

REZUMATUL REZULTATELOR

Proiectului *Elaborarea designului și fabricarea compuşilor coordinativi în baza metalelor 3d și liganzilor polidentati cu diverse seturi de atomi donori*

Cifrul Proiectului *15.819.02.03F*

Direcția Strategică *Materiale, tehnologii și produse inovative*

Director proiectului *dr. CROITOR Lilia*

Cuvinte cheie: DESIGN, MATERIALE METAL-ORGANICE, LIGANZI POLIDENTAȚI, SINTEZĂ, STUDIUL CU RAZE X, PROPRIETĂȚI.

Obiectul studiului – materiale metal-organice noi în baza metalelor de tranziție și liganzilor micști și polidentati cu proprietăți utile.

Scopul lucrării – elaborarea designului și sinteza materialelor metal-organice noi cu compoziție, topologie arhitecturală și proprietăți specifice prognozate.

Având ca scop elaborarea designului, sinteza și studiul materialelor metal-organice cu proprietăți utile pentru executarea procedeele experimentale și teoretice ale proiectului s-a apelat la un șir de aparate, dispozitive, complexe de program de calcul, printre care se pot enumera :

- ✓ Ingineria materialelor cristaline cu utilizarea conceptului ”*bottom-up*” și a blocului molecular de construcție;
- ✓ Baza de Date Structurale Cambridge (*BDSC*) utilizată pentru elaborarea designului și sinteza MMO;
- ✓ Aplicarea procedeele de sinteză clasică, ultrasunet, solvo-hidrotermale supramoleculare și a celor de creștere a cristalelor în fază monocristalină. Obținerea unei serii largi și diversificate de combinații complexe a servit ca material bogat și util pentru studiul comparativ al comportării diferitor componente ale sistemelor chimice analizate;
- ✓ Studiul experimental cu raze X al monocristalelor la difractometrul automatizat modern „Oxford Diffraction” înzestrat cu CCD.

Complexe de calcul (*SHELX, PLATON, MERCURY*) utilizate pentru determinarea și precizarea compoziției produselor cristaline finale și a arhitecturii supramoleculare, la ilustrarea rezultatelor. A fost elaborat designul și au fost obținute circa 27 materiale noi coordinative atât discrete, cât și polimerice, în baza unor metale de tranziție (Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn și Cd), iar în calitate de liganzi – liganzi polidentati cu diverse seturi de atomi donori. A fost efectuat studiul cu raze X pentru monocristalele tuturor acestor compuși. Au fost efectuate măsurători ce au permis investigarea proprietăților luminescente pentru unii din ei. Rezultatele obținute au o valoare teoretică importantă, deoarece sunt acele rezultate cumulative din *BDSC*, care aduc un aport la elaborarea designului dirijat atât al compuşilor noi în parte, cât și al arhitecturii

supramoleculare cu proprietăți avansate. Se poate menționa importanța și impactul acestor rezultate asupra dezvoltării științei și educației, beneficiari ai rezultatelor fiind diverse centre științifice de chimie și facultățile de chimie ale Universităților din Republica Moldova.

În cadrul acestui proiect s-au preconizat lucrări de cercetare ce vor finaliza un șir de teze de licență, master și doctor. Astfel, au fost susținute cu succes două teze de licență, una de master și una de doctor.

Unele rezultate obținute au fost comunicate și discutate în cadrul a 9 foruri științifice internaționale și au constituit obiectul a 4 lucrări științifice, dintre care 2 articole în revista națională, categoria B, *Chemistry Journal of Moldova*, iar 2 articole în revistele internaționale de specialitate cu impact factor, *Journal of Molecular Structure* (IF=1.753) și *Polyhedron* (IF=1.926).

Domeniul de aplicare – științe ale chimiei; științe ale fizicii; inginerie a materialelor; inginerie chimică.