

***Nowe kompleksy rutenu, palladu, miedzi i niklu z N-heterocyklicznymi karbenami.
Synteza, struktura, reaktywność i zastosowania.***

Krzysztof Grudzień

Współczesna synteza organiczna w olbrzymim stopniu opiera się na procesach katalitycznych, czyli przyspieszanych przez specjalnie dobrane związki o odpowiedniej budowie i właściwościach (katalizatory), będące odpowiednikami enzymów w procesach biochemicznych. Od wielu lat największym znaczeniem oraz popularnością cieszą się katalizatory metaloorganiczne, czyli kompleksy metali przejściowych ze związkami organicznymi (ligandami). Postęp w ich rozwoju zaowocował w ostatnich latach przyznaniem dwóch Nagród Nobla w dziedzinie chemii: w 2005 r. za badanie mechanizmu reakcji metatezy olefin, katalizowanej kompleksami rutenu i molibdenu (Chauvin, Grubbs, Schrock), oraz w 2010 r. za odkrycie i rozwój reakcji sprzęgania krzyżowego, katalizowanych kompleksami palladu (Heck, Negishi, Suzuki).

Grupą ligandów które w ostatnich latach zyskały olbrzymie znaczenie w chemii metaloorganicznej są N-heterocykliczne karbeny (NHC). Ze względu na korzystne własności elektronowe oraz szerokie możliwości modyfikacji strukturalnych są uniwersalnymi partnerami metali przejściowych w układach katalitycznych. Wiedza na temat reaktywności tego typu kompleksów ma kluczowe znaczenie dla rozwoju współczesnej chemii, w szczególności tak ważnych dziedzin jak kataliza homo- i heterogeniczna, chemia koordynacyjna czy synteza organiczna.

Celem moich prac w ramach projektu doktoranckiego jest zbadanie wpływu modyfikacji strukturalnych w nowych ligandach NHC na aktywność katalityczną metaloorganicznych kompleksów rutenu, palladu, miedzi i niklu. W szczególności zajmuję się badaniem zjawiska podwójnej ligacji centrów metalicznych przez niesymetryczne, N-heterocykliczne karbeny. Moja hipoteza zakłada, że jest to proces równowagowy zachodzący w roztworze, zaś jego skala zależy przede wszystkim od struktury liganda, temperatury oraz rozpuszczalnika. Z uwagi na to, że kompleksy mono- i bis-karbenowe wyraźnie różnią się między sobą aktywnością katalityczną, znajdują one zastosowania w różnych typach reakcji organicznych, które często prowadzone są w zbliżonych warunkach. W ramach podjętych prac staram się wykazać, że nawet niewielkie różnice w budowie liganda mogą mieć bardzo duży wpływ na selektywność procesu katalitycznego. Doświadczenie i wiedzę zdobyte w badaniach relacji struktura-aktywność wykorzystuję w projektowaniu i syntezie nowych ligandów do ściśle zdefiniowanych zastosowań.