

## Projecte per beques d'estiu 2019

### Dades del projecte:

Títol:	Lligands de tipus pincer que ens duguin a la química verda
Supervisor:	Dr. Albert Poater
E-mail supervisor:	albert.poater@udg.edu
Grup de recerca:	DIMOCAT
Destinat a estudiants:	3r i 4t any
Lloc de treball:	Fac. Ciències
Places ofertes:	1 (3r any) i 1 (4t any)
Data d'inici:	01/07/2018 (flexible, a concretar amb l'estudiant)
Data d'acabament:	31/07/2018 (31/08/2018 per alumne de 4art any)
Seguiment:	Diari

Coneixements específics que ha de tenir l'estudiant: Estar cursant o haver cursat el tercer curs de química o biotecnologia. No calen coneixements computacionals previs

Estudis en curs requerits: Estar cursant o haver cursat el tercer curs de química o biotecnologia

Formació que adquirirà l'estudiant en realitzar aquesta activitat: Coneixements bàsics de química quàntica, i familiarització amb el programari de computació (Gaussian, GaussView, ChemCraft), tècniques de caracterització de la reactivitat química i aprenentatge en l'escriptura d'un treball científic en anglès.

Descripció de l'activitat que ha de fer l'estudiant: Descriure el mecanisme de reacció per complexos de pinces de iridi PCP, coneguts per ser catalitzadors actius per a la hidrogenació de  $N_2O$ . El lligand PCP particular, que no és un simple espectador, sinó que ajuda directament en la reacció on s'allibera innocu  $N_2$ . L'estudi es farà mitjançant càlculs de la Teoria Funcional de Densitat (DFT). En cas de ser convenient i/o necessari, el treball podrà ser utilitzat com a part del treball d'empresa o treball de fi de grau.

### Bibliografia

- Doyle, L. E.; Piers, W. E.; Borau-Garcia, J. Ligand Cooperation in the Formal Hydrogenation of  $N_2O$  Using a  $PC_{sp^2}P$  Iridium Pincer Complex. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 2187-2190.
- Luque-Urrutia, J. A.; Solà, M.; Milstein, D.; Poater, A. Mechanism of the Manganese-Pincer Catalyzed Acceptorless Dehydrogenative Coupling of Nitriles and Alcohols. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 2398-2403