

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

Reakcja hydroborowania, jest procesem addycji wiązania bor-wodór do wiązań wielokrotnych węgiel-węgiel, bądź węgiel-heteroatom. Proces ten ze względu na 100% ekonomię atomową, wysoką reaktywność reagentów bororganicznych, a jednocześnie ich niską toksyczność jest najczęściej stosowany w syntezie związków zawierających grupy borylowe. Te boroorganiczne produkty wykorzystywane są dalej w syntezie tzw. *fine chemicals*, materiałów o specyficznych właściwościach, materiałów preceramicznych, czy aktywnych substancji farmaceutycznych lub naturalnych produktów. Stereoselektywna synteza pożądaných produktów wymaga przeważnie użycia katalizatorów, które z jednej strony przyspieszają reakcję, prowadząc do utworzenia ściśle określonego izomeru, a jednocześnie pozwalają na prowadzenie procesu w łagodniejszych warunkach. Kompleksy metali przejściowych są najczęściej stosowanymi katalizatorami tej przemiany. Hydroborowanie z ich udziałem przebiega przeważnie w warunkach homogenicznych. Powtórne użycie katalizatora i jego recycling, łatwe metody separacji produktów od katalizatora, jak również zrównoważony przebieg całego procesu oraz poszukiwanie nowoczesnych katalizatorów opartych o metale pierwszego i drugiego szeregu oraz pierwiastków grup głównych stanowią największe wyzwania współczesnej chemii boroorganicznej.

Celem projektu jest zmierzenie się z tymi problemami poprzez zastosowanie różnych technik immobilizacji molekularnych katalizatorów metali przejściowych, a także katalizatorów opartych o pierwiastki grup głównych i naonczątek oraz wykorzystania CO₂ (scCO₂) w stanie nadkrytycznym, jako rozpuszczalnika reakcji. Dzięki unikatowym właściwościom fizyko-chemicznym scCO₂, może on być wykorzystany jako medium reakcji, do tworzenia nowych katalitycznych układów hydroborowania działających okresowo, powtórzeniowo (*repetitive batch*) lub przepływowo (*continuous flow*). Połączenie scCO₂ z metodą immobilizacji molekularnych katalizatorów czy naonczątek, wraz z efektywną strategią rozdziału produktów stanowi ważny cel tego projektu. Projekt skupiony będzie na zrozumieniu wszystkich poziomów procesu hydroborowania alkinów, olefin, związków karbonylowych i imin: poziomu reakcji (oddziaływania między katalizatorem, rozpuszczalnikiem i reagentami), poziomu separacji (rozwój efektywnych metod rozdziału produktów od katalizatora, pozwalających na jego wielokrotne wykorzystanie lub prowadzenie procesu w warunkach przepływowych) i poziomu inżynierii procesu (proces jako całość, kompleksowy schemat, wraz z monitorowaniem jego postępu oraz doбором reaktora).

Hydroborowanie nienasyconých związków zawierających wiązanie C-C i C-heteroatom w scCO₂, z udziałem molekularnych katalizatorów lub nanocząstek immobilizowanych w filmie cieczy jonowej naniesionym na stały nośnik (SILP) lub przy użyciu innych metod immobilizacji (zastosowanie cieczy jonowych, poli(glikoli etylenowych), heteropolikwasów itd.) będzie najważniejszym zagadnieniem poruszonym w niniejszym projekcie. Zrozumienie inżynierii reakcji, pozwoli opracować procesy powtórzeniowego, a przede wszystkim przepływowego hydroborowania alkinów. Troska o planowanie procesów w sposób zrównoważony, efektywny i ekonomicznie uzasadniony stanowi jedno z najważniejszych wyzwań innowacyjnych technologii.

Wiedza uzyskana w projekcie umożliwi dokładne zrozumienie chemizmu całego procesu. Projekt wykracza poza aktualnie prowadzone badania nad metodami immobilizacji katalizatorów i strategii ich recyklingu wykorzystywanymi w hydroborowaniu. Zastosowanie scCO₂ jako rozpuszczalnika reakcji w układach okresowych stanowić będzie swoisty przełom w tworzeniu przyjaznych, zrównoważonych technologii opartych o reakcje hydroborowania i doprowadzi do opracowania po raz pierwszy przepływowego hydroborowania wiązań nienasyconých węgiel-węgiel i węgiel-heteroatom. Nadrzędnym efektem projektu będzie zaprojektowanie zrównoważonych procesów, które umożliwią recycling katalizatora, jego dobrą immobilizację, eliminację z reakcji toksycznych rozpuszczalników organicznych, uproszczenie procedury rozdziału produktów oraz selektywną syntezę borylowanych produktów (także związków chiralnych) z wysokimi wydajnościami. Takie podejście ma szansę zwiększyć udział katalizy homogenicznej w procesach o znaczeniu komercyjnym.