

Identificación del proyecto

Nombre del proyecto

Catalizadores moleculares y biocatalizadores híbridos "a medida" para la formación de enlaces C-X asimétricos y oxidación del agua (TAILORCAT)

Expediente numero

PID2019-104904GB-I00



Descripción del proyecto

Este proyecto se centra en procesos químicos catalizados. En particular, la mejora de la estabilidad y selectividad del catalizador para los procesos existentes y el desarrollo de catalizadores para nuevos procesos. Los catalizadores mejorados son estratégicos para la economía circular, la producción industrial sostenible y la generación de energía limpia. En este contexto, el proyecto se centra en obtener procesos catalíticos de alta eficacia (con alta selectividad y actividad, bajo consumo de energía y baja generación de residuos) para obtener compuestos quirales de alto valor añadido (p. ej., fármacos) y procesos que den lugar a la producción sostenible de energía limpia (oxidación del agua). El objetivo es avanzar en el diseño, síntesis y cribado de catalizadores (moleculares y biocatalizadores híbridos) muy activos y selectivos para reacciones asimétricas de interés industrial y para la oxidación del agua. Concretamente se trabajará en procesos aún no optimizados como la hidrogenación de olefinas no funcionalizadas, la isomerización de alcoholes alílicos, las sustituciones alílicas y propargílicas, la hidroformilación de sustratos 1,1'-di y trisustituidos y procesos de valorización de CO₂. Se incidirá en nuevas reacciones tándem que reducen el número de pasos de reacción. El impacto ambiental de los procesos se minimizará por sustitución de los disolventes orgánicos tóxicos por otros de bajo impacto ambiental y por inmovilización del catalizador molecular en soportes mesoporosos que permitan el uso posterior de metodologías de flujo continuo. Otra importante línea de investigación se centrará en mejorar los catalizadores homogéneos capaces de oxidar agua en condiciones de pH neutro y desarrollar ánodos biohíbridos con el potencial de integrarse en micro- y nanocélulas de combustibles capaces de generar energía in vivo a partir del agua y/o NADH. Estos objetivos se alcanzarán mediante las siguientes estrategias: a) la aplicación de técnicas combinatorias para acelerar el descubrimiento de catalizadores por evaluación sistemática de ligandotecas; b) la síntesis de nuevos catalizadores híbridos metal-enzima que combinan la alta selectividad de las enzimas y catalizadores de metales de transición al tiempo que aumentan la biocompatibilidad de estos últimos; y c) el estudio de los intermedios y mecanismos de reacción que, junto con el análisis de los resultados catalíticos, permitirá desarrollar nuevos catalizadores más efectivos. Utilizaremos técnicas de RMN e IR en condiciones catalíticas, así como estudios de modelización teórica (DFT). Todas estas estrategias permitirán avanzar considerablemente en la producción sostenible de catalizadores a medida para cada reacción y sustrato, para la preparación de productos quirales de elevado interés y para la oxidación del agua. Los resultados de este proyecto están alineados con las estrategias de Horizonte 2020 en "cambio climático y uso de recursos naturales y materias primas", "energía segura, limpia y eficiente", e indirectamente relacionados con la estrategia de "salud, cambio demográfico y bienestar" por las perspectivas que ofrece el desarrollo de ánodos biohíbridos.

Financiación

Entidad financiadora

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) y Agencia Estatal de Investigación (AEI)/10.13039/501100011033

Importe

114.950,00 €