

Struktura i dynamika wody w stanie ciekłym budzi powszechne zainteresowanie świata nauki od dziesiątek lat. Opiniotwórczy magazyn Science stawia pytanie o strukturę wody jako jedno ze 125 najważniejszych pytań dla ludzkości, które nadal nie znalazły odpowiedzi. Woda uważana jest za substancję niezbędną do życia, stanowi ok. 70 % masy naszego ciała. Jej unikatowe właściwości (znanych jest prawie 70 anomalii związanych z właściwościami wody) kształtują klimat na Ziemi, pozwalają przetrwać mrozy organizmom wodnym, determinują właściwości wody, jako dobrego rozpuszczalnika dla wielu substancji. Właściwości ciekłej wody są wynikiem silnych oddziaływań międzycząsteczkowych - wiązań wodorowych, które tworzą trójwymiarową sieć. Mimo licznych prac, nadal nie wiemy w jaki sposób łączą się cząsteczki H<sub>2</sub>O i w jaki sposób struktura wiązań wodorowych ulega zmianom pod wpływem wielu różnorodnych czynników, np. jonów organicznych, nanocząstek i innych. Nie wiadomo również czy, i ewentualnie w jaki sposób, struktura i dynamika lokalna przekłada się na właściwości wody w makroskali (efekt hierarchiczności struktury obserwowany jest dla wielu znanych układów, np. polimerów, w tym białek, zeolitów, kompozytów, itd.). Niniejszy projekt zakłada zbadanie zależności pomiędzy zmianami zachodzącymi w wodzie w różnej skali czasu (od bilionowej części sekundy po skalę tysięcznych części sekundy) i w różnym zakresie rozmiaru (od pojedynczych cząsteczek po duże ich ugrupowania zwane klastrami). Jak wspomniano woda jest uniwersalnym rozpuszczalnikiem, a jej dostępność i niska cena powoduje, że stanowi podstawę wielu współczesnych technologii. Warto przy tym zaznaczyć, że woda (wilgoć) silnie modyfikuje właściwości wielu materiałów użytkowych, chociażby materiałów budowlanych: cementów, gipsów, drewna i materiałów drewnopochodnych, polimerów itd.. Poznanie, jak woda oddziałuje z różnymi substancjami i jaka jest jej struktura w tych materiałach stanowi zatem poważne zagadnienie, istotne z punktu widzenia wielu dziedzin życia.

Nanocząstki metali są przykładem nowoczesnych materiałów, które stają się coraz bardziej popularne w codziennym życiu. Są stosowane m. in. jako dodatek do odzieży, farb czy kosmetyków nadając im m.in. właściwości antybakteryjne. Coraz liczniejsze zastosowania powodują, że nanocząstki metali dostają się w coraz większych ilościach do naszego środowiska. Wpływ takich substancji na strukturę i dynamikę wody jest ważnym aspektem, którego nie można ignorować, ze względu na fakt, iż nie znamy szlaków migracji nanocząstek w ekosferze. Zarówno ze względu na ograniczoną stabilność nanocząstek metali, ich doskonałe zdolności do penetracji nawet przez niewielkie pory (wiele z nich ma zdolność przenikania przez błony komórkowe), jak i aspekty związane z ochroną środowiska poznanie oddziaływań woda-nanocząstki metali wydaje się bardzo istotne. Tym bardziej, że wyniki symulacji komputerowych wskazują na możliwość tworzenia się na powierzchni nanocząstek metali specyficznych struktur wody.

Innym przykładem materiałów, w których woda odgrywa istotną rolę są ciecze jonowe. Są to sole posiadające w swej budowie jony substancji organicznych, które w temperaturach zbliżonych do temperatury pokojowej występują w stanie ciekłym. Ciecze jonowe należy zaliczyć do nowoczesnych materiałów. Mimo że ich historia ma już ponad wiek, pierwsze komercyjnie dostępne związki tego typu pojawiły się niecałe 20 lat temu. Ogromnym problemem przez wiele lat była ich niska stabilność w obecności wilgoci. Ze względu na swoje właściwości substancje te znajdują zastosowanie w wielu dziedzinach, m.in. jako „projektowane” rozpuszczalniki czy jako elektrolit w bateriach. Obecność wody może w przypadku wielu cieczy jonowych silnie wpływać na ich właściwości, dzięki czemu stosując różne ilości wody możemy dopasować te właściwości do potrzeb. Dlatego poznanie struktury i dynamiki wody w tych układach oraz oddziaływań woda – jony organiczne jest tak istotne.

Badania przeprowadzone w ramach tego projektu pozwolą globalnie spojrzeć na strukturę i dynamikę ciekłej wody w stanie czystym, jak również w dwóch wybranych klasach nowoczesnych materiałów funkcjonalnych zyskujących coraz większe znaczenie w naszym codziennym życiu.