

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 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 i modelowanie nowych katalizatorów zbudowanych na podstawie układów związanych mechanicznie, zawierających układy karbenowe. W pracy skupimy się na użyciu takich układów w organokatalizie oraz katalizie metaloorganicznej, ze szczególnym naciskiem na zaprojektowanie efektywnych i stereoselektywnych katalizatorów metatezy olefin. Kontrola stereoselektywności w reakcjach metatezy jest bardzo ważnym celem badań, ponieważ istnieje pilna potrzeba opracowania niezawodnych dróg syntezy czystych optycznie produktów olefinowych. 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 organokatalizatorów opartych na układach związanych mechanicznie.