

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2025

Cifra proiectului: **25.80012.5007.74SE**

Denumirea Proiectului: **Sinteza, analiza structurală și designul polimerilor coordinativi ai zincului(II) și cadmiului(II) cu proprietăți fotoluminescente (PCZn&CdFL)**

Rezumat în limba română pentru anul 2025

Au fost adaptate condițiile optime și obținuți doi polimeri coordinativi ai zincului(II) în baza 2,6-diacetilpiridin-bis(izonicotinoilhidrazoni) (H_2L). A fost stabilită compoziția chimică, structura moleculară și cristalină a polimerilor obținuți cu diverse metode fizico-chimice, inclusiv analiza elementală, spectroscopia IR, difracția razelor X pe monocristal și pe pulbere.

Au fost înregistrate spectrele de fotoluminescență și studiate proprietățile fotoluminescente ale agentului de coordonare și ale polimerilor coordinativi ai zincului (II). Ca rezultat, s-a stabilit, că polimerul coordinativ $[Zn_2L_2]_n$ emite fluorescență verde în intervalul 460-620 nm cu o intensitate de 10 ori mai înaltă decât cea a agentului de coordonare H_2L , ca urmare a formării legăturilor de hidrogen, precum și apariția interacțiunilor de tip $\pi \cdots \pi$ în compus. Apariția interacțiunilor fine de tip $\pi \cdots \pi$ în polimerul coordinativ $[Zn_2(L)_2]_n$ a fost confirmată în urma determinării structurii compusului prin studiul cu raze X pe monocristal. Rolul esențial în intensificarea proprietăților fluorescente ale polimerului coordinativ în comparație cu agentul de coordonare H_2L , este atribuit ionilor de Zn(II), care în urma complexării, stimulează esențial emisiile fluorescente ale ligandului luminozor.

Rezultatele acestor cercetări vor contribui la diversificarea familiei polimerilor coordinativi ai Zn(II) cu baze Schiff, ce conțin izoniazida și 2,6-diacetilpiridina, cu o varietate structurală deosebită și proprietăți fotoluminescente. Indiferent de mecanismul de luminescență care are loc în aceste sisteme, acești compuși sunt de interes pentru aplicații în calitate de materiale fluorescente verzi, precum materialele emițătoare de lumină (*de exemplu*, dioda luminescentă sau LED-uri).

Rezumat în limba engleză pentru anul 2025

The optimal conditions were adapted and two zinc(II) coordinating polymers based on 2,6-diacetylpyridine-bis(isonicotinoylhydrazone) (H_2L) were obtained. The chemical composition, as well as the molecular and crystalline structure of the synthesized polymers, were established using various physico-chemical methods, including elemental analysis, IR spectroscopy, single-crystal and powder X-ray diffraction.

Photoluminescence spectra were recorded, and the photoluminescent properties of the coordination agent and the coordination polymers of zinc(II) were investigated. As a result, it was established that the coordination polymer $[Zn_2L_2]_n$ emits green fluorescence in the 460-620 nm range, with an intensity 10 times higher than that of the coordination agent H_2L , due to the formation of hydrogen bonds and the emergence of $\pi \cdots \pi$ interactions within the compound. The presence of fine $\pi \cdots \pi$ interactions in the coordination polymer $[Zn_2(L)_2]_n$ was confirmed by determining its structure using single-crystal X-ray diffraction.

The essential role in enhancing the fluorescent properties of the coordination polymer, compared to the coordination agent H_2L , is attributed to the Zn(II) ions, which, upon complexation, significantly stimulate the fluorescent emission of the luminophore ligand.

The results of these studies will contribute to expanding the family of coordination polymers of

Zn(II) with Schiff bases containing isoniazide and 2,6-diacetylpyridine, characterized by remarkable structural diversity and photoluminescent properties. Regardless of the luminescence mechanism occurring in these systems, these compounds are of interest for applications as green fluorescent materials, such as light-emitting materials (e.g., light-emitting diodes or LEDs).

Conducătorul de proiect Cocu Maria

Data: 27.11.2025



LȘ