

Główną ideą projektu naukowego będzie zbadanie wpływu wysokiego ciśnienia oraz ograniczenia przestrzennego realizowanego poprzez zastosowanie materiałów porowatych o kontrolowanej rednicy i geometrii porów na:

- Poliaddycję wybranych układów aminowo-epoksydowych,
- Polimeryzację przebiegającą z otwarciem pierścienia laktonowego (tzw. ROP polimeryzacja) na przykładzie takich laktonów, jak: -walerolakton, -kaprolakton, -butyrylolakton, -angelica,
- Polimeryzację rodników monomerycznych cieczy jonowych,
- Reakcje mutarotacji, tautomerizacji w wybranych cukrach m. in. sorbozie, rybozie oraz substancjach aktywnych: m. in. glibenklamidzie, omeprazolu, ibuprofenie.

Pierwszy w tekście dotyczy badań prowadzonych w warunkach wysokiego ciśnienia w bardzo wąskich materiałach znajdujących zastosowania w różnych gałęziach przemysłu. Zastosowanie wysokiego ciśnienia podczas chemicznych konwersji tych elementów pozwoli zoptymalizować warunki reakcji oraz uzyskać makromolekuły o określonych fizykochemicznych własnościach takich jak: rednia masa cz. steckkowa, polidispersyjność, struktura, przewodnictwo stałoprądowe, jak również rozkład izomerów w przypadku procesów izomeryzacji. Dodatkowo chcielibyśmy wyznaczyć szybkość, energię i objętość aktywacji przeprowadzonych reakcji. Te podstawowe parametry opisujące kinetykę procesów chemicznych będą służyły do dyskusji nad mechanizmem przemian chemicznych zachodzących w warunkach wysokich ciśnienia. Innym motywacją ww. badań jest stworzenie modelu teoretycznego do przewidywania szybkości i objętości aktywacji reakcji w różnych warunkach termodynamicznych. Jest to niezmiernie ważne w kontekście planowania przebiegu reakcji i eliminowania przemian ubocznych. W tym celu zamierzamy zaadoptować entropowy model Avramova, który jest często stosowany do opisu dynamiki molekularnej szkielek w różnych warunkach T i p.

Kolejnym, istotnym etapem niniejszego projektu będą systematyczne badania nad procesem izomeryzacji i polimeryzacji w układach mezoporowatych. Pragniemy sprawdzić, jak geometria porów, oddziaływania pomiędzy ściankami o różnej funkcjonalności a układami izomeryzującymi i polimeryzującymi wpływają na kinetykę, właściwość produktu końcowego, populację izomerów, rozkład mas cz. steckkowych, morfologię makromolekuł, itd. Warto dodać, że w tych warunkach możliwe jest otrzymanie nanodrutów i nanowłókien o nowatorskich właściwościach, które mogą znaleźć zastosowanie w unikalnych nanotechnologiach medycznych, optycznych, elektronicznych, itd. Badania nad układami 'confined' będą miały te bardzo duże znaczenie w kontekście substancji aktywnych. Chcielibyśmy sprawdzić, czy możliwe jest zahamowanie procesu izomeryzacji, będą manipulacją koncentracją izomerów w sacharydach oraz wybranych APIs poprzez dobór odpowiednich matryc o określonej rednicy pora. Zdobyta wiedza może przyczynić się do rozwoju nowych, znacznie bezpieczniejszych nanoformulacji o ulepszonych parametrach farmakologicznych.

Innym, niezwykle ciekawym wątkiem, jest opis zjawisk obserwowanych w materiałach porowatych poprzez koncepcję ujemnych ciśnienia. Warto nadmienić, że w literaturze rozpatrywano różne mechanizmy polimeryzacji, proponowano wiele teorii próbujących tłumaczyć wpływ ograniczenia przestrzennego na szybkość zachodzących procesów. Jednakże w tekście ujemnego ciśnienia prawie w ogóle nie pojawił się w tych rozważaniach. Z drugiej strony są artykuły naukowe, które jasno pokazują, że ciśnienie generowane wewnątrz poru może osiągnąć wartość powyżej 80 MPa. Należy dodać, że nasze najnowsze prace dotyczące dynamiki molekularnej szkielek potwierdzają powyższe tezy. Wydaje się, że wyjątkowe ciśnienie wpływu ujemnego ciśnienia na postęp izomeryzacji lub polimeryzacji pozwoli na zrewidowanie teorii dostępnych w tej tematyce w literaturze i stworzenie nowej koncepcji przemian chemicznych zachodzących w porach.

Finalnym i zarazem najbardziej ryzykownym punktem naszego projektu badawczego będą pierwsze, pionierskie pomiary wysokości ciśnieniowe na układach polimeryzujących ograniczonych przestrzennie. Oczekujemy, że poprzez odpowiednią kombinację obydwu parametrów możliwe będzie uzyskanie jeszcze większej kontroli nad reakcjami chemicznymi. Planujemy wyznaczyć podstawowe parametry reakcji, by w pełni zrozumieć mechanizm zachodzących przemian. Innym, niezwykle ciekawym wątkiem będzie sprawdzenie, jak ciśnienie i ograniczenie przestrzenne wpływają na parametry otrzymanych materiałów, ich struktur oraz morfologii. Badania te mogą przyczynić się w przyszłości do rozwoju nowych metod syntezy nanopolimerów o kontrolowanej strukturze oraz własnościach fizykochemicznych.

Badania zaproponowane w ramach tego projektu są interdyscyplinarne i dotyczą fundamentalnych zagadnień dotyczących kinetyki, mechanizmu reakcji polimeryzacji i izomeryzacji prowadzonej w warunkach wysokiego ciśnienia oraz ograniczenia przestrzennego. Głównym motywem naszych prac będzie uzyskanie jak największej kontroli nad przebiegiem reakcji, sterowanie własnościami fizykochemicznymi, strukturą i morfologią otrzymanych produktów. Systematyczne badania w tym temacie przyczynią się w dużym stopniu do rozwoju wiedzy, jak również skutkować będą nowymi aplikacjami w dziedzinie syntezy materiałów polimerowych oraz farmaceutycznych. W konsekwencji doprowadzi to do stworzenia nowych nanopolimerów (nanowłókien, nanodrutów) i nanosubstancji aktywnych o unikalnych właściwościach.