

Projekt 3.3. Przenikanie jonów w kryształach molekularnych

Promotor: Dr hab. Oksana Danylyuk

Nazwa zespołu IChF PAN: Zespół 22: Przeniesienie ładunku w układach biologicznych i na granicy faz

www: <http://groups.ichf.edu.pl/zarzycki>

Opis:

Obecnie jesteśmy świadkami dojrzałości i rozkwitu inżynierii krystalicznej oraz jej ścisłego powiązania z chemią supramolekularną. To owocne małżeństwo toruje drogę do projektowania i syntezy sztucznych kryształów supramolekularnych, wykazujących różne zjawiska dynamiczne, takie jak 'nabrzmiwanie', 'oddychanie', transport, czy reakcje w ciele stałym. Proponowany projekt będzie ukierunkowany na badania dynamicznego zachowania kryształów molekularnych opartych o wiązania wodorowe wspomagane ładunkiem i oddziaływania typu gość-gospodarz. Takie kryształy powinny dostosowywać swoją strukturę do różnych wprowadzanych gości/jonów poprzez regulację konformacji molekularnej i sposobów agregacji bloków budulcowych. Zamiast aktywnie badanej klasycznej porowatości kryształów, która wymaga aktywacji i zachowania otwartej struktury, skoncentrujemy się na wnikaniu i wiązaniu gości w porach kryształów molekularnych. Aby to osiągnąć, zastosujemy metody nasiąkania kryształów, szeroko stosowane w krytalografii biologicznej. Kryształy będą analizowane za pomocą dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego na monokryształach, w celu oznaczenia sposobu i miejsca wiązania gości/jonów w porach i odpowiedzi natywnej struktury. Doktorant(ka) będzie miał(a) możliwość realizacji części zadań projektu na Uniwersytecie Bolońskim (Wydział Chemii) podczas planowanego stypendium zagranicznego.

Cel projektu:

Celem projektu jest wyjaśnienie, w jaki sposób współdziałanie wiązań wodorowych, sił jonowych i oddziaływań gość-gospodarz umożliwia tworzenie i następujące przemiany strukturalne przenikalnych kryształów molekularnych. Mamy nadzieję odpowiedzieć na pytanie, w jaki sposób małe jony i/lub cząsteczki mogą przenikać do kryształów? Czy pojawią się nowe oddziaływania wspomagające transport jonów przez pory? Jaka jest rola cząsteczek wody wypełniających pory w przenikaniu jonów?

Wymagania:

- tytuł magistra nauk chemicznych lub dziedziny pokrewnej;
- dobra znajomość języka angielskiego;
- wiedza/doświadczenie w zakresie krytalografii rentgenowskiej, chemii supramolekularnej.