

Badania w naszym projekcie dotyczą modelowania komputerowego struktur, jakie, dzięki oddziaływaniom wzajemnym, mogą tworzyć cząsteczki chemiczne osadzone na powierzchniach krystalicznych takich jak np. powierzchnia grafitu czy ścianki kryształów metali szlachetnych. Naszym zamiarem jest projektowanie uporządkowanych warstw molekularnych poprzez odpowiedni dobór parametrów cząsteczki-budulca. Przedmiotem proponowanych badań będą warstwy adsorpcyjne, w których proste cząsteczki organiczne o rozgałęzionej budowie, dzięki krótkozasięgowym oddziaływaniom wzajemnym (np. wiązania wodorowe lub halogenowe) tworzą rozległe planarne połączenia organiczne. Głównym celem projektu jest zbadanie wpływu czynników takich jak rozmiar, geometria i skład chemiczny cząsteczki-budulca (liczba i rozmieszczenie centrów oddziaływania), temperatura, podłoża, koncentracja powierzchniowa oraz wielkość oddziaływania między cząsteczkowymi na morfologię otrzymywanych układów supramolekularnych. Równocześnie celem badań jest określenie sposobów efektywnego programowania oddziaływania między cząsteczkowymi w rozważanych układach powierzchniowych w celu otrzymania warstwy o zrobinowatej periodycznej i nieuporządkowanej budowie. Naszym celem jest sformułowanie ogólnych reguł pozwalających na projektowanie zaadsorbowanych superstruktur cząsteczkowych, w tym sieci porowatych, zawierających organiczne jednostki strukturalne o nieliniowej geometrii. Wykorzystując symulacje komputerowe dla prostych modeli siatkowych i cięgłych pragniemy zweryfikować hipotezy zakładające, że poprawne prognozowanie architektur cząsteczkowych omawianego typu może odbywać się za pomocą metod teoretycznych nie wymagających szczegółowej wiedzy na temat struktury atomowej/elektronowej.

Zasadniczym przesłanką do podjęcia badań jest rosnące znaczenie praktyczne nowych nanomateriałów o zadanych funkcjach chemicznych, biologicznych, magneto-optycznych itp. Organiczne sieci supramolekularne są doskonałym przykładem programowalnych układów cząsteczkowych, które spełniają mogą wymienione funkcje w bardzo szerokim obszarze zastosowań praktycznych. Matryce supramolekularne z osadzonymi w porach cząsteczkami obcymi (magnetycznymi, biologicznymi, kropkami kwantowymi) służą mogą jako sensory w analizie chemicznej i diagnostyce medycznej, katalizatory, fotoczułe elementy w optoelektronice, pamięć masowa nowej generacji itp. Uporządkowane warstwy porowate stanowią mogą także podłoża dla wzrostu kryształów i innych obiektów trójwymiarowych według geometrii narzuconej przez strukturę samej warstwy powierzchniowej. Pory w dwuwymiarowej architekturze tych materiałów mogą być także ograniczeniem przestrzennym dla reakcji chemicznych oraz ruchu translacyjnego zaadsorbowanych cząsteczek. Wspomniane właśnie cięgi i przewidywane zastosowania pokazują ogromny potencjał aplikacyjny supramolekularnych sieci cząsteczkowych, który wykorzystany może być w rozmaitych dziedzinach życia ludzkiego.

Rezultaty planowanych badań dadzą odpowiedź na szereg pytań związanych z relacją: cząsteczka-budulec – dwuwymiarowa struktura supramolekularna. Dotyczy to zwłaszcza sformułowania ogólnych wskazówek pomocnych w projektowaniu nowych ligandów organicznych i warunków ich efektywnego stosowania. Wskazanie na określony typ geometrii cząsteczki jako gwarant formowania sieci molekularnej o zadanej strukturze może być bardzo pomocne w preselekcji molekuł o optymalnym kształcie. Pozwoli to na przykład na ograniczenie liczby testowych syntez nowych cząsteczek i skoncentrowaniu się na tej, której własności (kształt, rozmiar, wiązania) zapewniają samoorganizację określonego typu. Nasze rezultaty będą nie tylko uzupełnieniem lub opisem już istniejących danych ale także istotnym wkładem w poznanie nowych cech badanych układów. Co istotne, opracowana metodologia badań może mieć charakter ogólny i być wykorzystana w badaniu innych układów o zbliżonych właściwościach.