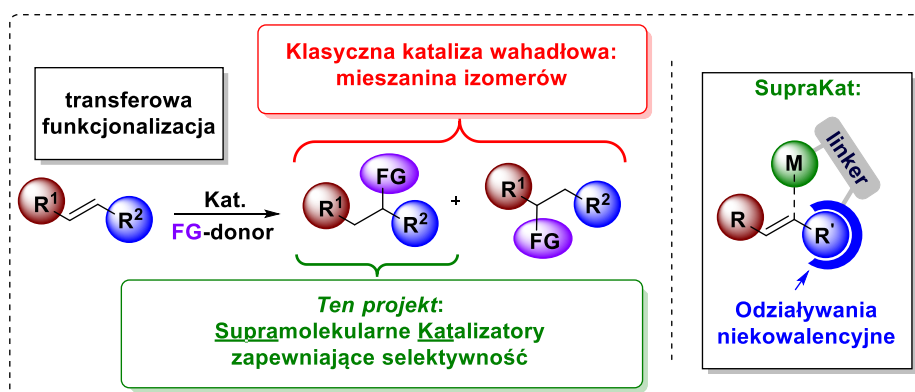


## KONTROLA REGIOSELEKTYWNOŚCI KATALITYCZNYCH REAKCJI TRANSFEROWYCH HYDROFUNKCJONALIZACJI Z WYKORZYSTANIEM ODDZIAŁYWAŃ NIEKOWALENCYJNYCH

### WPROWADZENIE

W ciągu ostatniego wieku kataliza chemiczna zrewolucjonizowała podejście do otrzymywania związków chemicznych, zarówno w laboratoryjnej syntezie organicznej, jak i w przemyśle chemicznym. Szacuje się, że z reakcjami katalitycznymi związane jest około 30% produktu światowego brutto. Kataliza jest również zaangażowana w wytwarzanie ponad 80% wszystkich związków, materiałów i produktów. Poszukiwanie nowych metodologii katalitycznych prowadzi do tworzenia nowych ścieżek reakcji, usprawniając odkrywanie i produkcję nowych farmaceutyków, agrochemikaliów, nawozów i innych materiałów.

W ostatnich latach, w katalizie wprowadzono nową, rewolucyjną koncepcję, a mianowicie katalizę wahadłową (ang. shuttle catalysis). Strategia ta umożliwi formalne przenoszenie (transfer) małych cząsteczek (np. HCN, H<sub>2</sub>/CO) między cząsteczkami chemicznymi będącymi odpowiednio donorami oraz akceptorami (Rys. 1). Warto zauważyć, że takie funkcjonalizacje można zrealizować za pomocą tanich, nietoksycznych i łatwo dostępnych cząsteczek donorów, eliminując konieczność bezpośredniego wykorzystania toksycznych i niebezpiecznych reagentów (np. HCN, H<sub>2</sub>/CO, HCl/CO) lub specjalistycznego sprzętu. Te cechy powodują, że takie podejście jest niezwykle atrakcyjne w syntezie organicznej, do funkcjonalizacji cząsteczek nienasyconych (np. alkenów i alkinów). Jednak proces jest nieselektywny, gdy w takich reakcjach stosuje się niesymetryczne substraty - tworzone są wtedy mieszaniny regioizomerów, niezależnie od rodzaju przenoszonych grup funkcyjnych (Rys. 1). To powoduje, że pożądaný produkt jest zwykle tworzony z małą wydajnością, co więcej jego izolacja jest problematyczna. Takie ograniczenie transferowych funkcjonalizacji ogranicza syntetyczną użyteczność omawianej strategii. Dlatego też niezwykle ważne jest opracowanie metodologii pozwalającej na pełną kontrolę regioselektywności omawianego podejścia.



Rysunek 1. Kontrola regioselektywności wykorzystana w tym projekcie.

Postuluje, że do rozwiązania problemu selektywności w reakcjach transferowych, niezbędne będzie precyzyjne zaprojektowanie nowej klasy katalizatorów supramolekularnych (SupraKat). SupraKat będą selektywnie promować tworzenie jednego docelowego regioizomeru poprzez wykorzystanie dodatkowych niekowalencyjnych oddziaływań do precyzyjnej preorganizacji substratu (Rys. 1). Zaproponowana strategia umożliwi precyzyjną kontrolę selektywności reakcji, które nie mogą zostać przeprowadzone selektywnie przy użyciu obecnie stosowanych metod. W konsekwencji podejście to zapewni dostęp do szerokiej gamy związków (np. nityli, aldehydów, halogenków), których tworzenie jest niezwykle pożądané zarówno w laboratoriach badawczych, jak i w produkcji przemysłowej.

### CEL PROJEKTU I PLAN BADAŃ

Szczegółowy program badawczy w kierunku realizacji celu projektu jest podzielony na trzy fazy (P), związane z: projektowaniem i syntezą nowych klas katalizatorów supramolekularnych (SupraKat) (P1), oceną aktywności i selektywności otrzymanych katalizatorów (P2), zakresem, ograniczeniami oraz syntetycznymi zastosowaniami opracowanych regioselektywnych funkcjonalizacji transferowych (P3).

Szczegółowy program badawczy w kierunku realizacji celu projektu jest podzielony na trzy fazy (P), związane z: projektowaniem i syntezą nowych klas katalizatorów supramolekularnych (SupraKat) (P1), oceną aktywności i selektywności otrzymanych katalizatorów (P2), zakresem, ograniczeniami oraz syntetycznymi zastosowaniami opracowanych regioselektywnych funkcjonalizacji transferowych (P3).

### ZNACZENIE REZULTATÓW REALIZACJI PROJEKTU

Proponowane badania mają na celu opracowanie użytecznej strategii kontroli regioselektywności w reakcjach transferowych, tym samym znacznie zwiększając ich użyteczność w syntezie organicznej oraz przemyśle chemicznym. Co więcej, strategia ta ma ogromny potencjał zastosowania w innych obszarach badań: syntezie farmaceutyków, uproszczeniu produkcji materiałów, ograniczeniu reakcji ubocznych i zanieczyszczeń, ułatwieniu dostępu do nowych materiałów z dostępnych prekursorów oraz opracowaniu przyjaznych dla środowiska, energooszczędnych procesów przemysłowych.