

## Formulár ZK - Záverečná karta projektu

<b>Riešiteľ:</b> doc. Ing. Dušan Velič, PhD.	<b>Evidenčné číslo projektu:</b> APVT-20-029804
<b>Názov projektu:</b> Funkčná supramolekulová povrchová nanoštruktúra na báze cyklodextrínov	
<b>Na ktorých pracoviskách bol projekt riešený:</b>	Medzinárodné laserové centrum
	Prírodovedecká fakulta UK
	Fyzikálny ústav SAV
	Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU
	Chemický ústav SAV
<b>Ktoré zahraničné pracoviská spolupracovali pri riešení (názov, štát):</b>	prof. R. J. Levis, Temple University, USA
	prof. A. Bald, Lodz University, Polsko
<b>Udelené patenty alebo podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory vychádzajúce z výsledkov projektu:</b>	predbežný názov patentu: "Filmy na báze derivátov cyklodextrínu s iónovými skupinami"
	-
	-
<b>Publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu (uved'te i publikácie prijaté do tlače alebo pripravované):</b>  <i>Uvádzajte maximálne päť najvýznamnejších publikácií.</i>	L. Rabara, M. Aranyosiova, D. Velic, Supramolecular host-guest complexes based on cyclodextrin-diphenylhexatriene, Appl. Surf. Sci. 252, 7000, 2006
	I. Bugar, M. Zitnan, D. Velic, G. Cik, D. Chorvat, Fluorescence study of intrachain and interchain ultrafast processes in domain-structured polythiophene, Synthetic Metals 157 (2007) 834–840
	Lorenc D., Velic D., Markevitch, A. N., Levis R. J., Adaptive femtosecond pulse shaping to control supercontinuum generation in a microstructure fiber, Optics Communications 276 (2): 288-292 AUG 15 2007
	M. Aranyosiova, A. Chorvatova, D. Chorvat jr., Cs. Biro, D. Velic, Analysis of cardiac tissue by gold cluster ion bombardment, Appl. Surf. Sci. 252, 6782, 2006
	M. Zitnan, J. Bdzech, I. Bugar, V. Szocs, T. Palszegi, M. Janek, D. Chorvat, D. Velic, Fluorescence Dynamics of Coumarin on Montmorillonite Structure, Femtochemistry and Femtobiology. Elsevier 2006. p. 420-423
<b>V čom vidíte uplatnenie výsledkov tohto projektu:</b>	Poznatky z prevažne základného výskumu o príprave supramolekulových povrchových štruktúr sa plánujú uplatniť v praxi prostredníctvom aplikovaného APVV projektu.

**Podpisom záverečnej karty riešiteľ vyjadruje svoj súhlas ku zverejneniu údajov v nej uvedených.**

**Podpis riešiteľa:** .....

**Dátum:** .....

# Charakteristika výsledkov

Evidenčné číslo: APVT-20-029804

## Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - slovensky:

Projekt poskytol výskum a integráciu vedeckých poznatkov z teoretického aj experimentálneho hľadiska so zameraním na prípravu modelovej funkčnej povrchovej nanoštruktúry. Skúmaný systém pozostáva z troch komponentov, pre možné praktické využitie je zvolená pevná podložka vo forme povrchu, na nej je základný systém nanoštruktúry na báze modifikovaných molekúl cyklodextrínu a tretím je potenciálne funkčný molekulárny komponent. Funkčný komponent vytvára pritom s cyklodextrínom hosť-ohosť komplex. Modelovým systémom bol zlatý povrch / tiolovaný cyklodextrín / klaster železa. Cyklodextrín je chemicky naviazaný na zlatom povrchu, tvoriac relatívne usporiadanú povrchovú štruktúru. Železo je deponované na štruktúru po termálnom odparení. Naviazaný cyklodextrín na povrchu so svojou otvorenou dutou kavitou vytvára priestor pre inkluzívne naviazanie klastra železa, poskytujúc relatívne usporiadanú distribúciu klastrov na povrchu. Tejto interpretácii predchádzali experimenty a výpočty aj na podobných modelových systémoch s nasledujúcimi výsledkami a naplnenými cieľmi. Metodika bola otestovaná na systémoch ako cyklodextríny, polytiofény, montmorillonity, AOT micely, cyklodextríny a AOT micely a bio-chemické vzorky s podobnou komplexnosťou štruktúry a zloženia. Rýchlostná konštanta pre alkalickú hydrolyzu kumarínu bola minimálna, čo znamená, že tieto látky sú v kontakte s cyklodextrínmi dobre chránené voči hydrolyze a teda potvrdzujú tvorbu komplexu. Nelineárna odozva optického vlákna kontrolovaná amplitúdovou a fázovou moduláciou priniesla možnosť spektrálnej kontroly s perspektívou novej detekčnej schémy pre povrchové štruktúry. Bolo potvrdené, že zvýšenie koncentrácie Na iónov v montmorillonitovej štruktúre spôsobuje spomalenie hydratačnej dynamiky komplexu s kumarínom. Zvládla sa alternatívna príprava  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  a  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  nanočastíc s malou disperziou veľkosti (12%) vysokoteplotnou syntézou z organických solí. Výhoda klastrových primárnych iónov  $\text{Au}_3^+$  sa prejavila pri SIMS meraní spektier supramolekulových komplexov cyklodextrínu s difenylhexatriénom tvorených v pomeroch hosť-ohosť 1:1, 1:2 a 2:1. Záverom treba povedať, že supramolekulová povrchová nanoštruktúra bola pripravená a jej aplikačné testovanie bude predmetom ďalších skúmaní.

## Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - anglicky:

The project provided research and integration of results from theoretical and experimental points of view with a focus on a preparation of model functional surface nanostructure. Studied system consists of three components, a solid surface support for a practical utilization, base of a surface nanostructure in a form of chemically modified cyclodextrine, and the third component represents a potential functional molecular species. The functional component forms then with cyclodextrine a host-guest complex. A model system was gold surface / thiolated cyclodextrine / iron cluster. Cyclodextrine is chemically attached on gold surface forming relatively semi-ordered structure. Iron was deposited on the surface structure by using thermal evaporation. The attached cyclodextrine with an open hollow cavity on the surface provides a space for inclusive attachment of the iron nanocluster forming a semi-ordered distribution of the clusters on the surface. This interpretation was suggested based on experiments and calculations involved also other modeled systems with supporting results and along of fulfilled project goals. Methods were tested on following systems as cyclodextrines, polythiophenes, montmorillonites, AOT micelles, cyclodextrines and AOT micelles, and biochemical samples with similar complexity of structure and composition. Rate constant of alkaline hydrolysis of coumarin was minimal suggesting that these molecules are well protected against hydrolysis in a presence of cyclodextrine, supporting the formation of the host-guest complex. Nonlinear response of the optical fiber controlled with modulation of phase and amplitude provided option how to spectrally control a prospective detection scheme of the surface structure. The increase of Na ion concentration in the montmorillonite structure resulted in the decrease of the coumarin complex hydration dynamics rate. An alternative preparation of  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  and  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  nanoparticles with a small dispersion of size (12%) was provided by using high temperature synthesis of organic salts. The advantage of the  $\text{Au}_3^+$  primary ions was clear in SIMS measurements for detecting supramolecular cyclodextrine complexes with diphenylhexatriene formed in host-guest ratios of 1:1, 1:2 and 2:1. As a conclusion, the supramolecular surface nanostructure was prepared and its application test experiments will proceed in a future project.

Podpis riešiteľa: .....