

Multinuklearne kompleksy metali jako molekularne jednostki budulcowe funkcjonalnych układów supramolekularnych: racjonalne projektowanie oparte na oddziaływaniach niekowalencyjnych (FunSup)

Chemia supramolekularna zajmuje się opracowaniem wysoce złożonych układów chemicznych, samoorganizujących się przez oddziaływania donorowo-akceptorowe i/lub niekowalencyjne. W tej dziedzinie naukowcy są ciągle stymulowane poprzez rosnące zapotrzebowanie na innowacyjne rozwiązania, spośród których można wymienić projektowanie i opracowywanie nowych molekularnych jednostek budulcowych czy racjonalne podejście do syntezy materiałów o pożądanej funkcjonalności.

Wielordzeniowe kompleksy metali o odpowiednich parametrach geometrycznych mogą pełnić rolę łączników jak również drugorzędowych jednostek budulcowych szerokiego zakresu nieorganiczno-organicznych materiałów porowatych (MOF). Mogą one również tworzyć różnorodne sieci supramolekularne oparte o oddziaływania niekowalencyjne, począwszy od struktur o topologii zbliżonej do zeolitów po materiały porowate. Głębokie zrozumienie reaktywności kompleksów molekularnych, zawierających wspomniane wyżej jednostki budulcowe, w stosunku do małych cząsteczek nieorganicznych i organicznych jest szczególnie istotne w przypadku projektowania i postsyntetycznych modyfikacji MOF.

Racjonalne projektowanie, jak również synteza molekularnych kompleksów metali oraz ich transformacja na drodze samoorganizacji poprzez oddziaływania niekowalencyjne stały się fascynującym tematem badań prowadzonych w ostatnim czasie. Przykładami takich wysiłków są w szczególności niekowalencyjne materiały porowate (NPM) lub porowate kryształy molekularne (MPC) zbudowane z cząsteczek organicznych lub kompleksów molekularnych metali. Stanowią one wyróżniającą się klasę materiałów typu MOF przeznaczonych do rozmaitych dalszych zastosowań. Kontrola nad geometrią sfery wtórnej i procesami samoorganizacji kompleksów metali jako jednostek budujących cząsteczki pozostaje ciągłym wyzwaniem. Z tego punktu widzenia charakter centrów metalicznych, jak również skład szkieletu ligandu organicznego, mogą odgrywać kluczową rolę w zapewnianiu kontroli nad słabymi niekowalencyjnymi oddziaływaniami, które kierują wzajemnym pakowaniem cząsteczek w kryształach. Ponadto supramolekularną strukturę molekularnych kryształów można łatwo dostosować poprzez subtelne modyfikacje szkieletu organicznego lub ko-kryształizację różnych molekularnych bloków budulcowych. Pozwala to na dostosowanie szerokiej gamy funkcjonalności projektowanych materiałów. Dlatego też wszechstronne zrozumienie interakcji międzycząsteczkowych jest niezbędne do projektowania nowych bloków budulcowych i ostatecznie sieci supramolekularnych.

W oparciu o nasze wieloletnie doświadczenie i osiągnięcia w tej dziedzinie, podstawowym celem proponowanego projektu jest pogłębienie podstawowej wiedzy z zakresu chemii supramolekularnej i materiałoznawstwa. W tym celu zostaną wykorzystane wstępnie zaprojektowane kompleksy metali z prototypowymi rdzeniami typu $[M_4O]^{6+}$ -okso i $[M_2]^{4+}$ typu „paddlewheel” ($M = Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn$) jako modelowe molekularne jednostki budulcowe materiałów supramolekularnych. Pozwoli to zbadać wpływ różnych czynników strukturalnych na procesy samoorganizacji. Jesteśmy przekonani, że poszerzona wiedza na temat chemii wybranych molekularnych kompleksów metali będzie służyła jako podstawa do dalszego rozwoju nowych supramolekularnych materiałów funkcjonalnych.