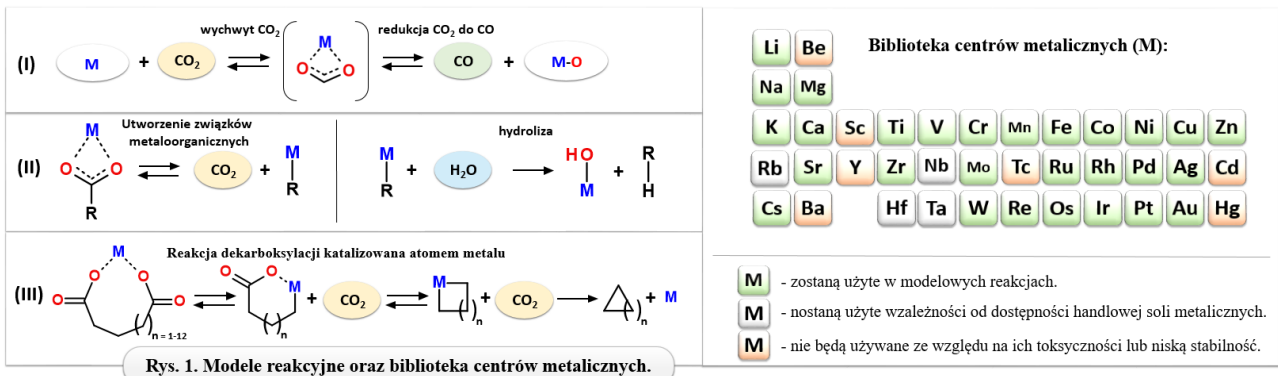


Aktywacja i transformacja cząsteczki CO₂ oraz grup karboksylanowych w obecności pojedynczych centów metalicznych. Badania mechanizmów reakcji i właściwości cząsteczkowych na polu eksperymentalnym, teoretycznym i statystycznym.

Wzrastające stężenie gazów cieplarnianych, w tym dwutlenku węgla CO₂ stanowi poważne wyzwanie dla współczesnego świata. Wzrost globalnej temperatury jest powiązany z ilością ditlenku węgla w atmosferze, a możliwość jego technicznego zagospodarowania jest aktualnie tematem żarliwej naukowej dyskusji. Najbardziej obiecującym rozwiązaniem tego problemu, nad którym wciąż pracują przedstawiciele przemysłu chemicznego we współpracy z wiodącymi ośrodkami naukowymi jest stworzenie nowych technologii pozwalających na wykorzystanie CO₂ w produkcji przemysłowej lub farmaceutycznej. Takie rozwiązanie pozwoli na wykorzystanie tej kluczowej cząsteczki jako substratu w reakcjach chemicznych, jednocześnie obniżając ich zawartość w atmosferze.

W ostatnich latach procesy chemiczne polegające na aktywacji chemicznej cząsteczek dwutlenku węgla, jego redukcji prowadzącej do powstania tlenku węgla CO, lub wykorzystanie kwasów karboksylowych (posiadających ugrupowanie karboksylanowe –CO₂⁻) w reakcjach tworzenia nowych wiązań węgiel-węgiel stały się jednymi z najbardziej istotnych tematów w obszarze chemii metaloorganicznej. Związane jest to wysokim potencjałem praktycznym tych procesów oraz łatwą dostępnością kluczowych substratów chemicznych (CO₂ oraz kwasy karboksylowe). Postęp w użyciu dwutlenku węgla jako substratu w laboratorium syntetycznym lub w przemyśle, oraz lepsze zrozumienie procesów pochodnych takich jak sztucznie programowalna fotosynteza wymaga pozyskania szczegółowej wiedzy na temat mechanizmów tych procesów oraz czynników podstawowych które nimi kierują. Jednakże dotychczasowa wiedza na temat tych procesów oparta jest o wyniki laboratoryjne dotyczące układów reakcyjnych o bardzo zróżnicowanej budowie i zastosowaniu, pomimo kilku istotnych prób przeglądu tej wiedzy i porównania ze sobą atomów metali z punktu widzenia ich zachowania i reaktywności wciąż wysoce pożądana jest przeprowadzenie systematycznego opisu zachowań pojedynczych atomów metalicznych katalizujących te procesy.

Biorąc to pod uwagę, podczas planowanych badań przeprowadzona zostanie gruntowna analiza zachowań metali ziem alkalicznych oraz metali przejściowych w trzech modelowych reakcjach: **(I)** wylapywanie oraz redukcja CO₂ do CO zachodząca na pojedynczych atomach metali, **(II)** reakcje dekarboksylacji karboksylanów metali prowadząca do powstania związków metaloorganicznych (M-R) – odwrócona reakcja typu Grignarda, oraz **(III)** reakcje tworzenia nowych wiązań C-C zachodzące w wyniku sekwencyjnych dekarboksylacji dikwasów karboksylowych katalizowanych pojedynczym atomem metalu (Rys. 1.).



Rys. 1. Modele reakcyjne oraz biblioteka centrów metalicznych.

Mając na uwadze wagę przedstawionego problemu, głównym celem prezentowanego projektu jest opisanie najważniejszych właściwości kinetycznych i termodynamicznych modelowych reakcji chemicznych. Zaproponowane eksperymenty pozwolą na zrozumienie wewnętrznej budowy atomów metali wraz z czynnikami determinującymi ich reaktywność (mechanizmy reakcji). Zaproponowane badania prowadzone będą w oparciu o nowoczesne techniki pomiarowe, m.in. specjalnie zmodyfikowane spektrometry mas, umożliwiające przeprowadzenie reakcji w fazie gazowej w warunkach ściśle kontrolowanego ciśnienia reagentów oraz precyzyjne wyznaczenie energii tych reakcji. Następnie, wszystkie zaobserwowane zjawiska eksperymentalne zostaną porównane z modelami teoretycznymi, skonstruowanymi z wykorzystaniem metod obliczeniowych chemii kwantowej. Wszystkie zebrane w ten sposób dane, zarówno teoretyczne jak i eksperymentalne zebrane zostaną w postaci baz danych, które następnie pozwolą na przeprowadzenie odpowiednich szczegółowych analiz statystycznych (Sztucznych Sieci Neuronowych) prowadzących do przedstawienia trendów i zależności opisujących jak zachowują się atomy metali w wybranych reakcjach chemicznych.