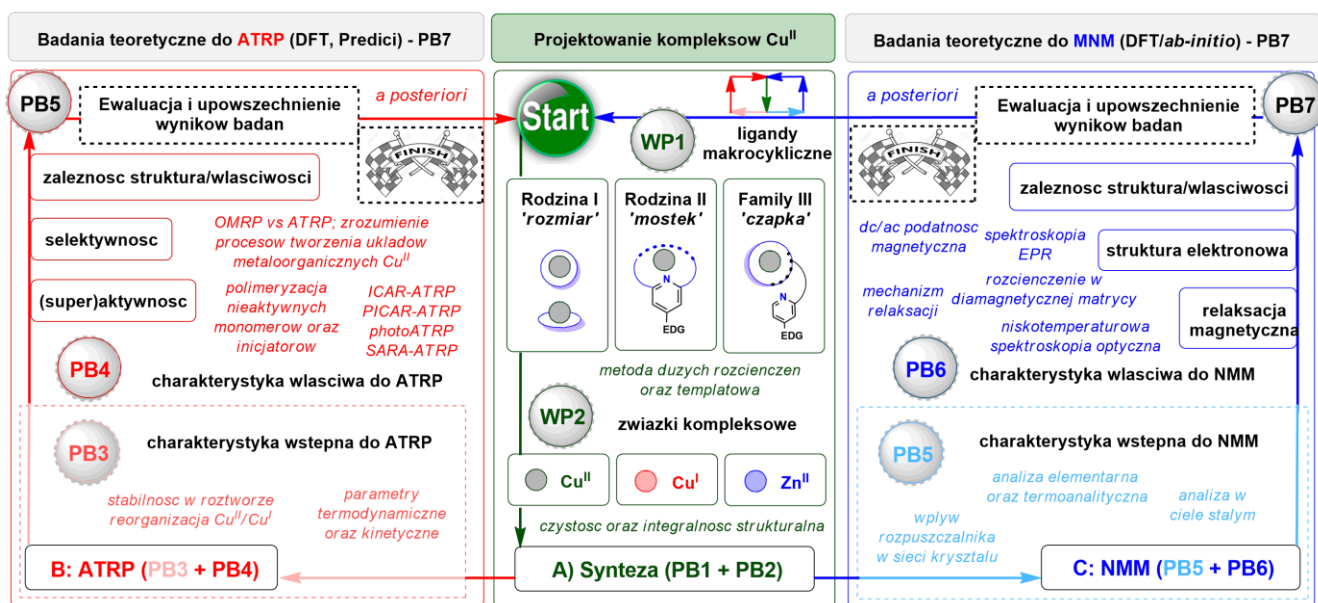


## Cel projektu

Racjonalne projektowanie architektur molekularnych jest kluczowe dla syntezy zaawansowanych funkcjonalnych materiałów w ukierunkowany sposób. Te z kolei powinny znaleźć zastosowanie przy rozwiązywaniu problemów natury globalnej, takich jak zrównoważony środowiskowy rozwój oraz 'Big Data problem' związany z rosnącą ilością gromadzonych danych. W przedstawionym projekcie zakładamy syntezę racjonalnie zaprojektowanych makrocyclicznych kompleksów miedzi(II), które mają w zamierzeniu funkcjonować jako (super)aktywne oraz selektywne katalizatory polimeryzacji rodnikowej z przeniesieniem atomu (ATRP) oraz polepszyć nasze zrozumienie dotyczące nanomagnetyzmu molekularnego (NMM).

## Opis badań

Badania zostały podzielone na siedem pakietów (PB) badawczych, z których każdy określa konkretny cel projektu, ustrukturyzowane w trzy sekcje A-C. Część A dotyczy części syntetycznej ligandów oraz ich kompleksów, część B jest powiązana z badaniami dotyczącymi katalizy ATRP, natomiast część C skupia się na badaniach NMM.



Racjonalne projektowanie odbędzie poprzez wprowadzenie koncepcji projektowania w formie ciągłej, odbywające się z zastosowaniem trójstopniowej funkcjonalizacji. Rozpoczynamy z *a priori* zaprojektowanej cząsteczki **TM1**, bazując na przeglądzie literatury, obliczeniach teoretycznych oraz istniejących danych eksperymentalnych. Pomyślna synteza (**A: PB1+PB2**), prowadzi do charakterystyki wstępnej sekcji **B (PB3)** oraz/lub **C (PB5)** celem ustalenia czy budowa i właściwości cząsteczki **TM1** nadają się do zbadania charakterystyki właściwej ATRP (**PB4**) i/lub NMM (**PB6**). Owe podejście oszczędza czas oraz zasoby, lecz jednocześnie zwiększa nasze zrozumienie dotyczące wymagań strukturalnych niezbędnych do zaobserwowania zakładanych właściwości. W szczególności pozwoli to na *a posteriori* zaprojektowanie nowej cząsteczki **TM2**, bez wad cząsteczki **TM1**. Pomoże w tym pakiet badawczy **PB7**, bazujący na obliczeniach teoretycznych, co w ostatecznym rozrachunku pozwoli na zademonstrowanie wielofunkcyjnego charakteru makrocyclicznych kompleksów miedzi(II) w polimeryzacji rodnikowej z przeniesieniem atomu oraz nanomagnetyzmie molekularnym.

## Rezultaty projektu

Zaproponowane związki przyczynią się do zwiększenia uniwersalności procesu ATRP przy konstrukcji wielu materiałów polimerowych jak i również pogłębienia zrozumienia dziedzin chemii koordynacyjnej, polimeryzacji oraz katalizy. Dodatkowo, wgląd w bardzo rzadko występujące nanomagnetyki molekularne bazujące na związkach miedzi(II), pozwoli nam zrozumieć jak należy je projektować na poziomie atomowym oraz jakie mechanizmy relaksacji magnetycznej się z tym wiążą. Ostatecznie, zaproponowane działania będą mieć wymierny wpływ naukowy oraz edukacyjny, mogąc prowadzić do komercyjnej produkcji polimerów oraz przyspieszenia nastąpienia Drugiej Rewolucji Kwantowej.