VI. Összefoglalás

1. A kristályos [Rh(*S*,*S*)-bdpp]PF_6 típusú komplexeket alumínium-oxid hordozóhoz kötöttük heteropolisavak segítségével az Augustine-féle eljárás segítségével. A felvett spektrumok azt mutatták, hogy a heterogenizált komplexek a homogén komplexekhez hasonló szerkezetűek voltak, és katalitikus szempontból is hasonlóan viselkedtek.

2. Az eredeti módszer módosítottuk, és a kikristályosított komplexek helyett magában az elegyben állítottuk elő a heterogenizálandó komplexeket. Mind a spektrumok, mind pedig a katalitikus vizsgálatok azt mutatták, hogy a két módszer hasonló tulajdonságú heterogenizált katalizátorokat eredményezett, ugyanakkor az *in situ* módszer sokkal gyorsabb és olcsóbb volt. Az *in situ* módon előállított katalizátorokat is alkalmaztuk egymás után következő mérésekben a katalitikus tulajdonságok észrevehető változása nélkül.

3. Az *in situ* módszerrel heterogenizált komplexekkel sikeresen hidrogéneztük a (Z)-2-acetamidofahéjsavat. A heterogenizált komplexek fajlagos katalitikus aktivitása nagyobb volt, mint a homogén komplexeké, ami jól egyezik a korábbi tapasztalatainkkal.

4. A különbözőkképpen szubsztituált homogén [Rh(*S*,*S*)-bdpp] komplexek katalitikus aktivitása nőt a ligandumok bázikusságának függvényében és ugyanez volt megfigyelhető a heterogenizált komplexek esetében is. Hasonló effektus volt megfigyelhető az enantioszelektivitás esetében is, de itt a hatás jóval kisebb volt.

5. A (*Z*)-metil-(2-acetamidocinnamát) hidrogénezési sebessége kisebb volt, mint a savé, más vonatkozásban azonban az észter a savhoz hasonlóan viselkedett.

6. Az *in situ* módszerrel heterogenizált Rh-komplexeket alkalmaztuk az acetofenon-származékok C=O kötésének enantioszelektív hidrogénezésére is Azokat a körülményeket alkalmazva, amelyek között a homogén komplexek alkalmasak voltak a C=O kötés hidrogénezésére, a heterogenizált komplexek is megfelelő aktivitást és enantioszelektivitást mutattak.

7. A fenti reakcióban a heterogenizált komplexek valamivel kisebb katalitikus aktivitást mutattak, mint a homogének, ami ellentétes azon korábbi megfigyeléseinkkel, hogy a heterogenizált komplexek általában nagyobb katalitikus aktivitást mutatnak.

8. A szubsztituált acetofenon származékok esetében a heterogenizált komplexek hasonló szubsztituenshatást mutattak, mint a homogén komplexek, de ez a hatás az oldható komplexek esetében kifejezettebb volt.

9. A heterogenizált komplexek leoldódása a Sheldon-teszttel is vizsgáltuk, és azt találtuk, hogy a leoldódás nem megy végbe.

10. Egy új heterogenizált Ru(NHC)-komplexet állítottunk elő az *in situ* heterogenizálási módszerrel. A heterogenizált komplex megfelelő aktivitással hidrogénezte a C=C és a C=O kötéseket, etanolban és vízben is.

11. A fenti katalizátorok fajlagos katalitikus aktivitása kisebb volt, mint a homogén komplexeké. A heterogenizált katalizátort kiszűrés után ismételten fel tudtuk használni több kísérletben is az aktivitás jelentősebb csökkenése nélkül.

12. A *trans*z-fahéjsav hidrogénezésénél a szelektív C=C hidrogénezéstől a C=C és a C=O közel azonos átalakulásáig tolódik el a szelektivitás.

13. Trifenilfoszfin jelenlétében sem az aceton, sem az acetofenon sem hidrogéneződik. Ezzel szemben a propanal, a *transz*-fahéjaldehid és az allil-alkohol jó termeléssel hidrogéneződött. Trifenilfoszfin jelenlétében a *transz*-fahéjaldehid esetében szelektív C=O hidrogénezés történt. Valószínű, hogy a PPh_3 helyettesíti a Cl^- ligandumot a $[RuCl_2L(C_{10}H_{14})]$ komplexben, és ezzel egy új katalitikusan aktív forma jöhet létre.

14. Az allil-alkohol esetében a C=C kötés hidrogéneződésével propán-1-ol képződött, és végbement az izomerizáció is propanallá.

15. Egyik célunk az volt, hogy megvizsgáljuk heterogenizált katalizátoraink alkalmazhatóságát vizes közegben, különös tekintettel arra, hogy heteropolisavakat használtunk a komplexek rögzítésére. Tudomásunk szerint első ízben alkalmaztunk heterogenizált *N*-heterociklusos karbén-komplexet vizes közegben.

16. Azt találtuk, hogy az Augustine-féle módszerrel előállított heterogenizált katalizátorok használhatók vizes közegben is, sőt a fajlagos aktivitás jóval nagyobb volt vízben, mint etanolban.