

REZUMAT

cu privire la rezultatele cercetărilor științifice, obținute în cadrul proiectului
16.80013.16.03.03/it "Materiale anorganice / organice hibride noi bazate pe ligandul triimidazol
activ optoelectronic"

Conducătorul proiectului Dr. FONARI Marina

În cadrul acestui proiect sa continuat colaborarea internațională strânsă cu echipele din cadrul Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari del CNR, Dipartimento di Chimica și Università degli Studi di Milano, cu scopul de a obține o gamă largă de compuși coordinativi noi cu proprietăți luminescente pronunțate.

În cadrul proiectului, echipa din R. Moldova a elaborat metode de sinteză a polimerilor coordinativi bi- și tridimensionali (2D și 3D) al Cu(I), $[\text{CuI}(\text{L}_1)]_n$ și $\{[(\text{Cu})_3(\text{L}_1)_4](\text{I})_3\}_n$, cu luminoforul $\text{L}_1 = \text{triimidazo}[1,2-a:1',2'-c:1'',2''-e][1,3,5]\text{-triazin}$, care prezintă emisii puternice induse la cristalizare. De asemenea s-a elaborat cea mai favorabilă metodă de sinteză a polimerului 3D al Cu(I) cu compoziția $\{[(\text{Cu})_3(\text{L}_1)_4](\text{I})_3\}_n$. S-a observat că creșterea randamentului și purității componente principale au fost obținute în prezența 4,4'-bipiridinei ca moleculă templat.

Pentru extinderea numărului de compuși coordinativi cu utilizarea luminoforilor noi, au fost efectuate sinteze, în diferite condiții, cu utilizarea diferitor săruri de metale ca reactanți. Sintezele au fost realizate cu utilizarea nitraților, tetrafluoroboraților, perchloratilor și acetaților de Zn(II), Cd(II) și Co(II), precum și a nitraților și acetaților de Cu(II). Sintezele au fost efectuate prin metoda hidrotermală și co-cristalizarea soluției în condiții blânde, realizată cu utilizarea diferitor solvenți, cu timp diferit de încălzire și modificarea rapoartelor componentelor reacției. În general, diversitatea structurală a compușilor obținuți include compuși de incluziune, complecși discreți mono-, bi- și trinucleari, cât și polimeri coordinativi mono-, bi- și tridimensionali cu un raport variabil de metal:ligand organic:anion:solvent. Pentru toți compușii obținuți au fost determinate structurile lor cristaline. De asemenea, au fost identificați polimorfi, izomorfi și compuși izostructurali printre compușii sintetizați. Comparativ cu sistemul Cu(I)- L_1 luminofor care au dus la formarea polimerilor coordinativi 2D și 3D cu un singur luminofor din cei patru încercați la moment, sărurile de Cu(II) au format doar polimeri coordinativi 1D cu doi liganzi luminofori.

S-a arătat că în compusul trinuclear Zn(II), luminoforul L_1 organizează H-agregate asemănătoare cu cele din faza pură, ceea ce permite identificarea clară a efectului extrinsec al metalelor grele (Zn) asupra fotofizicii cromoforului. În special, creșterea cuplării spin-orbital se manifestă în intensificarea fosforescenței ultra-lungă la temperatura camerei în raport cu fluorescența, datorită unei traversări S-T^{H} mai ușoare între sisteme.

Compușii rezultați demonstrează eficacitatea fosforilor selectați din punct de vedere al abordării principiului ingineriei cristalelor, precum liganzii coordonează mono-, bi- și tridentat, confirmând astfel posibilitatea designului dirijat și monitorizarea structurii pentru obținerea proprietăților dorite cum ar fi randamentul cuantic ridicat și fosforescență îndelungată la temperatura camerei.

Succesul proiectului a justificat analiza multilaterală de alegere a luminoforilor ce au dus la obținerea materialelor metal-organice de perspectivă cu proprietăți optice pronunțate și a arătat că salvarea interacțiunilor de tip $\pi\text{-}\pi$ puternice din rețeaua cristalină responsabile de fenomenul de emisie indusă de agregarea luminoforilor duc uneori și la intensificarea efectului de fosforescență persistent la temperatura camerei.

Rezultatele obținute în acest proiect au fost desiminate prin includerea lor în Baza de Date Structurale Cambridge, prin participarea la diferite forumuri științifice naționale și internaționale, precum și publicarea lor în articole științifice de specialitate.