

**Celem projektu jest opracowanie syntezy nowych silanowych środków sprzęgających (SiCA – Silane Coupling Agents) w oparciu o modyfikację cyklicznych siloksanów, silazanów, eugenolu i innych terpenów, a także pochodnych kwasu malonowego. Otrzymanie nowej klasy SiCA, poprzez zastosowanie niedrogich odczynników i prostych przemian chemicznych, takich jak reakcje substytucji na alkilowym lub acylowym atomie węgla, jak również funkcjonalizacja nienasyconych wiązań węgiel-węgiel w reakcji hydrosililowania z wykorzystaniem różnych katalizatorów opartych o metale przejściowe (Ir, Pt, Rh, Ru), to nadrzędne zadania realizowane w ramach projektu.** Tylko takie podejście syntetyczne, które charakteryzuje się prostotą i produktywnością jednocześnie, protokołami opartymi na funkcjonalizacji niedrogich reagentów, otwiera szansę na wykorzystanie tych nowych SiCA w przemyśle. Obecność różnych grup podatnych na funkcjonalizację w strukturze wyjściowych reagentów sprawia, że projekt stanowi duże wyzwanie w aspekcie syntetycznym, zwłaszcza w opracowaniu procesów z wysoką stereo-, regioselektywnością i wydajnością.

Ważnym aspektem planowanych badań będzie synteza związków sprzęgających o różnej liczbie grup funkcyjnych w swojej strukturze kompatybilnych z matrycą organiczną (polimerem) i nieorganiczną (krzemionka). Dzięki zastosowaniu nowych, zsyntetyzowanych w ramach tego projektu SiCAs pojawia się realna szansa na zmniejszenie ilości środka sprzęgającego w końcowej kompozycji kompozytowej, a także wpływania w kontrolowany sposób na gęstość sieciowania materiału oraz jego właściwości mechaniczne i fizyko-chemiczne.

Otrzymane SiCA będą wykorzystane jako modyfikatory różnych rodzajów krzemionki (koloidalnej, pirolitycznej i strąceniowej), powszechnie stosowanych jako wypełniacze w przemyśle polimerowym. Określone zostaną również właściwości silanizowanej krzemionki.

Silanowe środki sprzęgające (SiCA) są związkami krzemoorganicznymi posiadającymi zdolności łączenia materiałów o odmiennych strukturach i właściwościach. Specjalne właściwości tych związków wynikają z obecności w ich strukturze dwóch różnych grup odpowiedzialnych za interakcje z tymi materiałami. Jedną z tych funkcji jest grupa alkoksylowa, łatwo ulegająca hydrolizie i dalszej kondensacji z grupami hydroksylowymi na polarnej powierzchni materiału nieorganicznego. Drugą z nich to ugrupowanie organiczne o powinowactwie do hydrofobowego łańcucha polimerowego. Silanowe środki sprzęgające znalazły liczne zastosowania w produkcji różnego rodzaju materiałów: powłok, uszczelniaczy, czy kompozytów gumowych. Zainteresowanie tymi związkami stale rośnie, co można realnie zmierzyć liczbą opublikowanych raportów naukowych (odpowiednio 6572 publikacji i 41 155 patentów, odpowiednio Scopus i Google Patents, 09.12.2019 r.). Literatura naukowa i patentowa koncentruje się głównie na syntezie dwufunkcyjnych silanów. W ramach projektu opracowana zostanie nowa klasa silanów o zmiennej liczbie grup funkcyjnych i powinowactwie do matryc nieorganicznych i organicznych. Takie nowatorskie podejście stanowi jednak syntetyczne wyzwanie, ze względu na obecność różnych grup podatnych na funkcjonalizację w strukturze wyjściowych odczynników.

Projekt ten spełnia kryteria badań podstawowych, szczególnie tych dotyczących opracowania procesów katalitycznych (uzyskiwanie pożądaných produktów o wysokiej wydajności i selektywności) oraz aspektów chemii materiałowej.

Brak doniesień literaturowych na temat syntezy SiCA opartych na cyklicznych siloksanach, silazanach, pochodnych kwasu malonowego i terpenach stanowi istotny powód, dla których podjęcie badań w tym temacie jest w pełni uzasadnione, a opracowanie procedur syntetycznych stanowić będzie naukową nowość. Proste, wydajne i selektywne protokoły syntezy tych związków, a także ich dalsze wykorzystanie w roli środków sprzęgających, w silanowaniu krzemionki jest ważnym zagadnieniem, o czym świadczy także wartość światowego rynku SiCAs w 2018 r., wynosząca 523,1 mln USD.