Projekt 3.13 Badanie reakcji tlenu molekularnego ze związkami metaloorganicznych zawierających centra metaliczne nieaktywne w procesach redoks

Promotor: prof. dr hab. inż. Janusz Lewiński / dr hab. Adam Kubas
Instytut: Chemii Fizycznej PAN
Zespół: Zespół 9. Kompleksy koordynacyjne i materiały funkcjonalne - prof. dr hab. inż. Janusz Lewiński
www: http://lewin.ch.pw.edu.pl/

Opis:

Kontrolowana aktywacja tlenu molekularnego jest nieustannym wyzwaniem dla chemików. Wykorzystanie tej jednej z najpowszechniejszych cząsteczek wymaga zazwyczaj jej wstępnej aktywacji na centrum metalicznym. W naturze jest to realizowane przez metaloenzymy zawierające metale przejściowe o właściwościach utleniająco–redukcyjnych (redoks), które wykorzystują różnorodne ścieżki aktywacji O2 unikając niepożądanych reakcji rodnikowych. Stąd przez dekady badania mechanistyczne były zdominowane przez reakcje O2 z kompleksami metali przejściowych. Natomiast ścieżki aktywacji O2 z udziałem metali grup głównych wciąż są mało poznane. Na przykład, reakcje O2 ze związkami metaloorganicznymi zawierające centra metali nieaktywne redoks są przedmiotem badan od ponad 160 lat, ale wciąż pozostają duże niejasności odnośnie mechanizmu aktywacji cząsteczek O2 jak i dalszych transformacji tworzących się reaktywnych form tlenu. Nasza grupa badawcza systematycznie dostarcza nowego spojrzenia w tym obszarze badań na poziomie rozważań mechanistycznych i potencjalnych aplikacji.

Cel projektu:

Celem planowanych badań jest pełniejsze poznanie mechanizmu aktywacji O2 przez związki metaloorganiczne zawierające metale nieaktywne w procesach redoks (M = Mg, Zn Al, Ga, In,) jak i kontrolowanie transformacji powstających ugrupowań MOOR. Zrozumienie tych procesów jest kluczowe przy opracowywaniu nowych, efektywnych reakcji stechiometrycznych oraz katalitycznych. Proponowany projekt obejmuje: i) projektowanie, syntezę i charakterystykę nowych modelowych kompleksów metaloorganicznych o odpowiedniej budowie sfery koordynacyjnej wokół centrum metalicznego, ii) badanie reaktywności otrzymanych związków modelowych wobec O2, iii) badanie procesu transformacji kompleksów alkilonadtlenkowych metali, iv) badanie procesu utleniania związków metaloorganicznych i transformacji układów nadtlenkowych z wykorzystaniem obliczeń teoretycznych.

Wymagania:

- dyplom magistra w dziedzinie chemii, fizyki lub nauk pokrewnych;
- płynna znajomość jeżyka angielskiego w mowie i w piśmie;
- podstawowe doświadczenie w syntezie nieorganicznej i charakterystyce materiałów nieorganiczno-organicznych (np. NMR, PXRD, IR, MS, UV-Vis);
- znajomość podstawowych technik obliczeniowych i symulacyjnych.