

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU BADAWCZEGO

Atom wodoru – najprostszego i najlżejszego pierwiastka – bierze udział w wielu podstawowych procesach chemicznych. Najbardziej znane spośród nich są reakcje, w których proton - a więc pozbawiony elektronu atom wodoru - odrywa się od cząsteczki zwanej kwasem i wiąże z molekułą zwaną zasadą. Mechanizm tej pozornie prostej reakcji jest ciągle jeszcze nie do końca wyjaśniony, ponieważ bardzo istotną rolę odgrywają w nim tzw. efekty kwantowe, zjawiska nieznanne w klasycznej fizyce i chemii. Obserwacja i poprawny opis tych efektów w terminach mechaniki kwantowej stanowią wyzwanie, zarówno dla eksperymentu, jak i teorii.

Atom wodoru może przemieszczać się nie tylko pomiędzy różnymi cząsteczkami. Możliwa jest również reakcja wewnątrzcząsteczkowa, to znaczy proces, w którym przeniesienie następuje w obrębie tej samej cząsteczki. Tego rodzaju zjawisko nosi nazwę tautomeryzacji, a formy tej samej molekuły różniące się położeniem atomu wodoru nazywane są tautomerami. Spośród możliwych dla danej cząsteczki tautomerów, jeden ma zazwyczaj energię niższą od pozostałych i dlatego jest albo jedyną, bądź też dominującą w obserwacji formą.

Celem badań przewidzianych w granice jest otrzymanie i obserwacja rzadkich form tautomerycznych, które, choć teoretycznie możliwe, nie zostały jak dotąd wykryte ze względu na ich wysoką energię. Nasze poprzednie badania wykazały, że można otrzymać takie egzotyczne tautomery, jeśli umieści się cząsteczkę na powierzchni kryształu metalu – np. miedzi lub srebra. W takich warunkach można zmienić względne energie tautomerów w taki sposób, że najbardziej trwała staje się forma niedostępna w „normalnych” warunkach.

Obiektami badań będą cząsteczki o strukturze zbliżonej do porfiryryny, zwanej „pigmentem życia” ze względu na jej udział w tak istotnych procesach jak fotosynteza, czy przenoszenie tlenu we krwi. Poznanie właściwości rzadkich form tautomerycznych pomoże w dokładnym zrozumieniu mechanizmów tautomeryzacji. Wiedza ta może zaowocować w praktyce stworzeniem molekularnych przełączników lub pamięci molekularnych, których zasada działania polega na kontrolowanej przemianie jednej formy tautomerycznej w drugą.