

Współczesny rozwój chemii zmierza w kierunku tworzenia nowych metod przekształcania prostych związków chemicznych do złożonych i atrakcyjnych produktów przy użyciu zrównoważonych technologii, efektywnie zużywających substraty, obniżających koszty wytwarzania, eliminujących szkodliwe dla człowieka i środowiska naturalnego reagenty oraz ograniczających ilość wytwarzanych odpadów. Postęp w tej dziedzinie realizowany jest m.in. poprzez otrzymywanie i stosowanie nowych, układów katalitycznych. Nieodłączną częścią takiego procesu są badania związane z dokładnym poznaniem struktury, właściwości fizykochemicznych i reaktywności badanych katalizatorów. Umożliwiają one pełniejsze zrozumienie procesów katalitycznych i pozwalają na znalezienie nowych kierunków ich zastosowania. W ciągu ostatnich trzydziestu lat szczególne miejsce wśród takich układów zajmują wykorzystywane w syntezie asymetrycznej chiralne katalizatory Shibasakiiego o wzorze  $[MM'_{3}(\text{binol})_{3}]$  gdzie M oznacza metal ziem rzadkich, binolH - binaftol, a M' - metal alkaliczny. Wysoka skuteczność działania tych katalizatorów wynika z synergicznego współdziałania obu centrów metalicznych, których wzajemna kooperacja umożliwia przeprowadzenie transformacji, niemożliwych do osiągnięcia przy użyciu katalizatorów konwencjonalnych. Przykłady tego typu oddziaływań są bezpośrednio zaczerpnięte z przyrody, gdzie heterometaliczne klasterki, stanowiące centra aktywne wielu enzymów odgrywają znaczącą rolę w procesach wiązania i aktywacji substratów lub przeniesienia elektronów np. kofaktor żelazowo-molibdenowy  $\{\text{Fe}_{7}\text{MoS}_{9}\}$  - nitrogenazy,  $\{\text{Mn}_{4}\text{CaO}_{5}\}$  - fotosystemu II.

Dlatego celem tego projektu jest otrzymanie nowych układów katalitycznych do zastosowań w syntezie organicznej i procesach polimeryzacji estrów cyklicznych, opartych na heterometalicznych alkoksylanach i aryloksylanach pierwiastków grup głównych i przejściowych. Zadanie to zostanie zrealizowane poprzez syntezę odpowiednio zaprojektowanych związków kompleksowych o właściwościach katalitycznych, które będą racjonalnie kształtowane poprzez dobór odpowiednich centrów metalicznych i ligandów w zależności od potrzeb produkcyjnych. W badaniach jako ligandy wspomagające o zróżnicowanym charakterze centrów donorowych, budowie elektronowej i zawadach sterycznych stosowane będą komercyjnie dostępne funkcjonalizowane alkohole i fenole. Kluczowym etapem projektu będzie charakterystyka strukturalna i spektroskopowa zsyntezowanych związków, która umożliwi pełniejsze zrozumienie procesów samoorganizacji zachodzących w roztworze i w ciele stałym oraz pozwoli na określenie czynników determinujących tworzenie zdefiniowanych na poziomie molekularnym heterometalicznych klasterów. Wyniki tych badań pozwolą na znalezienia korelacji pomiędzy strukturą otrzymanych kompleksów a wykazywaną aktywnością katalityczną oraz posłużą do wyjaśnienia oddziaływań pomiędzy kwasowymi centrami metali a cząsteczkami przekształcanych substratów. Prace te mają również na celu określenie synergii połączeń heterometalicznych w badanych reakcjach katalitycznych.

Dalekosiężnym efektem końcowym przedstawionych badań jest otrzymanie na bazie prekursorów molekularnych układów katalitycznych, w których synergiczne współdziałanie centrów metalicznych pozwoli na zwiększenie wydajności i selektywności badanych reakcji przy jednoczesnym skróceniu czasu ich trwania i obniżeniu udziału reakcji ubocznych w odniesieniu do dotychczas stosowanych katalizatorów homometalicznych.