

Funcat – muokattuja katalyyttejä biomassapohjaisille raaka-aineille



Tulevaisuuden biotalous vaatii ennakkoluulottomia uusia tapoja muuntaa biomassapohjaisia korkeasti funktionalisoituja molekyyliä jalostusarvoltaan paremmiksi rakennuspalikoiksi erilaisten materiaalien sekä kemianteollisuuden tarpeisiin. Näitä ratkaisuja tarvitaan nopeasti ja saavutetaan ainoastaan kehittämällä uusia katalyyttisiä menetelmiä. Ratkaisuihin tarvitaan katalyyttimateriaaleja, joita ei vielä ole olemassa.

Tämän poikkitieteellisen hankkeen tavoitteena on kehittää uudenlaisia heterogeenisiä siirtymämetallikatalyyttejä, jotka mahdollistavat biomassapohjaisten raaka-aineiden jalostuksen. Tavoitteemme on erityisesti kehittää katalyyttejä valikoivaan pelkistykseen, sillä useat biomassapohjaiset raaka-aineet ovat korkeasti hapettuneita. Valikoivalla pelkistyksellä niitä voidaan muuntaa hyödyllisemmiksi rakennuspalikoiksi jatkojalostusta varten.

Funcat-hanke keskittyy ligandimuokattujen metallikatalyyttien kehittämiseen ja suunnitteluun. Ligandit ovat molekyyliä, jotka tarttuvat muutaman nanometrin kokoisen metallikatalyyttipartikkelin pinnalle ja muokkaavat katalyytin tehokkuutta. Toisin sanoen, ligandimolekyylit toimivat apukatalyyttinä metallikatalyytin rinnalla. Laskennallisessa ja kokeellisessa tutkimuksessa keskitytään ligandimolekyylin ja metallin välisten vuorovaikutusten ymmärtämiseen, sekä niiden vaikutukseen tutkittavien pelkistysreaktioiden tehokkuuteen ja valikoituvuuteen.

Hanke yhdistää tutkimusryhmien erityisosaamista: professori Honkalan ryhmässä tehdään kvanttimekaaniseen tiheysfunktionaaliteoriaan perustuvaa laskentaa ja kehitetään uusille katalyyteille malleja ennustaa rakenteen ja reaktiivisuuden välistä yhteyttä. Professori Pihkon ryhmä keskittyy synteettiseen kemiaan ja syntetisoiduilla ligandimolekyyleillä muokattujen katalyyttien karakterisointiin sekä reaktiivisuustutkimuksiin. Atomitason ilmiöiden ymmärryksellä tavoitellaan tietoa ligandien vaikutuksesta tutkittavien reaktioiden aktiivisuuteen ja valikoituvuuteen, minkä pohjalta saadaan valmiiksi pureksittuja avainsäätöjä ligandimuokattujen katalyyttien nopeaan räätälöintiin.

Lisätietoa hankkeesta:

- [karoliina.honkala\(at\)jyu.fi](mailto:karoliina.honkala(at)jyu.fi)
- [petri.pihko\(at\)jyu.fi](mailto:petri.pihko(at)jyu.fi)