

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 właśnie 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 bieżąca 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, modelowanie, syntezę i analizę nowych rutenowych katalizatorów metatezy olefin. Zadania tego projektu zostaną wykonane w interdyscyplinarnym, międzynarodowym zespole złożonym z ekspertów w syntezie karbenów i ich kompleksów rutenowych oraz racjonalnym projektowaniu katalizatorów. Wyniki tego projektu pozwolą na dokładne scharakteryzowanie serii nowych katalizatorów i umożliwią opracowanie ogólnej metodologii, która w przyszłości zostanie użyta do zaprojektowania nowych, lepszych 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 pożądanym 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 niezwykła, 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.

Głównym celem tego projektu jest wzmocnienie potencjału naukowego Polski i Niemiec, a także wstępem do ściślejszej współpracy pomiędzy tymi krajami, ich dwoma czołowymi instytucjami akademickimi oraz trzema grupami mających komplementarne doświadczenie chemiczne. W trakcie realizacji tego projektu stworzymy istotne, międzynarodowe synergie pomiędzy trzema grupami naukowymi pracując nad nowymi układami katalitycznymi na bazie rutenu. Jednym z celów tego projektu jest również promocja młodych naukowców i włączenie ich do międzynarodowego projektu o światowym potencjale. Oczekiwany rezultatem tej współpracy jest rozwój nowych umiejętności młodych naukowców oraz możliwość poszerzenia swoich horyzontów podczas pracy w wielonarodowym środowisku.