

# Nowe podejście do skomplikowanych reakcji. Przenośny układ do czasorodzielczego losowego próbkowania i Laplace'owskiego NMR

Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR) jest jednym z najbardziej wszechstronnych narzędzi analitycznych znanych ludzkości. Od czasu jej powstania pod koniec lat 40. ubiegłego wieku, została z powodzeniem wdrożona jako narzędzie badawcze w wielu dziedzinach, takich jak chemia organiczna, kontrola żywności i leków, badania biologiczne, a nawet w postaci obrazowania za pomocą rezonansu magnetycznego (MRI) w diagnostyce medycznej.

Jednym z unikalnych zastosowań analitycznych NMR jest badanie złożonych reakcji. Możliwość monitorowania reakcji pozwala nam badać zmiany stężenia reagentów w czasie. Ostatnio przedstawiliśmy nowy sposób analizy złożonych procesów polimeryzacji wykorzystujący połączenie dwóch niezależnych technik NMR: czasorodzielczego losowego próbkowania oraz czasorodzielczej dyfuzometrii NMR. Pierwsza technika pozwala śledzić zmiany stężenia cząsteczek w mieszaninie reakcyjnej. W tym samym czasie druga dostarcza nam informacje o zmianach mobilności reagentów i ich masy cząsteczkowej. Połączenie obu metod zaowocowało nowym, głębszym zrozumieniem procesu polimeryzacji i znacznie bardziej złożonym wglądem w mechanizm reakcji.

W tym projekcie planujemy zwiększyć możliwości nowej metody i zakres jej stosowalności. Zamierzymy zaadaptować ją do tanich, przenośnych spektrometrów niskopolowych, aby móc śledzić złożone reakcje chemiczne prowadzone w standardowych kolbach i reaktorach laboratoryjnych, zamiast ograniczać się tylko do prostych reakcji zachodzących w próbówce NMR.

Chcemy przetestować nowy, świeżo zaprojektowany układ na dwóch klasach polimeryzacji. Fotopolimeryzacja to rozwijająca się dziedzina w chemii materiałowej, która zyskuje ogromne znaczenie, ponieważ biokompatybilny druk 3D jest oparty na tej reakcji. Drugą klasą jest polimeryzacja oparta na chemii typu click, bazująca na prostej i eleganckiej metodologii zaproponowanej przez laureatów Nagrody Nobla w dziedzinie chemii z 2022 roku Bertozzi, Meldala i Sharplessa. Ostatnim celem projektu jest połączenie nowo opracowanej metodologii z automatyką i uczeniem maszynowym w celu stworzenia automatycznego systemu do optymalizacji reakcji wymienionych powyżej. Ten nowy system pozwoli nam na całkowitą kontrolę reakcji i osiągnięcie pożądanej długości polimerów oraz optymalnej wydajności reakcji.