

## Räätälöidyt heterogeeniset katalyytit: funktionalisoitujen katalyyttien suunnittelu ja käyttö biomassapohjaisten raaka-aineiden jatkojalostuksessa (FunCat)



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

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 jopa 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 molempien tutkimusryhmien erityisosaamista: Prof. Honkalan ryhmässä tehdään kvanttimekaaniseen tiheysfunktionaaliteoriaan perustuvaa laskentaa ja kehitetään uusille katalyyteille malleja ennustaa rakenteen ja reaktiivisuuden välistä yhteyttä. Prof. 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.

Kokeellinen tutkimus keskittyy nyt lupaavimpien substraattien löytämiseen katalyyttisissä reaktioissa ja tunnistamaan selektiivisyyteen vaikuttavia tekijöitä. Laskennallisessa tutkimuksessa puolestaan tarkastellaan ligandimolekyylien väliseen vuorovaikutukseen ja sitoutumiseen Pt katalyyttiin sekä ligandin rooliin yksinkertaisen hapon pelkistymisessä.

**Lisätietoa hankkeesta:**

- Karoliina Honkala, Jyväskylän yliopisto, karoliina.honkala@jyu.fi
- Petri Pihko, Jyväskylän yliopisto, petri.pihko@jyu.fi.