

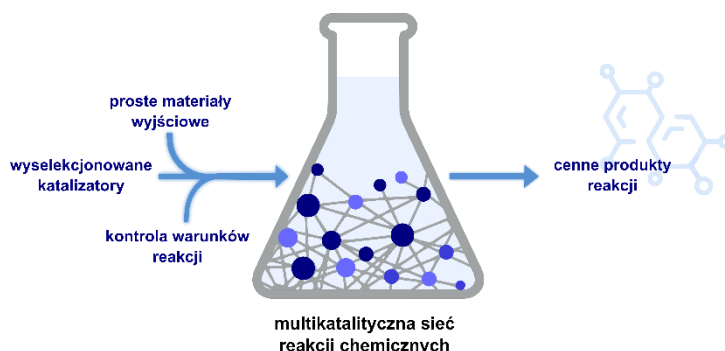
OD PROSTOTY DO ZŁOŻONOŚCI – GENEROWANIE DYNAMICZNEJ SIECI PROCESÓW MULTIKATALITYCZNYCH KONTROLOWANYCH PRZEZ KATALIZATORY Pd/Ru I WARUNKI REAKCJI

Analizując różnorodne systemy biologiczne, dostrzegamy fundamentalną rolę złożonych sieci reakcji chemicznych w organizowaniu dynamicznych interakcji oraz wieloetapowych przemian, które zapewniają efektywny transfer masy, energii i informacji. Wysoka precyzja i efektywność systemów naturalnych wynikają z ich wysoce uporządkowanych sekwencji reakcji, które pozostają nieznane przez sztuczne odpowiedniki. Mimo znacznego postępu w budowie złożonych układów syntetycznych w ostatnich latach, odwzorowanie poziomu zaawansowania obserwowanego w sieciach biologicznych wciąż stanowi istotne wyzwanie. Systemy te często nie dysponują adaptacyjnymi i dynamicznymi mechanizmami kontrolnymi, które wyróżniają naturalne kaskady enzymatyczne. Rozwój nowych metodologii umożliwiających integrację wielu zdarzeń katalitycznych w ramach połączonych sieci reakcji może stanowić kluczowy krok w kierunku wypełnienia tej luki.

Głównym celem tego projektu jest opracowanie strategii pozwalających na kontrolowanie i zarządzanie złożonością systemów syntetycznych bazujących na prostych komponentach molekularnych. Poprzez tworzenie dynamicznych i wysoce elastycznych sieci reakcji chemicznych, podejście to pozwoli na selektywne generowanie pożądaných produktów. Mimo ich skomplikowanej struktury, zostaną one przedstawione jako cenne narzędzia we współczesnej syntezie organicznej i katalizie.

W ramach projektu zostanie zaprezentowane innowacyjne podejście do tworzenia sieci wieloetapowych procesów, wykorzystujących serię prostych materiałów wyjściowych, takich jak alkohole i halogenki arylowe. Ich przebieg będzie sterowany za pomocą wyselekcjonowanych katalizatorów [Ru] i [Pd] oraz prostych czynników fizycznych i chemicznych. W miarę rozwoju kolejnych ścieżek, szczegółowa analiza topologii sieci umożliwi identyfikację kluczowych węzłów w sztucznym systemie, funkcjonującym jako zintegrowana sieć odrębnych reakcji. Kontrola aktywności katalitycznej, wzmacniając wybrane sekwencje reakcji przy jednoczesnym hamowaniu innych, będzie ukierunkowywać przebieg określonych szlaków syntetycznych (Rys. 1). W efekcie umożliwi to preferencyjną syntezę serii zróżnicowanych produktów, a także ułatwi ich wzajemne przekształcanie.

Projekt ma na celu połączenie chemii systemów z aspektami chemii organicznej i nowoczesnej katalizy, aby zwiększyć wydajność reakcji oraz umożliwić zrównoważoną syntezę wartościowych chemikaliów i wysokiej jakości materiałów. Poprzez opracowanie sztucznych sieci inspirowanych systemami metabolicznymi, projekt dąży do rozwiązania problemów chemii syntetycznej, które trudno rozwiązać tradycyjnymi metodami. Te syntetyczne analogi zapewniają efektywne i elastyczne podejście, pozwalając na zwiększenie wydajności reakcji, redukcję zużycia reagentów oraz minimalizację zasobów, energii i generowanych odpadów. Ta strategia ma potencjał zrewolucjonizować syntezę zarówno prostych związków, jak i zaawansowanych materiałów, zapewniając stosunkowo proste i opłacalne rozwiązania. Może także zainspirować badaczy, otwierając nowe możliwości rozwoju innowacyjnych podejść syntetycznych do różnych klas związków organicznych.



Rysunek 1. Schematyczna reprezentacja idei projektu – generowanie złożonej sieci reakcji chemicznych przy użyciu prostych materiałów wyjściowych i wyselekcjonowanych katalizatorów, pod ścisłą kontrolą warunków reakcji, prowadząca do szeregu różnorodnych produktów.