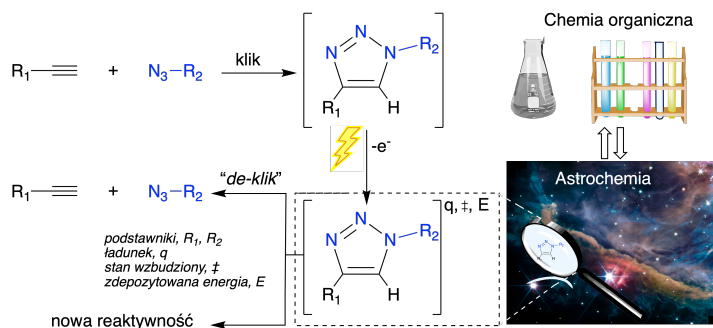


Streszczenie popularnonaukowe projektu

Obecnie uszkodzenia radiacyjne początkowo postrzegane jako mające tylko negatywny efekt taki jak np. w kosmosie promieniowanie kosmiczne na astronautów są obecnie uważane jako pozytywny czynnik wyzwalający w procesach poradajacyjnych, m.in. w przypadku formowania się materii w ośrodkach międzygwiazdnych, co ma pierwszorzędne znaczenie w przyszłej eksploracji kosmosu. Co więcej, napromieniowanie można wykorzystać do ukierunkowania reakcji chemicznej w kierunku pożądanego produktu poprzez kontrolowania formowania się i pęknięcia danego wiązania chemicznego (patrz Ryc. 1).

Nagrody Nobla za rozwój „chemii kliknięć” i organokatalizy zostały już przyznane, jednak nieznana jest chemia odwrotnej „reakcji klik”, za pomocą której odzyskuje się dane substraty. Zwłaszcza taka chemia w stanach naładowanych i wzbudzonych bardzo różni się od typowych warunków syntezy w chemii organicznej.

Celem jest zrozumienie fizycznych mechanizmów emisji i jonizacji w celu jakościowego wykorzystania układu eksperymentalnego z wiązkami tzw. „cross-beam” dla tych systemów. Nasza metodologia pozwoli zidentyfikować kluczowe procesy odpowiedzialne za obserwacje „de-click” i wymagane do dalszego rozwoju nowatorskiego eksperymentu. Zbudujemy obszerną bazę danych naszych teoretycznych ustaleń począwszy od heterocyklicznego związku opartego na azocie - 1H-1,2,3-triazolu. Dla ww. cząsteczki będzie to wstępny test porównujący metodologię z pomiarami eksperymentalnymi „cross-beam” w celu wstępnego określenia parametrów dla wielokrotnie naładowanych triazoli i ich dalszych modyfikacji dla klastrowych pochodnych triazolu. Teoretycznie otrzymane szczegółowe warunki pożądanej chemii „de-click”, tj. ładunek, podstawniki chemiczne, wzbudzenia do określonych stanów wzbudzonych oraz energia zdepozytowana na cząsteczce zostaną odkryte i dostarczone do eksperymentalnych układów „cross-beam”; eksperymenty niewątpliwie określą stosunki mas do ładunków azotku i alkinu, udowadniając, że nasza koncepcja jest możliwa.



Rycina 1: Schemat odwracalnej reakcji „kliknięcia” dla pochodnych 1H-1,2,3-triazolu (R_1, R_2) kontrolowanej przez źródło promieniowania w funkcji stanu jonu macierzystego tj. ładunku (q), stanu wzbudzonego (\ddagger) i/lub zdepozytowanej energii (E).

Atrakcyjność tego projektu polega zarówno na uogólnieniu podejścia teoretycznego w celu uzyskania oryginalnego narzędzia do badania fragmentacji wywołanej promieniowaniem jonizującym, jak i w szerokiej perspektywie na zastosowaniu w przemianach katalitycznych. Ta praca pozwala chemikom teoretykom powiązać społeczność laserów i fizyki molekularnej z zastosowaniami w chemii organicznej, takimi jak m.in. wiążąca aniony fotoindukowana organokataliza.