

MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport

Dr. Joó Ferenc akadémikus, egyetemi tanár

Dr. Fábíán István, egyetemi tanár

Dr. Czégény Csilla tudományos segédmunkatárs

Győrváriné Dr. Horváth Henrietta, tudományos főmunkatárs

Dr. Kalmár József tudományos munkatárs

Dr. Kállay Csilla, tudományos főmunkatárs

Dr. Papp Gábor, tudományos főmunkatárs

Dr. Purgel Mihály, tudományos munkatárs

Dr. Udvardy Antal MTA posztdoktor

A vezetőkön kívül a kutatócsoport felsorolt tagjai az MTA Támogatott Kutatócsoportok Irodájának alkalmazottai. Az MTA-DE Kutatócsoport kutatási területe nagy mértékben átfed a Kémiai Intézet Homogén Katalízis Kutatócsoport és a Környezeti Reakciómechanizmusok Kutatócsoport kutatási területével.

A kutatócsoport fő kutatási terület a vízdoldható átmenetifém komplex katalizátorok előállítása és alkalmazásai. Az utóbbi évek egyik jelentős nemzetközi trendje az illékony szerves oldószerek helyettesítése vízzel vagy ún. ionfolyadékokkal. E program keretében nagy számban állítunk elő szulfonálással vízdoldhatóvá tett tercier foszfin típusú ligandumokat valamint ezek ródium-, ruténium-, irídium- és palládiumkomplexeit. Intenzíven kutatjuk a platinafémek vízdoldható, N-heterociklusos karbén ligandumú komplexeinek szintézisét és katalitikus alkalmazásait. A komplexek katalitikus aktivitását elsősorban hidrogénezési reakciókban vizsgáljuk, de kutatásainkat kiterjesztettük a katalitikus hidrogénátvitel, a hidrogén-deutérium csere, és az allil-alkoholok redox-izomerizációja területére is. Az alkének, nitrilek és alkének katalitikus hidratálásában elsősorban a ruténium-tercier foszfin és az arany-NHC karbén komplexek mutatnak jelentős aktivitást. Az olefinek ún. anti-Markovnyikov típusú hidratálása primer alkoholok közvetlen előállítását tenné lehetővé, ami feleslegessé tenné a ma nagyipari méretekben alkalmazott hidroformilezés + hidrogénezés kétlépcsős eljárást. Tanulmányozzuk a vizes közegű C-C kapcsolások katalitikus megvalósítását és a halogéntartalmú szerves vegyületek hidrogenolitikus lebontását is. Speciális alkalmazást nyertek vízdoldható hidrogénező katalizátoraink a biológiai membránok hidrogénezéssel történő módosításában. Több katalitikus rendszerben sikerült megvalósítanunk karbonátok és hidrogénkarbonátok redukcióját formiáttá, és fordítva: a formiát bontását, ami lehetőséget ad hidrogén tárolásra. Kutatásaink lényeges része a katalitikus reakciók mechanizmusának felderítése kinetikai mérésekkel és a lehetséges köztitermékek elkülönítésével vagy *in situ* vizsgálatával. Ehhez elsősorban nagy gáznyomás (H_2 , CO_2 , CO) alatti multinukleáris NMR méréseket végzünk. Jelentős szerepet szánunk a számítási kémiai módszerek alkalmazásának (QM és QM/MM).

Több hazai és külföldi intézménnyel állunk kutatási kapcsolatban (MTA SZBK, Szeged; ill. Univ. Almería, Spanyolország; EPFL, Lausanne, Svájc).