md/files/u1/PDF-Abstract.pdf>
10. ZINICOVSCAIA, I.; DUCA, GH.; CEPOI, L.; CHIRIAC, T.; RUDI, L.; MITINA, T.; FRONTASYEVA, M.; CULICOV, O.; KIRKESALI, E.; PAVLOV, S.; GUNDORINA, S.; AKSHINTSEV. Biosorption of zinc, chromium and nickel from wastewater by microalgae spirulina plantensis. In: *1<sup>st</sup> EuCheMS Congress on Green and Sustainable Chemistry*. Budapest, Hungary. 2014, p. 44.

### Brevete de invenții

1. Procedeu de tratare a distilatului alcoolic și dispozitiv de realizare a acestuia : br. inv. 4283 MD : Int. Cl. C12H 1/00, C12H 1/12, A23L 3/32, C07C 29/141, C25B 3/04, C25B 9/06, C25B 9/08, C25B 11/03, C25B 11/06, C25B 11/08 / Victor Covaliov, Boris Găină, Olga Covaliova, Gheorghe Duca, Mihail Stîțuic, Vladimir Nenno, Rodica Sturza ; solicitantul Univ. de Stat din Moldova. – Nr depozit. a 2012 0007 ; data depozit. 2012.01.06 ; data publ. 2014.04.30, BOPI Nr 4/2014.
2. Procedeu de purificare a biohidrogenului de impurități gazoase : br. inv. 784 MD : Int. Cl. B01D 53/14, B01D 53/52, B01D 53/62, C01G 3/14, C07C 215/08 / Victor Covaliov, Olga Covaliova, Valentin Bobeică, Gheorghe Duca, Vladimir Nenno ; solicitantul Univ. de Stat din Moldova. – Nr depozit. s 2013 0199 ; data depozit. 2012.03.29 ; data publ. 2014.06.30, BOPI Nr 6/2014.
3. Procedeu de obținere a nanocompozitelor pe bază de nanotuburi din dioxid de titan și instalație pentru realizarea acestuia : br. inv. 4294 MD : B82B 3/00, C01G 23/047, B01J 21/06, H01L 21/00 / Victor Covaliov, Boris Găină, Olga Covaliova, Gheorghe Duca, Mihail Stîțuic, Vladimir Nenno, Rodica Sturza ; solicitantul Univ. de Stat din Moldova. – Nr depozit. a 2013 0007 ; data depozit. 2013.02.06 ; data publ. 2014.07.31, BOPI Nr 7/2014.