

A tantárgy neve:	magyarul:	KOMPLEXKATALIZÁLT SZERVES SZINTÉZISEK	Kódja:	TTKME0420
	angolul:	METAL COMPLEX CATALYZED ORGANIC SYNTHESSES		

A képzés 4. féléve (2. tavaszi félév)

Felelős oktatási egység:		DE TTK, Fizikai Kémiai Tanszék								
Kötelező előtanulmány neve:			Kódja:							
Típus	Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve	
	Előadás		Gyakorlat		Labor					
Nappali	x	Heti	2	Heti	0	Heti	0	kollokvium	3	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		Dr. Joó Ferenc			beosztása:	egyetemi tanár		

A kurzus célja:

A kurzus célja, hogy bemutassa az átmenetifém komplexek katalitikus alkalmazásait szerves szintézisekben, ismertesse a katalizált reakciók lehetséges mechanizmusát és értelmezze a fémkomplexek katalitikus hatásának molekuláris szintű alapjait.

Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató

Tudás:

Ismeri a kis molekulák (H_2 , HCN, $HSiR_3$, CO, CO_2 , O_2) aktiválásának általános kérdéseit és vizsgálati módszereit. Ismereteket szerez a homogén-katalitikus szerves szintézisek gyakorlati megvalósításáról, a katalizátor visszanyerésének módjairól. Tudásra tesz szert a regio-, sztereo- és enantioszelektív katalitikus reakciók fogalmáról, jellegzetes lépéseiről, mechanizmusairól. Áttekintése lesz néhány iparban is alkalmazott katalitikus eljárás részleteiről. Behatóbban ismerkedik meg néhány, biológiailag aktív vegyület komplexkatalitikus szintézisével, valamint a környezetbarát katalitikus reakciók szükségességével.

Képesség:

Érti az átmenetifém komplexek által katalizált szerves szintézisek jellegzetességeit, és képes ezen tudás gyakorlati alkalmazására.

Képes rendszer szinten átlátni, értelmezni a komplexkatalizált preparatív igényű átalakítások problémáit, és érdemben tud részt venni az ezekről szóló szakmai konzultációkban.

Képes a homogén katalízis szerves kémiai alkalmazásaival kapcsolatos ismereteinek kibővítésére/továbbfejlesztésére

Attitűd:

Törekedik az átmenetifém komplexek által katalizált szerves szintézisek típusainak, jellegzetességeinek minél teljesebb megismerésére.

Nyitott arra, hogy a témakörben új, tudományosan bizonyított ismereteket szerezzen, de elutasítsa a megalapozatlan, esetleg megtévesztő állításokat.

Érzékeny a környezeti problémákra, és elkötelezett a környezetbarát szintetikus módszerek kidolgozására

Autonómia és felelősség:

Szakmai irányítás mellett képes a kurzusban szereplő reakciótípusok reális értékelésére, előnyinek, hátrányainak felismerésére.

Felelősséggel vizsgálja a környezetet terhelő szerves kémiai folyamatok kockázatait, és ezek elkerülésének érdekében megfontolja az átmenetifém komplexek által katalizált szerves szintézisek alkalmazásának lehetőségeit.

A kurzus tartalma, témakörei

- Kis molekulák (H_2 , HCN, $HSiR_3$, CO, CO_2 , O_2) aktiválásának általános kérdései. Oxidatív addíció, redukzív elimináció. A 18-elektron szabály. Gyökös folyamatok szerepe fémkomplexek által katalizált reakciókban.
- A homogénkatalitikus szerves szintézisek gyakorlati megvalósítása. A katalizátor visszanyerése. Rögzített komplex katalizátorok, kétfázisú reakciók, fázisátviteli katalízissel kombinált komplexkatalitikus szintézisek.
- Regio-, sztereo- és enantioszelektív katalízis. Olefinek hidrogénezése, hidrocianálása, hidroszililezése. Telomerizációs reakciók. Ketonok, nitrogyeületek, iminek hidrogénezése és hidroszililezése. Reduktív aminálás. Dehidrogénezés. C-X kötések (X : oxigén, halogén) hidrogenolízise. Hidroformilezés, karbonilezés és dekarbonilezés. Oxidáció.
- Válogatott komplexkatalitikus szintézisek biológiailag aktív vegyületek, köztük heterociklusos származékok (kinolinok, béta-laktámok, laktonok) előállítására.

Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek

- Előadás, konzultáció.

Értékelés

Írásbeli vizsga tételsor alapján

Sikertelen teljesítés esetén a javítás módja, határideje: A kollokvium sikertelensége esetén javítás, utóvizsga keretében történhet, a TVSZ-ben meghatározottak szerint.

Kötelező olvasmány:

1. Faigl F., Kollár L., Kotschy A., Szepes L.: Szerves fémvegyületek kémiája, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001.
2. P.W.N.M. van Leeuwen: *Homogeneous Catalysis. Understandig the Art*, Kluwer, Dordrecht, 2004.

Heti bontott tematika

1. hét	<p>A katalízis fogalma, jellemzői. Katalízis mint a zöld kémia megvalósításának hatékony eszköze. Kis molekulák (H_2, HCN, $HSiR_3$, CO, CO_2, O_2) aktiválásának általános kérdései, a molekulaszervezet és reaktivitás kapcsolata.</p> <hr/> <p>TE: A homogénkatalitikus eljárások elhelyezése a szerves szintézisek témakörében, lehetséges zöld kémiai hatásuk felmérése. Követelmények a katalizátor felépítésére a katalizált folyamat reaktánsainak szerkezete alapján.</p>
2. hét	<p>Homogénkatalitikus reakciók jellegzetes lépései és mechanizmusa. Oxidatív addíció, redukzív elimináció. A 18-elektron szabály. Gyökös folyamatok szerepe fémkomplexek által katalizált reakciókban.</p> <hr/> <p>TE: Ismeretek a felsorolt témakörökben.</p>
3. hét	<p>A homogénkatalitikus szerves szintézisek gyakorlati megvalósítása. A katalizátor visszanyerése. Rögzített komplex katalizátorok – a szilárd fázisú rögzítés módjai.</p> <hr/> <p>TE: Ismeretek a felsorolt témakörökben.</p>
4. hét	<p>Két fázisú reakciók, fázisátviteli katalízissel kombinált komplexkatalitikus szintézisek. Alternatív oldószerek és sajátosságok, hatásuk a bennük végbemenő reakciók lefolyására.</p> <hr/> <p>TE: Ismeretek a felsorolt témakörökben, kiemelten a modern, új típusú oldószerek lehetséges alkalmazásában.</p>
5. hét	<p>A katalitikus folyamatok szelektivitása. A szelektivitás értelmezése. Enantioszelektív reakciók. Kinetikus rezolválás.</p> <hr/> <p>TE: Ismeretek a katalitikus folyamatok szelektivitásának főbb típusairól és a kinetikus rezolválás alapjairól.</p>
6. hét	<p>Olefinok hidrogénezése, hidrocianálása, hidroszililezése. Katalitikus dehidrogénezés. Redukciók hidrogénátvitellel. Alkének katalitikus izomerizációja. Gyakorlati alkalmazások.</p> <hr/> <p>TE: Ismeretek a felsorolt témakörökben, különös tekintettel az alkalmazott katalizátorokra.</p>
7. hét	<p>Aldehidok és ketonok hidrogénezése, ketonok hidroszililezése. Reduktív aminálás. Nitrovegyületek és iminek hidrogénezése. Allilalkoholok redoxi izomerizációja.</p> <hr/> <p>TE: Ismeretek a felsorolt témakörökben.</p>
8. hét	<p>C-X kötések (X : oxigén, halogén) hidrogenolízise. Alkalmazások környezetre ártalmatlan anyagok redukzív lebontásában. Alkének és alkének hidratálása. Telomerizációs reakciók.</p> <hr/> <p>TE: Ismeretek a felsorolt témakörökben, kiemelve a homogén katalízis alkalmazását környezeti ártalmak megelőzésében ill. felszámolásában.</p>
9. hét	<p>Hidroformilezés. Kobalt-, ródium-, és platina-alapú katalizátorok. A hidroformilezés mechanizmusa. Aszimmetrikus hidroformilezés. Ipari alkalmazások.</p> <hr/> <p>TE: Az egyik legjelentősebb ipari alkalmazású homogénkatalitikus reakció alapkérdéseinek, katalizátorainak és reakciómechanizmusainak megismerése.</p>
10. hét	<p>Karbonilezés és dekarbonilezés. Katalizátorok és mechanizmusok. Finomkémiai alkalmazások.</p> <hr/> <p>TE: Ismeretek a felsorolt témakörökben.</p>
11. hét	<p>Homogénkatalitikus oxidációk. Katalizátorok és mechanizmusok. Gyakorlati alkalmazások.</p> <hr/> <p>TE: Ismeretek a felsorolt témakörökben.</p>
12. hét	<p>C-C kötések homogénkatalitikus kialakítása (Sonogashira-, Suzuki- és más, névvel jelölt</p>

	<p>kapcsolási reakciók).</p> <hr/> <p>TE: Ismeretek a szerveskémi szintézislépések talán legfontosabbika, a szén-szén kapcsolat lehetséges homogénkatalitikus megvalósításairól.</p>
13. hét	<p>Olefin metatézis. A reakció különféle módja és mechanizmusai. Leggyakrabban használt katalizátorok.</p> <hr/> <p>TE: Ismeretek egy több útonvégrehajtható, rendkívül változatos módon használható szerveskémi szintetikus módszerről.</p>
14. hét	<p>Szén-dioxid alapú, homogénkatalitikus szerves szintézisek; metanol, hangyasav és származékai (formiát észterek, formamidok), laktonok, polikarbonátok előállítása.</p> <hr/> <p>TE: Az üvegház-hatásáért méltán kárhözott szén-dioxid megismerése más oldalról, hasznos alkalmazása szerveskémi szintézisekben C1 alapanyagként.</p>
15. hét	<p>A reakciókörülmények gyors optimalizálása. Az H-Cube hidrogénező reaktor és alkalmazása homogénkatalitikus szintézisekhez. Több-munkahelyes reaktorok.</p> <hr/> <p>TE: Áttekintés a reakciókörülmények gyors optimalizálásának módszereiről</p>