

Tytuł polski: „Badania nad kooperacją jonów metali w dwuatomowych centrach złożonych z jonów metali przejściowych” BIMET

Tytuł angielski: “Exploring metal ion cooperativity in binuclear transition metal sites” BIMET

Kierownik Projektu: dr hab. Dorota Rutkowska – Żbik

Numer projektu: 2020/39/I/ST4/02559

Enzymy są naturalnymi katalizatorami stworzonymi do przeprowadzania ważnych procesów chemicznych w organizmach. Zazwyczaj zawierają one pojedyncze centra metaliczne, ale znane są również takie, w których znajdują się dwa jony metali położone blisko siebie. Enzymy posiadające dwujądrowe miejsca aktywne są odpowiedzialne za różnorodne procesy chemiczne, takie jak m.in. utlenianie metanu. Przykładem jest np. monooksygenaza metanowa, która w postaci cząstek zawiera dwa jony miedzi w centrum aktywnym lub w przypadku rozpuszczalnej monooksygenazy metanowej zawierającej dwa jony żelaza w centrum aktywnym. W obecnym projekcie chcemy zbadać reaktywność dwujądrowych centrów bimetalicznych wprowadzonych do matryc zeolitowych jako nieorganicznych analogów miejsc aktywnych występujących w enzymach. Zeolity są glinokrzemianami, które dają możliwość kontrolowanego wprowadzania kationów metali w swoją strukturę. Niniejszy projekt opiera się na ostatnich osiągnięciach w syntezie metalozeolitów z wprowadzonymi centrami złożonymi z dwóch centrów metalicznych położonych blisko siebie opracowanej w Instytucie Chemii Fizycznej im. J. Heyrovskiego w Pradze. Grupa badaczy z Instytutu Chemii Fizycznej im. J. Heyrovskiego wykazała możliwość wbudowania różnych kationów metali w strukturę zeolitu w taki sposób, aby tworzyły one pary. Układy te są zdolne do aktywacji O₂ i N₂O poprzez ich rozszczepienie. Skutkuje to tworzeniem wysoce aktywnych form tlenu (tzw. α -tlen). Jednak reaktywność tych systemów jest zbadana w bardzo niewielkim stopniu: do tej pory opisano tylko utlenianie metanu przez aktywny α -tlen utworzony na dwujądrowych centrach bimetalicznych w zeolitach. W obecnym projekcie, poprzez połączenie badań doświadczalnych i obliczeń teoretycznych, planujemy zbadać mechanizm aktywacji O₂ i N₂O przez miejsca aktywne tego typu, a także wykorzystać ich jako układy naśladujące enzymy w reakcjach selektywnego utleniania lekkich węglowodorów.