

Kataliza chemiczna to zjawisko przyspieszenia szybkości reakcji chemicznej pod wpływem dodania do układu niewielkiej ilości katalizatora, który sam nie ulega trwałym przekształceniom, lecz tylko tworzy z innymi substratami związki lub kompleksy przejściowe. Działanie katalizatora powoduje przyspieszenie reakcji chemicznej i/lub obniża temperaturę niezbędną do zajścia danej reakcji chemicznej. W rezultacie reakcje katalityczne są preferowanymi reakcjami w przyjaznej dla środowiska zielonej chemii z powodu redukcji ilości produktów ubocznych / odpadów oraz oszczędności czasu i energii. Współcześnie produkcja większości ważnych substancji chemicznych w dużej skali odbywa się za pomocą reakcji katalitycznych.

Z chemicznego punktu widzenia kataliza polega na zmianie ścieżki kinetycznej reakcji poprzez obniżenie energii aktywacji reakcji i utworzenia innych, w stosunku do reakcji prowadzonej na sposób niekatalityczny, kompleksów przejściowych. W efekcie przyspieszeniu ulega zarówno reakcja prowadząca do produktu, jak i reakcja biegnąca w kierunku przeciwnym, prowadząca do odtworzenia substratów. W większości przypadków mechanizm katalizowanej reakcji jest skomplikowany, a sama kataliza jest procesem wieloetapowym. Oczywiście nie istnieją uniwersalne katalizatory, ale każda reakcja chemiczna wymaga unikalnego katalizatora.

Głównym celem tego projektu badawczego jest systematyczne badanie nad wybranymi katalizatorami chemicznymi w celu lepszego zrozumienia fundamentalnych aspektów ich działania. W ramach tego projektu planujemy zaprojektowanie i modelowanie nowych rutenowych katalizatorów metatezy olefin, reakcji uwodornienia, katalitycznego procesu przeniesienia wodoru oraz hydrosililowania. Część pracy poświęcimy także na rozwój nowych metod obliczeniowych, które pozwolą na opisanie wybranych procesów katalitycznych nie tylko na poziomie atomowym, ale także w skali nano- i mezomolekularnej, przygotowując parametryzację wybranych kompleksów rutenowych w metodach ReaxFF, DFTB oraz PM6/PM7. Zadanie to zostanie przeprowadzone w interdyscyplinarnym zespole składającym się z naukowców specjalizujących się w chemii metaloorganicznej, racjonalnym projektowaniu modelowaniu kompleksów metali przejściowych/półmetali, katalizie oraz fizyce. Wyniki tego projektu pozwolą na dokładną charakterystykę nowych katalizatorów oraz pozwolą na opracowanie ogólnej metodologii, która zostanie wykorzystana w przyszłości do projektowania nowych katalizatorów.

Skoncentrowanie się na reakcji metatezy jest uzasadnione, ponieważ reakcja ta została nazwana "nową zieloną technologią" przez Royal Academy of Science w 2005 podczas wręczenia za nią Nagrody Nobla i szybko została zaadoptowana przez grupy badawcze jako podstawowa strategia syntezy wiązania C-C. Zdolność tej metody do wybiórczego zastępowania atomów między dwiema cząsteczkami pozwala na generowanie układów chemicznych o pożądanych właściwościach. Jest to szczególnie ważne dla skomplikowanych związków takich jak związki naturalne oraz nowe związki heterocykliczne i makrocycliczne. Użycie reakcji metatezy krzyżowej, metatezy z zamknięciem lub otwarciem pierścienia, acyklicznej metatezy dienów oraz metatezy alkinów i enynów pozwala na syntezę związków chemicznych używając prostych dróg reakcji oraz użycia tańszych i prostszych surowców i związków wyjściowych.

Ogromna liczba aplikacji reakcji metatezy w dzisiejszych czasach jest naprawdę niezwykłą, zwłaszcza biorąc pod uwagę relatywnie krótki czas od czasu jej odkrycia. Synteza wielu złożonych cząsteczek i substancji organicznych, takich jak związki o działaniu farmaceutycznym, polimery, środki agrochemiczne i produkty naturalne, jest możliwe lub znacznie łatwiejsze właśnie dzięki nowym katalizatorom. Pomimo dużej ilości badań nad nowymi katalizatorami metatezy i mechanizmami tej reakcji wiele pytań dotyczących tych zagadnień pozostaje bez odpowiedzi. Większość dzisiejszych prac w tym temacie koncentruje się na poszukiwaniu nowych zastosowań dla katalizatorów, odpowiada na pytanie dotyczące mechanizmów reakcji przez nie katalizowanych, oraz na ulepszaniu już istniejących katalizatorów poprzez zmiany w ich strukturze. Taki jest również zakres tego wniosku, którego głównym celem jest poszerzenie naszej wiedzy na temat tej ciekawej klasy związków chemicznych.

Projekt ten wzmocni również badania naukowe w Polsce. Mamy nadzieję, że projekt ten przyczyni się do wzrostu konkurencyjności Polski na polu katalizy chemicznej, a jego wyniki posłużą społeczności chemicznej na całym świecie do lepszego zrozumienia zależności pomiędzy strukturą a reaktywnością katalizatorów rutenowych i katalizatorów innych metali przejściowych.