

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2025

Cifra proiectului 25.80012.5007.87SE

Denumirea Proiectului Materiale hibride anorganice-organice Co/Co-Ln: de la clustere discrete la cadre extinse

Rezumat în limba română pentru anul 2025 (august-decembrie) 1 pagină

O cerere tot mai mare pentru materiale mai specifice și mai eficiente în zilele noastre implică crearea și dezvoltarea de noi specii complexe care vizează proprietăți specifice și sunt unice și utile pentru multe aplicații care revoluționează stilul nostru de viață. În acest context, polimerii de coordinare bazați pe clustere de metal (CCP-uri), care sunt proiectați prin implementarea clusterelor polinucleare versatile conectate prin linkeri organici, au atras o atenție deosebită și au oferit un impuls substanțial pentru dezvoltarea de noi materiale hibride anorganice-organice cu cadre și proprietăți unice, cum ar fi magnetismul, adsorbția/stocarea de gaze, cataliză și luminiscentă. Proiectul de cercetare „Materiale hibride anorganice-organice Co/Co-Ln: de la clustere discrete la cadre extinse” își propune să dezvolte strategii sintetice inovatoare pentru prepararea de noi materiale hibride care conțin Co/Co-Ln prin legarea clusterelor mai mici homo- și heterometalice de ioni Co și Ln sau oricare dintre combinațiile lor potrivite în sisteme folosind linkeri convenabili.

Pentru a atinge obiectivele proiectului în 2025 (pe parcursul august-decembrie) toate activitățile au fost desfășurate în conformitate cu descrierile științifice și tehnice ale proiectului. Pentru a proiecta și elabora noi materiale hibride multifuncționale bazate pe clustere de Co(II)/Co(III)/Co(II,III) am dezvoltat proceduri sintetice pentru obținerea a 8 compușilor coordinativi, din care 3 compuși este sub forma clustere, și 5 reprezintă polimerii coordinativi multidimensionali. De asemenea, au fost identificate condițiile optime de obținere a materialelor aplicând chimia soluțiilor și tehnici noi de obținere ca sinteza hidro(solvo)termală și ultrasonificarea. Structura cristalină a materialelor a fost obținută cu ajutorul difracției razelor X (metode cu difracție monocristalelor și a pulberilor). Analiza distribuției interacțiunilor intra- și intermoleculare, și calcularea energetică a acestor arhitecturi au fost efectuate folosind program Crystal Explorer. Proprietățile lor fizico-chimice au fost caracterizate prin spectroscopia IR, spectrometria de masă și analiza termogravimetrică. Pentru a înțelege interacțiunile magnetice fundamentale complexe din aceste sisteme proprietățile lor magnetice au fost studiate folosind măsurători de susceptibilitate la temperatură variabilă în Germania. Proprietățile lor au fost modelate prin aplicarea chimiei teoretice și computaționale, folosind simulări ab initio (MOLCAS) și modelare magnetochimică utilizând pachetul CONDON. Interacțiunilor de schimb magnetic între centrii magnetici și energia de anizotropie magnetică a clusterelor magnetice studiate au fost efectuate folosind pachetul TB2J python și software-ul Siesta. Aceste rezultate ne extind înțelegerea referitor la procesele sintetice, a structurilor geometrice și electronice, precum și a proprietăților spectroscopice și magnetice ale clusterelor și polimerilor coordinativi bazate pe ioni Co(II) și Co(III). În 2025, în cadrul proiectului, au fost publicate unii teza în culegerea de lucrări prezentate la Congresul Internațional „Medicine, molecular and environmental sciences 2025”, noiembrie 10-15, 2025, Chișinău, Moldova și a fost pregătit un articol științific pentru a depune în revistă științifică de specialitate cu factor de impact.

Rezumat în limba engleză pentru anul 2025 (august-decembrie) 1 pagină

The growing demand for more specific and efficient materials today involves the creation and development of new complex species that target specific properties and are unique and useful for many applications that are transforming our lifestyles. Metal cluster-based coordination polymers (CCPs), which are designed by implementing versatile polynuclear clusters connected by organic linkers, have attracted particular attention in this context, and provided a substantial impulse for developing new inorganic-organic hybrid materials with unique structure and properties, such as magnetism, gas adsorption/storage, catalysis, and luminescence. The research project "Co/Co-Ln inorganic-organic hybrid materials: from discrete clusters to extended frameworks" aims to develop innovative synthetic strategies for the preparation of new hybrid materials containing Co/Co-Ln by linking smaller homo- and heterometallic clusters of Co and Ln ions, or any of their suitable combinations, using convenient linkers.

In 2025 (August-December), all activities were carried out in accordance with the scientific and technical descriptions of the project. In order to design and develop new multifunctional hybrid materials based on Co(II)/Co(III)/Co(II,III) clusters, synthetic procedures were developed for obtaining eight coordination compounds, of which three compounds are clusters and five represent coordination polymers. The optimal conditions for obtaining the materials were identified through the application of solution chemistry and novel techniques, including hydro(solvo)thermal synthesis and ultrasonication. The crystal structures of the materials were obtained using X-ray diffraction (single crystal and powder diffraction methods). The analysis of the distribution of intra- and intermolecular interactions, as well as the energy calculation of these architectures, were performed using Crystal Explorer software. The properties of the samples were additionally characterized by infrared spectroscopy, mass spectrometry (ESI-MS), and thermogravimetric analysis. In order to comprehend the complex fundamental magnetic interactions, present within these systems, a study was conducted on their magnetic properties by utilizing variable temperature susceptibility measurements in Germany. The properties of these molecules were modelled through the application of theoretical and computational chemistry, using ab initio simulations (MOLCAS) and magnetochemical modelling employing the CONDON package. The magnetic exchange interactions between the magnetic centers and the magnetic anisotropy energy of the studied magnetic clusters were also performed using the TB2J Python package and Siesta software. The results obtained extend the understanding of the synthetic processes, geometric and electronic structures, as well as the spectroscopic and magnetic properties of clusters and coordination polymers based on Co(II) and Co(III) ions. In 2025, as part of the project, an abstract was published in the Book of Abstracts presented at the International Congress "MEDICINE, MOLECULAR AND ENVIRONMENTAL SCIENCES 2025", November 10-15, 2025, Chisinau, R. Moldova, and a scientific article was prepared for submission to a specialized scientific journal with impact factor.

Conducătorul de proiect / BACA Svetlana, dr.

Data: 05.12.2025

LŞ

