

Woda jest głównym składnikiem hydrosfery Ziemi i płynów większości organizmów żywych. Ma kluczowe znaczenie dla wszystkich znanych form życia. Tworzy 18 stałych, krystalicznych form lodu o fantastycznych strukturach i dwie formy bezpostaciowe. Zajmuje większość powierzchni Ziemi. Cząsteczki wody oddziałują z najważniejszymi substancjami biologicznymi: białkami, DNA i polisacharydami wpływającymi na fałdowanie białek, parowanie zasad DNA i inne kluczowe dla życia zjawiska. Cząsteczki wody tworzą wiązania wodorowe - jedno z najważniejszych oddziaływań we współczesnej biologii, medycynie i farmakologii. Woda tworzy różne hydraty i odgrywa kluczową rolę w procesach geologicznych i mineralogicznych zachodzących w płaszczu Ziemi (hydrografia, hydrologia, hydrogeologia, glaciologia, oceanografia itp). Woda/lód są również obecne w przestrzeni kosmicznej. Woda wytwarzana jako produkt uboczny gwiazdnej fuzji jądrowej, została wykryta jako lód w obłokach międzygwiazdowych w Drodze Mlecznej i występuje w dużych ilościach w innych galaktykach. Główne cele tego projektu to: **(1) odkrycie nowych form lodu, lodu deuterowanego i hydratów zawierających małe cząsteczki organiczne, (2) dla znanych form lodu, uzyskanie lepszych (bardziej precyzyjnych i dokładnych) uśrednionych i lokalnych struktur znanych lodów.** Planujemy osiągnąć cele projektu stosując nowe podejścia **krystalografii kwantowej (QC)** połączone z monokrystalicznymi badaniami wysokociśnieniowymi przy użyciu gazowych celek diamentowych o szerokim kącie otwarcia (DAC) z kontrolowanym ciśnieniem i temperaturą oraz krótkofalowe promieniowanie synchrotronowe (ca. 0.2-0.4Å). Metody QC są bardziej rygorystyczne niż dotychczas stosowane rutynowe metody krystalografii. Będą one obejmować: eksperymentalne badania gęstości elektronowej, udokładnienia atomów metodą Hirshfelda (HAR), udoskonaloną przez nas nową wersję HARu (z możliwością użycia różnych partycji atomowej gęstości elektronowej a także z możliwością użycia obliczeń periodycznych) oraz udokładnienie eksperymentalnej funkcji falowej na podstawie eksperymentów rentgenowskich (XWR). Stosując te metody uzyskaliśmy i opublikowaliśmy wyniki udokładnień danych rentgenowskich pozycji atomów wodoru w hydratach struktur z bardzo ciężkimi atomami oraz wyniki eksperymentalnych badań efektów relatywistycznych i korelacji elektronowej w kompleksie złota. Używając HARu udokładniliśmy już anizotropowe atomy wodoru w lodzie VI, lodzie D<sub>2</sub>O VI i mieszanym lodzie H<sub>2</sub>O /D<sub>2</sub>O VI, korzystając z danych uzyskanych z naszego laboratoryjnego dyfraktometru rentgenowskiego o anodzie srebrnej. To niebywałe, że można udokładnić anizotropowe ruchy termiczne nieuporządkowanych atomów wodoru w lodzie VI nawet na podstawie jedynie danych rentgenowskich z laboratoryjnego dyfraktometru. W niektórych pomiarach laboratoryjnych dla lodów pod ciśnieniem wydaje się nam, że uzyskujemy nieznaną strukturę lodu jednakże bardzo niska jakość danych dyfrakcyjnych nie pozwala na przeprowadzenie udokładnień, a tym bardziej na publikację takich wyników. Jednakże promieniowanie synchrotronowe jest ponad 10mln razy silniejsze, dlatego powinniśmy zobaczyć znacznie więcej szczegółów, w tym zobaczyć te nowe formy lodu i uzyskać dla nich wiarygodne dane. Będziemy generować różne formy lodu *in situ* wewnątrz DAC i wytwarzać nowe formy lodu poprzez kontrolowane, małe, zmiany temperatury i ciśnienia. Spadek temperatury i wzrost ciśnienia spowodują zmniejszenie ruchu termicznego cząsteczek wody, podczas gdy wzrost temperatury i spadek ciśnienia zwiększy dynamiczny nieporządek cząsteczek wody. Nasze badania pozwolą odkryć i udokładnić struktury lodu i hydratów oraz zasymulować w DAC procesy na powierzchni Ziemi, wewnątrz Ziemi i innych planet oraz scharakteryzować i badać je na poziomie ilościowych zmian gęstości elektronów. To otwiera nowe możliwości w krystalografii, mineralogii, chemii fizycznej i teoretycznej daleko wykraczającą poza obecny stan wiedzy.

Nasz projekt jest wysoce interdyscyplinarny i łączy w sobie najnowocześniejsze metody krystalografii kwantowej, wykorzystujące ściśle idee chemii kwantowej dla ciała stałego oraz badania mineralogiczne wysokiej rozdzielczości, wysokociśnieniowe i w zmiennej temperaturze. Jesteśmy przekonani, że znajdziemy nowe polimorficzne formy lodów i hydratów, szczególnie te, które w swoich strukturach mają ważne biologiczne cząsteczki, takie jak: NaCl, MgSO<sub>4</sub>, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, MgCl<sub>2</sub>, proste gazy: H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub>, gazy szlachetne, aminokwasy, zasady purynowe i pirymidynowe itp.

Badania wody stały się ostatnio niezwykle gorącym tematem. Są setki tysięcy prac. Doskonałym przykładem wagi tego tematu jest cykl konferencji w DESY (Niemcy) skupionych na utworzeniu Centrum Molekularnej Nauki o Wodach (CMWS) wspólnym wysiłkiem ok. 85 grup badawczych z całego świata. Jestem jednym ze współtwórców drugiego filaru tej aplikacji.

Nasze badania mają naturę fundamentalną, pozwolą na dokonanie przełomu w badaniach lodu i hydratów, dostarczą nowych informacji kluczowych w badaniach odkształceń plastycznych, również dla ekstremalnie głębokich ciśnień wewnętrznych Ziemi i innych planet pozaziemskich.