

Samoasocjacja subkomponentów jest metodą syntezy wykorzystującą tworzenie wiązań kowalencyjnych i koordynacyjnych do konstruowania złożonych, trójwymiarowych architektur supramolekularnych. To podejście bazuje na wykorzystaniu prostych organicznych bloków budulcowych oraz jonów metali do budowy ogromnych struktur metalosupramolekularnych. Dzięki wykorzystaniu dynamicznych reakcji kowalencyjnych, strategia ta zapewnia mechanizm kontroli i naprawy błędów, co czyni ją atrakcyjną w zestawieniu z klasycznymi metodami syntezy. Wśród typów architektur supramolekularnych, które zostały skonstruowane przy użyciu samoasocjacji subkomponentów znajdziemy zarówno helikaty, układy mechanicznie zablokowane, jak również funkcjonalne kapsuły molekularne.

Klatki molekularne są trójwymiarowymi cząsteczkami posiadającymi dobrze zdefiniowane wewnętrzne wnęki. Zyskały one uwagę nie tylko ze względu na unikalność swoich struktur, ale także ze względu na niezwykle właściwości i funkcje. Kapsuły molekularne wykazują szereg różnorodnych i fascynujących cech, które doprowadziły do ich zastosowania w różnych obszarach. Stosuje się je do separacji małych cząsteczek, detekcji, generowania nanocząstek metali, dostarczania leków, transportu anionów oraz realizacji wymagających reakcji katalitycznych. Odpowiednia konstrukcja wnęki kapsuły zapewnia ochronę przed zewnętrznym środowiskiem, umożliwiając pułapkowanie reaktywnych cząsteczek i selektywne wiązanie oraz uwalnianie ładunku molekularnego. Projektowanie i wykorzystanie organiczno-nieorganicznych kapsuł molekularnych stanowi jeden z interesujących obszarów rozwoju chemii supramolekularnej w kontekście jej praktycznych zastosowań.

Głównym celem projektu badawczego jest opracowanie nowego wariantu samoasocjacji subkomponentów, nazwanego samoasocjacją subkomponentów sprzężoną z tautomeryzacją, oraz jej wykorzystanie do konstrukcji klatek molekularnych o nowych, oryginalnych funkcjach. Planowane do otrzymania kapsuły molekularne będą się cechowały elastycznością swoich cząsteczek, które można modyfikować, dostosowując je do wymagań cząsteczek gości. Projekt ma na celu zbadanie przemian i dynamiki kompleksów supramolekularnych w celu opracowania wielofunkcyjnych, reagujących na bodźce kapsuł molekularnych o różnorodnych zastosowaniach, w tym do wiązania i protekcji cząsteczek gości, nietypowej reaktywności, oraz do ekstrakcji, transportu jonów i stabilizacji nanocząstek metali.

Projekt bazuje na eksploracji chemii iminopiroli, klasy ligandów strukturalnie zbliżonej do iminopirydyn, ale charakteryzujących się zestawem unikalnych cech. Podczas gdy iminopirydyny są obecnie szeroko wykorzystywane w procesach samoorganizacji struktur supramolekularnych, iminopirole pozostają w tym kontekście słabo zbadane. Subtelna różnica strukturalna między tymi dwoma grupami ligandów pozwala iminopirodom wykazywać ciekawe właściwości koordynacyjne i ulegać tautomeryzacji pod wpływem koordynacji metalu. Właściwości te czynią ligandy iminopirolowe obiecującymi obiektami do projektowania i syntezy elastycznych klatek molekularnych zdolnych do modyfikacji pod wpływem zewnętrznych bodźców. Projekt może potencjalnie mieć dalekosiężny wpływ na pozornie odległe obszary tematyczne, takie jak synteza nanocząstek metali, kataliza heterogeniczna i materiały luminescencyjne.

Realizacja projektu doprowadzi do opracowania nowego wariantu samoasocjacji, nazywanej samoasocjacją subkomponentów sprzężoną z tautomeryzacją i jej wykorzystania w syntezie klatek molekularnych na bazie pirolu, zdolnych do reagowania na bodźce zewnętrzne. Kapsuły te będą się cechowały elastycznymi cząsteczkami i będą wykazywać interesujące zdolności do wiązania i protekcji cząsteczek gości, czy prowadzenia egzotycznych reakcji we wnęce. Będą także mogły zostać wykorzystane do ekstrakcji, transportu jonów i stabilizacji nanocząstek metali. Projekt przyczyni się do rozwoju metod syntezy dostępnych w chemii supramolekularnej i przyczyni się do postępu w takich obszarach jak nauka o materiałach, kataliza czy transfer leków.