

STRESZCZENIE POPULARNONAUKOWE

Projekt dotyczy syntezy i synergicznych właściwości hybryd molekularnych, tzw. IoCarboNanoFluids ('ICON Fluids') zawierających rozłączalne jak w zamku błyskawicznym, zaprojektowane chemicznie, poprzez kowalencyjną modyfikację jonami, nanorurki węglowe (ICNTs) i ciecze jonowe (ILs). Z punktu widzenia chemika kluczową rolę w układzie pełnią molekularne „zębki” dopasowane rozmiarem i siłą wiązania. Nanoukłady takie winny wykazywać inteligentne i funkcjonalne właściwości, wymagane w miniaturyzacji elektroniki. Co istotne, wszystkie te właściwości zostaną odkryte za pomocą wyjątkowego połączenia technik analitycznych, które zbadają *in situ* losy ultradźwięków i prądu zmiennego oddziałujących z tytułowymi hybrydami. Tej analizie będzie towarzyszyć trójwymiarowe obrazowanie w skali atomowej różnych lokalizacji „dopasowujących się” jonów i nanorurek. Ogólnie – budowa molekularna zostanie przełożona na wyjątkowe właściwości reologiczne, elektryczne i termiczne ICON Fluids, które mogą przypominać klasyczne ciecze, ale także plastyczne lub elastyczne żełe.

A teraz o samych komponentach. Jedno- (SW-) i wielościenne CNTs (MWCNT) charakteryzują się dużą powierzchnią, doskonałymi właściwościami mechanicznymi, wysokim przewodnictwem elektrycznym oraz znakomitą stabilnością (elektro)chemiczną. Z kolei ciecze jonowe (ILs), tzw. „projektowalne związki chemiczne”, składają się z kationów organicznych o niskiej symetrii oraz anionów nieorganicznych lub organicznych. Właściwości ILs zdominowane są poprzez silne oddziaływania elektrostatyczne. Stąd też ILs mają doskonałe właściwości elektryczne i elektrochemiczne, a także wysoką stabilność termiczną i chemiczną, niską prężność par oraz są niepalne. Rządząca się statystyką funkcjonalizacja powierzchni CNTs prostymi grupami, np. hydroksylowymi (-OH) czy karboksylowymi (-COOH), jest łatwa, ale destrukcyjna dla nanorurek, a tym samym dla ich właściwości. Z drugiej strony, długotrwała funkcjonalizacja CNTs za pomocą złożonych ugrupowań jonowych przypominających składniki ILs (kationy i aniony) wymaga powstawania silniejszych wiązań kowalencyjnych. Modyfikacje CNTs można także przeprowadzić za pomocą słabszych wiązań niekowalencyjnych opartych na oddziaływaniach π -elektronów CNTs i wysoce polaryzowalnych π -elektronów ILs (jest to osiągalne przez zmieszanie składników). Struktura tych ostatnich, tj. IoNanoFluids, czyli funkcjonalizowanych niekowalencyjnie CNTs nie jest dobrze zdefiniowana. Składają się one z CNTs rozproszonych w ILs z międzyfazową nanowarstwą IL na powierzchni CNTs. Pytanie, jak zorganizowane są nanowarstwy, jak mogą być projektowane i kontrolowane w stanie ciekłym, a także jakie są ich właściwości w nanoskali, pozostaje wciąż bez odpowiedzi stanowiąc ważne wyzwanie dla współczesnej nauki.

Niniejszy projekt odpowie na powyższe pytania dzięki cząsteczkowemu zaprojektowaniu ICON Fluids – nowej klasy układów wielojonowych opartych na kontrolowanej funkcjonalizacji CNTs, które utworzą „zmontowaną” architekturę molekularną. Kontrola ta zostanie osiągnięta poprzez nakierowanie czynników funkcjonalizujących – uwięzionych w częściowo osłaniającym je szablone – na powierzchnię nanorurki, podczas gdy po reakcji szablon zostanie usunięty. Projektując funkcjonalizowane kowalencyjnie jony nanorurek (ICNT⁺ i ICNT⁻) oraz odpowiednie przeciwjony, możliwe będzie jakościowe i ilościowe kontrolowanie organizacji architektury molekularnej, tj. zarówno struktury granicy faz ciało stałe-ciecz, jak i ogólnych właściwości ICON Fluids. Płyny IoCarboNanoFluids będą zatem składać się z kationu CNT⁺ i anionu CNT⁻, oraz dwóch pozostałych jonów. W niektórych przypadkach mechanizm „zapinania-rozpinięcia” powinien być obserwowany na styku ICNT⁺/ICNT⁻, podobnie jak w przypadku CNT-CNT w tzw. buckypaper CNT (bazujących jedynie na oddziaływaniach niejonowych). Czterojonowe systemy złożone z ICNTs lub „spinanych” jonowo ICNT i IL nie zostały do tej pory zsyntetyzowane.

Nasz pomysł spotkał się z zainteresowaniem wielu wiodących ośrodków na świecie. Analiza struktury chemicznej ICON Fluids będzie prowadzona z wykorzystaniem kriogenicznej mikroskopii transmisyjnej (cryo-TEM), połączonej ze skaningową transmisyjną mikroskopią elektronową (S/TEM) i spektroskopią rentgenowską z dyspersją energii (EDS) wspólnie z Wydziałem Chemii Uniwersytetu Cambridge, UK. Techniki te umożliwią obrazowanie i scharakteryzowanie systemu w jego „stanie naturalnym”. ICON Fluids stają się szkliste przez szybkie chłodzenie i mogą być badane w postaci amorficznej warstwy. Morfologia w nanoskali 3D i rozmieszczenie nanostruktur zostaną scharakteryzowane za pomocą tomografii S/TEM i tomografii EDS umożliwiających uzyskanie map o dokładności atomowej. Autorski pomysł połączenia ultradźwiękowej spektroskopii absorpcyjnej (UAS) z elektrochemiczną spektroskopią impedancyjną (EIS) pozwoli na unikalne, sonoelektrochemiczne badania strukturalne i wgląd w ilościowe informacje o skali czasowej różnych procesów relaksacji w ICON Fluids. Obliczenia dynamiki molekularnej we współpracy z Centro de Química Estrutural Uniwersytetu w Lizbonie także pomogą odpowiedzieć na powyższe pytania. Z kolei charakterystyki termiczne w ekstremalnie wysokich temperaturach będą wyznaczone we współpracy z Instytutem Energii Geotermalnej i Odnawialnej, Wspólny Instytut Wysokich Temperatur Rosyjskiej Akademii Nauk. Oczekiwany efekt tego projektu jest stworzenie automatycznej metodyki, precyzyjnej kontroli struktury i powiązanych z nią właściwości ICON Fluids, umożliwiającej zmiany molekularne w kierunku otrzymania układów wykazujących właściwości przelączalne i molekularny „efekt domina”.