

Supramolekularne, jak i molekularne struktury klatkowe zsyntezowane z zastosowaniem wiązań odwracalnych reprezentują niesamowicie fascynującą i niezwykle ważną, z punktu widzenia nauki i przemysłu, klasę związków. Dzieje się tak, ponieważ sposób w jaki jest zbudowany ten rodzaj architektury molekularnej (obecność wolnej przestrzeni wewnątrz cząsteczki) stwarza szeroki wachlarz możliwości i aplikacji, zwłaszcza w chemii typu gość-gospodarz, a dzięki zastosowaniu odwracalnych wiązań dynamicznych, także w projektowaniu i syntezie nowoczesnych nanomateriałów adaptacyjnych. Dotychczasowe osiągnięcia na tym polu nauki przełożyły się na zastosowanie tej klasy związków w takich dziedzinach jak chemia materiałów specjalnego przeznaczenia, nanotechnologia (opracowanie nanoreceptorów, nanoprzełączników), inżynieria (supra-)molekularna, czy biotechnologia lub medycyna. Z tych powodów dalsze poszukiwanie nowej generacji związków o budowie klatkowej jest w pełni uzasadnione, a innowacyjne badania nad dynamiką tego typu układów (procesami samo-asocjacji, samo-sortowania, wymiany komponentów w określonym środowisku) przyczynią się do lepszego zrozumienia procesów sterujących powstawaniem i właściwościami takich struktur. To z kolei bezpośrednio przełoży się na zwiększenie wydajności procesów syntetycznych, z jednoczesnym obniżeniem kosztów oraz wzrostem efektywności funkcjonalnej takich związków.

Głównymi celami naukowymi przygotowywanej rozprawy doktorskiej pt. **„Samo-asocjacja kapsuł supramolekularnych na bazie dynamicznych wiązań iminowych i β -diketonowych”** są:

- a) Zaprojektowanie, synteza oraz pełna charakterystyka spektroskopowa:
 - di-, tri-, tetra- oraz heksafunkcyjnych komponentów aminowych i aldehydowych zdolnych do tworzenia dynamicznego, odwracalnego wiązania iminowego
 - nowej generacji czysto organicznych, bi- i policyklicznych, dynamicznych klatek iminowych
 - nowej generacji ligandów, zawierających w swojej strukturze ugrupowania β -diketonowe, zdolnych do tworzenia kompleksów metalosupramolekularnych o strukturze klatki
 - architektur klatkowych opartych na dynamicznych wiązaniach iminowych i koordynacyjnych β -diketonowych, łącząc je w jednej strukturze
- b) **Badania dynamiki powyższych układów – ze szczególnym naciskiem na proces samo-sortowania i wymiany komponentów, celem określenia preferencji strukturalnych komponentów i wzajemnych korelacji pomiędzy nimi**
- c) Badanie właściwości fizykochemicznych dla otrzymanych molekuł o budowie klatki, ze szczególnym uwzględnieniem funkcjonalności w chemii gość-gospodarz, a następnie określenie potencjału aplikacyjnego

Założenie badawcze (hipoteza): Właściwe zaprojektowanie trójwymiarowych, dynamicznych architektur klatkowych opartych o odwracalne wiązania iminowe i β -diketonowe, a także zadanie procesu samo-sortowania komponentów w kierunku ich samo-asocjacji w struktury klatkowe umożliwi opracowanie nowej generacji adaptacyjnych materiałów supramolekularnych o wstępnie zaprojektowanych, specyficznych właściwościach fizykochemicznych (np. sorpcyjnych, elektrochemicznych, magnetycznych).

Przygotowywana rozprawa doktorska w znaczący sposób przyczyni się do poszerzenia podstawowej wiedzy dotyczącej dynamicznych struktur klatkowych (molekularnych, jak i supramolekularnych), a także podkreśli istotę odpowiedniego projektowania podstawowych bloków budulcowych, z których architektury klatkowe tworzą się z procesie samo-asocjacji. Warto zaznaczyć, że odpowiednio dobrane i zaprojektowane w początkowej fazie podstawowe jednostki budulcowe (substraty), mogą w sposób hierarchiczny przekazać swoje właściwości złożonej strukturze trójwymiarowej, którą uformują.

Istotnym aspektem proponowanych badań, jest położenie nacisku na zrozumienie czynników (np. strukturalnych, elektronowych) kierujących procesem samo-sortowania komponentów w obrębie zaprojektowanej Dynamicznej Biblioteki oraz ich wzajemnej komplementarności, co w konsekwencji przyczyni się do efektywniejszego otrzymywania i stosowania w nanoprzemysle dynamicznych materiałów adaptacyjnych (np. o właściwościach sorpcyjnych, magnetycznych, elektrochemicznych, czy optycznych). Prowadzone badania mają istotnie interdyscyplinarny charakter, łącząc w sobie dziedziny nauki związane z syntezą, chemią supramolekularną, nanochemią i chemią kombinatoryczną, a także uwzględniają zastosowanie nowoczesnych metod takich jak modelowanie molekularne, projektowanie obliczeniowe, czy synteza mikrofalowa (przyczyniając się w ten sposób do rozwoju Zielonej Chemii).

