

## RAPORT ȘTIINȚIFIC

privind implementarea proiectului PN-III-P1-1.1-TE-2021-0153,

contract nr. 16/2022 Etapa 2

### • Descrierea științifică cu punerea în evidență a rezultatelor etapei anuale și gradul de realizare a obiectivelor;

Conform programului experimental prevăzut în acest proiect, obiectivele principale și activitățile de cercetare aferente acestei etape pot fi redată unitar astfel:

Studiu privind separarea acizilor organici (acid adipic, acid muconic) utilizând lichide ionice

Activitățile prevăzute **au fost realizate în totalitate** și au inclus studiile dedicate:

- Studiu privind separarea acidului adipic prin extracție utilizând lichide ionice. Modelare și optimizare.
- Studiu privind separarea acidului muconic prin extracție utilizând lichide ionice. Modelare și optimizare.
- Studiu privind separarea acidului adipic prin pertracție utilizând lichide ionice. Modelare și optimizare.
- Studiu privind separarea acidului muconic prin pertracție utilizând lichide ionice. Modelare și optimizare.
- Pe baza rezultatelor experimentale, optimizarea procesului de pertracție a vitaminei C, utilizând fie regresia liniară statistică clasică fie rețelele neuronale artificiale (ANN).

Rezultatele obținute au confirmat că lichidele ionice pot fi utilizate pentru separarea acizilor carboxilici din soluții apoase. Extracția reprezintă operația de separare a componentelor unui amestec lichid sau solid pe baza diferenței lor de solubilitate în unul sau mai mulți solvenți. Dacă extracția are loc numai prin fenomenele fizice de solubilizare și difuzie, extracția este fizică, iar dacă în timpul procesului se formează un complex între extractant și acidul carboxilic, extracția este reactivă. Extracția reactivă a fost dezvoltată în scopul obținerii unei separări eficiente și necesită prezența unui extractant care poate fi dizolvat în faza organică, dar produsul reacției dintre solut și extractant este esențial să fie hidrofob. Eficiența extracției reactive depinde de caracteristicile fizico-chimice ale solutului: hidrofobitate și proprietăți acido-bazice; de proprietățile extractantului: reactivitate, capacitatea de a forma compuși hidrofobi cu solutul, și de condițiile de separare: pH, intensitatea amestecării, concentrația solutului și a extractantului, etc.

La nivel industrial, pentru separarea produselor de biosinteza se folosesc metode care presupun o succesiune de etape laborioase cu consum semnificativ de utilități. Dificultățile tehnologice ale etapelor de separare-purificare sunt amplificate de necesitatea realizării fiecărei etape într-un timp foarte scurt datorită stabilității lor scăzute. Extracția reactivă folosind lichide ionice poate reprezenta o alternativă eficientă pentru separarea acizilor adipic și muconic. Pe lângă faptul că are un randament ridicat, această abordare iese în evidență față de concurență prin faptul că este simplă și rentabilă. Procesele de extracție reactivă și pertracție au fost modelate și optimizate folosind un algoritm de rețele neuronale artificiale (ANNs) și evoluție diferențială (DE).