



CNCS



RAPORT STIINTIFIC ETAPA 1 / 2022

Denumirea proiectului:

Materiale Semiconductoare Supramoleculare pentru Dispozitive Electronice

Organice

(Acronim: SUPRAMOL-MAT)

Cod proiect: PN-III-P4-PCE-2021-0906

Director proiect

Dr. Aurica Farcas

Membri:

1. Dr. Ana-Maria Resmerita
2. Dr. Ursu Laura-Elena
3. Dr. Balan-Porcărașu Mihaela
4. Dr. Asăndulesa Mihai
5. Dr. Tigoianu Ionut Radu
6. Dr. Peptu Cristian

Rezumatul etapei.

In prima etapa a proiectului, s-au preparat si caracterizat din punct de vedere structural 3 noi clase ciclodextrine permodificate (TMe β CD, TMS β CD si TMS γ CD) si cucurbit[7]uril (CB7), cu scopul de a fi folosite drept molecule gazda pentru polimerii conjugat, in vederea sintezei de arhitecturi pseudo- si polirotaxanice. Pentru sinteza lor, s-au folosit ca precursori ciclodextrinele native, ai caror atomi de hidrogen din grupele hidroxilice exterioare, au fost substituiti cu radicali inalt hidrofobi de tipul metil sau trimetil silil. Sinteza de CB7, s-a realizat pornind de la aldehida formica si glicoluril, folosind drept catalizator acidul sulfuric. Toate cele 4 moleculele gazda au fost caracterizate integral prin: IR, RMN, DSC, RMN, MALDI-MS, iar in unele cazuri si prin ESI-MS. S-au testat protocoale (amestecuri TMe β CD·EDOT si CB7·EDOT) in vederea obtinerii compusilor de incluziune corespunzatori, care au constituit baza pentru implementarea sintezei compusilor supramoleculari PEDOT·CB7 PPs si PEDOT·CB7 PRs. Constantele de stabilitate ale EDOT·TMe β CD si EDOT·CB7, au fost masurate prin UV-vis. Informatii suplimentare privind formarea compusilor de incluziune EDOT·CB7 si EDOT·TMe β CD s-au obtinut prin simulare moleculara si MALDI-MS. EDOT·CB7, complet structural caracterizat, a fost polimerizat oxidativ in apa folosind drept catalizator FeCl₃. Polipseudorotaxanul (PEDOT·CB7 PPs) s-a separat si purificat. Fractia solubila in apa a PEDOT·CB7 PPs, s-a caracterizat structural printr-o diversitate de metode, iar final s-au studiat interactiile cu o entitate biologica (aerolizina). Pentru sinteza polirotaxanilor (PEDOT·CB7 PRs), s-a folosit ca precursor PEDOT·CB7 PPs si pirenul drept grupare blocoare. Fractia solubila in apa a PEDOT·CB7 PRs, a fost caracterizata din punct de vedere structural si al proprietatilor fotofizice si de transport, pentru a cuantifica influenta gradului de rotaxinare privind posibilitatea de aplicabilitate in dispozitive electro-optice. Rezultatele stiintifice publicate au fost diseminate regasindu-se in 3 articole stiintifice publicate sau in curs de publicare in reviste ISI, 3 prezentari la manifestari stiintifice internationale. 2 articole scurte au fost publicate in volume ale acestor manifestari. Toate aceste rezultate se regasesc pe pagina web a proiectului: <https://icmpp.ro/supramol-mat/index.php> Rezultatele investigarilor din prima etapa de desfasurare a proiectului PN-III-P4-PCE-2021-0906, au demonstrat beneficiile incapsularii asupra proprietatilor optice, electrochimice si de transport ale polimerilor supramoleculari PEDOT·CB7 PPs si PEDOT·CB7 PRs.

I.1 Obiectivele/Activitatile proiectului PN-III-P4-PCE-2021-0906 pentru etapa I/2022

An	Obiective/Activitati prevazute	Obiective/Activitati realizate	Grad de realizare
2012	O1. Sinteza unei noi familii de molecule gazda	- S-a dezvoltat o metoda eficienta de sinteza a CB7, TMe β CD, TMS β CD, TMS γ CD. Aceste	100 %

<p>Act 1.1 - W1. Sinteza moleculelor gazda TMeβCD, TMSβCD, TMSγCD si CB7. -Se vor caracteriza structural macrociclurile TMeβCD, TMSβCD, TMSγCD si CB7 sintetizate prin FTIR, NMR, ESI-MS, TGA si DSC.</p> <p>Act 1.2 - W2.1. Sinteza compusilor de incluziune (ICs): EDOT-TMeβCD si EDOT-CB7. -Se vor determina constantele de stabilitate si se vor caracteriza structural ICs: EDOT-TMeβCD si EDOT-CB7.</p>	<p>molecule gazda au fost caracterizate din punct de vedere structural (FTIR, NMR, ESI-MS) si al stabilitatii termice (TGA, DSC).</p> <p>-S-au sintetizat compusii de incluziune EDOT-TMeβCD si EDOT-CB7 folosind o noua metoda de preparare. -Constantele de stabilitate au fost determinate prin tehnica UV-vis; Au fost complet caracterizati din punct de vedere structural.</p>	
<p>O2. Sinteza de arhitecturi poli(3,4-etilenedioxitiofen) (PEDOT) polipseudorotanice (PPs) si polirotaxanice (PRs) Act 1.3 - W2.2. Sinteza PEDOT polipseudorotaxanilor (PPs) si ale polirotaxanilor (PRs): PEDOT-CB7 PPs si PRs. -Se vor separa si caracteriza din punct de vedere structural, inclusiv DLS, si al proprietatilor fotofizice fractiile: solubile in apa ale PPs si PRs.</p>	<p>- In cadrul acestui obiectiv, au fost sintetizati PEDOT-CB7 PPs si PRs. Fractiile solubile in apa, au fost separate si complet caracterizate din punct de vedere structural. - PEDOT-CB7 PPs si PRs sintetizati au fost caracterizati din punct de vedere fotofizic, morfologic si de transport. - PEDOT-CB7 PPs si PRs au fost investigati din punct de vedere al interactiilor cu molecule biologice active.</p>	100 %

I. Etapa 1 (2022)

Proiectul "Materiale Semiconductoare Supramoleculare pentru Dispozitive Electronice Organice", in conformitate cu obiectivele propuse in etapa 1 / 2022, s-au realizat urmatoarele activitati asociate:

O1. Sinteza unei noi familii de molecule gazda

Act 1.1 - W1. Sinteza de noi molecule gazda TMe β CD, TMS β CD, TMS γ CD si CB7

Macrociclurile TMe β CD, TMS β CD, TMS γ CD si CB7 sintetizate au fost caracterizate prin urmatoarele metode spectroscopice: FTIR, NMR, ESI-MS, TGA si DSC.

Structurile chimice ale macrociclurilor sunt prezentate in Fig. 1.

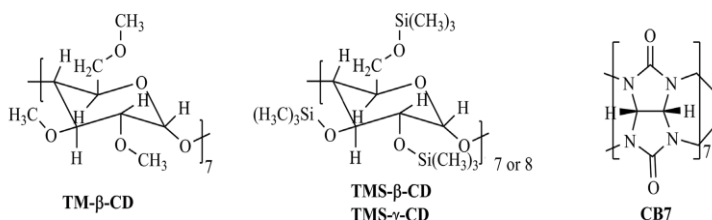


Figure 1. Structurile chimice ale moleculelor gazda sintetizate in O1.

Sinteza de cucurbit[n]urili (CBs), s-a realizat pornind de la aldehida formica si glicolul, reactie catalizata de acid sulfuric. Amestecul obtinut a fost precipitat in apa/acetona, filtrat/spalat cu apa/acetona (4/1 v/v) si uscat. Structurile chimice pentru aceste amestecuri de CBs sunt redade in Fig. 2. Din amestecul de CBs, s-a separat doar CB7 prin purificari repetate.

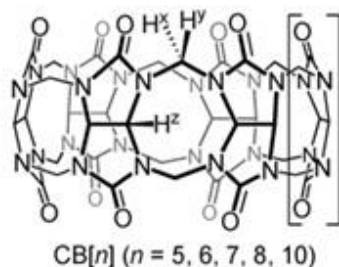
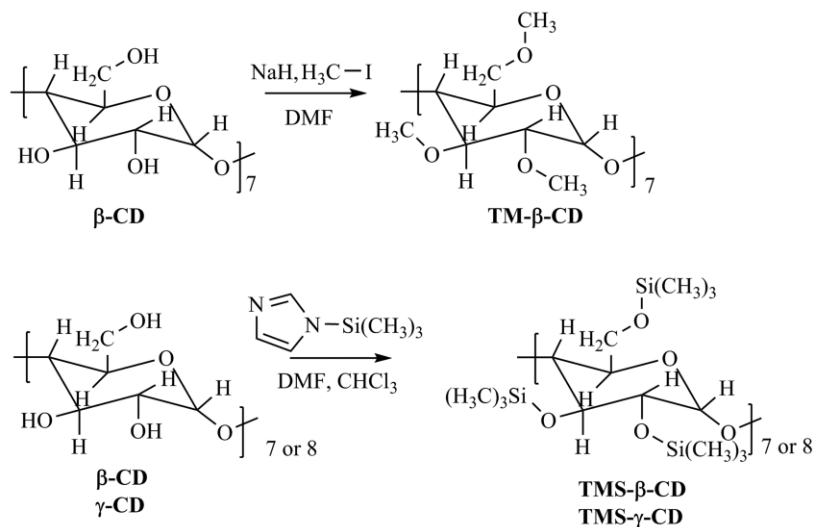


Figura 2. Structura chimica a amestecului de CBs.

Derivatii permodificati ai ciclodextrinelor au fost sintetizati conform Schemei 1.



Caracterizarea structurala a macrociclorurilor sintetizate, s-a efectuat prin spectroscopie FTIR, NMR, ESI-MS, TGA si DSC. Mai jos redam cele mai importante rezultatele, care au confirmat sinteza noilor molecule gazda propuse in **O1** si **Act 1.1**)

CB7

FT-IR (KBr, cm^{-1}): ~ 3446 (N-H), 2926 (C-H), 1733 (C=O), 1476 (C-N), 1376 , 1326 , 1234 , 1191 , 967 , 806 , 760 , 674 , 626 cm^{-1} .

$^1\text{H-NMR}$ (D_2O , ppm): $\delta = 4.25$ (d, 14 H, $J = 15.2$ Hz, CH_2), 5.55 (s, 14 H, CH), 5.80 (d, $J = 15.6$ Hz, 14 H, CH_2)

$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6 , ppm): $\delta = 4.15$ (d, 14 H, $J = 14.8$ Hz, CH_2), 5.37 (s, 14 H, CH), 5.67 (d, $J = 14.4$ Hz, 14 H, CH_2)

TMS β CD si TMS γ CD

Analiza MALDI MS, confirma sinteza de TMS β CD si TMS γ CD, Fig. 3.

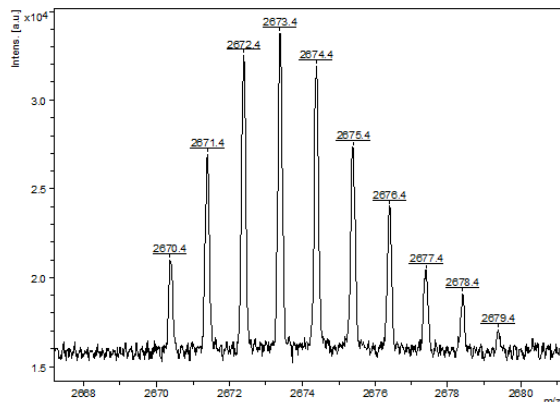


Figura 3. Spectru MALDI MS pentru TMS β CD

TMe β CD

Structura TMe β CD a fost confirmata prin analize $^1\text{H-NMR}$, $^{13}\text{C-NMR}$ (Fig. 3) si ESI-MS (Fig. 4)

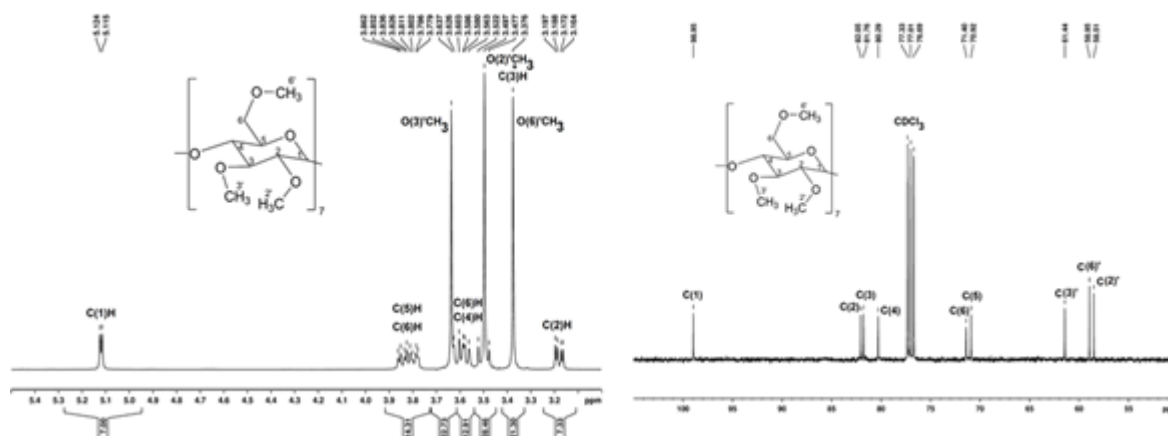


Figura 3. $^1\text{H-NMR}$ (400 Mz) (stanga) si $^{13}\text{C-NMR}$ (dreapta) pentru TMe β CD in CDCl_3 .

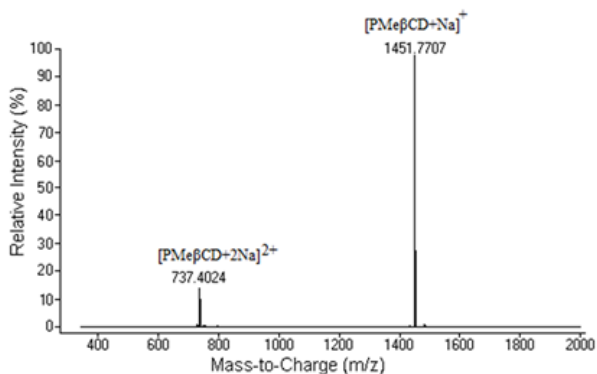
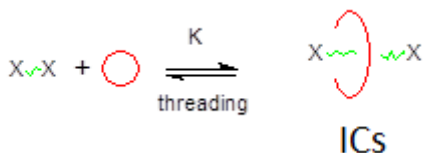


Figura 4. Spectru ESI-MS pentru TMe β CD $\text{CHCl}_3/\text{CH}_3\text{OH}$ 9/1 v/v.

In conformitate cu rezultatele prezentate, O1 si Act. 1.1 au fost realizate cu succes.

Act 1.2 - W2.1. Sinteza compusilor de incluziune (ICs): EDOT·CB7 si EDOT·TMeβCD.
Determinarea constantele de stabilitate si caracterizarea structurala pentru EDOT·CB7 si EDOT·TMeβCD

Sinteza ICs a fost realizata in apa, pornind de la cantitati echimoleculare dintre EDOT si molecule gazda (TMeβCD si CB7) si este prezentata schematic in Schema 2.



Schema 2. Reprezentarea schematica a formarii ICs.

Determinarea constantelor de stabilitate (K_s) privind validarea sintezei structurilor complexe de tip EDOT·CB7 si EDOT·TMeβCD, s-a realizat prin absorptia UV-vis in apa (Fig. 5). Valorile K_s obtinute au fost: $K_s = 1.5 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$ pentru EDOT·CB7 si $1.0 \times 10^3 \text{ M}^{-1}$ pentru EDOT·TMeβCD, indicand o mai buna stabilitatea a complexului cu EDOT·CB7 (Fig. 5).

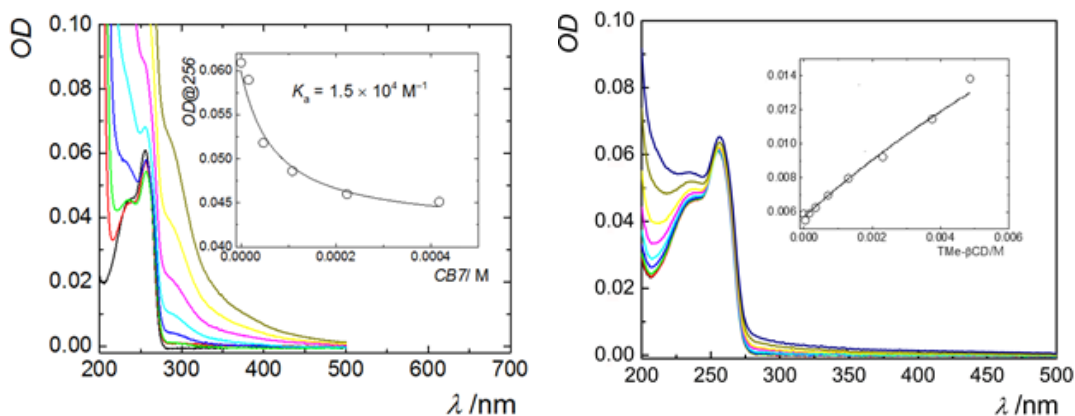


Figura 5. Modificarile in absorptia UV-vis ale solutiilor 5 μM de EDOT, dupa adaugarea unui exces de solutie de CB7 (stanga) sau TMeβCD (dreapta).

Sinteza și caracterizare structurală a compusului de incluziune EDOT·CB7

CB7 (0.334 g, 0.3 mmol) s-a solubilizat in 8 mL de apa ultrapura peste care s-a adaugat EDOT (0.0286 g, 0.2 mmol). Dispersia formata s-a sonicat timp de 15 minute, apoi s-a mentinut sub agitare energica timp de 24 ore. Suspensia formata s-a filtrat, spalat cu apa si acetona, iar dupa uscare la vid s-au obtinut 0.171 g (50.1% randament) sub forma de solid alb.

Fig. 7 prezinta spectrul $^1\text{H-RMN}$ al compusului de incluziune EDOT·CB7 in DMSO-d_6 .

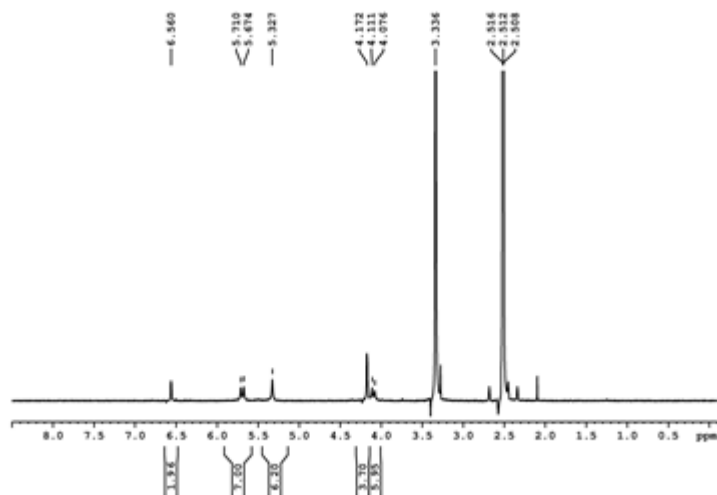


Figura 7. Spectrul ^1H -RMN al compusului de incluziune EDOT·CB7.

^1H -NMR (DMSO- d_6), δ (ppm): 6.56 (s, 2H, EDOT), 5.71 (d, 14 H, CH₂ (CB7)), 5.33 (s, 14 H, CH (CB7)), 4.11 (s, 4H, EDOT), 4.07 (d, 14 H, CH₂ (CB7)).

FT-IR (KBr, cm^{-1}): ~ 3441, 2924, 2855, 1729, 1539, 1472, 1470, 1374, 1319, 1227, 1188, 962, 799.

O confirmare suplimentara privind formarea acestor structuri complexe, a fost realizata prin simularea moleculara si spectroscopia MALDI-MS (Fig. 7), suplimentar in A1.2.

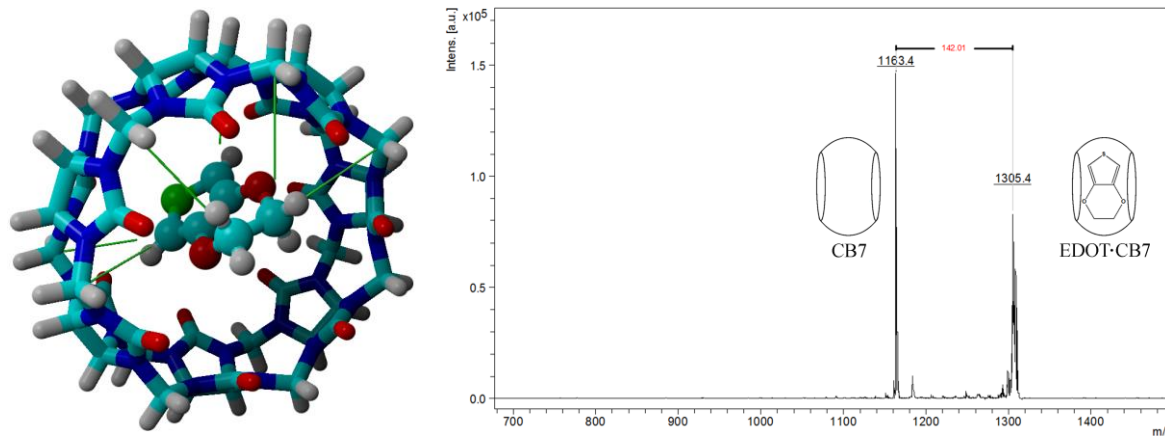


Figura 7. Simularea moleculara (stanga) si spectru MALDI-MS (dreapta) al compusului de incluziune EDOT·CB7.

In Fig. 8 este prezentata simularea moleculara privind formarea compusului de incluziune EDOT·TMe β CD.

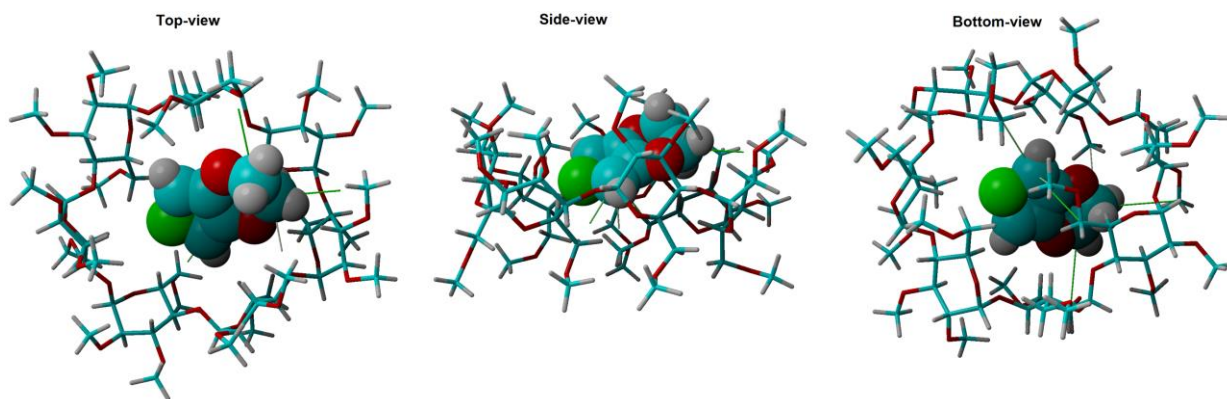


Figura 8. Simularea moleculara privind formarea compusului de incluziune TMe β CD-EDOT.

O2. Sinteza de arhitecturi poli(3,4-etilenedioxitiofen) (PEDOT) polipseudorotaxanice (PPs) si polirotaxanice (PRs)

Act 1.3 - W2.2. Sinteza PEDOT polipseudorotaxanilor (PPs) si ale polirotaxanilor (PRs): PEDOT-CB7 PPs si PEDOT-CB7 PRs.

Experimental

Sinteza PEDOT-CB7 PPs: Se dizolva in 25 ml de apa 1.675 g (1.47 mmol) de CB7, dupa care se adauga 0.139 g de EDOT (0.98 mmol), amestecul de reactie se supune sonicarii timp de 15 minute, iar apoi agitarii energice timp de 24 ore. Dupa timpul specificat, se adauga in portiuni mici 0.81 g FeCl₃ (5.0 mmol), se barboteaza azot si reactia se mentine sub agitare si protejata de lumina vizibila timp de 4 zile. Suspensia rezultata, se filtreaza, se spala cu apa si acetona, iar final cu dietil eter. Dupa uscare s-a obtinut 0.354 g precipitat negru cu tenta albastra (randament=19,5%). Pentru de-dopare PEDOT-CB7 PPs a fost dispersat in 20 mL de acetonitril si agitat energetic cu 6 mL de hidrat de hidrazina timp de 3 ore, filtrat si spalat cu etanol, apoi uscat. Final, PEDOT-CB7 PPs a fost dispersat in apa, agitat energetic si s-a separat fractia solubila in apa de cea insolubila. Fractia solubila in apa, s-a uscat prin liofilizare.

Sinteza PEDOT-CB7 PRs:

Sinteza PEDOT-CB7 PRs s-a realizat in aceleasi conditii experimentale ca si cea prezentata mai sus pentru PEDOT-CB7 PPs, cu exceptia ca la finalul reactiei, s-a adaugat piren dizolvat in acetona, iar reactia a fost continuata inca 2 zile. PEDOT-CB7 PRs a fost purificat, dedopat si izolat, in aceleasi conditii ca si cele prezentate pentru PEDOT-CB7 PPs mai sus.

Caracterizare structurala

PEDOT-CB7 PPs s-a caracterizat structural prin FT-IR (Fig. 9), RAMAN (Fig. 10) si RMN (Fig. 11), iar masele moleculare prin GPC (Fig. 12).

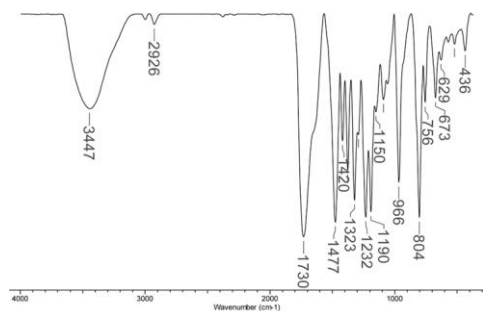


Figura 9. Spectru FT-IR al PEDOT-CB7 PPs.

FT-IR (KBr, cm^{-1}): 3447, 2926, 1730, 1477, 1323, 1232, 1190, 966, 804, 756, 673 436 cm^{-1} .

Suplimentar, a fost efectuată și analiza RAMAN (Fig. 10).

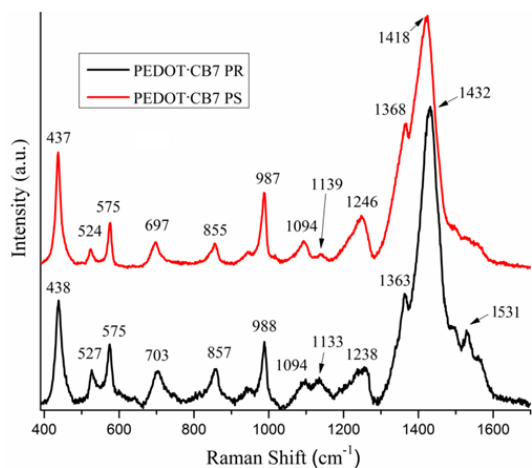


Figura 10. Caracterizare structurală prin spectroscopie RAMAN.

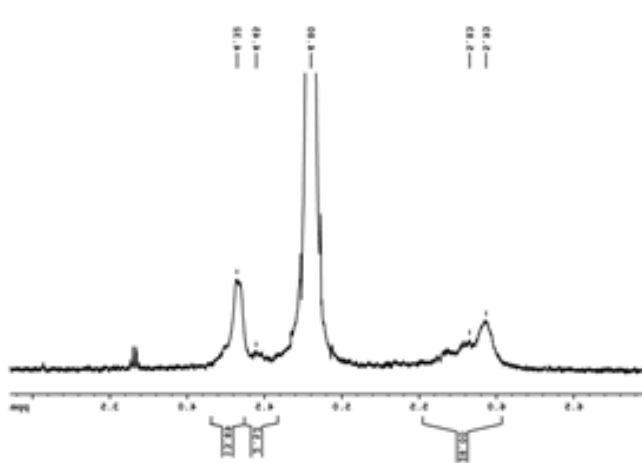
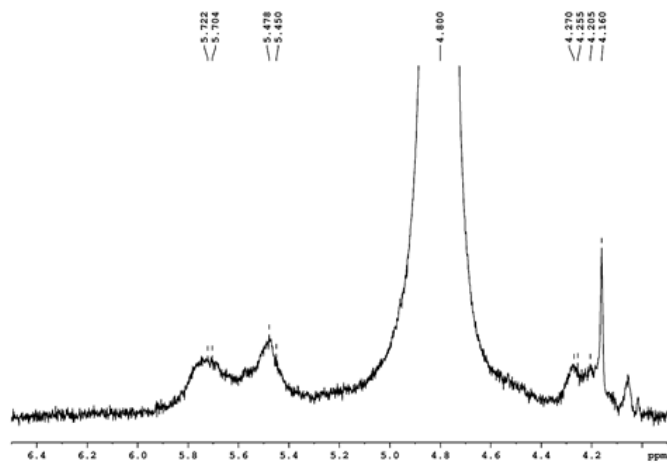


Figura 11. Spectrele ^1H -RMN în apă deuterată pentru PEDOT-CB7 PRs (stanga) și PEDOT-CB7 PPs (dreapta).

^1H -NMR (D_2O), δ (ppm) (PEDOT-CB7 PPs): 5.93 (d, 14 H CH_2 , (CB7)), 5.54 (s, 14 H, CH (CB7)), 4.45 (s, 4H, PEDOT), 4.32 (d, 14 H, CH_2 (CB7)).

$^1\text{H-NMR}$ (D_2O), δ (ppm) (PEDOT-CB7 PRs): 5.72 (d, 14 H CH_2 , (CB7)), 5.47 (s, 14 H, CH (CB7)), 4.27 (s, 4H, PEDOT), 4.20 (d, 14 H, CH_2 (CB7)).

Mase Moleculare

GPC (apa cu 0.02 % N_3Na si 0.05 M LiBr ca eluent, PEO standards): PEDOT-CB7 PRs = $M_n \sim 9$ kDa, $M_w/M_n \sim 2.1$; PEDOT-CB7 PRs = $M_n \sim 13$ kDa, M_w/M_n 1.8 (Fig. 12).

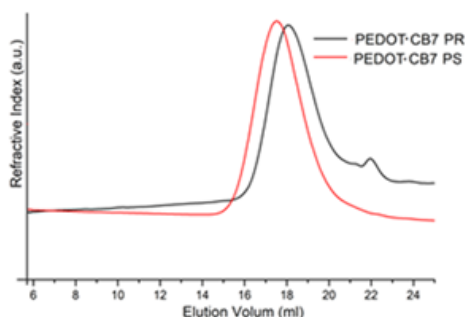


Figura 12. Spectrele GPC al PEDOT-CB7 PPs si PEDOT-CB7 PRs.

Proprietatile fotofizice

Proprietati optice

Absorptia UV-vis (Fig. 13), fluorescenta (FL) (Fig. 14) si fosforescenta (PH) in H_2O si ACN, au fost investigate pentru fractiile solubile in apa ale PEDOT-CB7 PPs si PEDOT-CB7 PRs (Fig. 13) iar rezultatele obtinute sunt prezentate in Tabelul 1.

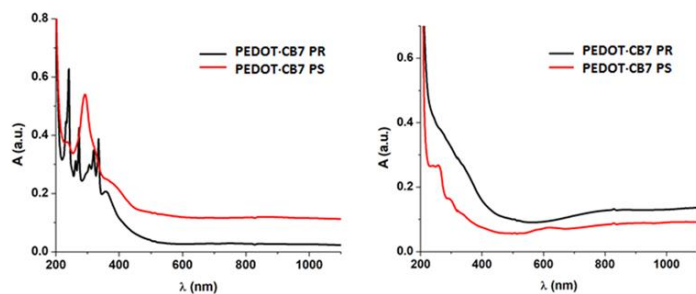


Figura 13. Spectrele de absorptie UV-vis ale PEDOT-CB7 PRs si PEDOT-CB7 PPs in ACN (stanga) si in apa (dreapta).

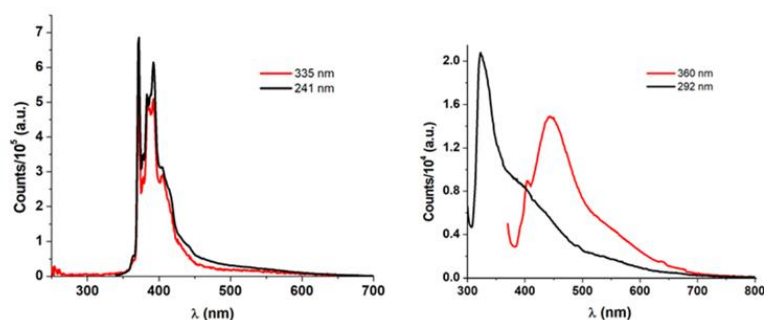


Figura 14. Spectrele de fluorescenta in ACN ale PEDOT-CB7 PRs (stanga) si PEDOT-CB7 PPs (dreapta).

Tabel 1. Emission lifetimes (τ) and chi squared (χ^2) determined by nanosecond transient absorption, and quantum yields for fluorescence (Φ_{FL}) and phosphorescence (Φ_{PH}) of PEDOT·CB7 PRs and PEDOT·CB7 PPs.

Sample	Solvent	λ_{ex} (nm)	λ_{em} (nm)	τ_1 (ns)	τ_2 (ns)	χ^2	Φ_{FL} (%)	Φ_{PH} (%)
PEDOT·CB7 PRs	H ₂ O	375	422	5.49	-	0.99	-	-
PEDOT·CB7 PPs	„	“	443	0.57 (54.41%)	5.77 (45.59%)	1	-	-
PEDOT·CB7 PRs	ACN	355	625	1124.48 (72.76%)	8921.85 (27.24%)	1	6.89	24.69
PEDOT·CB7 PPs	“	“	605	1022.19 (69.59%)	8199.98 (30.41%)	1	5.36	15.81

In vederea confirmarii puritatii PEDOT·CB7 PRs si PEDOT·CB7 PPs, s-a folosit tehnica nanosecond transient absorption (Fig. 15). Aparitia punctelor izobestice, au confirmat prezenta unor compusi unitari.

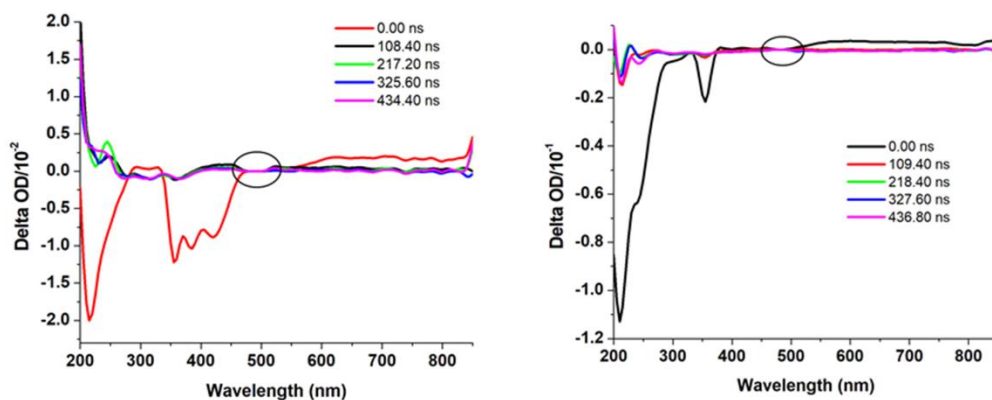


Figura 15. Nanosecond transient absorption pentru PEDOT·CB7 PRs (stanga) and PEDOT·CB7 PPs (dreapta) in ACN ($\lambda_{ex} = 355$ nm) (cercurile indica aparitia punctului izobestic).

Morfologia de suprafata

Morfologia de suprafata a fost investigata prin tehnica AFM. Imaginile AFM pentru filmele de PEDOT·CB7 PRs si PEDOT·CB7 PPs, sunt redade in Fig. 16 si Fig. 17.

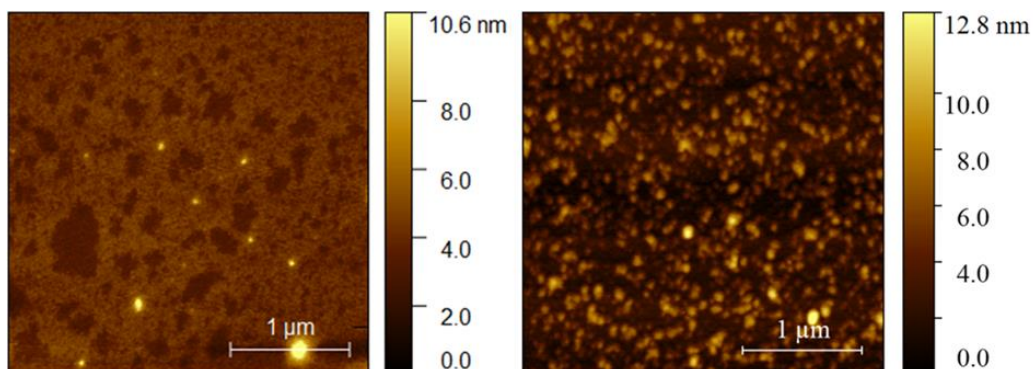


Figura 16. Imaginile AFM PEDOT·CB7 PRs sub forma de film obtinut din apa (stanga) si din ACN (dreapta).

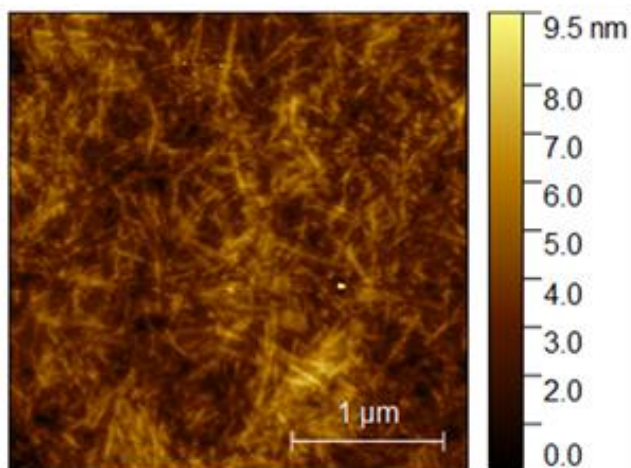


Figura 17. Imaginea AFM pentru PEDOT·CB7 PPs sub forma de film obtinut din apa.

Dupa cum se vede din Fig. 17, PEDOT·CB7 PPs prezinta o mai mare tendinta de auto-organizare comparativ cu PEDOT·CB7 PRs.

Caracteristici electrochimice

Proprietatile electrochimice au fost investigate prin voltametrie ciclica (Fig. 18).

Rezultatele obtinute au indicat, prezenta ambelor procese electrochimice, adica oxidare si reducere, demonstrand prezenta PEDOT-ului deoarece *CB7 nu prezinta activitate electrochimica*.

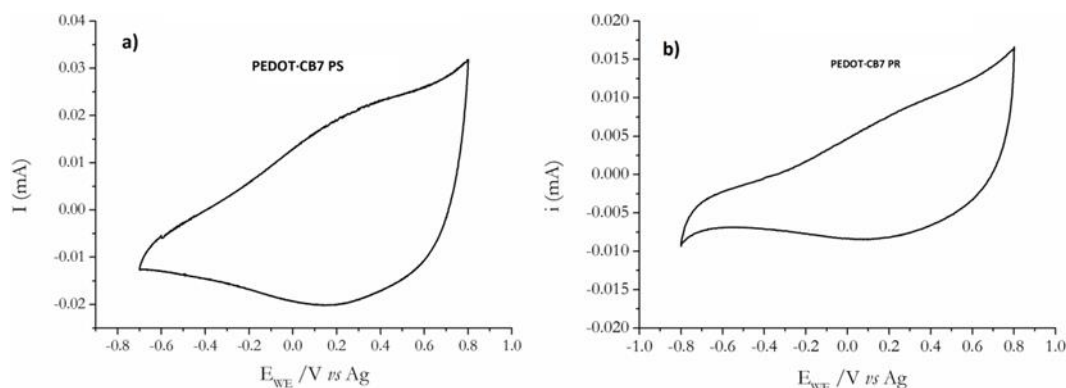


Figure 14. Voltamogramele pentru PEDOT·CB7 PPs (a) si PEDOT·CB7 PRs (b).

Masuratorile DLS

Dimensiunea particulelor coloidale, distributia lor, potentialul de ionizare in solutie si sub forma de filme subtiri pentru PEDOT·CB7 PRs si PEDOT·CB7 PPs au fost investigate prin analize DLS si TEM (Fig. 15 si Fig. 16).

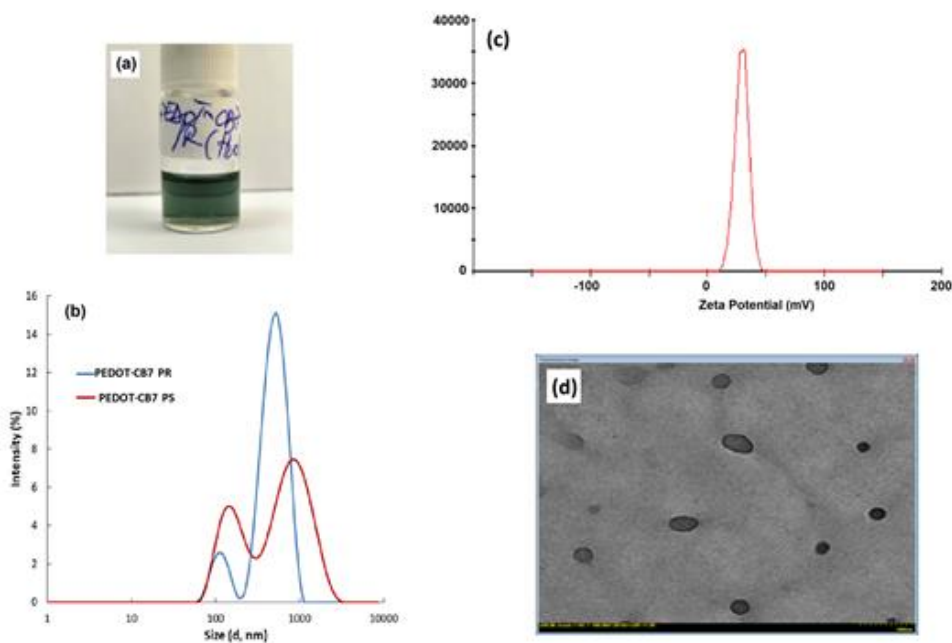


Figura 15. (a) Culoarea solutiei apoase a fractiei de PEDOT·CB7 PRs. (b) Comparatie dintre dimensiunea particulelor coloidale ale PEDOT·CB7 PRs si PEDOT·CB7 PPs (spectrele reprezinta distributia diametrelor particulelor). (c) Potentialul Zeta al PEDOT·CB7 PRs. (d) Imaginea TEM a filmului de PEDOT·CB7 PRs care confirma prezenta si distributia densa a particulelor.

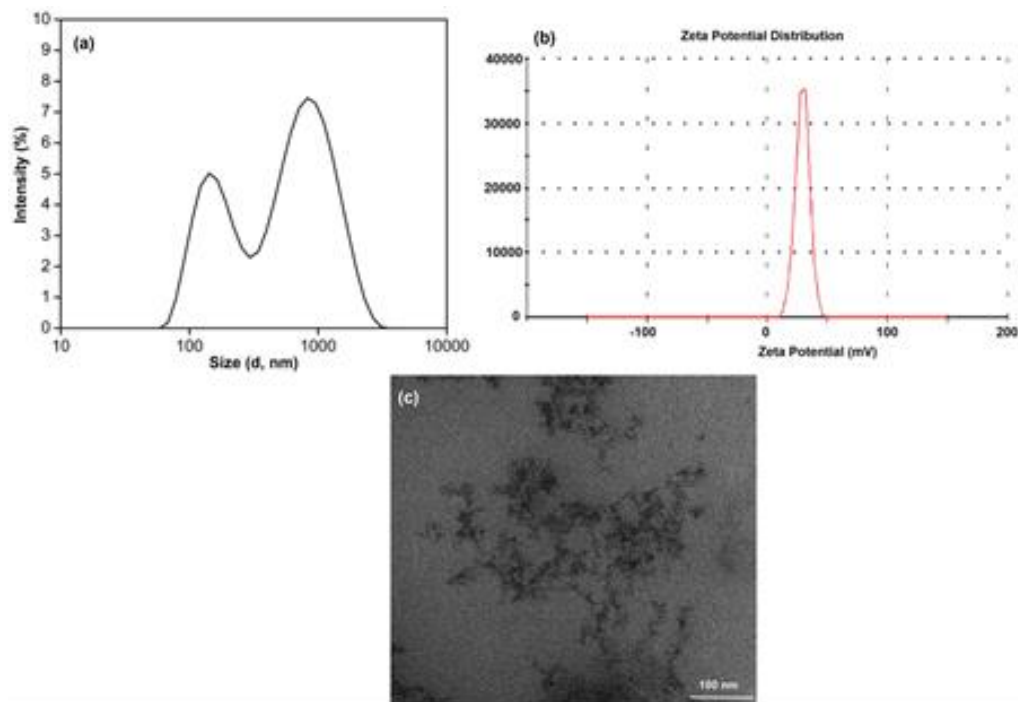


Figura 16. (a) Dimensiunea particulelor coloidale ale PEDOT·CB7 PPs. (b) Potentialul Zeta al PEDOT·CB7 PPs. (c) Imaginea TEM a filmului de PEDOT·CB7 PPs.

Proprietati electrice

Proprietatile electrice au fost investigate prin spectroscopie dielectrica si prin metoda celor 4 puncte. Rezultatele acestor investigatii sint redade in Tabelul 2.

Tabel 2. Valorile numerice ale conductivitator (σ_{DC}) si energia de activare a purtatorilor de sarcina (E_a) la temperaturi joase si inalte si frecventa (f) = 1 Hz.

Sample	σ (S·cm ⁻¹)	E_a (mEV)	
		low temperature	high temperature
PEDOT·CB7 PPs	2.0 x 10 ⁻⁵ ^{a)} 3.7 x 10 ⁻⁴ ^{b)}	81.9	112
PEDOT·CB7 PRs	3.6 x 10 ⁻³ ^{a)} 9.2 x 10 ⁻³ ^{b)}	51.7	61

^{a)} Conductivitate electrica masurata prin spectroscopie dielectrica; ^{b)} Conductivitate electrica masurata prin metoda celor 4 puncte.

Suplimentar, s-a investigat si evolutia conductivitatii cu temperatura, si s-a observat ca a respectat trendul intalnit si in cazul altor polimeri conjugati. Din aceste investigatii s-a concluzionat ca evolutia purtatorilor de sarcina in PEDOT·CB7 PRs este mai buna decat in PEDOT·CB7 PPs, fapt ce confirma inca o data, prezenta pirenului la capatul de lant al PEDOT·CB7 PRs (Fig. 17).

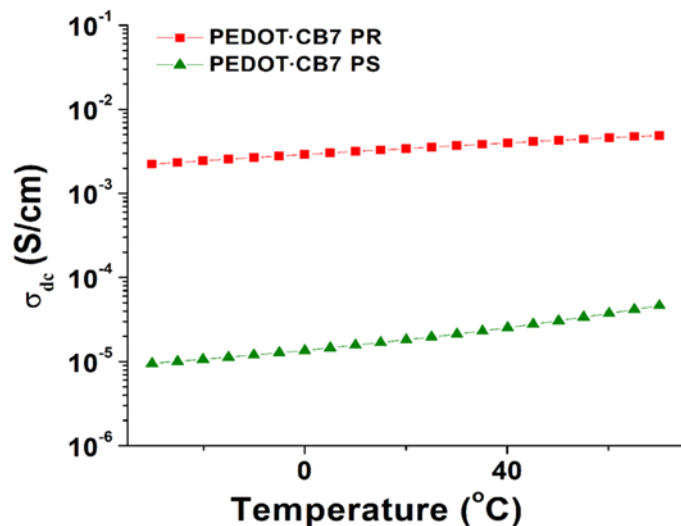


Figura 17. Evolutia conductivitatii cu temperatura la frecventa = 1 Hz pentru PEDOT·CB7 PRs si PEDOT·CB7 PPs.

Teste preliminare privind interactiile fractiilor solubile in apa ale PEDOT·CB7 PPs si PEDOT·CB7 PRs cu entitati biologice (aerolizina).

Suplimentar, au fost investigate interactiile acestor sisteme supramoleculare cu aerolizina, utilizand tehnica Nanopore resistive pulse-sensing si simularea moleculara. Ambele tehnici utilizate au demonstrat interactii puternice ale acestor sisteme complexe cu compusii cu activitate biologica.

Fig. 18 prezinta principiul detectarii electrice, utilizat in investigatia noastra.

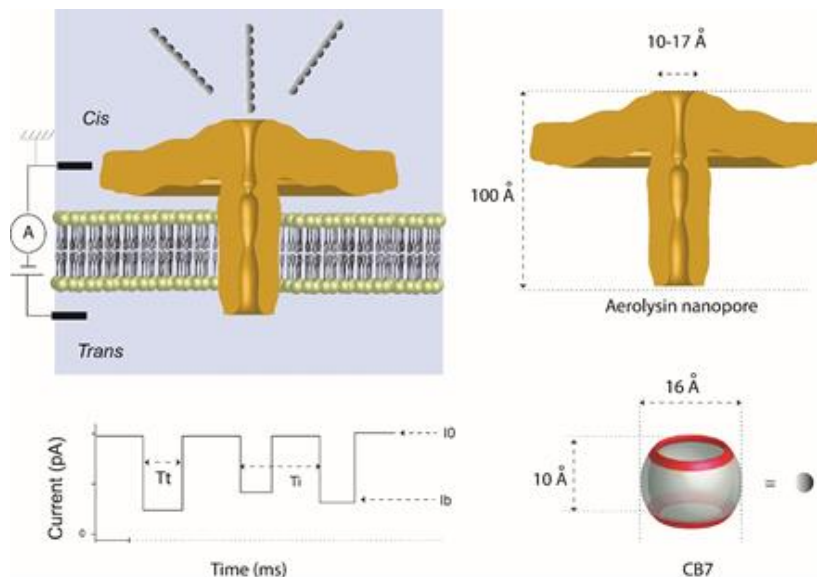


Figura 18. Principiul detectarii electrice.

Detectia electrica pentru PEDOT·CB7 PPs utilizand aerolizina nanopor, este prezentata in Fig. 19.

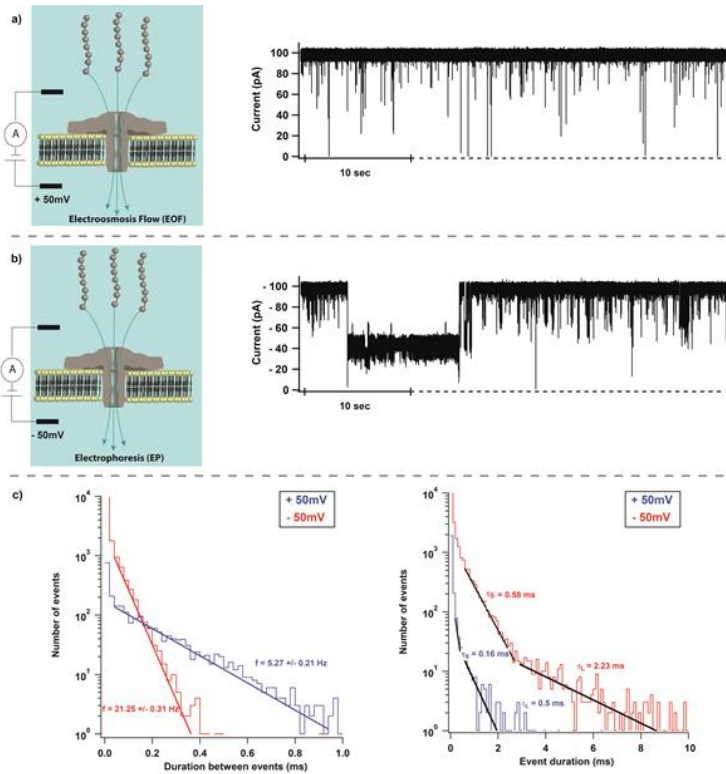


Figura 19. Detectia electrica a PEDOT-CB7 PPs.

Pentru confirmari suplimentare privind interactiile acestor sisteme complexe cu nanoporul de aerolizina, s-a utilizat si tehnica de modelare moleculara.

Rezultatele sunt prezentate in Fig. 20.

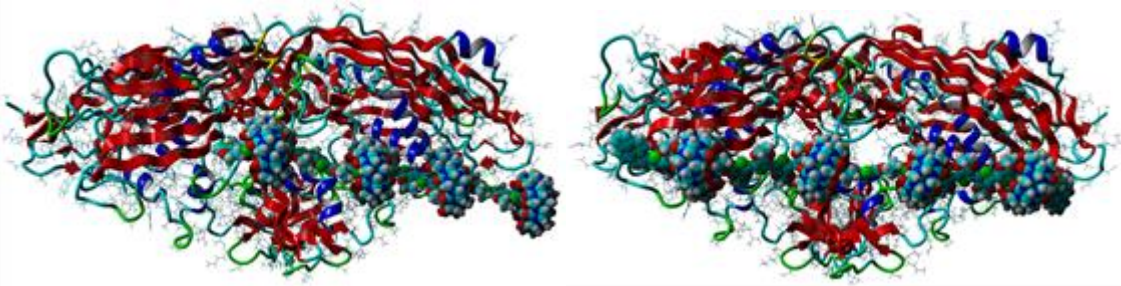


Figura 20. Modelare moleculara privind interactiunile dintre PEDOT-CB7-PPs (stanga) si PEDOT-CB7-PRs (dreapta) cu nanopor de aerolizina.

Rezultatele acestor cercetari, ofera oportunitatea de a dezvolta canale biometice pentru aplicatii atat in optoelectronica cat si in nanobiotehnologie.

Un studiu comparativ privind interaciunile acestor sisteme complexe cu nanoporul de aerolizina este prezentat in Figura 21.

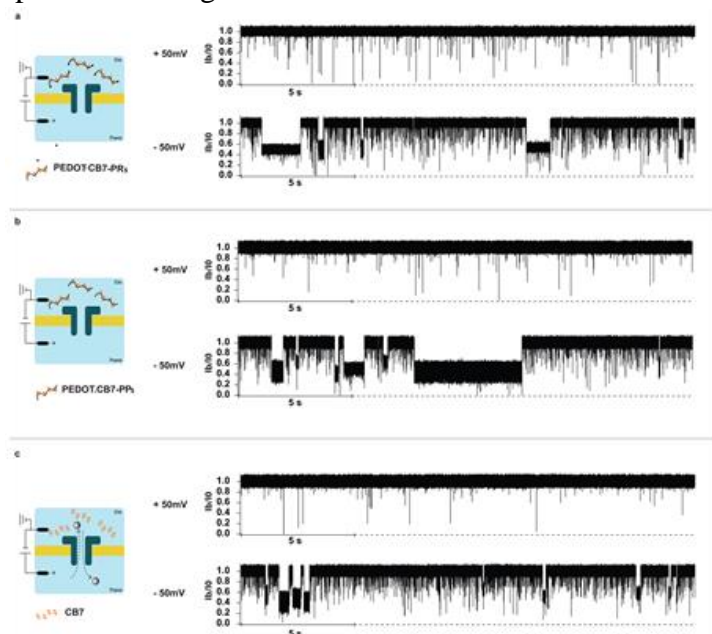


Figura 21. Detectia electrica pentru PEDOT·CB7-PRs (a), PEDOT·CB7-PPs (b) si CB7 (c) in domeniul + 50 si -50 mV.

Concluzii

- In conformitate cu obiectivele propuse in cadrul proiectului "Materiale Semiconductoare Supramoleculare pentru Dispozitive Electronice Organice" SUPRAMOL-MAT, etapa I/2022, precizam ca s-au realizat integral toate activitatile.
- Scopul acestei etape, a fost stabilirea unor conditii optime pentru sinteza de noi macrocicluri si arhitecturi supramoleculare complexe, de tipul PEDOT-CB7 PPs si PEDOT-CB7 PRs, solubili atat in apa cat si in solventi organici.
- Prin rezultatele obtinute in aceasta prima etapa, s-a demonstrat, dupa cum era de asteptat, ca folosind toate mijloacele de investigare existente in ICMPP cat si cu sprijinul colaboratorilor externi, ca proiectul PN-III-P4-PCE-2021-0906, se inscrie intr-o directie de actualitate, la interfata chimia supramoleculara si biologie.
- Rezultatele obtinute in prima etapa de desfasurare a proiectului PN-III-P4-PCE-2021-0906, au fost primele raportate in literatura de specialitate si cu certitudine vor contribui la cresterea vizibilitatii stiintifice romanesti in domeniu.
- Proiectul a decurs conform obiectivelor propuse, si nu s-au intampinat dificultati.

III. Diseminarea rezultatelor etapa I /2022

Articole publicate: 3 in reviste ISI si 1 in proceedings online

Articole publicate

1. A. Farcas, H. Ouldali, C. Cojocaru, M. Pastoriza-Gallego, A.-M. Resmerita, A. Oukhaled
Structural characteristics and the label-free detection of poly(3,4-ethylenedioxythiophene/cucurbit[7]uril) pseudorotaxane at single molecule level, Nano Research 2022, online 03.10.2022, <https://doi.org/10.1007/s12274-022-4918-x>. F.I.=10.29, Q1
2. A. Farcas, M. Damoc, M. Asandulesa, P.-H. Aubert, R. I. Tigoianu, a E. L. Ursu
The straightforward approach of tuning the photoluminescence and electrical properties of encapsulated PEDOT end-capped by pyrene, Journal of Molecular Liquids, MOLLIQ-D-22-07066 (under review). F.I.=6.63 (Q1)
3. A.-M. Resmerita, M. Silion, C. Cojocaru, A. Farcas
Structural and morphological characterization of a new semi-polyrotaxane architecture based on 2-hydroxypropyl- β cyclodextrins and polyisoprene, Reactive & Functional Polymers, REACT-S-22-01046 (under review). F.I.=4.966 (Q2)

Articole publicate in volume ale manifestarilor stiintifice: 2

1. M. Asandulesa, A.-M. Resmerita, A. Farcas, Electrical properties of poly(3,4-ethylenedioxythiophene) threaded by cucurbit[7]uril, "Microelectronics and Nanotechnologies" ATOM N-2022, August 22-25, Constanta-Romania, *Proceedings Online* OMN200-76
2. I. R. Tigoianu, A. Farcas, Photophysical studies of poly(3,4-ethylenedioxythiophene/cucurbit[7]uril) polypseudorotaxane and polyrotaxane by transient absorption and time-resolved fluorescence spectroscopy, 9th International Electronic Conference on Sensors and Applications. Part of the International Electronic Conference on Sensors and Applications series 10 Nov 2022 (online)

Conferinte Invitate

1. A. Farcas, Supramolecular Semiconducting Materials: From Synthesis to Properties and Applications, 22nd November 2022, Universität Osnabrück-FB Biologie/Chemie, 49069-Osnabrück, Germany
2. A. Farcas, Supramolecular Semiconductor Materials for Organic Electronics, 25th November 2022, Bremen University, Germany

Prezentari la manifestari stiintifice internationale: 3

1. M. Asandulesa, A.-M. Resmerita, A. Farcas, Photophysical and electrical properties of poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/ cucurbit[7]uril) polypseudorotaxane (OMN200-76), The 11th edition of the International Conference "Advanced Topics in Optoelectronics, Microelectronics and Nanotechnologies" ATOM N-2022, August 22-25, Constanta-Romania (prezentare orală)
2. A.-M. Resmerita, M. Balan-Porcarasu, A. Farcas, Supramolecular networks based on PEG and PEDOT cross-linked polyrotaxanes as electrical conductive materials (OMN200-55) , The 11th edition of the International Conference "Advanced Topics in Optoelectronics, Microelectronics and Nanotechnologies" ATOM N-2022, August 22-25, Constanta-Romania (prezentare orală)
3. I. R. Tigoianu, A. Farcas, Photophysical studies of poly(3,4-ethylenedioxythiophene/cucurbit[7]uril) polypseudorotaxane and polyrotaxane by transient absorption and time-resolved fluorescence spectroscopy, 9th International Electronic Conference on Sensors and Applications (ECSA-9), 1-15 Nov. 2022 (poster)

Altele:

1. A. Farcas - Program Committee at the 11th edition of the International Conference "Advanced Topics in Optoelectronics, Microelectronics and Nanotechnologies" ATOM N-2022, August 22-25, Constanta-Romania
2. A. Farcas - Program Committee and KEYNOTE SPEAKER at the International Summit on Power and Energy Engineering (ISPEE 2023), 12-14 Jun 2023, Paris France
3. A. Farcas - The board member in the Journal of Composites and Biodegradable Polymers

Director proiect,

Dr. Aurica Farcas