

Richiesta per attivazione assegno di ricerca

Tutor: Prof.ssa Elisabetta Mezzina

Titolo dell'assegno: Progettazione e studio dei movimenti di macchine molecolari radicaliche alimentate da combustibili chimici

Progetto di ricerca

Le macchine molecolari artificiali (MIM) come rotassani e catenani sono composti interconnessi tenuti insieme da legami meccanici anziché chimici. Queste molecole possono essere predisposte in modo da incorporare nei loro componenti opportuni siti di riconoscimento producendo stati ben definiti.

All'equilibrio, le MIM si trovano in una situazione di 'riposo' in cui uno degli stati prevale sull'altro a causa delle interazioni attrattive tra i due componenti; quando una fonte di energia esterna ad esempio luce, input chimico o elettrochimico allontana il sistema dall'equilibrio, viene prodotto un nuovo stato derivato dallo spostamento di un componente interconnesso sull'altro. Il sistema supramolecolare può in seguito tornare nello stato iniziale mediante un controstimolo o mediante opportuni reagenti detti 'fuels' in grado di compiere interi cicli di movimento in un senso e nel senso opposto (*shuttling*) sulla macchina molecolare stessa.

Scopo del lavoro di ricerca sarà quello di progettare rotassani paramagnetici contenenti centri radicalici persistenti in uno o in entrambi i componenti del rotassano allo scopo di studiare le proprietà dei nuovi sistemi anche mediante spettroscopia EPR. La spettroscopia EPR, infatti, è una tecnica estremamente sensibile all'ambiente nelle immediate vicinanze del centro radicalico in grado di seguire processi che avvengono in una scala dei tempi dell'ordine dei nanosecondi, come accade per gli assemblaggi supramolecolari. L'analisi della forma di riga spettrale permetterà di avere informazioni sulla dinamica molecolare e sulle distanze tra i vari componenti del rotassano difficilmente ottenibili con tecniche convenzionali.

Piano delle attività di ricerca

Allo scopo di realizzare il Progetto di ricerca, l'Assegnista sarà indirizzato alla preparazione di MIM paramagnetiche utilizzando sia strategie generalmente usate per la sintesi di rotassani che si basano su relazioni di riconoscimento come quelle che si sviluppano in un complesso molecolare *host-guest*, sia nuovi approcci basati su interazioni deboli o poco favorite fra gruppi funzionali dove i componenti si assemblano

per formare una molecola interbloccata in uno *step* singolo e senza altri reagenti, sfruttando il macrociclo come catalizzatore della reazione.

Inoltre l'Assegnista cercherà di proporre alternative sintetiche per una più efficiente preparazione di macrocicli paramagnetici basati su eteri corona.