



UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

**Nowe podejście do oddziaływań typu anion- π :
addukty supramolekularne z udziałem anionowych
kompleksów jonów metali d-elektronowych i
cząsteczek organicznych z niedoborem gęstości
elektronowej π (Anion- π)**

Dr hab. Robert Podgajny

Zespół Nieorganicznych Materiałów Molekularnych,
Zakład Chemii Nieorganicznej,
Wydział Chemii



Zaproszenie do udziału w realizacji projektu NCN
OPUS 8 (UMO-2014/15/B/ST5/02098)

**Nowe podejście do oddziaływań typu anion- π :
addukty supramolekularne z udziałem anionowych
kompleksów jonów metali d-elektronowych i
cząsteczek organicznych z niedoborem gęstości
elektronowej π (Anion- π)**

Kierownik projektu: dr hab. Robert Podgajny, Wydział Chemii UJ
Zakład Chemii Nieorganicznej
Zespół Nieorganicznych Materiałów Molekularnych

Okres realizacji: 3 lata, lipiec 2015 - czerwiec 2018

Stypendia naukowe: w okresie jesień-zima 2015 – wiosna 2018

Budżet całkowity: 679 980,00 zł



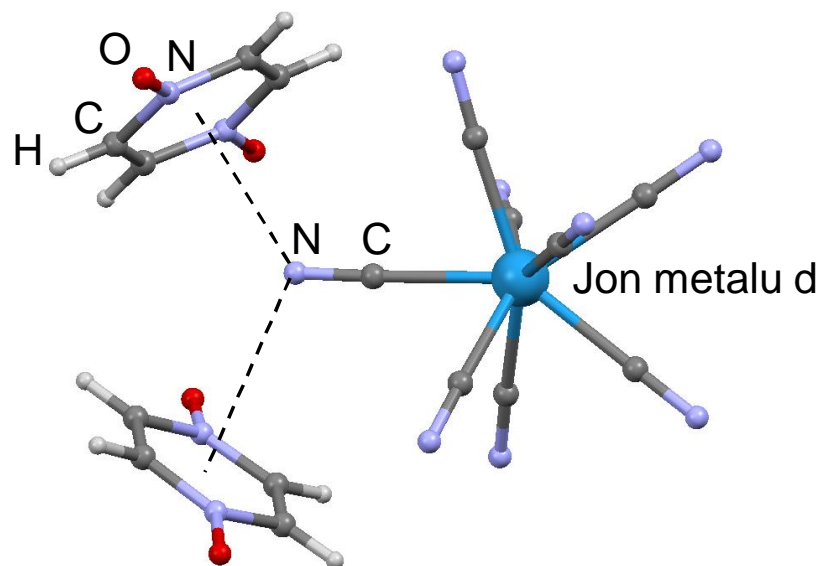
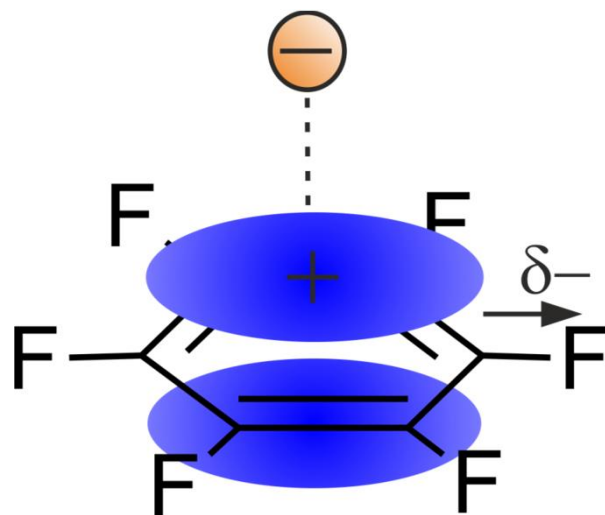
Cele i zadania badawcze:

- Uzyskanie nowych połączeń molekularnych z udziałem anionowych kompleksów jonów metali d-elektronowych oraz cząsteczek organicznych z niedoborem elektronów π .
- Charakterystyka strukturalna i fizykochemiczna uzyskanych połączeń
- Poszukiwanie i identyfikacja motywów strukturalnych z oddziaływaniami anion- π
- Poszukiwanie nowych chromoforów w zakresie widzialnym
- Teoretyczny opis oddziaływań supramolekularnych w obrębie wyodrębnionych motywów strukturalnych
- Określenie wpływu oddziaływań anion- π na oddziaływania magnetyczne w wybranych połączeniach z udziałem ligandów z niedoborem elektronów π



Strategia syntezy:

- Wykorzystanie potencjalnych oddziaływań supramolekularnych pomiędzy ujemnie naładowanym fragmentem kompleksu, a obszarem dodatniego potencjału elektrostatycznego cząsteczki organicznej:



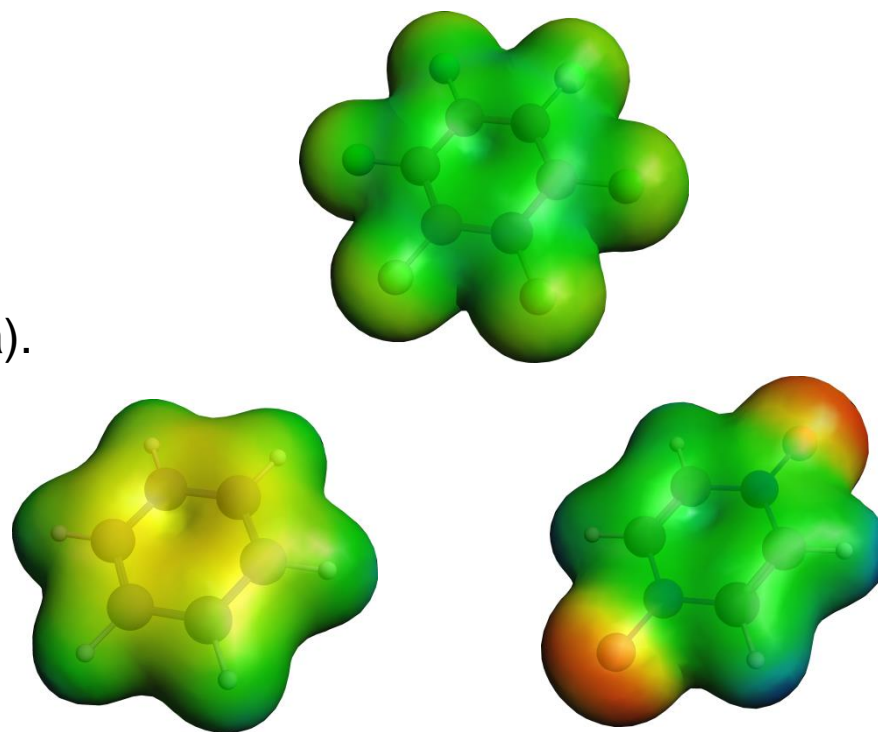


Obliczenia DFT:

- Określanie potencjału elektrostatycznego oraz energii oddziaływań (metoda ETS-NOCV):

(z wyodrębnieniem przyczynków

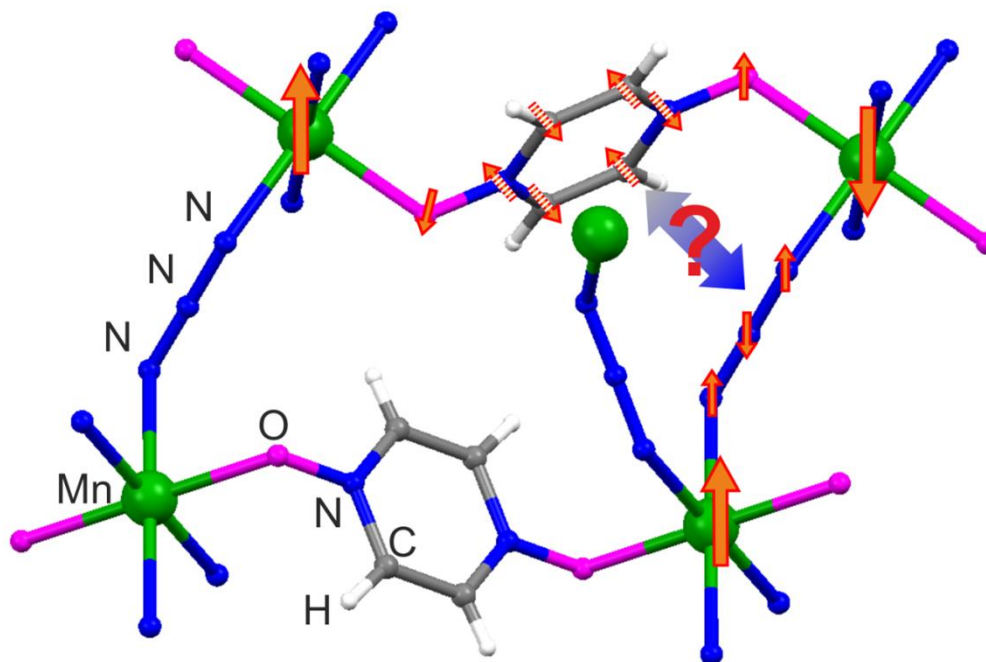
- Pauliego,
- elektrostatycznego,
- orbitalnego,
- dyspersyjnego (van der Waalsa).





Nowe spojrzenie na sprzężenie magnetyczne:

- Poszukiwanie synergii pomiędzy oddziaływaniami supramolekularnymi a nadwymiernymi oddziaływaniami magnetycznymi w polimerach koordynacyjnych:





Doświadczenie kierownika:

Dotychczasowe artykuły naukowe związane ściśle z tematyką projektu:

1. *Inorg Chem.*, **2007**, *46*, 10416.
2. *Cryst. Growth Des.*, **2013**, *13*, 3036.
3. *CrystEngCmm*, **2013**, *15*, 2378.
4. *Cryst. Growth Des.* **2014**, *14*, 4030.

Dorobek naukowy:

Ponad 50 artykułów naukowych z Listy Filadelfijskiej,
Udział w projektach badawczych KBN, MNiSW oraz NCN – Kierownik, Główny wykonawca lub Wykonawca.

Wystąpienia konferencyjne ECMM, ICMM, ICCO i inne



Infrastruktura badawcza:

Dogodny dostęp do urządzeń badawczych istniejących na Wydziale Chemii UJ:

Laboratorium chemiczne w pełni wyposażone; komory rękawicowe (2 x);
linie próżniowo-azotowe i inne

Aparatura pomiarowa: Magnetometr MPMS-3 Evercool (Quant. Des. - najnowszy model); Dyfraktometry monokrystaliczne (2 x) i Dyfraktometry proszkowe (2 x) z przystawkami temperaturowymi (tryb grzania i tryb chłodzenia); urządzenia analityczne CNHS, TGA QMS, DSC; spektrometry UV-VIS, IR, EPR, NMR spektrometry masowe i inne

Dogodny dostęp do urządzeń istniejących w krakowskim ośrodkach badawczych (WFAIS UJ, IFJ PAN, AGH), jak również w innych uczelniach w Polsce: zestaw PPMS, spektrometr Moessbauera ^{57}Fe i inne.

Współpraca naukowa w zakresie chemii teoretycznej i obliczeniowej (metody DFT, metody *ab initio*).



Rekrutacja stypendystów:

Regulamin przyznawania stypendiów naukowych dla młodych naukowców w projektach badawczych oraz regulamin przyznawania stypendiów naukowych dla młodych naukowców w ramach stypendiów doktorskich ETIUDA **finansowanych ze środków Narodowego Centrum Nauki**

II połowa 2015 roku

(Załącznik nr 4 do konkursu OPUS 8, wrzesień 2014)



Rekrutacja stypendystów:

W **otwartym konkursie** ocenie komisji rekrutacyjnej podlegają:

- **Osiągnięcia naukowe** młodego naukowca, w tym publikacje w renomowanych wydawnictwach/czasopismach naukowych (50% oceny końcowej, od 0 do 4 pkt)
- **Wyróżnienia** wynikające z prowadzenia badań naukowych, stypendia, nagrody oraz doświadczenie naukowe zdobyte poza macierzystą jednostką naukową w kraju lub za granicą, warsztaty i szkolenia naukowe, udział w projektach badawczych (50% oceny końcowej, od 0 do 4 pkt)



Osobom zainteresowanym chętnie udzielię dodatkowych wyjaśnień

dr hab. Robert Podgajny

Zespół Nieorganicznych Materiałów Molekularnych

Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii

ul. Ingardena 3, 30-060 Kraków

p. 026b lub 107

e-mail: podgajny@chemia.uj.edu.pl

tel. 12 663 22 36, 12 663 20 51, fax. 12 634 05 15

strona internetowa: <http://www2.chemia.uj.edu.pl/znmm/>

zakładka: ANION- π OPUS 8