

Podstawowym zadaniem chemii w służbie człowiekowi jest przemiana łatwo dostępnych surowców, takich jak ropa, minerały czy biomasa, w użyteczne substancje charakteryzujące się pożądanymi właściwościami. Zakres produktów chemii rozciąga się od relatywnie prostych wyrobów – nawozów, barwników, paliw, do najbardziej wyrafinowanych – zaawansowanych materiałów i nowych leków. Praca naukowca chemika w jej aspekcie aplikacyjnym polega na ulepszaniu istniejących oraz opracowywaniu nowych metod przeprowadzania tych transformacji w sposób kontrolowany i jak najbardziej efektywny, a przy tym jak najmniej wpływający na środowisko naturalne. Równie ważny jest aspekt poznawczy badań, z jednej strony motywowany dążeniem do lepszego zrozumienia otaczającego nas świata, a z drugiej umożliwiający dalszy postęp w dziedzinie zastosowań.

Przedstawiony projekt wpisuje się w oba powyższe punkty widzenia. Jego głównym celem jest opracowanie szeregu nowych reakcji chemicznych, narzędzi do transformacji substancji, posiadających szeroki potencjał zastosowania przede wszystkim w przemyśle farmaceutycznym oraz wysokowartościowych produktów chemicznych. Co ważne, planowane prace nie będą ukierunkowane na otrzymanie konkretnych związków chemicznych, przeciwnie proponowane nowe procesy charakteryzują się dużą ogólnością i będą mogły z powodzeniem być używane w różnorodnych kontekstach. Projekt niesie także wysoką wartość poznawczą. Zakłada on eksplorację dotąd niezbadanego połączenia intrygującej reaktywności specjalnej klasy substancji zawierających jod, tzw. hiperwalencyjny, z możliwościami oferowanymi przez katalizę nukleofilową.

Kluczową własnością reakcji chemicznej decydującą o jej efektywności, stosowalności, jakości i minimalizacji niekorzystnego oddziaływania na środowisko, jest selektywność. Reakcje wykazujące wysoką selektywność przekształcają większość lub nawet całość substratu w produkt oraz nie generują niepożądanych produktów ubocznych. Dodatkową kwestią także związaną z selektywnością reakcji jest fakt, że cząsteczki praktycznie wszystkich złożonych związków chemicznych mogą występować w postaci nieidentycznych odbić lustrzanych, tzw. enancjomerów. Ponieważ podstawowe składniki budulcowe organizmów żywych: białka, kwasy nukleinowe i węglowodany, również posiadają tę własność, przeciwnie enancjomery np. leku często wykazują bardzo odmienne własności i działanie. Stąd rozwój skutecznych metod syntezy pozwalających selektywnie otrzymywać produkty enancjomerycznie czyste ma pierwszorzędne znaczenie. Proponowane nowe reakcje będą właśnie dawały taką możliwość dzięki zastosowaniu efektywnych katalizatorów asymetrycznych, tj. substancji znacznie przyspieszających tworzenie pojedynczego enancjomeru produktu, tak że drugi powstaje w bardzo małej, zaniedbywalnej ilości.

Co stanowi o innowacyjności projektu to zastosowanie związków jodu hiperwalencyjnego. Obecność w ich cząsteczkach bardzo reaktywnego atomu jodu na wysokim stopniu utlenienia otwiera możliwość przeprowadzania selektywnych reakcji prowadzących do gwałtownego wzrostu złożoności molekularnej. Oznacza to, że będą one przekształcać proste materiały wyjściowe od razu w produkty o skomplikowanej budowie, zawierające motywy strukturalne występujące np. w związkach naturalnych bądź ważnych farmakologicznie.

Związki jodu hiperwalencyjnego, w szczególności w porównaniu z często obecnie wykorzystywanymi w przemyśle chemicznym metalami ciężkimi, charakteryzują się niską toksycznością. Stanowi to ogromną zaletę zwłaszcza w kontekście zastosowań do syntezy leków. Niestety ich wadą jest, że są to substancje skomplikowane, a przez to często drogie w otrzymaniu. Stąd, aby zwiększyć potencjał praktycznego zastosowania opracowanych reakcji, już na początkowym etapie badań planowana jest immobilizacja, tj. związanie, katalizatorów nukleofilowych oraz odnawialnych związków jodu na stałym nośniku i ich użycie w formie heterogenicznej. Zastosowanie katalizatorów heterogenicznych umożliwi ich łatwe odzyskanie po reakcji i ponowne użycie, pozwala ono także na przeprowadzanie reakcji w układzie przepływowym.

Opracowywanie nowych transformacji chemicznych, w szczególności tych najbardziej innowacyjnych, opierających się na niedokładnie jeszcze poznanych obszarach wiedzy, wiąże się dużym nakładem pracy związanym z koniecznością testowania licznych warunków reakcji metodą prób i błędów. W ramach tego projektu planowane jest zastosowanie metod obliczeniowych w celu usprawnienia procesu optymalizacji warunków reakcji, zwłaszcza doboru katalizatora o jak najlepszej strukturze. Korzystając z najnowszych zdobyczy chemii teoretycznej oraz przy zastosowaniu dzisiejszych superkomputerów możliwe jest modelowanie procesów chemicznych *in silico*, co stanowi ogromną pomoc w projektowaniu nowych skutecznych i selektywnych metod syntetycznych. Zastosowanie uzupełniających się wzajemnie podejść doświadczalnych i teoretycznych umożliwi także zgłębienie mechanizmów opracowywanych reakcji, tj. ich dokładnego przebiegu na poziomie molekularnym.

Podsumowując, projekt przyczyni się do usprawnienia syntez skomplikowanych substancji chemicznych, w szczególności w kontekście otrzymywania leków (tak nowych, jak i istniejących). Posiada on bardzo interdyscyplinarny charakter, jego realizacja będzie ważnym krokiem naprzód w dziedzinie chemii, inspirując nowe kierunki rozwoju.