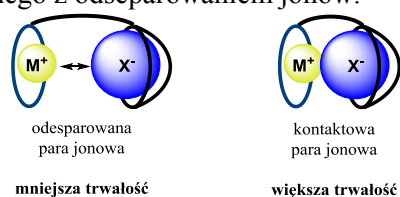


"Projektowanie i badania nowych fotoprzełączalnych receptorów w procesach wiązania i transportu soli o istotnym znaczeniu w ochronie środowiska"

Kluczowa rola jonów w różnych dziedzinach nauki takich jak biologia, kataliza, ochrona środowiska czy też medycyna wymusiła potrzebę opracowywania nowych syntetycznych receptorów molekularnych zdolnych do ich silnego i selektywnego wiązania. Pomimo wielu badań, receptory tego typu generalnie sprawdzają się tylko w warunkach laboratoryjnych, gdy silne oddziaływania elektrostatyczne w obrębie pary jonowej są ograniczone poprzez zastosowanie odpowiedniego miękkiego i niekordynującego przeciwjonu. W rzeczywistych warunkach, przeciwjon docelowej soli jest zazwyczaj twardy i silnie hydratowany. Racjonalnie zaprojektowany receptor posiadający domeny wiążące oba jony wydaje się być remedium na zwiększenie trwałości powstałego kompleksu supramolekularnego. Nie jest to jednak trywialne zadanie i do tej pory opracowano niewiele skutecznych systemów tego typu. Przeważająca większość opisanych receptorów soli wykorzystuje odesparowane od siebie domeny wiążące kation i anion, co wpływa niekorzystnie na entalpie swobodną kompleksowania, ze względu na konieczność poniesienia dodatkowego wydatku energetycznego związanego z odseparowaniem jonów.



Wobec powyższych, można przypuszczać, że odpowiednio usytuowane w przestrzeni domeny wiążące oba jony umożliwią kompleksowanie kontaktowej pary jonowej, co pozwoli na opracowanie nowych, szczególnie skutecznych receptorów par jonowych. Z drugiej strony wiadomym jest, że zmiana geometrii związku chemicznego wpływa na jego właściwości fizykochemiczne (np. powinowactwo do jonów), przy czym możliwość kontroli tego procesu za pomocą czynnika zewnętrznego jest z wielu względów wysoce pożądana.

W prezentowanym projekcie planuję połączyć oba podejścia w celu opracowania unikalnych receptorów par jonowych, których właściwości kompleksujące mogą być sterowane za pomocą światła.

W celu walidacji hipotezy badawczej postanowiłem skupić się na hybrydowych receptorach molekularnych złożonych z powszechnie stosowanych domen wiążących kationy (etery benzo-koronowe) i aniony (amidy lub moczniki) oraz podstawnika azobenzonowego jako grupy fotoprzełączalnej. Związki na bazie

azobenzenu ulegają szybkiej i odwracalnej, indukowanej światłem oraz temperaturą, izomeryzacji typu *E/Z* (*trans/cis*), której towarzyszy wyraźna zmiana geometrii układu – w tym przypadku znaczne przybliżenie domen wiążących jony w termodynamicznie nietrwalej konformacji *Z* umożliwi wytworzenie kontaktowej pary jonowej i wystąpienie dodatniego efektu kooperatywnego.



Projekt składa się z kilku etapów. Pierwszym jest otrzymanie serii hybrydowych receptorów oraz ocena ich właściwości fotochemicznych. Na tym etapie rozpoczęte zostaną również badania obliczeniowe na wysokim poziomie teorii w celu oceny zdolności kompleksotwórczych badanych obiektów. W kolejnym etapie, przy wykorzystaniu szybkiej metody ekstrakcyjnej ciecz-ciało stałe, zbadana zostanie zdolność obu izomerów receptorów do solubilizacji stałych soli. Wyselekcjonowane na tym etapie pary receptor-MX, poddane zostaną gruntownym badaniom w celu wyznaczenia relewantnych parametrów kinetycznych i termodynamicznych opisujących trwałość danego kompleksu receptor-para jonowa. Do tego celu wykorzystam szerokie spektrum metod spektralnych (^1H NMR, UV-Vis) oraz kalorymetrię różnicową (ITC). W ostatnim etapie za pomocą oryginalnego urządzenia pomiarowego najlepsze receptory poddane zostaną badaniom jako innowacyjne dynamiczne transportery wysoce hydrofilowych par jonowych, które mogą być aktywowane i dezaktywowane „na żądanie”, zapewniając ścisłą kontrolę selektywnego procesu ich transportu przez membranę, zarówno zgodnie jak i przeciwnie do ich gradientu stężeń (transport bierny vs aktywny).

Do tej pory brak jest doniesień o zastosowaniu tej metodologii w procesach wiązania pary jonowej (soli). Rezultaty moich badań mogą znaleźć zastosowanie w takich segmentach gospodarki i przemysłu jak procesy separacji i utylizacji toksycznych i radioaktywnych soli, w procesach wiązania i transportu soli przez układy biologiczne (przemysł farmaceutyczny) oraz w syntezie nowych nanomateriałów o pożądanym właściwościach opto- i elektrochemicznych.