

Activación molecular mediante complejos organometálicos con enlaces múltiples heterometálicos

Researchers:

Miguel Angel Ruiz Alvarez (IP), Daniel García-Vivó, M^a Esther García Díaz, M^a Angeles Alvarez Fidalgo. Area de Química Inorgánica, Universidad de Oviedo.

Language Undefined

Description:

El objetivo general de la presente investigación es sintetizar nuevos complejos con enlaces múltiples heterometálicos y estudiar su reactividad en un sentido amplio, poniendo especial atención en los procesos generales de activación de moléculas sencillas y su posible utilidad en campos más aplicados como la catálisis. Se parte de la hipótesis, contrastada en distintos estudios experimentales previos, de que los compuestos con enlaces múltiples heterometálicos pueden mostrar una reactividad superior a la de sus homólogos homometálicos, debido a la polaridad intrínseca del enlace heteronuclear. En particular, y aprovechando la gran experiencia del grupo investigador en el área de los compuestos carbonílicos homobinucleares de los elementos de transición, se abordará la síntesis de nuevos compuestos carbonílicos y ciclopentadienílicos con enlaces múltiples entre átomos metálicos diferentes, principalmente de los grupos 6 a 8, estabilizados mediante ligandos puente de tipo fosfuro (PR₂) o fosfinideno (PR), que adicionalmente pueden contener, o no, ligandos hidruro puente. En una fase posterior se estudiará la reactividad general de estos complejos frente a moléculas orgánicas e inorgánicas sencillas, y frente a otros complejos metálicos, y también se analizará su actividad en relación con algunos procesos de interés más aplicado, tales como procesos de hidrogenación, activación de óxidos de nitrógeno y del fósforo elemental.

Methodology:

El proyecto posee una componente mayoritaria de síntesis inorgánica y estudios de reactividad química. En el transcurso de estos estudios, sin embargo, se plantean con frecuencia problemas que no pueden resolverse exclusivamente mediante técnicas espectroscópicas convencionales, y cuya solución precisa acudir a cálculos mecanocuánticos, típicamente de tipo DFT, que serán realizados empleando el programa GAUSSIAN para obtener información relativa a distintos extremos:

- Determinación de la estructura electrónica más probable de compuestos químicos de baja estabilidad, o de estructura no determinable mediante técnicas espectroscópicas y difractométricas.
- Determinación de energías relativas de isómeros geométricos.
- Análisis de la estructura electrónica y enlace de compuestos de especial relevancia por su inusual estructura geométrica o reactividad.
- Estudio de perfiles energéticos de reacción en transformaciones de especial interés, con identificación de especies intermedias y los correspondientes estados de transición.

Source

URL: <https://web.computaex.es/en/proyectos/activacion-molecular-mediante-complejos-organometalicos-con-enlaces-multiples>