



Válogatás

Az MTA Kémiai Tudományok Osztálya által kiválasztott három kiemelt publikáció foszfinátok és foszfinsav-amidok egymásba alakításával, az elektrolizálócella központi eleme, a membrán-elektrod együttes legfontosabb tulajdonságaival és kvantumkémiai soktestmódszerek felületkémiai felhasználásával foglalkozik.

Perczel András

az MTA rendes tagja, osztályelnök

Foszfinsav-származékok mikrohullámmal segített, ionfolyadék által katalizált aminolízise és alkoholízise; foszfinátok és foszfinsav-amidok egymásba alakítása

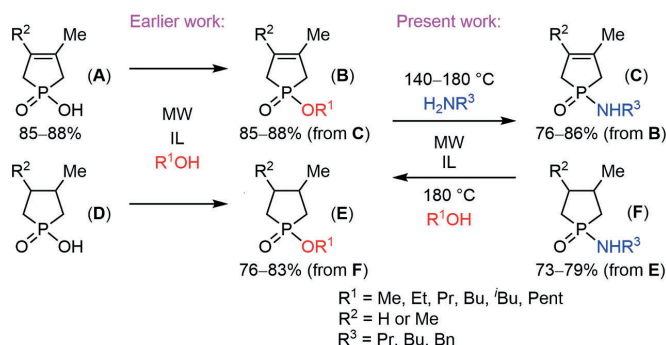
Green Chemistry, 2023

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2023/GC/D3GC02711B>

György Keglevich, Nikolett Harsági, Sarolta Szilágyi

Department of Organic Chemistry and Technology, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Budapest University of Technology and Economics, Hungary

A szerzők egy klórmentes egyszerű eljárást dolgoztak ki alkilamino-3-foszfolén-oxidok előállítására és alkilamino-foszfolén-oxidok diasztereoselektív szintézisére a megfelelő gyűrűs foszfinátok mikrohullámmal segített és ionfolyadékkal katalizált aminolízisével. Az ellentétes reakciót, a gyűrűs foszfinsav-amidok alkoholízisét szintén megvalósították. A foszfinátok és foszfinsav-amidok egymásba alakíthatósága általánosabb érvényű lehet.



Membrán-elektrod együttesek elektrokémiai CO₂ redukcióhoz: alapvetések és alkalmazások

Angewandte Chemie International Edition, 2023

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/ange.202302789>Zheng Zhang^{1,2}, Xin Huang¹, Zhou Chen¹, Junjiang Zhu¹, Balázs Endrődi³, Csaba Janáky³, Dehui Deng²

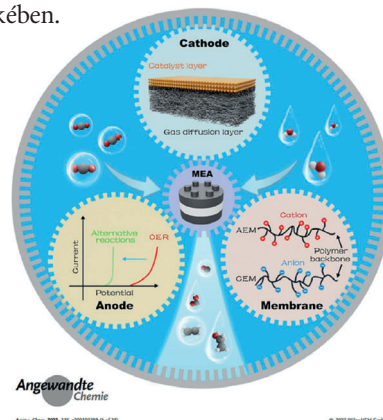
¹Hubei Key Laboratory of Biomass Fibers and Eco-dyeing & Finishing, College of Chemistry and Chemical Engineering, Wuhan Textile University, Wuhan, China

²State Key Laboratory of Catalysis, Collaborative Innovation Center of Chemistry for Energy Materials, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Science, Dalian, China

³Department of Physical Chemistry and Materials Science, University of Szeged, Hungary

Az elektrokémiai CO₂-átalakítás gyorsan növekvő tudományterület, mivel az ilyen típusú technológiák egyszerre teszik lehetővé különböző vegyipari platform-molekulák (pl. szén-monoxid,

etilén) előállítását és a CO₂ hasznosítását. A közleményben a szerzők összefoglalták az elektrolizálócella központi eleme, a membrán-elektrod együttes legfontosabb tulajdonságait, a kihívásokat, és azonosították a lehetséges fejlesztési irányokat az iparosítás érdekében.



A pontos kvantumkémiai soktestmódszerek felnöttek a felületkémia kihívásaihoz: a számítások és a mérések összhangba kerültek

Journal of the American Chemical Society, 2023

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.3c09616>Benjamin X. Shi¹, Andrea Zen², Venkat Kapil¹, Péter R. Nagy³, Andreas Grüneis⁴, Angelos Michaelides¹

¹Yusuf Hamied Department of Chemistry, University of Cambridge

²Department of Earth Sciences, University College London

³Department of Physical Chemistry and Materials Science, Budapest University of Technology and Economics

⁴Institute for Theoretical Physics, TU Wien

A molekulák felületi kötődése kritikus például a heterogén katalízis vagy a gáztárolás leírásában. A 20 éve halmozódó eltérések után először sikerült 3 fejlett számítást és 3 újraértelmezett mérést azonos eredményre hozni a reprezentatív MgO-felületen kötött CO esetén. Különösképpen a BME-n a nyílt MRCC programban fejlesztett LNO-CCSD(T) módszerünkkel sikerült eddig elérhetetlen pontosságú számításokat végezni széles körben elérhető költséggel, ami új utat nyit a pontos felületkémiai modellezésben.

