

Czy kiedykolwiek marzyłeś drogi czytelniku by być architektem? Ja tak. Od dzieciństwa tworzyłem różne budowle z klocków lego. Do dziś jestem ich fanem. Zachwycali mnie obiekty tworzone przez wybitnych współczesnych architektów - Gaudiego, Corbusiera, Fullera. Człowiek potrafi zaprojektować i zbudować w skali makro fantastyczne obiekty. Dzieła, które wydawałoby się nie mają prawa istnieć, ich kształt nieraz zdaje się przeczyć prawom fizyki. Jako studenta/doktoranta chemii a obecnie młodego pracownika nauki zafascynowała mnie krystalografia i świat tworzonych przez naturę z klocków budulcowych - atomów, jonów, cząsteczek niezwykłych układów kryształów. Czy projektowanie w świecie atomów i cząsteczek jest również możliwe? Tak, ale nie jest to na razie proste. Dlaczego? Dysponujemy ogromną różnorodnością cząsteczek, których używamy jako swego rodzaju cegiełek. Każdą cechuje inny kształt, morfologia oraz zestaw grup funkcyjnych, które oddziałują z otaczającymi je obiektami (również najczęściej cząsteczkami). Spoiwem są oddziaływania międzycząsteczkowe. Te cechuje również ogromną różnorodność - od bardzo silnych (np. jonowych) przez średniej mocy (wiązania wodorowe) po bardzo słabe (np. van der Waalsa). By dana cząsteczka mogła być uznana za wartościowy blok budulcowy powinny ją charakteryzować właśnie dobrze sprecyzowane oddziaływania z innymi obiektami, tak by jej zachowanie w obecności innych obiektów prowadziło do tych samych motywów strukturalnych. Obiektami, którymi zajmuję się w projekcie to alkohole i aminy, bardzo proste związki modelowe, ważne dla życia i poprawnego funkcjonowania na naszej planecie, które zarazem charakteryzuje duża złożoność strukturalna w kontekście tworzenia kryształów o dużej różnorodności motywów. Chciałbym się dowiedzieć w jakich warunkach tworzą się kokryształy (układy złożone z cząsteczek obu rodzajów związków), jakie motywy strukturalne są tworzone (zarówno aminy jak i alkohole mogą być zarówno donorem jak i akceptorem wiązania wodorowego), kiedy można uzyskać maksymalnie stabilne układy, czy istnieje możliwość tworzenia tylko jednego rodzaju czy większej ilości różnych architektur kryształów przy zachowaniu tego samego składu (czy istnieje jeden polimorf czy więcej), czy do tego typu układów można włączyć w racjonalny sposób inne bloki budulcowe (np. stworzyć układy typu gospodarz-gość), jaka jest relacja pomiędzy budową a właściwościami fizycznymi (np. temperaturą topnienia) i w jaki sposób takie układy syntezować. W efekcie otrzymujemy wiedzę fundamentalną, niezwykle ważną dla projektowania nowych materiałów o pożądanych, ściśle określonych właściwościach. Pamiętajmy jednak, że większość prostych alkoholi i amin to ciecze. By móc stworzyć z nich kryształ konieczne są specjalistyczne urządzenia badawcze. W laboratorium, w którym pracuję zainstalowana jest jedyna w Polsce unikatowa przystawka do krystalizacji *in situ* (jedna z ok. 15 na całym świecie), która umożliwi krystalizację praktycznie dowolnych związków (również ich mieszanin) jeśli mają tylko na to ochotę, dzięki odpowiedniemu sprzężeniu mocy promieniowania laserowego oraz temperatury sterowanej strumieniem zimnego azotu chłodzącego krystalizowaną substancję. Innym sposobem na uzyskanie kryształów jest ich hodowla w komorach wysokociśnieniowych. Architektura tak otrzymanych układów analizowana będzie dzięki dyfrakcji promieni rentgenowskich na monokryształach. Badania uzupełnione będą o pomiary z użyciem metod spektroskopowych, dzięki unikatowemu sprzężeniu dyfraktometru rentgenowskiego ze spektrometrem Ramana (jedno z nielicznych tego typu sprzężeń na świecie, jedyne w Polsce) oraz o badania termiczne przy użyciu metod kalorymetrycznych. Otrzymane kokryształy badane będą w różnych temperaturach, by prześledzić możliwość występowania przejść fazowych (przechodzenia od jednej architektury kryształu do innej). Bardzo interesującym aspektem projektu jest również systematyczne przebadanie czy kryształy uzyskane metodą *in situ* oraz w komorze wysokociśnieniowej tworzą tę samą architekturę czy też nie (czy tworzą się inne odmiany polimorficzne). Wyjaśnienie zaobserwowanych faktów eksperymentalnych oraz pogłębiona analiza strukturalna będzie dodatkowo wsparte o zaawansowane metody chemii teoretycznej dla układów periodycznych.