

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

Hydrosililowanie, które polega na addycji organicznych lub nieorganicznych związków zawierających połączenie Si-H do wiązań wielokrotnych węgiel-węgiel (w alkenach i alkinach) lub węgiel-heteroatom (węgiel-tlen, węgiel-azot) stanowi efektywną metodę tworzenia sililowanych związków, które dalej mogą być stosowane w syntezie *fine chemicals* i zaawansowanych materiałów opartych na krzemie. Stereoselektywna synteza pożądaných produktów wymaga przeważnie użycia katalizatorów, które z jednej strony przyspieszają reakcję, a z drugiej prowadzą do utworzenia ściśle określonego izomeru. Kompleksy metali przejściowych stanowią nieustannie najczęściej stosowane katalizatory tej przemiany, a hydrosililowanie z ich udziałem przebiega przeważnie w warunkach homogenicznych. Powtórne użycie katalizatora i jego recykling, łatwe metody separacji produktów od katalizatora, jak również zrównoważony przebieg całego procesu stanowią największe wyzwania współczesnej chemii krzemoorganicznej.

Celem projektu jest zmierzenie się z tymi problemami poprzez zastosowanie nadkrytycznego CO₂ (scCO₂), jako rozpuszczalnika reakcji. Dzięki jego unikatowym właściwościom fizyko-chemicznym, może on być wykorzystany do tworzenia nowych katalitycznych układów hydrosililowania pracujących w okresowym lub przepływowym (*continuous flow*) reżimie. Połączenie scCO₂ z molekularnym katalizatorem lub nanokatalizatorem, jego metoda immobilizacji wraz z efektywną strategią rozdziału produktów jest odpowiedzialna za tworzenie selektywnych i zrównoważonych procesów hydrosililowania. Projekt skupiony będzie na zrozumieniu wszystkich skali procesu hydrosililowania w scCO₂: *molekularnej* (oddziaływania między katalizatorem, rozpuszczalnikiem i reagentami), *mezoskali* (rozwój efektywnej strategii separacji) i *makroskali* (proces jako całość, kompleksowy schemat, wraz z monitorowaniem jego postępu w rzeczywistym czasie reakcji).

Hydrosililowanie alkinów, imin i związków karbonylowych w scCO₂, z udziałem molekularnych katalizatorów lub nanocząstek immobilizowanych w filmie cieczy jonowej naniesionym na stały nośnik (SILP) będzie zagadnieniem po raz pierwszy poruszonym w niniejszym projekcie. Zrozumienie inżynierii reakcji, a następnie opracowanie procesów okresowych i przepływowych na podstawie wiedzy zdobytej z badań nad wszystkimi skalami procesu stanowi główny cel tego projektu. Zadaniem prowadzonych badań jest stworzenie nowego podejścia do procesów hydrosililowania, które mogą być prowadzone zarówno cyklicznie okresowo, jak i przepływowo (*continuous flow*). Troska o tworzenie procesów w sposób zrównoważony, efektywny, ekonomicznie uzasadniony i stabilny stanowi jedno z najważniejszych wyzwań innowacyjnych technologii.

Współpraca pomiędzy ITMC RWTH (Niemcy) oraz CAT AMU (Polska), ich uzupełniająca się wiedza, doświadczenie w tworzeniu zrównoważonych katalitycznych procesów w reżimie przepływowym oraz katalitycznej syntezie związków krzemoorganicznych ma na celu utworzenie nowego ośrodka innowacyjnych technologii krzemoorganicznych na miarę XXI wieku. Wiedza podstawowa uzyskana w projekcie umożliwi dokładne zrozumienie chemizmu całego procesu. Projekt wykracza poza aktualnie prowadzone badania nad metodami stosowanymi w hydrosililowaniu, immobilizacji katalizatorów i strategii ich recyklingu. Zastosowanie scCO₂ jako rozpuszczalnika reakcji w układach okresowych, a zwłaszcza przepływowych będzie stanowiło swoisty przełom w tworzeniu przyjaznych technologii opartych na procesie hydrosililowania.