

Niniejszy projekt ma na celu dogłębne zbadanie ścieżki reakcji dekompozycji rutenowych katalizatorów do metatezy olefin. Planujemy zbadać możliwe szlaki reakcji zarówno powszechnie stosowanych jak i nowych katalizatorów metatezy przy pomocy metod obliczeniowych.

Reakcja metatezy olefin jest jednym z najbardziej użytecznych narzędzi we współczesnej syntezie organicznej. W tym procesie do precyzyjnego tworzenia nowych wiązań podwójnych C=C, wymagane są katalizatory bazujące na metalach przejściowych. Najbardziej popularną grupą związków o tym zastosowaniu są katalizatory Grubbsa oraz Hoveydy-Grubbsa, bazujące na rutenie. Jednak pomimo ogromnej użyteczności tej reakcji i trwałości katalizatorów okazuje się, że w trakcie tego procesu zachodzą również reakcje niepożądane, takie jak degradacja kompleksów rutenowych. Pomimo tego, że temat dekompozycji tego typu katalizatorów był niejednokrotnie podejmowany w literaturze, brak jest jednoznacznie określonych mechanizmów jego przebiegu. Z uwagi na ogromną popularność reakcji metatezy oraz powszechną dostępność katalizatorów do tej reakcji, oczywistym wydaje się rozwiązywanie problemów związanych z reakcjami ubocznymi towarzyszącymi metatezie. Badacze zauważyli, że w tej reakcji obok oczekiwanych produktów, powstają także produkty izomeryzacji olefin oraz niepożądane produkty tego procesu. Ponadto, zmniejszeniu uległa również liczba TONs (ang. *Turnover Number*, ilość cykli katalitycznych), co najprawdopodobniej związane jest z degradacją katalizatorów.

Przedstawiony projekt w całości będzie realizowany przy użyciu technik obliczeniowych-współczesnych metod funkcjonału gęstości. Zbadamy właściwości elektronowe rozważanych kompleksów oraz energię swobodną poszczególnych etapów reakcji. Korzystając ze znanych katalizatorów rutenowych i ich struktur krystalograficznych, zbudujemy badane kompleksy, a stworzone w ten sposób struktury zostaną przez nas przebadane pod kątem optymalnej geometrii, stabilności i właściwości elektronowodonorowych.

Poznanie mechanizmów dekompozycji pozwoli wyjaśnić zachodzące reakcje uboczne, jak również umożliwi poznanie słabych punktów obecnie stosowanych katalizatorów. Dzięki wynikom otrzymanym w ramach tego projektu badawczego, możliwe będzie podanie pełnej charakterystyki możliwych ścieżek degradacji katalizatorów rutenowych oraz opracowanie ogólnej metodologii, która będzie stosowana w przyszłości do projektowania nowych katalizatorów. Ponadto, uzyskane informacje pozwolą na projektowanie nowych, bardziej wydajnych katalizatorów, które będą trudniej ulegały reakcji degradacji.