

Aktywacja azotu molekularnego z udziałem wielocentrowych kompleksów żelaza i wanadu stabilizowanych sterycznie rozbudowanymi N,N' centrami donorowymi

Azot cząsteczkowy to jedna z najpowszechniejszych substancji występujących w naszym otoczeniu. Z kolei wiązanie azotu z atmosfery i wbudowywanie go w cząsteczki wykorzystywane przez organizmy żywe jest jednym z najbardziej podstawowych procesów kluczowych dla zapewnienia zrównoważonego obiegu azotu w przyrodzie. Jednocześnie, z uwagi na wysoką stabilność cząsteczki azotu N_2 , jest to jeden z najbardziej wymagających procesów znanych chemii. W organizmach żywych proces ten jest katalizowany przez metaloenzymy zwane nitrogenazami, które w swoim centrum aktywnym zawierają złożone układy jonów metali, najczęściej żelaza i molibdenu, także znane są układy żelazowo-wanadowe i tylko żelazowe. W przemyśle azot cząsteczkowy aktywuje się w obecności wodoru z użyciem katalizatorów zawierających jony żelaza i rutenu w procesie Habera-Boscha, którego głównym produktem jest amoniak. Proces ten jest prowadzony w drastycznych warunkach ciśnienia i temperatury, co powoduje, że pożera on znaczne ilości energii i prowadzi do emisji gazów cieplarnianych. Energochłonność oraz zanieczyszczenie środowiska stanowi istotną wadę procesu Habera-Boscha. Opanowanie procesu wiązania gazowego azotu w łagodnych warunkach, analogicznie do reakcji przebiegających w naturze, zrewolucjonizowałoby syntezę wielu wysokowartościowych produktów organicznych zawierających atomy azotu jest jednym z największych wyzwań współczesnej chemii koordynacyjnej.

Celem proponowanego projektu jest dokładne zrozumienie procesów wiązania azotu cząsteczkowego przebiegające na centrach metalicznych. Realizacja tak niezwykle ambitnego zadania będzie możliwa poprzez racjonalne zaprojektowanie, syntezę i charakteryzację strukturalną szeregu nowych układów reakcyjnych zawierających wielocentrowe związki kompleksowe żelaza i wanadu, stabilizowane ligandami zawierającymi miejsca N,N-wiążące o różnorodnych właściwościach koordynacyjnych i budowie przestrzennej. Opracowane układy posłużą do badania procesu wiązania i aktywacji azotu cząsteczkowego w zależności od budowy centrów metalicznych, jak i organicznych ligandów stabilizujących. Projekt badań wykorzystuje wieloletnie doświadczenie naszego zespołu w badaniu procesów wiązania i aktywacji innych małych, powszechnie występujących cząsteczek gazowych (tlenu, dwutlenku węgla czy dwutlenku siarki), z wykorzystaniem kompleksów zarówno metali grup głównych, jak i metali przejściowych stabilizowanych szeroką gamą ligandów organicznych, Co więcej, projekt jest oparty na najnowszych przełomowych odkryciach w zakresie chemii oddziaływań azotu cząsteczkowego z wielocentrowymi kompleksami metali. O ile ligandy typu N,N oraz N,N,N były stosunkowo powszechnie wykorzystywane w badaniu tego typu procesów, to wykorzystanie sprzężonych układów ligandów N'N-donorowych w zasadzie nie było do tej pory rozpatrywane w tym kontekście. Nowatorską stroną projektu będzie również badanie struktury produktów pośrednich procesu aktywacji azotu cząsteczkowego, dzięki zastosowaniu wielometalicznych układów redoks, co w efekcie przyczyni się do poszerzenia wiedzy dotyczącej czynników determinujących kinetykę i efektywność wiązania azot. Ostatecznie, wyniki projektu pozwolą na dogłębne zrozumienie reguł rządzących procesami aktywacji N_2 z udziałem centrów metalicznych, co będzie ważnym krokiem na drodze do racjonalnego projektowania wydajnych układów katalitycznych mających zastosowanie w przemyśle.