



Journal of the Turkish Chemical Society, Section A: Chemistry

Owned by the Turkish Chemical Society

Correspondence e-mail: jotcsa@turchemsoc.org

Founded in February, 2014

**QUANTUM CHEMICAL INVESTIGATIONS OF METHANE AND
DIOXYGEN ACTIVATION REACTIONS OF Fe(II)-
BISPYRAZOLEPYRIDINE**

**Fe(II)-BİSPİRAZOLPİRİDİNİN METAN VE DİOKSİJEN AKTİVASYONU
REAKSİYONUNUN KUANTUM KİMYASAL İNCELEMELERİ**

G. Burçin Divrik¹ and Yavuz Dede^{1*}

¹Gazi University, Department of Chemistry, Faculty of Science, Teknikokullar, Ankara 06370,
Turkey

*Corresponding author. dede@gazi.edu.tr

ABSTRACT

Oxidative C-H bond activation is of utmost importance in the context of converting small hydrocarbons to alcohols as an alternative to fossil fuel consumption. Despite decades of continued research that utilized transition metal compounds, only a limited number of simultaneous O₂ and C-H activation processes are available and it is still challenging to harness alkanes more directly, efficiently and cleanly by using low cost catalysts under mild conditions.[1]

In this study, we present a Density Functional Theory analysis (at B3LYP/cc-pVTZ level of theory) reaction mechanisms of methane to methanol conversion with Fe(II)-bispyrazolopyridine (Fe(II)bpp). Structural, energetic, and electronic parameters are reported for the species in the proposed mechanism given in Figure 1.

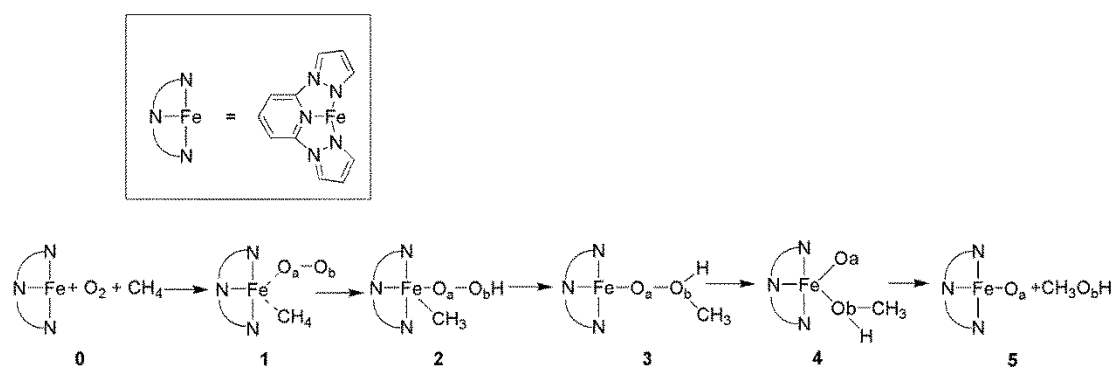


Figure 1: Structure of Fe(II)[bpp] complex and reaction mechanism.

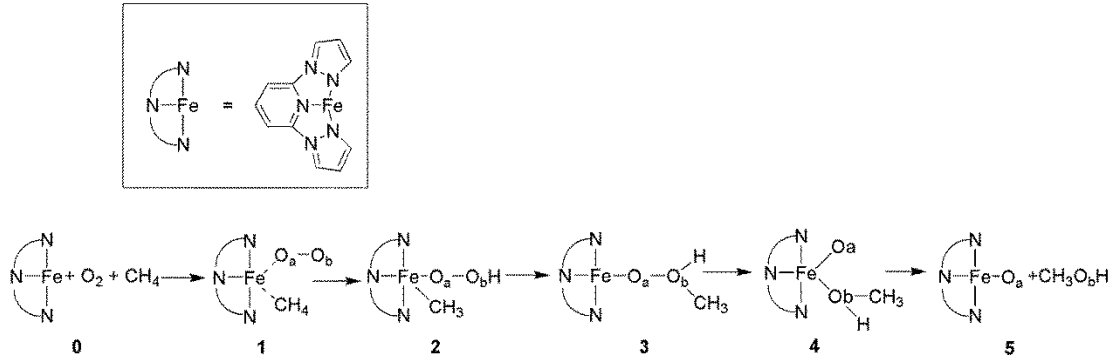
Keywords

C-H bond activation, Dioxygen activation, Fe(II)-bispyrazolepyridine, DFT.

ÖZET

Oksidatif C-H bağ aktivasyonu, küçük hidrokarbonların, fosil yakıt tüketimine alternatif olabilecek alkollere dönüşümünde son derece önemlidir. Yıllardır geçiş metali bileşikleri kullanılarak yapılan araştırmalara rağmen, O₂ ve C-H aktivasyonunu aynı anda gerçekleştirebilen sınırlı sayıda proses mevcuttur. Ayrıca alkanlardan, makul şartlarda, düşük maliyetli katalizörler kullanılarak, doğrudan, etkin ve temiz bir şekilde yararlanmak hala oldukça iddialı bir hedeftir.

Bu çalışmada; Fe(II)-bispirazolpiridin (Fe(II)bpp) ile metan metanol dönüşümü reaksiyon mekanizmaları Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi ile (B3LYP/cc-pVTZ seviyesinde) sunulmuştur. Şekil 1.'de önerilen mekanizmadaki türlerin yapısal, enerjistik ve elektronik parametreleri açıklanmıştır.



Şekil 1: Fe(II)[bpp] kompleksinin yapısı ve reaksiyon mekanizması.

Anahtar Kelimeler

C-H bağ aktivasyonu, oksijen aktivasyonu, Fe(II)-bispirazolpiridin, DFT.

Kaynaklar / References

[1] Jay A. Labinger, John E. Bercaw, *Nature*, 417, 507-514, (2002).