

Celem projektu jest zbadanie procesu samoorganizacji nanocząstek ze zmodyfikowaną powierzchnią. Zamierzamy badać dwie grupy nanocząstek: cząstki Janusa i "włochate" nanocząstki. Wybrany temat jest fascynujący z czysto poznawczego punktu widzenia i dotyczy fundamentalnych problemów fizyki i chemii. Z drugiej strony, proces samoorganizacji ma podstawowe znaczenie w nanotechnologii.

Spontaniczna organizacja cząsteczek jest podstawowym sposobem budowania złożonych struktur w organizmach żywych. Zainspirowani przez Nature chemicy, dostrzegli możliwość otrzymywania materiałów nowej generacji poprzez samoorganizację specjalnie zsyntetyzowanych "cegielek". Nanocząstki stanowią szczególnie obiecującą "cegielek", ponieważ wykazują unikalne właściwości fizyczne. Kontrolowane "układanie" nanocząstek w uporządkowane struktury prowadzi do wytworzenia nowych materiałów, które znajdują liczne zastosowania w elektronice, diagnostyce i terapii medycznej, fotonice.

Spółrod nanocząstek o zmodyfikowanej powierzchni najbardziej znane są cząstki Janusa. Nazwa pochodzi od Janusa, rzymskiego boga o dwóch twarzach. Ich powierzchnia składa się z dwóch płatów o różnych właściwościach. Ta specyficzna budowa powoduje, że mogą tworzyć różne agregaty i skomplikowane struktury uporządkowane. Podobnie, "włochate" nanocząstki mogą być wykorzystane do tworzenia precyzyjnie zaprojektowanych materiałów. "Włochate" nanocząstki składają się z "rdzenia", do którego "przyczepiono" polimerowe włochate. Stanowią hybrydowe "cegielek", które łączą w sobie cechy rdzenia i szczotki polimerowej.

Sterowanie procesem samoorganizacji wymaga zrozumienia zachowania się nanocząstek w różnych warunkach. Dlatego zamierzamy zbadać efektywne oddziaływania między nanocząstkami, ich samoorganizację w różnych warunkach, przemiany fazowe w takich układach, zachowanie się nanocząstek na granicy faz oraz adsorpcję małych cząsteczek na powierzchni nanocząstek.

Opracowanie teorii samoorganizacji stanowi trudne wyzwanie. Zamierzamy stosować dwa typy technik badawczych: symulacje komputerowe oraz teorię funkcjonalną gęstości. Będziemy prowadzić symulacje metod Monte Carlo i metod dynamiki molekularnej.

Badania powinny znacznie rozszerzyć naszą wiedzę o nanocząstkach i ich samoorganizacji. Wyniki mogą być wykorzystane do projektowania różnych "sprytnych" materiałów.