

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2025

Sinteza și studiul materialelor noi în baza combinațiilor complexe cu liganzi polifuncționali și cu proprietăți utile în medicină, biologie și tehnică

Codul subprogramului 010602

- Au fost elaborate metode noi de sinteză a 3 baze Schiff și noi combinații complexe în baza derivaților acidului salicilic structura cărora a fost determinată cu ajutorul difracției cu raze X pe monocristal.
- Au fost sintetizate 5 rețele metal-organice polimerice poroase a metalelor de tranziție 3d, de tip *f*- cu liganzi organici care conțin grupe carboxilice și fosfonice. În scopul elucidării compoziției, structurii și proprietăților fizico-chimice a compușilor sintetizați au fost aplicate metode moderne de cercetare (difracția cu raze X pe monocristal, spectroscopia IR și analiza elementală).
- Au fost elaborate protocoale de sinteză a patru tiosemicarbazone noi cu abreviatuara HL¹⁻⁴ pe baza 4-alil- și 4-feniltiosemicarbazonei 1-(morfolin-4-il)propan-1,2-dionei și 1-(azepan-1-il)propan-1,2-dionei. Structura moleculară a tiosemicarbazonei sintetizate a fost confirmată cu ajutorul metodelor spectrale de cercetare (FTIR, RMN) și cu ajutorul analizei cu raze X în monocristal.
- Pentru prima dată pe baza HL¹⁻⁴ au fost sintetizați 45 compuși coordinați ai Cu(II), Co(III), Fe(III), Ni(II), Zn(II). În scopul elucidării compoziției, structurii și proprietăților fizico-chimice a compușilor sintetizați au fost aplicate metode moderne de cercetare. Pentru determinarea potențialului terapeutic pentru compușii sintetizați au fost cercetate proprietățile biologice *in vitro* precum: antimicrobiene, antifungice, antioxidative conform protocolului de specialitate.
- Evaluarea proprietăților optice utilizând metoda Calculului Teoretic al Densității de Stări confirmă că valorile densității de stări ale polimorfului {[Cd(L)]·0,5H₂O}_n comparativ cu cele ale PC {[Cd(L)]·H₂O}_n, în intervalul -3,0 ÷ 3,0 eV, sunt aproape de două ori mai mari, iar DOS a atomilor de Cd(II) înregistrând o contribuție slabă în acest interval. Astfel, maximul spectrului FL al PC {[Cd(L)]·0,5H₂O}_n este de cca 2 ori mai înalt comparativ cu intensitatea maximului FL al PC {[Cd(L)]·H₂O}_n și pentru ambii complecși revendicați maximul intensității emisiilor FL corespunde transferului de sarcină ligand-ligand ($\pi \cdots \pi^*$).
- Profilul spectrului de emisie al polimerilor {[Cd(L)]·0,5H₂O}_n și {[Cd(L)]·H₂O}_n se caracterizează prin emisii fluorescente în regiunea galben-verde (500-520 nm) a spectrului vizibil, cu maximul situat la 2,5 eV(500 nm) pentru {[Cd(L)]·0,5H₂O}_n și respectiv, 2,4 eV (520 nm) pentru {[Cd(L)]·H₂O}_n. Astfel, PC revendicați manifestă fotoluminescență potrivită pentru producătorii de ecrane și dispozitive de vizualizare, deoarece regiunea galben-verde este cea mai confortabilă și optimă pentru ochiul uman, ceea ce permite o percepție vizuală mai bună.
- În 2025, în cadrul subprogramului, au fost publicate 30 articole științifice în reviste internaționale, naționale categoria A, B și diverse culegeri științifice. Membrii echipei au participat la 16 conferințe științifice internaționale, naționale și au publicat 30 rezumate, au obținut 5 brevete de autor. La saloanele Internaționale de invenție brevetele au fost premiate cu medalii de aur (25), medalii de argint (7), 2 premii speciale și 4 diplome de excelență. A fost susținută 1 teză de doctor.

- New methods for the synthesis of 3 Schiff bases and new coordination compounds based on salicylic acid derivatives were developed, the structure of which was determined using single-crystal X-ray diffraction.
- Five porous metal-organic networks of 3d transition metals and f-type, with organic ligands containing carboxylic and phosphonic groups were synthesized. In order to elucidate the composition, structure and physicochemical properties of the synthesized compounds, modern research methods were applied (single-crystal X-ray diffraction, IR spectroscopy and elemental analysis).
- Synthesis protocols for four new thiosemicarbazones with the abbreviation HL¹⁻⁴ were developed based on the 4-allyl- and 4-phenylthiosemicarbazones 1-(morpholin-4-yl)propane-1,2-dione and 1-(azepan-1-yl)propane-1,2-dione. The molecular structure of the synthesized thiosemicarbazones was confirmed using spectral research methods (FTIR, NMR) and single-crystal X-ray analysis.
- For the first time, 45 coordination compounds of Cu(II), Co(III), Fe(III), Ni(II), Zn(II) were synthesized based on HL¹⁻⁴. In order to elucidate the composition, structure and physicochemical properties of the synthesized compounds, modern research methods were applied. To determine the therapeutic potential of the synthesized compounds, in vitro biological properties such as antimicrobial, antifungal, and antioxidant properties were investigated according to the specialized protocol.
- Evaluation of optical properties by using the Theoretical Calculation of Density of States method confirms that the density of states values of the polymorph {[Cd(L)]·0.5H₂O}_n compared to those of PC {[Cd(L)]·H₂O}_n, in the range -3.0 ÷ 3.0 eV, are almost twice as high, and the DOS of Cd(II) atoms has a weak contribution in this range. Thus, the maximum of the FL spectrum of PC {[Cd(L)]·0.5H₂O}_n is about 2 times higher compared to the intensity of the FL maximum of PC {[Cd(L)]·H₂O}_n and for both claimed complexes the maximum of the FL emission intensity corresponds to the ligand-ligand charge transfer ($\pi \rightarrow \pi^*$).
- The emission spectrum profile of the polymers {[Cd(L)]·0.5H₂O}_n and {[Cd(L)]·H₂O}_n is characterized by fluorescent emissions in the yellow-green region (500-520 nm) of the visible spectrum, with the maximum located at 2.5 eV(500 nm) for {[Cd(L)]·0.5H₂O}_n and 2.4 eV (520 nm) for {[Cd(L)]·H₂O}_n, respectively. Thus, the claimed PCs exhibit photoluminescence suitable for manufacturers of displays and viewing devices, since the yellow-green region is the most comfortable and optimal for the human eye, which allows for better visual perception.
- In 2025, within the subprogramme, **30** scientific articles were published in international, national journals, category A, B and various scientific collections. Team members participated in **16** international and national scientific conferences and published **30** abstracts, obtained **5** author patents. At the International Salons of Invention, the patents were awarded with gold medals (**25**), silver medals (**7**), **2** special prizes and **4** diplomas of excellence. **1** doctoral thesis were defended.