

Dwuwymiarowe szkielety metaloorganiczne stanowią klasę polimerów koordynacyjnych, konstruowanych z zastosowaniem procesów samoorganizacji prostych cząsteczek organicznych i atomów metalu na powierzchniach płaskich. Ze względu na ich właściwości, które mogą być modyfikowane w szerokim zakresie (chiralność, porowatość, skład itd.) oraz periodyczne rozmieszczenie ligandów organicznych/atomów metali, szkielety metaloorganiczne są fascynującymi nanomateriałami o potencjalnym zastosowaniu w wielu dziedzinach nauki, takich jak: medycyna, chemia czy farmacja. Konstruowanie struktur supramolekularnych o precyzyjnie zdefiniowanych właściwościach nie jest jednak łatwym zadaniem. Obecnie projektowanie nowych materiałów, stabilizowanych przez wiązania koordynacyjne opiera się głównie na metodzie prób i błędów. Wynika to z olbrzymiej różnorodności dostępnych ligandów organicznych/atomów metalu, które potencjalnie mogą być użyte w tym celu. Ponadto, nawet niewielkie zmiany w strukturze ligandów organicznych mogą mieć znaczny wpływ na morfologię powstających połączeń metaloorganicznych. W związku z tym, trudno sobie wyobrazić przyszły rozwój chemii supramolekularnej bez wsparcia zaawansowanego modelowania komputerowego. Szczegółowy opis teoretyczny dużych układów molekularnych może być jednak czasochłonny, a niekiedy wręcz niemożliwy do przeprowadzenia. Jednym z możliwych rozwiązań jest zastosowanie uproszczonych modeli, w których badane cząsteczki są mapowane na regularnej sieci (trójkątnej, kwadratowej lub heksagonalnej), jako zbiór sztywnych, połączonych segmentów z odpowiednio przypisanymi oddziaływaniami o charakterze kierunkowym. Do najpopularniejszych ligandów stosowanych, jako jednostki budulcowe dwuwymiarowych struktur metaloorganicznych należą polifenyłowe cząsteczki zbudowane z podobnych jednostek (np. pierścieni fenyłowych). Jako połączenia pomiędzy nimi często wykorzystywane są atomy metalu o niskich liczbach koordynacyjnych, takich jak: Ag(II), Fe(III), Cu(IV). W związku z tym, w przypadku wielu połączeń metaloorganicznych (zaadsorbowanych na płaskich powierzchniach) możliwe jest mapowanie ligandów/atomów metalu na regularnych, dwuwymiarowych sieciach, zbudowanych z regularnie rozłożonych miejsc adsorpcyjnych. Modele ziarniste mogą być szczególnie skuteczne w połączeniu z symulacjami komputerowymi Monte Carlo (MC).

Biorąc pod uwagę powyższe rozważania, jednym z celów proponowanych badań jest weryfikacja hipotezy, że symulacje MC w układach sieciowych mogą stanowić komplementarne narzędzie względem badań eksperymentalnych nad złożonymi architekturami molekularnymi. W symulacjach MC trójramienne cząsteczki organiczne będą modelowane w sposób uproszczony, lecz ich najważniejsze właściwości, takie jak kształt, rozmiar i sposób rozmieszczenia grup funkcyjnych zostaną zachowane. Ziarnista reprezentacja rzeczywistych struktur molekularnych (zaadsorbowanych na powierzchniach płaskich) pozwoli na zbadanie układów, składających się nawet z kilku tysięcy cząsteczek w stosunkowo krótkim czasie. Otrzymane struktury supramolekularne zostaną sklasyfikowane na podstawie ich morfologii i składu. Zaproponowane podejście teoretyczne może znacząco zmniejszyć liczbę eksperymentów laboratoryjnych, które są niezbędne w celu syntezy struktur metaloorganicznych o precyzyjnie zdefiniowanych właściwościach i topologii. Ponadto, nasze badania z zastosowaniem symulacji komputerowych MC mogą być pomocne w projektowaniu nowych ligandów organicznych, które znajdą zastosowanie, jako elementy budulcowe nowych szkieletów metaloorganicznych o interesującej strukturze i właściwościach.