

Nacisk na Postęp: Odpowiedzialne dla Środowiska Syntezy w Wysokim Ciśnieniu

Projekt zakłada opracowanie nowatorskiej metody syntezy chemicznej, w której wysokie ciśnienie zastąpi tradycyjne katalizatory, umożliwiając przeprowadzanie trudnych lub potencjalnie niebezpiecznych reakcji w sposób bardziej zrównoważony i przyjazny dla środowiska. Obecnie stosowane katalizatory, choć odgrywają kluczową rolę w przemyśle chemicznym, generują liczne problemy, w tym wysokie koszty, toksyczność oraz trudności z ich usuwaniem z produktów końcowych. Zastosowanie ciśnienia jako „katalizatora fizycznego” może wyeliminować te ograniczenia, jednocześnie otwierając nowe możliwości w syntezie materiałów i związków o unikalnych właściwościach, których nie da się uzyskać w standardowych warunkach.

Badania skoncentrują się na dwóch istotnych reakcjach: estryfikacji i aminowaniu Buchwalda-Hartwiga. Estryfikacja, czyli proces, w którym kwasy karboksylowe reagują z alkoholami, prowadząc do powstania estrów, znajduje szerokie zastosowanie w przemyśle farmaceutycznym, kosmetycznym, spożywczym oraz polimerowym. Tradycyjne metody jej przeprowadzania wymagają silnych katalizatorów kwasowych, takich jak kwas siarkowy, które są korozyjne i generują odpady trudne do utylizacji. W ramach projektu zbadany zostanie potencjał wysokiego ciśnienia do inicjowania tej reakcji bez użycia katalizatorów chemicznych. Eksperymenty obejmą różne substraty, w tym kwasy aromatyczne (np. kwas benzoesowy) i alifatyczne (np. kwas masłowy), a także alkohole, takie jak metanol, etanol czy propanol. Szczególna uwaga zostanie poświęcona wpływowi grup funkcyjnych na efektywność i selektywność reakcji, analizując ich właściwości elektronowe i steryczne. Drugą reakcją, która zostanie poddana badaniom, jest aminowanie Buchwalda-Hartwiga, proces umożliwiający tworzenie wiązań węgiel-azot – kluczowych dla syntezy związków biologicznie aktywnych, takich jak leki przeciwwirusowe czy przeciwnowotworowe. Standardowo reakcja ta wymaga zastosowania kosztownych katalizatorów palladowych oraz specjalistycznych ligandów. W ramach projektu zostanie przeanalizowana możliwość przeprowadzania aminowania przy użyciu wysokiego ciśnienia jako alternatywy dla katalizatorów chemicznych. Badania obejmą analizę reaktywności różnych halogenków arylowych i amin, takich jak 4-nitrojobenzen czy difenylamina, w celu określenia wpływu właściwości elektronowych i sterycznych na przebieg i selektywność procesu. Eksperymenty zostaną przeprowadzone w dwóch skalach. Na początkowym etapie mechanizmy reakcji będą badane w małych komorach z kowadełkami diamentowymi, co pozwoli na precyzyjne śledzenie procesów chemicznych w czasie rzeczywistym przy użyciu zaawansowanych technik, takich jak spektroskopia FTIR czy dyfrakcja rentgenowska. Następnie wyniki tych badań zostaną zweryfikowane i przeskalowane w reaktorze wysokociśnieniowym o pojemności 10 ml. Reaktor, zaprojektowany specjalnie na potrzeby projektu, zostanie wyposażony w system mieszania zapewniający równomierny transfer ciepła i masy w warunkach ekstremalnych.

Dotychczasowe badania wykazały wysoką skuteczność tej technologii – kwas benzoesowy udało się przekształcić w estry metylowe, etylowe i propylowe w zaledwie trzy godziny, przy ciśnieniu 3,5 kbar i temperaturze 400 K, bez zastosowania katalizatorów. Kolejne eksperymenty będą ukierunkowane na optymalizację warunków reakcji, aby poprawić selektywność i wydajność procesów. Rezultaty tego projektu mają szansę znacząco wpłynąć na rozwój zrównoważonej chemii. Oczekuje się, że badania przyczynią się do zmniejszenia zużycia energii, ograniczenia ilości odpadów oraz wyeliminowania konieczności stosowania toksycznych substancji. Chemia wysokociśnieniowa oferuje perspektywę dla bardziej ekologicznej produkcji farmaceutyków, zaawansowanych materiałów i polimerów, wspierając jednocześnie globalne cele zrównoważonego rozwoju. Uzyskane w projekcie wyniki mogą także poszerzyć wiedzę na temat mechanizmów reakcji chemicznych w ekstremalnych warunkach, otwierając nowe możliwości w takich dziedzinach jak nauki środowiskowe, magazynowanie energii czy rozwój innowacyjnych technologii materiałowych.