



CNCS



RAPORT STIINTIFIC / 2014

Denumirea proiectului:

"POLIROTAXANI PE BAZA DE POLIMERI CONJUGATI PENTRU APLICATII IN MICRO-OPTOELECTRONICA"

Proiect No. **ID-PCE-2011-3-0035**

Etapă III/2014

Director proiect,

Dr. Aurica Farcas

Membri:

1. Dr. Ana-Maria Resmerita
2. Dr. Iuliana Stoica
3. Dr. Stefanache Andreea
4. Drd. Mihaela Balan

I. Obiectivele proiectului:

Proiectul "*Polirotaxani pe baza de polimeri conjugati pentru aplicatii in opto-electronica*", etapa III/2014, a avut urmatoarele obiective principale:

- 1) Design-ul, sinteza si caracterizarea fizico-chimica a polirotaxanilor conjugati si a polimerilor de referinta (fara arhitecturi rotaxanice);**
- 2) Investigarea proprietatilor opto-electronice si morfologice ale polirotaxanilor conjugati si compararea cu polimerii fara aceste arhitecturi;**
- 3) Testarea ca materiale emiseive pentru aplicatii in opto-electronica, atat a polirotaxanilor cat si a polimerilor de referinta.**

II. Rezultate obtinute - etapa III/2014

In conformitate cu planul de realizare al proiectului "*Polirotaxani pe baza de polimeri conjugati pentru aplicatii in opto-electronica*", etapa 2014, a avut drept obiective urmatoarele directii de cercetare:

- II.1. Sinteza de oligoazometine aromate cu structuri rotaxanice pe lant principal, utilizand drept macrocicluri derivatii permodificati ai ciclodextrinelor (α -ciclodextrina permetilata (PMe- α CD));
- II.2. Studiul comparativ al proprietatilor fotofizice si de utilizare ale copolimerilor alternanti pe baza de 9,9-dioctilfluorena/2,2'-bitiofen inclus in cavitatea β -ciclodextrinei permetilata (PMe β CD) sau β -ciclodextrinei persililalte (PS β CD) si compararea acestora cu cele ale copolimerilor non-rotaxanici;
- II.3. Sinteza polirotaxanului poli (9,9-dioctilfluorena/2,2'-bitiofen/cucurbit[7]uril): proprietati fotofizice si morfologice si compararea acestora cu cele obtinute in cazul polirotaxanilor de la punctul (b);
- II.4. Sinteza polirotaxanului poli (9,9-dioctilfluorena-*alt*-2,7-fluorena inclus in cavitatile ciclodextrinelor permodificate (PMe β CD/PMe γ CDs/PS β CD/PS γ CD);
- II.5. Sinteza polirotaxanilor pe baza de fluorena cu grupe donoare si compusi de incluziune ale unitatilor acceptoare in PS β CD sau PS γ CD.

II.1. Sinteza de oligoazometine aromate cu structuri rotaxanice pe lant principal prin utilizarea PMe- α CD drept componenta macrociclica

Structurile chimice precum si morfologia de suprafata a poliazometinei de referinta (**PA**) si a celei polirotaxanice (**PA-Rot**) sunt redade in Fig. 1. Efectul incapsularii oligoazometinelor aromatice in interiorul cavitatilor PMe- α CD, asupra proprietatilor electrooptice a fost studiat si comparat cu cele ale polimerului de referinta. Sinteza polirotaxanilor, a condus la obtinerea de poliazometine solubile in solventi uzuali, formare de filme transparente cu suprafate netede si uniforme (2D si 3D analize AFM), Fig. 1. Valorile energiei de banda precum si cele ale nivelelor energetice HOMO si LUMO, au fost mai mici decat cele ale polimerului de referinta. Imbunatatirea eficientiei fluorescentei, atat in solutie cat si in filme, recomanda testarea lor in celule fotovoltaice.

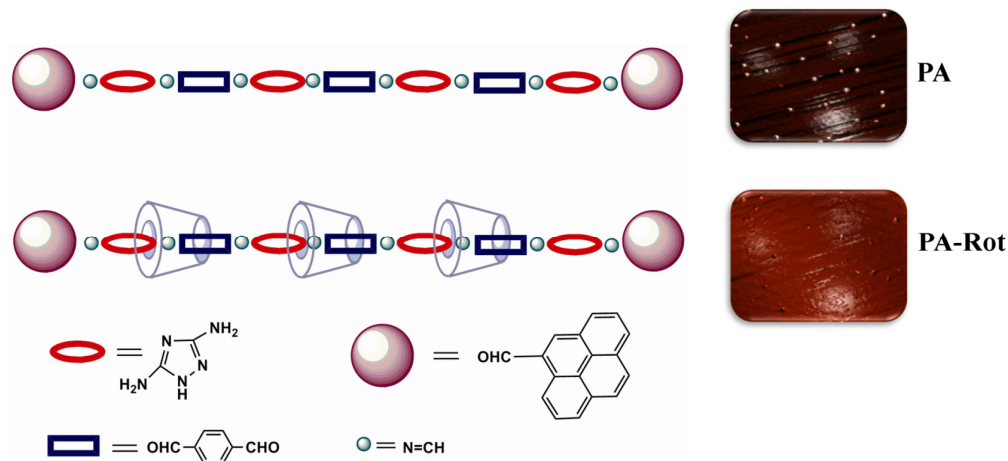


Fig. 1. Structurile chimice si morfologia de suprafata a poliazometinei de referinta (**PA**) si a celei polirotaxanice (**PA-Rot**)

Lucrare publicata:

1. Electrooptical properties of aromatic oligoazomethine/permethylyated β -cyclodextrin main-chain polyrotaxanes; A. Stefanache, M. Balan, V. Harabagiu, P. H. Aubert, P. Guegan, A. Farcas; *Chem. Phys. Lett.*, 599, 104-109, **2014**

II.2. Studiul comparativ al proprietatilor fotofizice si de utilizare ale copolimeri alternanti pe baza de 9,9-dioctilfluorena/2,2'-bitiofen compus de incluziune in PMe β CD sau PS β CD cu a polimerilor de referinta

Structurile chimice ale copolimerilor investigati sunt prezentate in Fig. 2.

Studiul comparativ al proprietatilor fotofizice si de utilizare ale copolimerilor alternanti pe baza de 9,9-dioctilfluorena/2,2'-bitiofen compus de incluziune in PMe β CD sau PS β CD cu ale copolimerului non-rotaxanic, au evidenciat urmatoarele aspecte:

- (1) formarea structurilor polirotaxanice prin utilizarea derivatilor permodificati ai β -ciclodextrinei imbunatateste solubilitatea, posibilitatea de obtinere a filmelor transparente pe diferite suporturi si creste temperatura de tranzitie sticloasa;

- (2) fluorescența prezintă structuri vibronice, iar timpul de viață este monoexponential, ceea ce confirmă reducerea agregărilor intermoleculare, ceea ce a corespuns scopului propus;
- (3) proprietățile redox investigate prin voltametrie ciclică, au indicat posibilitatea de dopare p și n atât în faza de oxidare cât și cea de reducere, Fig. 3.

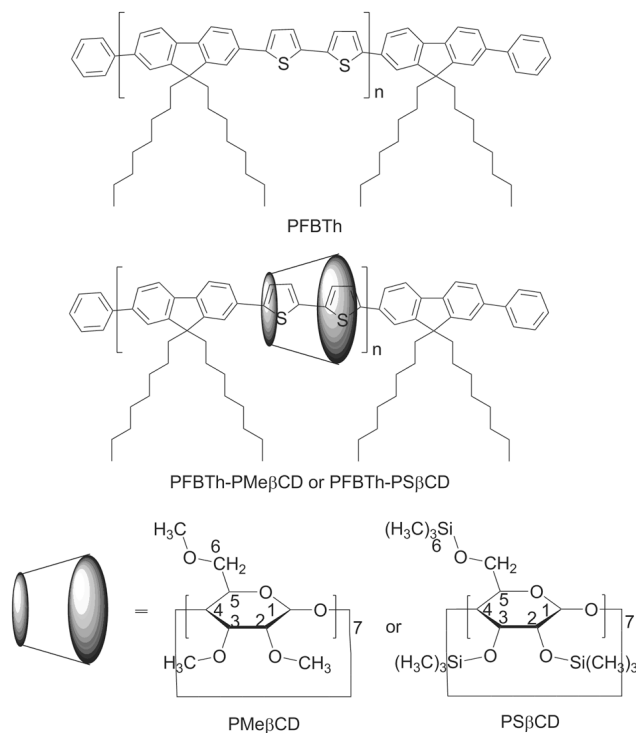


Fig. 2. Structurile chimice ale copolimerului de referință (PF-BTh) și a polirotaxanilor cu PM β CD sau PS β CD (PF-BTh-PM β CD, PF-BTh-PS β CD)

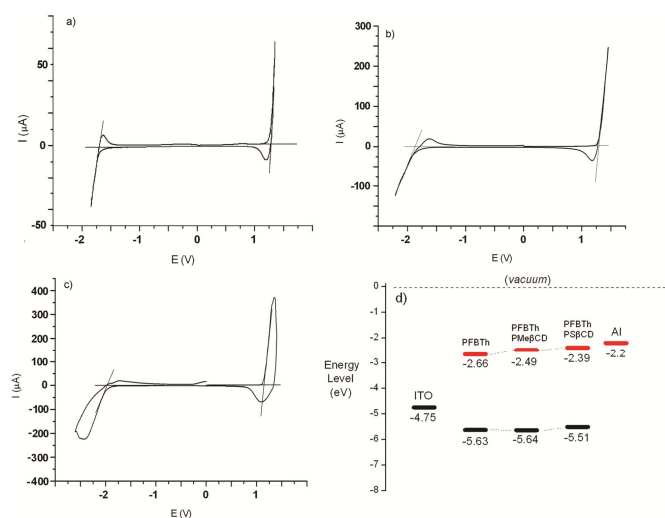


Fig. 3. Voltametrie ciclică pentru: copolimerul de referință PFBTh (a), polirotaxanul PFBTh•PS β CD (b), polirotaxanul PFBTh•PM β CD (c) și nivele energetice HOMO/LUMO având drept referință ITO (anod) și Al (catod)

Obs. Din valorile nivelelor energetice HOMO/LUMO, determinate prin voltametrie ciclica, cat si organizarea macroscopica in fibre, investigata prin metoda AFM, Fig. 4, se poate concluziona ca atat polimerul de referinta cat si polirotaxanii, pot fi utilizati ca materiale emiseive in optoelectronica. In etapa III/2014, am testat doar polimerul de referinta.

Lucrari publicate:

1. Poly[2,7-(9,9-dioctylfluorene)-alt-(5,5'-bithiophene/permethylated β -cyclodextrin)] main chain polyrotaxane: Synthesis, characterization and surface morphology; A. Stefanache, M. Sillion, I. Stoica, A. Fifere, V. Harabagiu, A. Farcas; *Eur. Polym. J.*, 50, 223-234, **2014**
2. Effect of permodified β -cyclodextrin on the photophysical properties of poly[2,7-(9,9-dioctylfluorene)-alt-(5,5'-bithiophene)] main-chain polyrotaxanes; A. Farcas, G. Tregnago, A.-M. Resmerita, S. Taleb Dehkordi, S. Cantin, F. Goubard, P.-H. Aubert, F. Cacialli; *J. Polym. Sci. Part A: Polym. Chem.*, 52, 460-471, **2014**

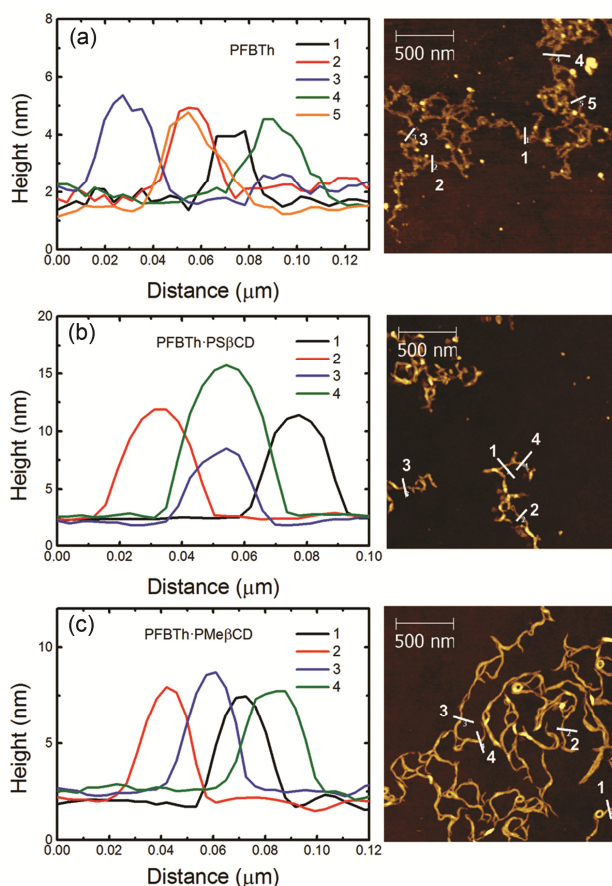


Fig. 4. Imaginile AFM ale filmelor polimerice depuse pe oxid de siliciu ale: PFBTh (a), PFBTh•PS β CD (b), si PFBTh•PMe β CD (c)

II.3. Luand in considerare, rezultatele fotofizice si morfologice obtinute pentru copolimerii alternanti pe baza de 9,9-dioctilfluorena/bitiofen, desi in afara planului de realizare pe anul 2014, am sintetizat un nou polirotaxan avand drept macrociclu cucurbit[7]uril, Fig. 5.

Motivatia principala a fost aceea ca, interactiile hidrofobice intre moleculele gazda/oaspete, sunt mult mai favorabile prin utilizarea de cucurbit[7]uril (CB7) in sinteza de polirotaxani conjugati. Ca rezultat, valoarea constantei de stabilitate (K_s) a bitiofenul inclus in cavitatea CB7 a fost de 700 mol^{-1} . De asemenea eficienta fluorescentei si timpul de viata au crescut semnificativ, Fig. 6.

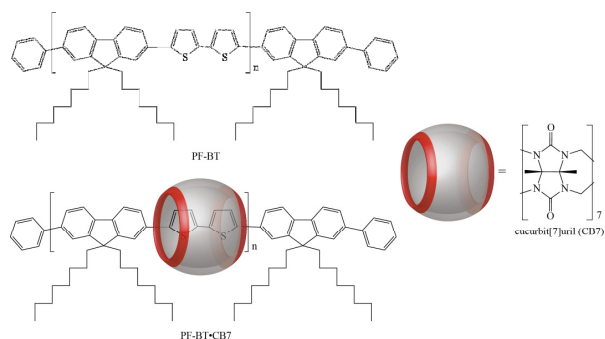


Fig. 5. Structurile chimice ale polimerului de referinta **PF-BT** si a polirotaxanului **PF-BT•CB7**

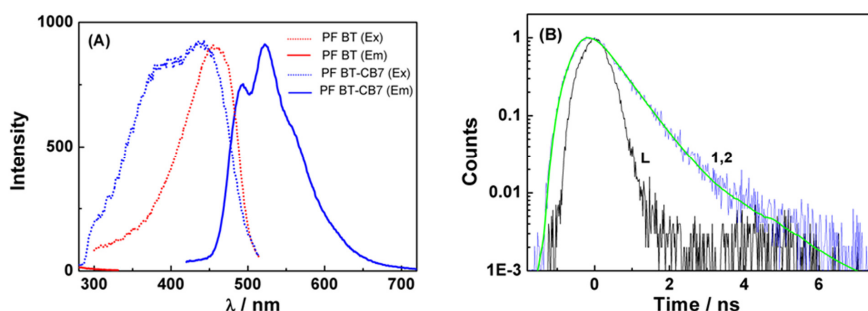


Fig. 6. Spectru de emisie si excitatie normalizata al: (A) **PF-BT** and **PF-BT•CB7**. (B) Timp de viata ($\lambda_{ex} = 373 \text{ nm}$, $\lambda_{em} = 525 \text{ nm}$) la **PF-BT** (1) si **PF-BT•CB7** (2) in THF/DMSO/9:1 (v/v); L este profilul lampei

Proprietatile fotofizice si electrochimice ale polimerilor investigati sunt redade in Tabel 1 si 2.

Tabel 1. Proprietatile fotofizice ale **PF-BT** si **PF-BT•CB7**.

	λ_{abs}^{max} (nm)	λ_{em}^{max} (nm)	θ_f (ps)	θ_f (ps)
PF-BT	450	498, 527	0.52	630
	~470	~560	0.58	
PF-BT•CB7	390	494, 521	0.45	665
	~430	~560	0.50	

Tabel 2. Proprietatile redox ale **PF-BT** si **PF-BT•CB7**

Polymer	$E_{\text{onset},p}^a$ (V)	$E_{\text{onset},n}^a$ (V)	IP (eV)	EA (eV)	ΔE_g^b (eV)
PF-BT	1.12	-1.48	-5.43	-2.83	2.60
PF-BT•CB7	1.05	-1.67	-5.36	-2.64	2.72

^a Potentialele de reducere si oxidare. ^b Energia de banda (ΔE_g)= $EA - IP$.

Investigatiile morfologice de suprafata prin AFM, Fig. 7, au indicat formarea de noi structuri supramoleculare complexe. Flexibilitate redusa a lanturilor macromoleculare, incluse in cavitatile CB7 a permis obtinerea de fire moleculare (*molecular wires*), Fig. 7a.

Prezentul studiu, poate deschide noi oportunitati de cercetare privind obtinerea de *molecular wires*. Trebuie mentionat ca, rezultatele preliminare privind aplicabilitatea acestor polirotaxani, au indicat bune proprietati de utilizare.

Mentionam ca, acest tip de polirotaxan conjugat cu CB7 este primul raportat in literatura de specialitate.

Lucrare publicata online:

Molecular wire formation from poly[2,7-(9,9-dioctylfluorene)-*alt*-(5,5'-bithiophene/cucurbit[7]uril)] polyrotaxane copolymer; A. Farcas, P.-H. Aubert, J. Mohanty, A. I. Lazar, S. Cantin, W. M. Nau; Eur. Polym. J. (EPJ6629 online - 26th Nov **2014**).

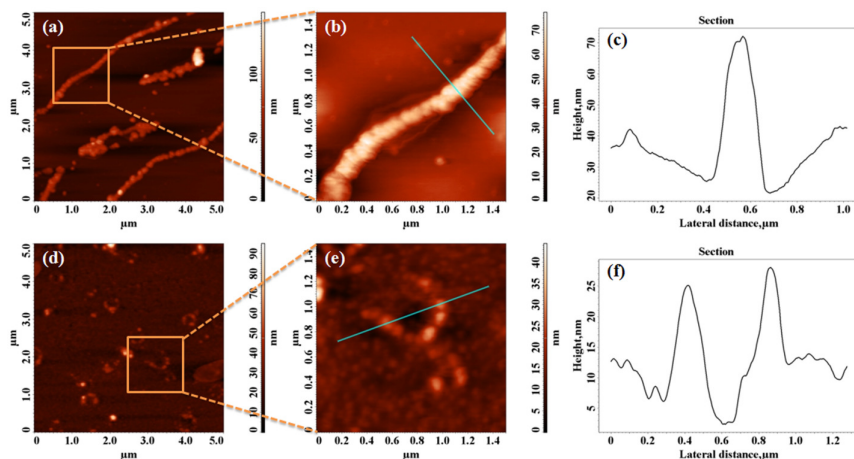


Fig. 7. Imagini 2D obtinute prin AFM al: **PF-BT•CB7** (a, b), **PF-BT** (d, e) si profilul lor in sectiune (c, f)

II.4. Sinteza polirotaxanului poli (9,9-dioctilfluorena-*alt*-2,7-fluorena/PMe β CD sau PMe γ CD)

Structurile chimice ale copolimerilor polirotaxanici sintetizati si preliminar investigati sunt prezentate in Fig. 8.

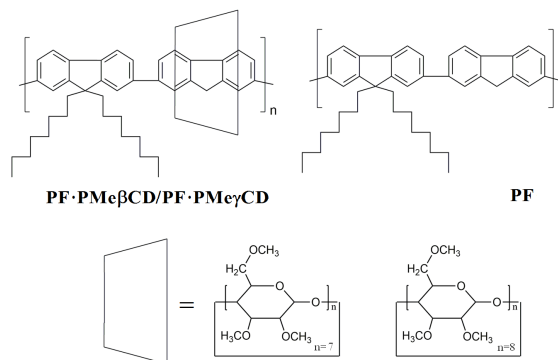


Fig. 8. Structurile polirotaxanilor **PF·PMeβCD**, **PF·PMeγCD** si a polimerului de referinta **PF**

Caracteristicile fizico-chimice ale polirotaxanilor **PF·PMeβCD**, **PF·PMeγCD** si a polimerului de referinta **PF**, sunt prezentate in Tabel 3.

Table 3. Caracteristicile fizico-chimice ale **PF**, **PF·PMeβCD** si **PF·PMeγCD**

	M_n	M_w	M_w/M_n	T_g (°C)
PF·PMeβCD	24300	47628	1.96	152
PF·PMeγCD	20100	45024	2.24	128
PF	27900	51057	1.83	93

Studiile de voltametrie ciclica au permis determinarea valorilor benzilor energetice (HOMO, LUMO) si a energiei de banda (E_g), Tabel 4.

Tabel 4. Proprietati electrochimice.

Polimer	E_{ox} , (onset) V	E_{red} (onset) V	HOMO level eV	LUMO level eV	$\square E \sim E_g$ V (or eV)	Optical E_g eV
PF	1.5	-1.95	-5.86	-2.41	3.45	3.35
PF-PMeβCD	1.45	-1.71	-5.81	-2.65	3.16	3.32
PF-PMeγCD	1.42	-2.02	-5.78	-2.34	3.44	3.26

Testarea proprietatilor de aplicabilitate ale polirotaxanilor pe baza de poli (9,9-dioctilfluorena-alt-2,7-fluorena) cu derivati permodificati ai ciclodextrinelor, ca PLED-uri, vor fi continuate si in etapa IV/2015.

II.5. Sinteza polirotaxanilor pe baza de fluorena cu grupe donoare si compusi de incluziune ale unitatilor acceptoare in β- sau γ-ciclodextrina persililata, distribuite statistic intre lanturile de poli(9,9-dioctil fluorena)

Structurile copolimerilor statistici sintetizati sunt redade in Fig. 9.

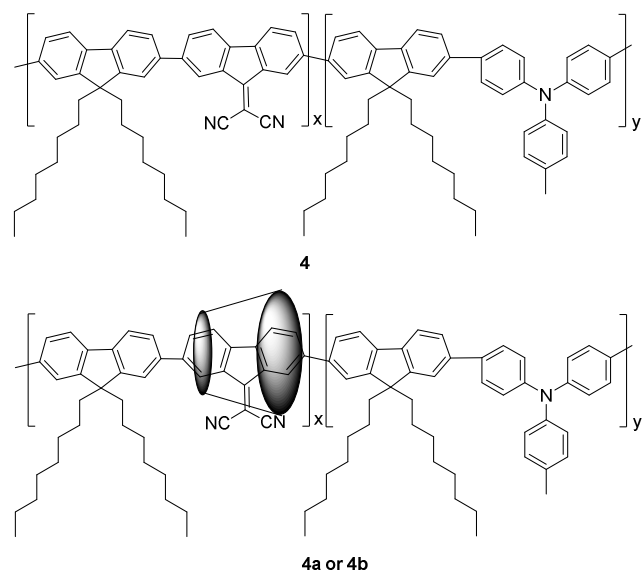


Fig. 9. Structurile chimice ale polymerului statistic cu unitati donor-acceptor non rotaxanic (**4**) si a polirotaxanilor cu PS- β CD sau PS- γ CD (**4a** sau **4b**)

Structurile chimice au fost confirmate prin spectroscopie IR si RMN, Fig. 10. Prin integrarea ariei caracteristice protonului din pozitia 1 al Ps β CD (5.29 ppm, I_H^1) si protonul grupei aromatice de la 7.78-7.69 ppm, (I_{l+m+n}); ($I_H^1/7$)/($I_{l+m+n}/6$), s-a calculat un raport de incapsulare de 0.43 (*ca.* 43.2 %). Un grad de incluziune mai mic a fost determinat in cazul polirotaxanului **4b** datorita dimensiunii mai mari a cavitatii interioare a Ps γ CD.

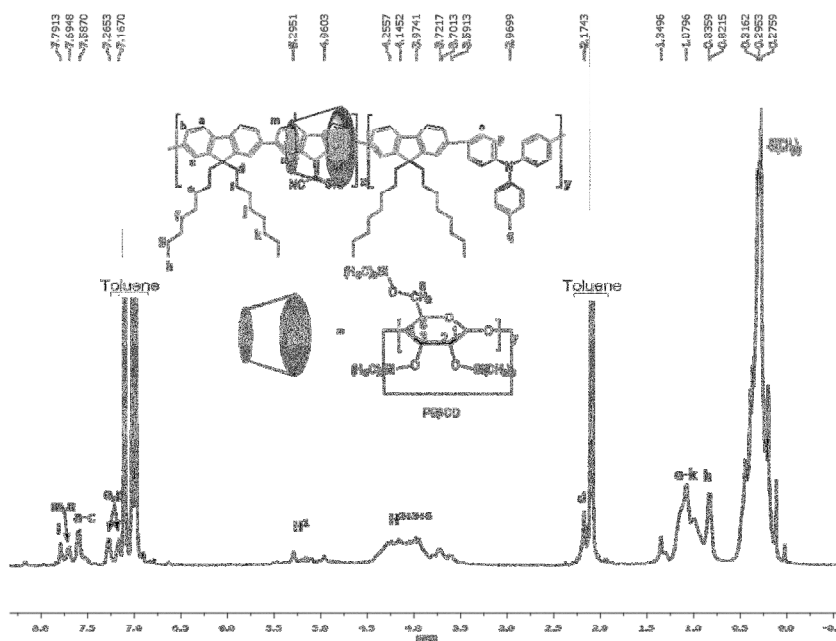


Fig. 10. Spectru ^1H -RMN al polirotaxanului **4a** in toluen- d_8

Proprietatile optice si electrochimice sunt redate in Tabel 5 si 6.

Tabel 5. Proprietatile optice ale copolimerilor

Polimer	λ_{abs}^a (nm)	λ_{em}^b (nm)	λ_{abs}^c (nm)	λ_{em}^d (nm)	Φ^e (%)	τ_1^f (ns)	τ_2^f (ns)	χ^2^g	E_{opt}^h (eV)
4	379	441	383	418; 531	7.00 ⁱ	0.88	1.56	0.935	2.89
4a	383	443	385	418; 530	17.60	-	1.03	1.029	2.88
4b	381	442	383	419; 527	16.27	-	1.14	0.997	2.90

^a Absorbtia in solutie diluata de DCM [$c = 1.5 \cdot 10^{-3} \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$]. ^b Emisia in solutie diluata de DCM [$c = 1.5 \cdot 10^{-3} \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$]. ^c Absorbtia in film subtire obtinut prin spin-coating din solutie de DCM. ^d Emisia in film subtire obtinut prin spin-coating din solutie de DCM. ^e Eficienta fluorescentei masurata din solutie diluata de DCM [$c = 1.5 \cdot 10^{-3} \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$]. ^f Timp de viata. ^g Chi square. ^h Energia de banda optica, E_{opt} , valoare estimata din onset-ul absorbtiei ($E_{opt} = 1240/\lambda_{onset}$).

Tabel 6. Proprietatile redox ale copolimerilor

Sample	4	4a	4b
P Oxidare ^a (E_{ox_onset}) (V)	1.04	0.82; 1.15	1.05
o Reducere ^b (E_{red_onset}) (V)	-1.75	-2.02	-2.09
t	-2.10		
e IP~ E_{HOMO}^c (eV)	-5.4	-5.51	-5.41
n EA~ E_{LUMO}^d (eV)	-2.26	-2.43	-2.27
a ΔE_g^e (eV)	3.14	3.08	3.13
p			

^a Potential de oxidare. ^b Potențial de reducere. ^c Potential de ionizare $IP = +e (E_{p,onset} - E_a^{1/2} Fc) + IP_{Fc}$, unde: $E_a^{1/2} Fc$ potentialul de injumatatire pentru reactia de reducere reversibila a cuplului redox (Fc^+/Fc); valoare potentialului de ionizare al Fc (IP_{Fc}) = 4.76 eV. ^d Afinitatea electronica $EA = +e (E_{n,onset} - E_c^{1/2} Fc) + EA_{Fc}^+$, unde: $E_c^{1/2} Fc$ potentialul de injumatatire pentru reactia de oxidare reversibila a cuplului redox (Fc^+/Fc); valoarea afinitatii electronice a cationului Fc (EA_{Fc}^+) = 4.76 eV. ^e Energia de banda electrochimica (ΔE_g)=EA-IP.

Diagrama energetica (HOMO/LUMO) comparata cu cea a ITO, a poli(3,4-etilendioxitiofen): polistirensulfonat (PEDOT:PSS) (anod) si Ca sau Al (catod) a indicat clar ca toti copolimerii sintetizati pot fi utilizati ca materiale emise in obtinerea de PLED-uri, Fig. 11.

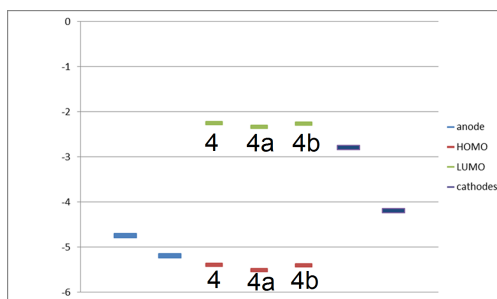


Fig. 11. Diagrama energetica HOMO/LUMO dispusa intre ITO si poli(3,4-etilendioxitiofen):poli(stirensulfonat) (PEDOT:PSS) (anod) si Ca sau Al (catod)

Morfologia filmelor polimere, precum si valorile parametrilor de suprafata, au indicat formarea de structuri globulare asociate cu valori mai mici ale exponentului de rugozitate pentru structurile polirotaxanice, Fig. 12

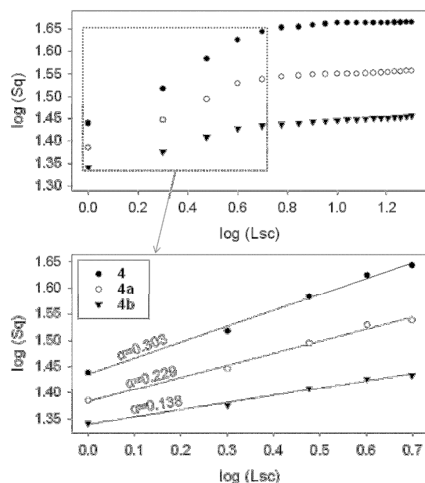


Fig. 12. Exponentul de rugozitate, α , calculat din $\log(Lsc)$ versus $\log(Sq)$, pentru polimerul de referinta **4**, respectiv pentru polirotaxanii **4a** si **4b**

Lucrare publicata:

1. The effect of permodified cyclodextrins encapsulation on the photophysical properties of a polyfluorene with randomly distributed electron-donor and rotaxane electron-acceptor units; A. Farcas, A.-M. Resmerita, P.-H. Aubert, I. Stoica, F. Farcas, A. Airinei; Beilstein J. Org. Chem., 10, 2145-2156, **2014**

III. Concluzii

In etapa III/2014 de desfasurare a proiectului **ID-PCE-2011-3-0035** au fost sintetizate, caracterizate si investigate din punct de vedere al proprietatilor optice si morfologice, patru clase de polirotaxani cu polimeri conjugati precum si patru polimeri conjugati de referinta, dupa cum urmeaza: oligoazometine aromatice cu PMe- α CD; copolimeri alternanti pe baza de fluorena/bitiofen inclus in cavitatile interioare ale PS β CD, PMe β CD si CB7; poli(9,9-dioctilfluorena-*alt*-2,7-fluorena/PMe β CD sau PMe γ CD); copolimeri pe baza de derivati de fluorena cu unitati donoare si acceptoare incluse in cavitatile interioare ale PS β CD respectiv PS γ CD, distribuite statistic pe lantul de poli(9,9-dioctilfluorena).

Proprietatile fotofizice investigate, au demonstrat urmatoarele:

1. imbunatatirea solubilitatii polimerilor conjugati in solventi organici uzuali si formarea de filme transparente cu buna adezitate pe suporturi, *ex.* poliazometinele aromatice;

2. creșterea temperaturii de tranziție sticloasă;
3. îmbunătățirea emisiei de fluorescență și a timpilor de viață;
4. obținerea de filme uniforme cu forțe de adeziune slabe, argumentând astfel rolul încapsulării în diminuarea interacțiunilor intermoleculare, ex. copolimeri alternanți pe baza de fluorena/bitiofen.

Trebuie menționat încă o dată că, deși neincluși în planul de realizare pe etapa III/2014 copolimerii pe baza fluorena/bitiofen/CB7, au condus la obținerea de molecular wires cu perspective deosebite de interesante pentru aplicații în optoelectronică, prin comparare cu asocierea în fibre moleculare obținute în cazul încapsulării în $\text{PMe}\beta\text{CD}$ sau $\text{PS}\beta\text{CD}$, Fig. 13 dreapta.

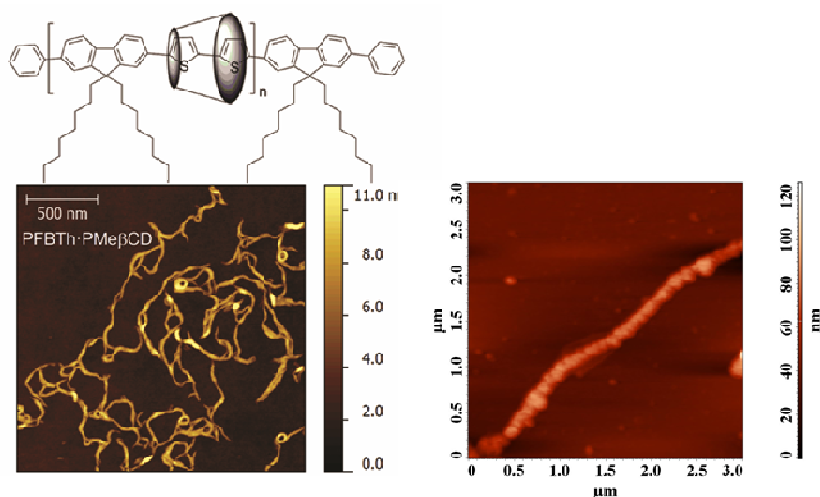


Fig.13. Imaginile AFM comparative ale filmelor polimerice depuse pe oxid de siliciu: PF-BT/ $\text{PMe}\beta\text{CD}$ (stanga) și PF-BT/CB7 (dreapta)

Rezultatele cercetărilor efectuate până în prezent, ne-a permis să dezvoltăm cunoașterea într-un domeniu interdisciplinar, de mare actualitate și să promovăm o cercetare colaborativă cu specialiști din domeniul chimiei supramoleculare, interesați la fel ca și noi de posibilitatea de aplicare în micro-optoelectronică. Prin rezultatele obținute în aceste 3 etape de desfășurare a proiectului, cu toate mijloacele de investigare existente, atât în țară cât și cu sprijinul colaboratorilor externi, s-a demonstrat, după cum era de așteptat că, proiectul se înscrie într-o direcție de actualitate, cea a chimiei supramoleculare și abordează noi clase de structuri supramoleculare complexe de tip polirotaxanic cu polimeri conjugați, ca materiale emise cu aplicații certe în optoelectronică.

IV. Diseminarea rezultatelor etapa-2014

IV.1. Articole publicate în reviste cotate de Web of Science (Thomson Reuters)

1. Electrooptical properties of aromatic oligoazomethine/permethylated β -cyclodextrin main-chain polyrotaxanes; A. Stefanache, M. Balan, V. Harabagiu, P. H. Aubert, P. Guegan, A. Farcas; Chem. Phys. Lett., 599, 104-109 (2014);

2. Poly[2,7-(9,9-dioctylfluorene)-alt-(5,5'-bithiophene/permethylated β -cyclodextrin)] main chain polyrotaxane: Synthesis, characterization and surface morphology; A. Stefanache, M. Sillion, I. Stoica, A. Fifere, V. Harabagiu, A. Farcas; Eur. Polym. J., 50, 223-234 (2014);
3. Effect of permodified β -cyclodextrin on the photophysical properties of poly[2,7-(9,9-dioctylfluorene)-alt-(5,5'-bithiophene)] main-chain polyrotaxanes; A. Farcas, G. Tregnago, A.-M. Resmerita, S. Taleb Dehkordi, S. Cantin, F. Goubard, P.-H. Aubert, F. Cacialli; J. Polym. Sci. Part A: Polym. Chem., 52, 460-471 (2014);
4. The effect of permodified cyclodextrins encapsulation on the photophysical properties of a polyfluorene with randomly distributed electron-donor and rotaxane electron-acceptor units; A. Farcas, A.-M. Resmerita, P.-H. Aubert, I. Stoica, F. Farcas, A. Airinei; Beilstein J. Org. Chem., 10, 2145-2156 (2014);
5. Molecular wire formation from poly[2,7-(9,9-dioctylfluorene)-alt-(5,5'-bithiophene/cucurbit[7]uril)] polyrotaxane copolymer; A. Farcas, P.-H. Aubert, J. Mohanty, A. I. Lazar, S. Cantin, W. M. Nau; Eur. Polym. J. (EPJ6629 online - 26th Nov 2014).

IV.2. Conferințe prezentate la manifestări științifice internaționale

1. A. Farcas, A.- M. Resmerita, P.- H. Auber

The Effect of permodified γ CD encapsulation on the photophysical properties of a polyfluorene modified with randomly distributed electron-donor and electron-acceptor structural units

ICS17 Congress, 29-31 May, **2014**, Saaarbrucken, Germany

IV.3. Conferințe invitate/plenare/keynote prezentate la manifestări științifice naționale

1. A. Farcas

Conjugated polyrotaxanes and their unthreaded analogues: properties and opportunities for electronic applications

XXXIII-rd Romanian chemistry conference, 1-3 October, **2014**, Calimanesti-Caciulata, Valcea Romania

2. A. Farcas

Supramolecular chemistry: The effect of permodified cyclodextrin encapsulations in photophysical and morphological properties of conjugated polymers for organic electronics applications

“Alexandru Ioan Cuza” University Days, October 31st – November 1st, **2014**, Iasi Romania

IV.4. Postere prezentate la manifestări științifice naționale

1. A.-M. Resmerita, A. Lupu, I. Stoica, M. Balan, A. Rotaru, A. Farcas
Photophysical properties of alternating poly(fluorene-bithiophene) main-chain polyrotaxanes

XXXIII-rd Romanian chemistry conference, 1-3 October, **2014**, Calimanesti-Caciulata, Valcea Romania

IV.5. Teza de doctorat sustinuta

- Andreea Craita STEFANACHE (cas. Lupu), "*Polimeri conjugati cu arhitectura rotaxanica*", 23 aprilie 2014

V. Rezultate preconizate in etapa IV/2015

V.1. Continuarea cercetarilor conform temei program etapa IV/2015

- Sinteza si investigatiile fotofizice si morfologice ale polirotaxanilor pe baza de poliazometine si α -ciclodextrina persililata;
- Sinteza si investigatiile privind aplicabilitatea polifluorenelor incapsulate in derivatii permodificati ai ciclodextrinelor;
- Investigatiile caracteristicilor curent-voltaj in intuneric ale structurilor hibride pe baza de sticla/(TCO)/ZnO/polimeri conjugati (polirotaxani)/Ag pentru construirea de celule solare;
- continuarea investigatiilor privind aplicabilitatea in celule fotovoltaice si (sau) OLED-uri/PLED-uri a polimerilor si polirotaxanilor conjugati

V.2. Articole ce vor fi publicate

- Publicarea a cel putin 2 articole in reviste cotate ISI

V.3. Publicarea unei carti

A. Stefanache (Lupu), A. Farcas

Polirotaxani conjugati pentru optoelectronica

V.4. Publicarea a 2 capitole de carte invitate, de catre editura John Willey&Sons. Inc, ce vor fi publicate in Encyclopedia of Physical Organic Chemistry / 2015

1. A. Farcas, P.-H. Aubert

Electrochemical studies of conjugated polyrotaxanes and their unthreaded analogues

2. A. Farcas, A.-M. Resmerita

Supramolecular chemistry: synthesis and photophysical characteristics of conjugated polyrotaxanes

5.5. Sustinerea publica a unei teze de doctorat in sem II/2015

- Mihaela Balan, "*Tehnici RMN pentru caracterizarea ciclodextrinelor si a complexilor de incluziune ai acestora*"