



TURKISH CHEMICAL SOCIETY
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

CH₄ AND O₂ ACTIVATION AT IRON(II)[TERPYRIDINE]

DEMİR(II)[TERPİRİDİN] İLE CH₄ VE O₂ AKTİVASYONU

Damla Pekyılmaz¹ and Yavuz Dede^{1*}

¹Gazi University, Faculty of Science, Department of Chemistry, Ankara, 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.[1] Despite decades of continued research that utilized transition metal compounds, only a limited number of simultaneous O₂ and C-H activation processes are available.[2] It is still an immense challenge to convert methane into methanol by using low cost catalysts under mild conditions.

Herein, we report a Density Functional Theory analysis (utilizing the B3LYP functional) of the methane to methanol conversion paths (Figure 1) by Fe(II)[2,6-bis(2-pyridyl)pyridine] (Fe(II)[tpy]) complex.

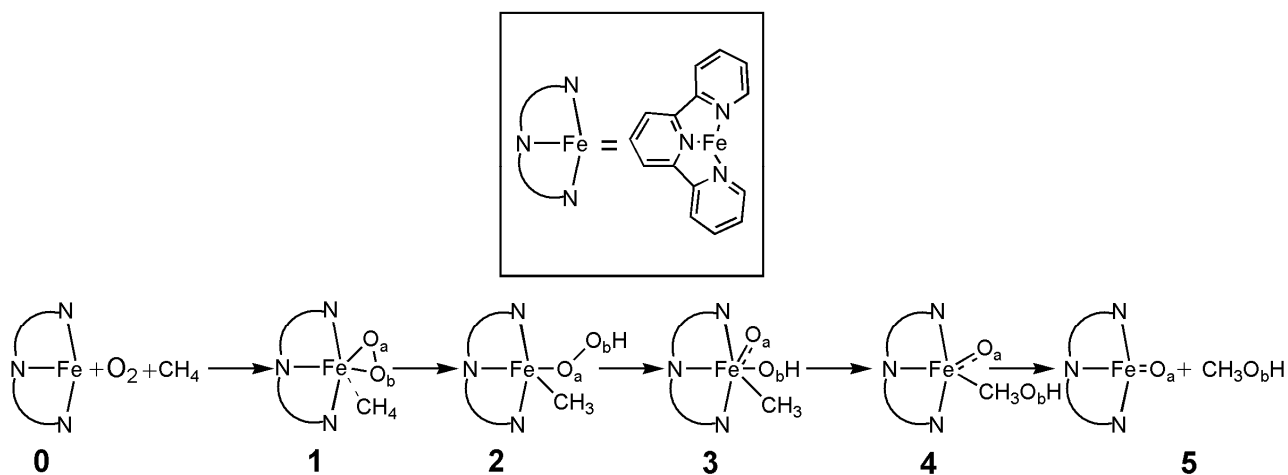


Figure 1: Methane to methanol conversion mechanism investigated in this study.

Possible intermediates and transition structures for the proposed paths were located. Structural, energetic and electronic properties of the reaction intermediates were corroborated.

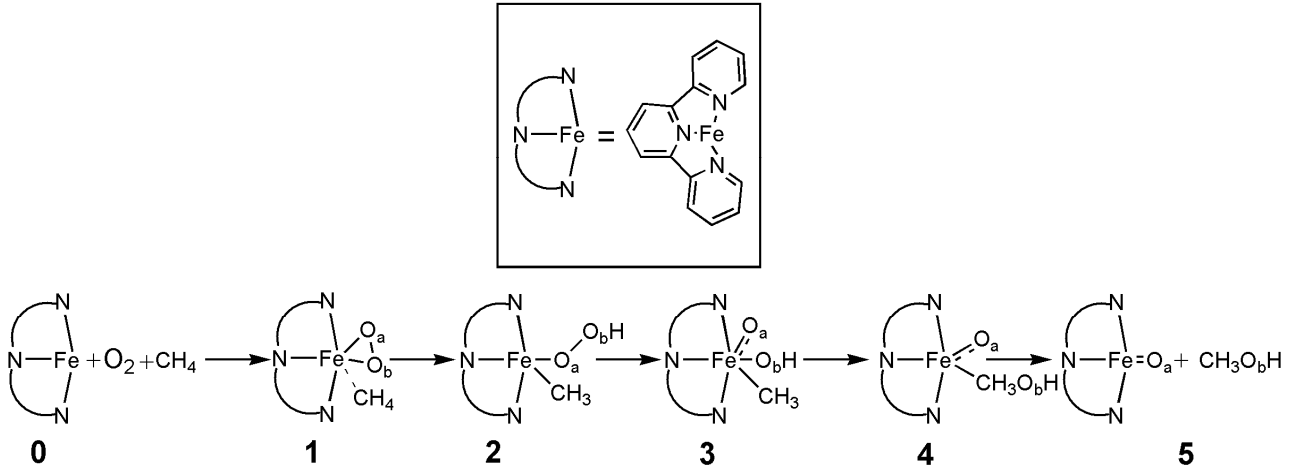
Keywords

C-H bond activation, Dioxygen activation, Density Functional Theory, Fe(II)[2,6-bis(2-pyridyl)pyridine].

ÖZET

Oksidatif C-H bağ aktivasyonu, küçük hidrokarbonların alkollere dönüştürülmesi ile fosil yakıt tüketimine alternatif olması bakımından büyük önem taşımaktadır.[1] Yıllardır devam eden pek çok çalışmaya rağmen, geçiş metali kompleksleri ile eş zamanlı O₂ ve C-H aktivasyonu örnekleri hala sınırlıdır.[2] Uygun koşullarda, düşük maliyetli katalizörler ile metan-metanol dönüşümü hala büyük bir hedeftir.

Bu çalışmada, Fe(II)[2,6-bis(2-piridil)piridin] (Fe(II)[tpy]) kompleksi ile metan-metanol dönüşüm yollarının Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT) (B3LYP fonksiyoneli kullanılarak) analizleri gerçekleştirilmiştir.



Şekil 1: Çalışılan metan-metanol dönüşüm mekanizması.

Önerilen yollar için olası ara ürünler ve geçiş hal yapıları tespit edilmiştir. Önerilen ürünlerin yapısal, enerjistik ve elektronik özellikleri incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler

C-H bağ aktivasyonu, Oksijen aktivasyonu, Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi, Fe(II)[2,6-bis(2-piridil)piridin].

Kaynaklar / References

- [1] H. D. Gesser, N. R. Hunter. Chem. Rev., 85, 235-44 (1985).
 [2] M. A. Halcrow. Coord. Chem. Rev., 253, 2493-514 (2009).