

Identificación del proyecto

Nombre del proyecto

Catalizadores 'a medida' para procesos quirales y de generación de energía limpia.

Expediente numero

CTQ2016-74878-P

Descripción del proyecto

Los procesos químicos catalizados permiten aumentar la producción, reducir el número de etapas del proceso, trabajar en condiciones energéticas más favorables, y generar menos subproductos que los no catalizados. Mejorar la estabilidad y selectividad del catalizador de los procesos ya catalizados y desarrollar catalizadores para procesos en los que todavía no están disponibles es una necesidad estratégica para alcanzar la producción industrial sostenible y la generación de energía limpia. En este marco, el presente proyecto se centra en crear procesos catalíticos de alta eficacia (elevadas selectividades y actividades, mínimo consumo de energía y mínima generación de residuos) para producir productos enantioméricamente puros de alto valor añadido (p.ej. fármacos), y procesos de producción de energía limpia. El objetivo es avanzar en el diseño, síntesis y cribado de catalizadores (moleculares, nano- y biocatalizadores) muy activos y selectivos para reacciones asimétricas de interés industrial y para la oxidación del agua, clave para la producción sostenible de energía limpia. Concretamente se trabajará en procesos aún no optimizados como la hidrogenación de olefinas mínimamente funcionalizadas y arenos, la transferencia de hidrógeno de cetonas e iminas alquílicas, la hidroboración de sustratos 1,1'-disustituídos, la sustitución alílica de nuevos sustratos y nucleófilos (no)estabilizados, la sustitución propargílica, la hidroformilación de sustratos 1,1'-disustituídos, la adición conjugada de nuevos compuestos organometálicos a nuevos sustratos α,β -insaturados, y en procesos de valorización del CO₂. Se insistirá en procesos átomo-económicos en los cuales moléculas pequeñas (H₂, CO, CO₂...) se incorporan a los productos finales y nuevas reacciones tándem que reducen el número de pasos de reacción. Se sustituirán progresivamente los disolventes orgánicos tóxicos por otros de bajo impacto ambiental y se aplicarán técnicas de recuperación del catalizador.

Estos objetivos se alcanzarán mediante las siguientes estrategias: a) la aplicación de técnicas combinatorias para acelerar la búsqueda de catalizadores por exploración sistemática de librerías de catalizadores; b) la síntesis de nuevos catalizadores híbridos metalenzima que combinan la elevada selectividad de las enzimas y los catalizadores de metales de transición y c) el estudio de los intermedios y mecanismo de reacción que junto con el análisis de los resultados catalíticos, permitirá desarrollar nuevos catalizadores más efectivos. Se usarán técnicas de RMN e IR en condiciones catalíticas, así como estudios de modelización teórica (DFT). Todas estas estrategias permitirán avanzar considerablemente en la obtención sostenible de catalizadores "a medida" para cada reacción en estudio y sustrato, para la preparación de productos de interés en síntesis y para la reacción de oxidación del agua. Las nuevas ligandotecas se diseñarán para obtener ligandos sólidos, estables, que pueden ser manipulados y almacenados al aire. Para ello se usarán péptidos, aminoalcoholes y azúcares ya que su química bien establecida y su elevada disponibilidad permiten la introducción de la diversidad deseada a un precio razonable.

Financiación

Entidad financiadora

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN), Agencia Estatal de Investigación (AEI) y Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER)

Importe

90.750,00 €



Unión Europea

Fondo Europeo de Desarrollo regional
"Una manera de hacer Europa"

Este proyecto está cofinanciado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER). "Una manera de hacer Europa"