

Wodór obecnie jest gazem szeroko wykorzystywanym w różnych dziedzinach przemysłu, nauki oraz medycyny. Przykładowo jest kluczowym odczynnikiem w reakcjach uwodornienia w syntezie wielu substancji czynnych leków. Coraz większą uwagę przyciąga również jako ekologiczne paliwo – jego spalanie prowadzi do powstania wody, co czyni go przyjaznym dla środowiska. Przewiduje się, że w najbliższym czasie wodór będzie odgrywał coraz większą rolę w sektorze energetycznym. Kolejnym ważnym zastosowaniem wodoru jest jego rola w spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR) i obrazowaniu magnetycznym rezonansem jądrowym (MRI). Dzięki swoim wyjątkowym właściwościom fizykochemicznym wodór znacząco poprawia czułość NMR i MRI.

Jedną z najbardziej interesujących cech wodoru jest jego występowanie w dwóch odmianach – ortowodorze i parawodorze. Mianowicie, cząsteczka wodoru (H_2) składa się z dwóch atomów wodoru, a każde jądro atomu, będące protonem, posiada unikatową właściwość zwaną spinem. Ze spinem jądrowym związany jest moment magnetyczny, który można sobie wyobrazić jako mały magnes sztabkowy. Spiny dwóch jąder cząsteczki wodoru mogą być skierowane w tę samą stronę, tworząc ortowodór, lub w przeciwnych kierunkach, tworząc parawodór. Te dwie odmiany wodoru mają zupełnie różne właściwości fizykochemiczne i nie przekształcają się samoczynnie w siebie nawzajem. Taka konwersja jest możliwa tylko w obecności odpowiedniego katalizatora. Pomimo, że cząsteczka wodoru jest znana ludzkości od XVII wieku i wiadomo obecnie już o niej niemal wszystko, to stosunkowo niedawno odkryto, że niektóre katalizatory mogą przekształcać parawodór w ortowodór w taki sposób, że widmo cząsteczki ortowodoru w spektroskopii NMR ma niespotykany dotychczas kształt (PNL - *ang. Partial Negative Line*). Powstawanie takiego widma nie jest zgodne z dotychczasową wiedzą na temat cząsteczki ortowodoru, co intryguje wielu naukowców na całym świecie. Aby wyjaśnić ten efekt, zaproponowano dwie hipotezy. Pierwsza sugeruje, że na katalizatorze dochodzi do konwersji parawodoru w ortowodór ze specyficznym uporządkowaniem spinów jądrowych. Druga zakłada, że w wysokim polu magnetycznym cząsteczki ortowodoru są częściowo zorientowane, co powoduje nietypowe sygnały NMR. Obie hipotezy opierają się na solidnych założeniach, ale różnią się mechanizmami fizykochemicznymi. Hipotezy te muszą zostać poddane weryfikacji, a to wymaga dalszych badań efektu PNL.

Dlatego naszym celem jest ostateczne poznanie i wyjaśnienie natury wyjątkowego efektu PNL i rozwianie wszelkich wątpliwości dotyczących obecnego stanu wiedzy na ten temat. W ramach projektu dokładnie zbadamy, jak efekt PNL zależy od struktury i budowy katalizatora. W szczególności wyjaśnimy, dlaczego w przypadku niektórych katalizatorów PNL jest bardziej efektywny. Integralną częścią projektu jest również badanie, jak warunki eksperymentalne wpływają na obserwację tego zjawiska. W tym przypadku zbadamy, jak efekt PNL jest modulowany przez typ rozpuszczalnika oraz wielkość pola magnetycznego, w którym wykonywane są eksperymenty PNL. Szczegółowa analiza wyników pozwoli nam zweryfikować słuszność obecnych hipotez tłumaczących PNL. Wyjaśnimy, czy za powstawanie PNL odpowiadają procesy chemiczne, takie jak reakcja wymiany, czy może fizyczne, jak unikatowa orientacja cząsteczek wodoru w polu magnetycznym.

Nasze badania pozwolą wyjaśnić obecne kontrowersje i nieдомówienia związane ze zjawiskiem PNL oraz zaspokoją ciekawość i głód wiedzy na ten temat panujący w środowiskach naukowych. Mamy nadzieję, że pokażą one, w jakim stopniu efekt PNL może być wykorzystany w badaniach ważnych procesów i cząsteczek chemicznych. W szczególności zrozumienie PNL może mieć znaczenie w badaniach układów mających udokumentowane właściwości biologiczne, takich jak biokatalizatory nazywane hydrogenazami. Są poważne przesłanki, że występowanie oraz charakter PNL w tego typu układach biologicznych może dostarczać informacji o oddziaływaniu wodoru z centrum biokatalitycznym. Nasze badania mogą również mieć znaczenie w zastosowaniu PNL w badaniach katalizatorów chemicznych, w tym tych mających znaczenie w przemyśle farmaceutycznym. Nasze badania pozwolą też na głębsze zrozumienie procesów konwersji pomiędzy ortowodorem a parawodorem. Szczegółowa wiedza na ten temat ma kluczowe znaczenie choćby w procedurach bezpieczeństwa podczas magazynowania wodoru, gdy jest on stosowany jako paliwo.