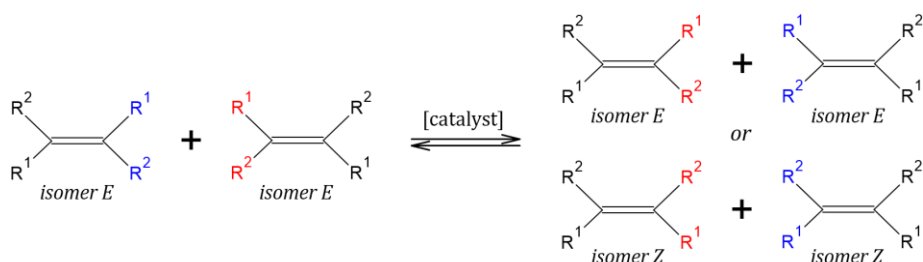


Zrównoważona Etenoliza Odnawialnych Olejów z Nasion za Pomocą Nowatorskich Katalizatorów na Bazie Rutenu

Nazwa reakcji metatezy wywodzi się od greckich słów oznaczających „zmianę pozycji”. Metatezę można postrzegać jako przegrupowanie molekularne, w którym związki chemiczne posiadające podwójne wiązania węgiel-węgiel (C=C) ulegają wymianie podstawników Rⁿ:



Ten proces ujawnia dynamiczną naturę reakcji chemicznych na poziomie molekularnym i dostarcza cennego wglądu w zawłości przemian molekularnych. Kluczową rolę odgrywają tu kompleksy rutenowe, pełniące funkcję wydajnych katalizatorów metatezy olefin. Ten proces chemiczny jest jednym z najbardziej elastycznych narzędzi w chemii organicznej, umożliwiającym naukowcom tworzenie różnorodnej gamy związków chemicznych. Co więcej, ciągłe poszukiwania nowatorskich zastosowań reakcji metatezy wciąż pobudzają ciekawość i innowacje wśród badaczy z różnych dziedzin chemii. Badania z zakresu metatezy olefin zostały uhonorowane Nagrodą Nobla dla Yves'a Chauvina (*Institut Français du Pétrole*, Francja), Roberta H. Grubbsa (*California Institute of Technology*, USA) i Richarda R. Schrocka (*Massachusetts Institute of Technology*, USA). Poza swoimi akademickimi korzeniami, metateza olefinowa jest bardzo ważną reakcją w syntezie nowych leków i materiałów polimerowych.

W ostatnich latach naukowcy coraz częściej poszukują ekologicznych metod syntezy związków chemicznych. Jednym z godnych uwagi podejść jest właśnie metateza olefin, a zwłaszcza etenoliza odnawialnych olejów z nasion, która może być traktowana jako zrównoważona droga produkcji ważnych substancji chemicznych. Technika ta wykorzystuje biomasę, taką jak oleje roślinne, oferując ekologiczną alternatywę dla ropy naftowej i źródeł petrochemicznych. Kluczem jest zaprojektowanie i synteza katalizatorów, które są ekonomiczne, wytrzymałe i nadają się do recyklingu. Są to elementy zapewniające, że te przyjazne dla środowiska procesy przechodzą drogę od ambitnych pomysłów do realnych rozwiązań.

Celem tego projektu jest zaprojektowanie i synteza nowej rodziny katalizatorów etenolizy. Wydajność tej nowej klasy katalizatorów zostanie oceniona na podstawie badań obliczeniowych opartych na metodach kwantowo-chemicznych. Cele tego projektu badawczego zostaną osiągnięte poprzez trzy zadania oparte na modelowaniu molekularnym: (1) ocena aktywacji katalizatorów opartych na kompleksach rutenu zaprojektowanych *in silico*, (2) określenie stabilności katalizatorów oraz (3) ocena wydajności katalizatorów w cyklach katalitycznych, ze szczególnym uwzględnieniem etenolizy olejów z nasion. Następnie, w ramach zadania (4), kompleksy rutenowe, które wykażą najlepsze profile reakcji, zostaną zsyntetyzowane w warunkach laboratoryjnych w celu doświadczalnej oceny ich aktywności katalitycznej. Oczekiwany rezultatem tego projektu naukowego jest stworzenie nowych kompleksów rutenowych, które będą efektywnie katalizowały reakcje etenolizy, stanowiąc zrównoważone rozwiązanie do syntezy istotnych związków chemicznych.