

A Kémia Doktori Iskola "Kismolekulák aktiválása" című szigorlati melléktárgyának tematikája

Kis molekulák (H_2 , HCN, $HSiR_3$, CO, CO_2 , O_2) aktiválásának általános kérdései. Oxidatív addíció, redukzív elimináció. Gyökös folyamatok szerepe fémkomplexek által katalizált reakciókban.

A H_2 molekula elektronszerkezete. A homolitikus és heterolitikus hidrogén hasítás energetikája gáz- és oldatfázisban. A vizes közeg hatása a H_2 -hasítás módjára.

Dihidrogénkomplexek és szerepük a H_2 aktiválásában. Molekuláris hidrogén reakciója *transz-* $[IrCl(CO)(PPh_3)_2]$, $[RhCl(PPh_3)_3]$ és $[RuCl_2(PPh_3)_3]$ komplexekkel. $[Co(CN)_5]^{3-}$ reakciója dihidrogénnel.

A CO molekula elektronszerkezete. Átmenetifémek karbonil-komplexei. Karbonilezési reakciók mechanizmusa.

Az O_2 molekula elektronszerkezete. Átmenetifém-dioxidkomplexek. A homogén katalitikus oxidációk lehetséges mechanizmusai.

Az N_2 molekula elektronszerkezete. Átmenetifém-dinitrogénkomplexek és szerepük az N_2 homogén katalitikus aktiválásában.

A CO_2 molekula elektronszerkezete. CO_2 ligandumot tartalmazó átmenetifém komplexek. CO_2 homogén katalitikus aktiválásával lejátszódó reakciók.

A HCN molekula elektronszerkezete. HCN homogén katalitikus aktiválásával lejátszódó reakciók.

Ajánlott irodalom:

- Faigl F., Kollár L., Kotschy A., Szepes L.: *Szerves fémvegyületek kémiája*, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001.
- A. Yamamoto: *Organotransition Metal Chemistry. Fundamental Concepts and Applications*, Wiley-Interscience, New York, USA, 1986.
- R. H. Crabtree: *The Organometallic Chemistry of the Transition Metals*, Wiley-Interscience, New York, USA, 1988.
- P. W. N. M. van Leeuwen: *Homogeneous Catalysis. Understanding the Art*, Kluwer, Dordrecht, The Netherlands, 2004.
- L. I. Simándi: *Catalytic Activation of Dioxygen by Metal Complexes (Catalysis by Metal Complexes, Vol. 13)*, Kluwer, Dordrecht, The Netherlands, 1992.
- A Reakciókinetika/katalízis c. tárgy anyaga (elérhető a DE Fizikai Kémiai Tanszék honlapján, <http://fizkem.unideb.hu>).