

A Kémia Doktori Iskola "Katalízis a környezetbarát kémiában" című szigorlati melléktárgyának tematikája

A zöld kémia fogalma, jellemzői és alapelvei . A környezeti tényező (E-faktor) definíciója. Egy reakció atomhatékonyságának definíciója. A katalízis fogalma és fajtái. Homogén és heterogén katalizátorok tulajdonságainak összehasonlítása. A katalizátor szelektivitásának fajtái (kémiai példákkal). Egy katalizátor aktivitásának és szelektivitásának jellemzése. A katalitikus ciklusszám (TON) és az időegységre jutó katalitikus ciklusszám (katalitikus frekvencia, TOF) definíciója. A homogén katalízis elemi lépései (oxidatív addíció, redukív elimináció, ligandum vándorlás, β -hidrogén elimináció). A heterogén katalízis elemi lépései.

A heterogén katalízis Langmuir-Hinshelwood és Eley-Rideal mechanizmusa.

Oldószerek használatának indokai (előnyei) és hátrányai. Alternatív oldószerek. Ionfolyadékok (ionos folyadékok) általános összetétele és tulajdonságai. Szuperkritikus fluidumok definíciója és felhasználása oldószerként. Fluóros oldószerek fogalma és lényeges tulajdonságai. Két fázisú katalitikus reakciók. Oldószerek kiválasztásának szempontjai.

Komplekkatalizált aszimmetrikus hidrogénezés; L-DOPA szintézis (Monsanto). Racemizálás és dinamikus kinetikus rezolválás. A hidroformilezés általános folyamata és katalizátorai. A Ruhrchemie-Rhône-Poulenc vizes közegű kétfázisú hidroformilezési eljárás jellemzői. A Union Carbide eljárás hosszú láncú alkének hidroformilezésére. A Kuraray eljárás butadién és víz telomerizálására. Ecetsav előállítása metanol karbonilezésével: a Monsanto és a Cativa eljárás. Olefin metatézis és katalizátorai.

Zeolitok és agyagásványok katalitikus alkalmazásuk.

Biokatalízis a környezetbarát kémiában.

Mikrohullámú aktiválás és sajátosságai.

A katalitikus folyamatok gyors optimalizálásának módszerei. Az H-Cube hidrogénező reaktor Alapvető biztonsági szempontok a szintézisek tervezésében.

Az életciklus analízis (life cycle assessment) fogalma

Ajánlott irodalom:

- Faigl F., Kollár L., Kotschy A., Szepes L.: *Szerves fémvegyületek kémiája*, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001.
- D.J. Adams, P.J. Dyson, S.J. Tavener: *Chemistry in Alternative Media*, Wiley, Chichester, England, 2004
- A. Behr: *Angewandte homogene Katalyse*. Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2008.
- A. Behr, P. Neubert: *Applied Homogeneous Catalysis*, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2012.
- J.M. Adams, R.W. McCabe: *Clay minerals as catalysts*. In Handbook of clay science, 3rd ed., Eds. F. Bergaya, B.K.G. Theng, and G. Lagaly, pp. 541-581, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2008.
- P.W.N.M. van Leeuwen: *Homogeneous Catalysis. Understanding the Art*, Kluwer, Dordrecht, The Netherlands, 2004.
- A Reakciókinetika/katalízis c. tárgy anyaga (elérhető a DE Fizikai Kémiai Tanszék honlapján, <http://fizkem.unideb.hu>)

