



HeidelCat

Newsletter des SFB 623 der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg



Ausgabe 1, März 2003

We go beyond the surface

Editorial

Nachdem die Deutsche Forschungsgemeinschaft als Ergebnis der hervorragenden Begutachtung unseres Antrags (März 2002) die Einrichtung eines Sonderforschungsbereichs der Chemie der Ruprecht-Karls-Universität beschlossen hat (Mai 2002), konnte dieser als **SFB 623: „Molekulare Katalysatoren: Struktur und Funktionsdesign“** zum 1. Juli 2002 seine Tätigkeit aufnehmen. Einzelheiten zur Einrichtung sind einer entsprechenden Pressemitteilung der Universität bzw. einem Artikel in der *Ruperto Carola*, dem Forschungsmagazin der Universität Heidelberg (Nr. 2/2002), zu entnehmen.

Unser SFB ist mit einer eigenen Homepage im Internet präsent (<http://www.sfb623.uni-hd.de>).

Im November 2002 hat Frau Gabriele Bönisch als Sekretärin der Geschäftsstelle des SFB ihre Arbeit aufgenommen (SFB-Büro: OCI, Raum 236, Tel. 8427, Fax 8398, E-mail gabriele.boenisch@urz.uni-heidelberg.de).

In der ersten ordentlichen Mitgliederversammlung am 15.07.02 wurden einstimmig P. Hofmann zum Sprecher, R. Krämer und G. Helmchen zu Sprecher-Stellvertretern und Frau Claudia Meier zur Budgetleiterin des SFB gewählt. Es wurde ferner beschlossen, dass mit den zur Verfügung stehenden Mitteln pro Jahr bis zu 3 Gastprofessoren sowie eine angemessene Zahl von Gastwissenschaftlern und Gastvortragenden finanziert werden sollen. Pro Jahr soll ein SFB-Workshop stattfinden (erstmalig 2003), wenn möglich auswärts, sowie ein internationales SFB-Symposium (erstmalig 2004), zu dem auch andere SFB's eingeladen werden sollen. Das SFB-Kolloquium jeweils am Freitag (14-tägig) soll sowohl Vorträge auswärtiger Gäste einschließen, als auch als internes Diskussionsforum für die Mitarbeiter des SFB und deren laufende Projekte dienen. Diese "Workstattgespräche", also regelmäßige Treffen aller Mitarbeiter des SFB, die in ca. 14-tägigem Abstand stattfinden und von den Gruppen des SFB mit Brezeln und Getränken versorgt und organisiert werden, haben sich inzwischen gut und mit bisher recht zufriedenstellender Beteiligung etabliert.

Die Beschaffung der als notwendige Grundausstattung der SFB von den DFG-Gutachtern empfohlenen High-Throughput Synthese- und Screening-Workstation der Fa. Chemspeed, die im Rahmen einer HFBG-Beschaffungsmaßnahme vom Bund, dem Land und der BASF (deren finanzielles Einspringen den Kauf erst ermöglicht) finanziert wird, sollte noch in diesem Frühjahr zum Abschluss kommen. Die notwendigen Umbaumaßnahmen im dafür vorgesehenen Labor sind praktisch abgeschlossen, die für dieses Großgerät zur automatisierten, parallelen chemischen Synthese und zum Hochdurchsatz-Screening von chemischen Reaktionen bei variablen Temperaturen und Drucken vorgesehene Technikerstelle wird soeben besetzt.

Der größte Teil der sonstigen Beschaffungsmaßnahmen von Geräten der Grund- und Ergänzungsausstattung für den SFB ist abgeschlossen.

Highlight auch für den SFB in diesem Jahr wird sicher das nun zum 2. Mal stattfindende internationale Symposium „Heidelberg Forum of Molecular Catalysis“ (HFMC 2003) am 27.6.2003 sein, das wiederum großzügig von der BASF finanziert wird. Darüber werden wir Sie in unserem nächsten Newsletter ausführlich informieren.

Wir werden, folgend auf diese erste Ausgabe, unseren Newsletter, den wir **HeidelCat** getauft haben, in möglichst regelmäßigen Abständen herausgeben. Wegen der vielen Aktivitäten und Veranstaltungen, die seit Bestehen des SFB 623 stattgefunden haben, ist diese erste Ausgabe etwas umfangreicher ausgefallen. In Zukunft wird der Newsletter mit maximal 2 Seiten interessierten Lesern innerhalb und außerhalb des SFB Einblick in das Geschehen rund um den SFB 623 geben. Wir werden weiterhin über unsere Werkstattgespräche, Workshops, Kolloquien, Symposien, Gastvorträge, die Tätigkeit von SFB-Gastwissenschaftlern und über alles Interessante im oder im Zusammenhang mit dem SFB und seiner Thematik berichten.

HeidelCat soll einmal im Monat erscheinen und kostenlos verteilt werden. Die 2. Ausgabe ist für April geplant. Die redaktionelle Bearbeitung von **HeidelCat** übernimmt die Geschäftsstelle des SFB 623 in Zusammenarbeit mit wissenschaftlichen Mitarbeiterin-

nen und Mitarbeitern der Arbeitsgruppen des SFB 623, die im Turnus für die inhaltliche Betreuung sorgen sollen.

Wir hoffen sehr auf eine engagierte Beteiligung aller SFB-Projektleiter und Mitarbeiter an unserem Newsletter. Einer guten Öffentlichkeitsarbeit kommt eine nicht geringe Bedeutung für die Außenwirkung und den Erfolg unseres SFB zu.

Prof. Dr. P. Hofmann
Sprecher des SFB 623
Herausgeber *HeidelCat*

Gastvorträge im SFB

Freitag, 15 November 2002

Professor Charles P. Casey

(Department of Chemistry, University of Wisconsin, USA)

„New Hydrogenation Catalysts of Polar Molecules that Deliver Hydride from a Metal and a Proton from an Electronegative Atom“

Abstract:

A hydroxycyclopentadienyl ruthenium hydride is the active reducing agent of aldehyde hydrogenation catalysts developed by Shvo. Evidence for the mechanism of aldehyde reduction by these species were presented, along with studies of the regeneration of the active reducing agent from reactions with H₂. Based on these mechanistic studies, more active catalysts have been developed.

Dienstag, 19. November 2002

Professor David Milstein

(Department of Organic Chemistry, The Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel)

„Manipulating Organometallic Chemistry with Pincers“

Abstract:

Unusual properties and reactivity patterns can be imparted on the metal by Tri-dentate “pincer type” ligands, binding to a metal center via a carbon and two donor atoms. Work on PCX (X=P,N,O) type systems was described, including C-C-, C-H- and C-O-bond activation, catalysis of C-C-bond formation, and the generation of an unusual family of compounds – metalla-quinonoides. New types of interactions between transition metal complexes and arene systems and their consequences for catalysis were presented.

Freitag, 06. Dezember 2002

Dr. Horst Weiss (BASF AG, Polymer Research – Quantenchemie Ludwigshafen)

„First principles exploration of catalytic reactions in solvents and on surfaces with Car-Parrinello Methods“

Abstract:

Density Functional Theory calculations are carried out today to support the elucidation of reaction

mechanisms. Although the chemical models can be rather crude, they offer valuable insights. In some cases, however, one has to check whether these simplifications are appropriate. Car Parrinello methods can now be applied through the availability of high speed computers allowing to carry out Molecular Dynamics simulations with periodic boxes within the framework of DFT. Applications dealing with catalytic reactions in water with late transition metals and simulations on heterogeneous Ziegler Natta catalysts were shown.

Freitag, 20. Dezember 2002

Professor Didier Astruc

(Laboratoire de Chimie Organique et Organometallique University Bordeaux, France)

„Organometallic Chemistry and Catalysis at the Nanoscopic Scale“

Abstract:

The lecture gave an overview of the metal-mediated synthesis and techniques used for the characterization of nanoscale organometallic devices (metallo-dendrimers and metallo-colloids) and their functions (catalysis, supramolecular recognition). Catalytic reactions such as metathesis using Grubbs catalysts in dendrimers of various sizes (including very large ones) and especially the dendritic effects were presented and discussed.

Freitag, 21. Februar 2003

Dr. Guy C. Lloyd-Jones

(Bristol Centre for Organometallic Catalysis & Organic & Biological Chemistry Section, University of Bristol, England)

„Some Stereochemical and Kinetic Aspects of Asymmetric Catalysis“

Abstract:

An NMR-based study of an asymmetric Mo-catalyzed process was presented, which determines the overall stereochemical relationship between the racemic substrate and the highly enantioenriched product and how an apparent “memory effect” is predominantly a catalyst activation process. The consideration of kinetic aspects of Pd-catalyzed allylic substitution leading to studies on reactions of racemic catalysts was discussed in the second part. They can under certain circumstances reveal whether studies on the enantiomerically pure form might be useful.

Gastprofessuren im SFB

4.-11. November 2002

Professor Igor Tkatchenko

(Université de Bourgogne, Dijon, France)

„Straightforward access to conventional and new ionic liquids based on imidazoles“

Abstract:

Dialkyl carbonates have already been reported as alkylating organic substrates including the quaternari-

zation of nitrogen compounds. Applying this reaction to 1-alkylimidazoles leads to the formation of dialkylimidazolium-carboxylates, which are protonated and decarboxylated to give halogen-free ionic liquids.

“Expeditious route to N-heterocarbene complexes of transition metals”

Abstract:

1,3-Dialkylimidazolium-2-carboxylates react readily with transition metal complexes, especially those forming dimers with bridging ligands and lead to the corresponding heterocarbene complexes with the evolution of carbon dioxide. This reaction can be extended to (solvated) cationic complexes, opening new opportunities in catalysis.

“Dimerisation of Acrylates with Cationic Palladium Complexes Trapped in Ionic Liquids”

Abstract:

Dicationic Pd-complexes with phosphine ligands catalyze the dimerization of methyl acrylate (MA), but precipitation of metallic palladium is occurring after ca. 1000 TON. The use of ionic liquids (IL) may stabilize these ionic complexes. However, the results indicate a product inhibition effect. A “cationization” of the ligand should favor a retention effect in the IL phase. $[\text{Me}_2\text{N}(\text{H})\text{C}_2\text{H}_4\text{P}^+\text{Bu}_2]$ provides a suitable combination of properties for a biphasic, Pd-catalyzed MA dimerisation in ILs. No palladium black was formed, and the catalytic system could be recycled four times with nearly no loss of activity.

11.-15. März 2003

Professor Gregory C. Fu

(Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, USA)

“Asymmetric Catalysis with ‘Planar-Chiral’ Heterocycles”

Abstract:

A common mode of catalysis is nucleophilic catalysis. “Planar-chiral” derivatives of 4-(dimethylamino)pyridine (DMAP) serve as effective catalysts for the kinetic resolution of alcohols and amines, the enantioselective acylation of enolates, and the Staudinger synthesis of β -lactams.

“Palladium catalysed Coupling Reactions”

Abstract:

Until recently there were no general methods for effecting the corresponding reactions of aryl chlorides. Due to their increasing availability and low cost relative to other aryl halides, aryl chlorides are a particularly important family of coupling partners. The electron-rich and sterically bulky ligand P^tBu_3 is used allowing efficient palladium-catalyzed couplings of aryl chlorides.

Werkstattgespräche

1. Werkstattgespräch (25.10.2002)

Elementarreaktionen und Mechanismen molekularer Katalysezyklen

Teilprojekt A1: AK Siebert/Gleiter

Avijit Goswami und Tobias Stüb, Hilko Schulte: *„Untersuchungen zu katalytischen [2+2+2] und [2+2+1]-Reaktionen von Alkinen mit Cobaltkomplexen“*

Teilprojekt A3, AK Comba/Limberg

Marion Kerscher, Michael Merz und Tobias Wistuba: *„Oxidationskatalyse mit kovalenten Oxometall-Einheiten“*

2. Werkstattgespräch (29.11.2002)

Stereoselektive Katalyse

Professor Andres Jäschke: Pharmazeutisch-Chemisches Institut

„Stereoselektive Hybridkatalysatoren auf Nukleinsäurebasis“

Vorstellung eines geplanten Teilprojekts im Teilbereich B „Stereoselektive Katalyse“

Teilprojekt B2: AK Helmchen

Dr. Christina Garcia Yebra und Professor Günter Helmchen:

„Recent Developments in Ir-Catalysed Allylic Substitution“

3. Werkstattgespräch (17.01.2003)

Biologische und Bioinspirierte Katalyse

Teilprojekt C2: AK Döring

Daniela Pufky: *„Oxidative Heterocyclisierung – Koordinationschemie und Katalyse“*

Technikrelevante Basisprozesse

Teilprojekt D3: AK Enders

Pablo Fernández García:

„Cyclopentadienylquinoline chromium (III) complexes as highly active catalysts for olefin polymerisation“

4. Werkstattgespräch (7.02.2003)

Biologische und Bioinspirierte Katalyse

Teilprojekt C6: AK Krämer

Dr. Andriy Mokhir: *„DNA-templated metal catalysis“*

Teilprojekt C6: AK Wolfrum/Sauer

Oliver Piestert: *„Metallkatalyse an DNA-Templaten und deren Verfolgung durch Einzelmolekül-Spektroskopie“*

Technikrelevante Basisprozesse

Teilprojekt D4: AK Hofmann

Daniel Warth: *„Schnelle und hoch n-selektive Hydroformylierungs-Katalysatoren: neue modulare Ligandensysteme“*

Personalia

Siehe Editorial.

Aktuelles/Termine:

Die Veranstaltungstermine für das SS 2003 werden im nächsten Newsletter (April) bekannt gegeben.