

Atomy i cząsteczki w kryształach poruszają się wokół swoich pozycji równowagi, a niekiedy i daleko od pozycji równowagi. Kryształy zachowują się jako zbiory wielu cząsteczek, które mogą zmieniać orientację, przemieszczać się, izomeryzować i reagować, pokazując nam, w jaki sposób materia żywa powstaje z chemii i jak projektować sztuczne układy o nowych właściwościach.

W ramach proponowanego projektu planujemy zbadać dynamiczne właściwości kryształów molekularnych o elastycznej architekturze wrażliwej na kationy i aniony. Takie kryształy molekularne są dość rzadkie, ale obiecujące do zastosowań w sensorach, katalizie, rozdzielaniu i rozpoznawaniu molekularnym. Elastyczność architektury kryształów postrzegamy jako zdolność do osiągnięcia dużej liczby dostępnych stanów strukturalnych przy zachowaniu krystaliczności. Planujemy indukować transformacje strukturalne przez wprowadzanie kationów i anionów w bardzo łagodnych warunkach, stosując metody 'nasiąkania' kryształów (*ang.* crystal soaking). 'Nasiąkanie' to proces pobierania wstępnie wyhodowanych kryształów i namaczania ich w roztworze interesującej nas cząsteczki. Następnie kryształy poddaje się analizie rentgenowskiej (dyfrakcja na monokryształach), co zapewnia określenie pozycji wszystkich atomów w badanym kryształach. To pozwoli nam zwizualizować miejsca wiązania kationów i anionów w kryształach i odpowiadające im zmiany strukturalne. Mamy nadzieję odpowiedzieć na pytania, w jaki sposób małe cząsteczki i jony mogą przenikać do kryształów? Jakie oddziaływania międzycząsteczkowe ułatwiają transport jonów przez pory? Jaka jest rola cząsteczek wody wypełniających pory?

Wytwarzanie elastycznych kryształów molekularnych reagujących na jony i małe cząsteczki jest ważne z wielu powodów. Oczekujemy się, że takie kryształy będą wykazywać aktywność, niezbędną do działania jako czujniki chemiczne, separatory i zbiorniki jonów. Elastyczne kryształy molekularne potencjalnie mogą być używane jako krystaliczne membrany lub 'gąbki' operujące w roztworach wodnych.