

W ostatnim czasie duży nacisk kładzie się na zrozumienie, jak zmieniają się podstawowe własności fizyczne i chemiczne materii miękkiej podczas ograniczania jej rozmiarowości do skali nano. Intensywne badania prowadzone przez topowe ośrodki na świecie ujawniły, że problem ten jest bardzo złożony i tak naprawdę wiele czynników, m.in. specyficzne oddziaływania międzycząsteczkowe, zwilżalność, energia międzyfazowa, dynamiczne heterogeniczności, chropowatość, oraz objętość swobodna, mają wpływ na zachowanie się nanoukładów. W istocie, spośród nich chropowatość powierzchni i fluktuacje gęstości jawią się jako najważniejsze parametry kontrolujące dynamikę molekularną miękkich materiałów tworzących fazę szklaną. Niemniej jednak, w literaturze można spotkać prace raportujące przeciwstawne wyniki dotyczące tego samego zagadnienia. Klasycznym przykładem tego jest przyspieszenie bądź spowolnienie dynamiki segmentalnej w pobliżu chropowatej powierzchni. W ramach tego projektu planujemy użycie unikalnych mezoporowatych membran o nanostrukturyzowanych ściankach porów, charakteryzujących się ściśle zdefiniowaną chropowatością, wraz z wysokociśnieniowymi badaniami impedancyjnymi do rozwiązania fundamentalnych problemów materii miękkiej infiltrowanej do układów mezoporowatych. Skupimy się na weryfikacji, czy istnieje nieodwracalnie zaadsorbowana warstwa molekuł dla cieczy będących w kontakcie z silnie zakrzywioną nanostrukturyzowaną powierzchnią ścianek porów, na dynamice molekularnej, oddziaływaniach typu gość-gospodarz, zwilżalności, itd. Inny, niezwykle ciekawy problem dotyczy procesu dochodzenia próbek infiltrowanych do porów do stanu równowagi podczas izotermicznego wygrzewania, pozwalający im (nie w każdym przypadku) odzyskać mobilność układu litego. Pytanie jakie należy sobie zadać, to dlaczego to zjawisko zachodzi i jakie jest jego molekularne pochodzenie? Dlaczego dla jednych substancji możliwe jest odzyskanie mobilności charakterystycznej dla cieczy litej, a dla innych tak nie jest? Czy efekt ten jest związany ze zwilżalnością, oddziaływaniami międzymolekularnymi? Na koniec chcielibyśmy zbadać wzajemną korelację pomiędzy dynamiką molekuł zaadsorbowanych na ściankach molekuł (tzw. *interfacial layer*) z tymi znajdującymi się bliżej środka pora (tzw. *core molecules*), kinetykę adsorpcji na ściankach porów o różnej morfologii, chropowatości, w ciśnieniu atmosferycznym i podwyższonym. Te innowacyjne pomiary pozwolą nam określić wpływ fluktuacji gęstości na osobliwe zachowanie materiałów miękkich infiltrowanych do mezoporów.

Aby zrealizować zamierzone cele, wyselekcjonowaliśmy kilkanaście modelowych substancji nisko- oraz wielkocząsteczkowych, które będą infiltrowane do mezoporów wykonanych z kilku materiałów (m.in. tlenków: glinu, krzemu, cyrkonu), o różnej chropowatości, strukturze poru i średnicy ($d=4-150$ nm). Następnie, planujemy wykonać na nich pomiary z wykorzystaniem techniki szerokopasmowej spektroskopii dielektrycznej (BDS), spektroskopii Ramana oraz w podczerwieni (FTIR), skaningowej kalorymetrii różnicowej (DSC), dyfrakcji rentgenowskiej (XRD), mikroskopii sił atomowych (AFM), kątów zwilżania, itd. Te metody eksperymentalne zostaną uzupełnione obliczeniami kwantowo-mechanicznymi (DFT) oraz symulacjami dynamiki molekularnej (MD). Jesteśmy przekonani, że badania ciśnieniowe wsparte multieksperymentalnym i teoretycznym podejściem, pozwolą nam znacznie wyjść poza obecny stan wiedzy i przyczynią się do znacznego postępu w zrozumieniu zachowania i własności fizykochemicznych układów ograniczonych przestrzennie w skali nano.