



HeidelCat

Newsletter des SFB 623
der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Molekulare Katalysatoren:
Struktur und Funktionsdesign



We go beyond the surface

Ausgabe 4, Februar 2004

Editorial

Rechtzeitig zum Beginn des neuen Kalenderjahrs 2004 hat die Deutsche Forschungsgemeinschaft die – ungekürzten – Mittel für den Sonderforschungsbereich zugeteilt. Die Endabrechnung für 2003 ist nahezu abgeschlossen und wird im März termingerecht der DFG zugehen.

Bei den SFB-Mitgliedern haben sich – nach dem Weggang von Herrn Kollegen Limberg nach Berlin – weitere Änderungen ergeben: In Mitgliederversammlungen wurden einstimmig als neue Mitglieder in den SFB aufgenommen Prof. Lutz Gade (Anorganisch-Chemisches Institut, Lehrstuhlnachfolger von Kollegen Siebert), Prof. Sven Doye (Organisch-Chemisches Institut, Nachfolger von B. Breit) und Frau Dr. Doris Kunz (Organisch-Chemisches Institut, Emmy-Noether Stipendiatin und Habilitandin im AK Hofmann). Verlassen hat uns auf Grund eines Rufs auf einen Lehrstuhl für Physik an der Universität Bielefeld Priv.Do. Dr. Markus Sauer (Physikalisch-Chemisches Institut), der bisher an Teilprojekt C6 beteiligt war und in Kürze durch einen Nachfolger am Lehrstuhl Wolfrum ersetzt werden wird. Besonders erfreulich ist auch, dass der Projektantrag von Herrn Prof. Jäschke aus dem Institut für Pharmazie und Molekulare Biotechnologie (IPMB) der Fakultät für Biowissenschaften, den wir nach seinem Wechsel nach Heidelberg als kooptiertes Mitglied unserer Fakultät und als SFB-Mitglied aufgenommen hatten, und der von der DFG die Möglichkeit eines Nachantrags für die laufende Förderperiode unseres SFB eingeräumt bekam, positiv begutachtet wurde. Das Forschungsvorhaben konnte am 1. August 2003 als Teilprojekt B5 „Selektive Hybridkatalysatoren auf Nukleinsäurebasis“ innerhalb des Projektbereichs B „Stereoselektive Katalyse“ bei Bewilligung in vollem Antragsumfang begonnen werden. Die neuen SFB-Mitglieder Gade und Doye haben sich im Rahmen von Werkstattgesprächen vorgestellt, Frau Dr. Kunz wird dies im April tun. Alle drei werden mit ihren Projektanträgen bei der Fortsetzungsbegutachtung im Jahr 2005 eine wichtige Verstärkung unseres SFB sein.

Seit Juli 2003 hat Frau Kerstin Windisch das Sekretariat der Geschäftsstelle des SFB übernommen und führt ihre Tätigkeit seitdem äußerst kompetent, effizient und engagiert aus.

Die englische Web-Präsentation des SFB ist mittlerweile fertiggestellt (<http://www.sfb623.uni-hd.de>) und wir verdanken ihre Erstellung Frau S. Franz, Frau Dr. Kunz, Frau Windisch und Dr. Frank Rominger, der die Seiten im Netz pflegt.

Die Planung von Werkstattgesprächen, Gastvorträgen und von Aufenthalten von Gastwissenschaftlern mit jeweils mehreren Vorträgen für das laufende Jahr 2004 ist bereits relativ weit fortgeschritten. Nach den Werkstattgesprächen vom 16.01., 30.01. und 20.02. sowie nach den Vorträgen von Prof. David Tanner und Prof. Pierre Braunstein am 03. und 13.02. wird Prof. Antonio Togni von der ETH Zürich am 25., 26. und 27.02. drei Vorträge halten, gefolgt von einem Gastaufenthalt von Prof. Peter Chen, ebenfalls ETH Zürich, der drei Vortragstermine am 17., 18. und 19.03. wahrnehmen wird. Als weitere Vortragende konnten inzwischen gewonnen werden Prof. Paul Knochel (LMU München), Prof. Ilme Schlichting (MPI für Medizinische Forschung, Heidelberg), Prof. Jörn Manz (Freie Universität Berlin) sowie Prof. Ed Solomon (Stanford University, USA). Die Vortragstermine werden jeweils rechtzeitig bekannt gegeben werden und finden sich, soweit schon festgelegt, nachstehend auch in diesem Newsletter.

Als weitere wichtige Termine dieses Jahres sind festzuhalten zum einen ein gemeinsamer Workshop zusammen mit dem Sonderforschungsbereich 624 „Template – vom Design chemischer Schablonen zur Reaktionssteuerung“ der Universität Bonn, der am 07. und 08.06. in Bonn stattfinden wird, der von den Bonner Kollegen organisiert wird, und zu dem außer uns auch noch externe Vortragende eingeladen werden. Unser eigener Workshop für 2004, der im Antragsprogramm des SFB verankert ist, wird vom 11. bis 14.10. im Tagungszentrum Waldhotel Zollernblick in Freudenstadt im Schwarzwald stattfinden. Er wird von uns organisiert und ist als gemeinsame Veranstaltung von insgesamt vier Sonderforschungsbereichen konzipiert, deren Zusagen bereits vorliegen. Diese anderen drei Sonderforschungsbereiche, nämlich der Bonner SFB 624 (s. oben), der SFB 583 „Redoxaktive Metallkomplexe – Reaktivitätssteuerung durch molekulare Architekturen“ der Erlanger Chemie und der SFB 436 „Metallvermittelte Reaktionen nach dem Vorbild der Natur“ der Friedrich-Schiller-Universität Jena befassen sich in Teilbereichen ebenfalls mit Aspekten der Katalyse und werden mit entsprechenden Teilprojekten und Postern bzw. entsprechenden Vorträgen an unserem Schwarzwald-Workshop mitmachen. Auch wir werden versuchen, zu dieser Veranstaltung möglichst prominente und interessante externe Vortragende zu gewinnen.

Erwähnt sei weiterhin, dass sich unser Sonderforschungsbereich durch die Übernahme der Finanzierung eines Vortrags von Prof. Reetz, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim, an der Tagung des Heidelberger Jung-

chemikerforums beteiligen wird, bei der Prof. Reetz am 30.03. vortragen wird.

Die Fakultät für Chemie und Geowissenschaften und der Senat der Ruperto Carola unserer Universität haben vor einiger Zeit beschlossen, an Herrn Prof. Hans H. Brintzinger, Universität Konstanz, eine Ehrendoktorwürde zu verleihen. Seine wissenschaftlichen Verdienste in diesem Newsletter zu würdigen, hieße sicherlich Eulen nach Athen tragen. Die Verleihung wird im Rahmen einer Festveranstaltung im Sommer geschehen, die eingerahmt werden soll von Vorträgen renommierter Wissenschaftler in einem vom SFB getragenen Begleitprogramm dieser Ehrenpromotion. Der Termin der Veranstaltung wird noch festgelegt. Am 18. und 19. März 2005 wird unser Sonderforschungsbereich zusammen mit der Akademie der Wissenschaften Leopoldina ein Meeting zum Thema „Dendrimere und Katalyse“ veranstalten, für das Prof. Gade (zusammen mit Herrn Kollegen Werner aus Würzburg) verantwortlich zeichnet.

In diesen Tagen läuft die endgültige Testung und Abnahme unseres High-Throughput Synthese- und Screening-Roboters Accelerator der Firma Chemspeed, und wir werden in nächster Zukunft im Rahmen einer nochmaligen Schulung die ersten Experimente mit diesem Gerät, das von Frau Uta Wiesinger betreut wird, ausführen können. Es ist vorgesehen, denjenigen Teilprojekten des Sonderforschungsbereichs, die an der Beantragung des Großgeräts beteiligt sind und die Finanzierung mittragen, eine Informationsveranstaltung anzubieten, in der das Gerät und seine Funktionsweise vorgestellt werden sollen, und bei der die Modalitäten und Regelungen für die Benutzung des Accelerators festgelegt werden.

Es sei bereits heute darauf hingewiesen, dass spätestens ab Oktober 2004 mit der Erstellung des Berichtsbandes und des Fortsetzungsantrags für die Begutachtung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft im Jahr 2005 begonnen werden muss. Ergebnisband und Projektantrag müssen im Januar 2005 bei der DFG eingereicht werden, so dass Ende März/Anfang April 2005 die Vorort-Begutachtung in Heidelberg stattfinden kann. Nach den neuen Vorgaben der DFG wird der Fortsetzungsantrag einen Zeitraum von 4 Jahren umfassen.

In diesem Zusammenhang ist es besonders wichtig, darauf hinzuweisen, dass bei der anstehenden Begutachtung insbesondere die Frage nach der sichtbaren Kooperation innerhalb des SFB, sei es im Rahmen von direkten Kooperationsprojekten oder von in Aussicht gestellten Zusammenarbeiten unabhängiger Teilprojekte, für die Gutachter und für die DFG von ganz entscheidender Bedeutung sein werden. Es ist deswegen unabdingbar, solche Kooperationen – sofern nicht bisher schon geschehen – zu intensivieren und auch klar dokumentierbar zu machen.

Abschließend bleibt als erfreuliche Neuigkeit festzuhalten, dass sich entgegen bisherigen Ankündigungen auch das Land Baden-Württemberg weiterhin an der Finanzierung von Großgerätebeschaffungen für Sonderforschungsbereiche im Rahmen des HFBG-Verfahrens beteiligen wird.

Prof. Dr. P. Hofmann

Sprecher des SFB 623, Herausgeber *HeidelCat*

Anstehende Termine 2004

25. – 27. Februar: Gastprofessur

Prof. Dr. Antonio Togni

Department of Chemistry and Applied Biosciences Swiss Federal Institute of Technology (ETH) Zürich

1. Vortrag: Mi., 25. 02., 11 Uhr c.t., Kleiner Hörsaal

„*Transition-Metal-Catalyzed Enantioselective Electrophilic Halogenation and Hydroxylation Reactions*“

2. Vortrag: Do., 26. 02., 11 Uhr c.t., Kleiner Hörsaal

„*Catalytic Asymmetric Hydroamination: Experimental and Computational Studies*“

3. Vortrag: Fr., 27. 02., 11 Uhr c.t., Hörsaal der Geologie (Museum), INF 235

„*Electronic Effects in Asymmetric Catalysis Using Ferrocenyl Ligands. Experimental and Computational Studies*“

15. – 20. März: Gastprofessur

Prof. Dr. Peter Chen

Laboratorium für Organische Chemie, Eidgenössische Hochschule (ETH) Zürich

1. Vortrag: Mi., 17. 03., 11 Uhr c.t., Kleiner Hörsaal

„*Organometallic Chemistry by Electrospray Ionization Tandem Mass Spectrometry: High-Valent Oxo Complexes, Diolates, Metallaoxetanes and Carbenes*“

2. Vortrag: Do., 18. 03., 11 Uhr c.t., Kleiner Hörsaal

„*Mechanism of Asymmetric Hydrogenation by Noyori's Ruthenium Catalyst: Structural, Spectroscopic, and Kinetic Studies.*“

3. Vortrag: Fr., 19. 03., 11 Uhr c.t., Kleiner Hörsaal

„*C-H Activation by Pt (II) Complexes in the Gas-Phase and in Solution*“

26. März: 12. Werkstattgespräch: 11 Uhr c.t., Kleiner Hörsaal

Teilprojekt C3: AK Prof. Krämer

Teilprojekt C6: AK Prof. Wolfrum/Prof. Krämer/Dr. Herten

30. März: Vortrag von Prof. Manfred T. Reetz

14 Uhr 30, Großer Hörsaal

Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim/Ruhr
-SFB-Vortrag im Rahmen der Tagung des Jungchemikerforums

16. April: Vortrag von Prof. Paul Knochel

11 Uhr, c.t., Kleiner Hörsaal

Fakultät für Chemie und Pharmazie, Dept. Chemie, Ludwig-Maximilians-Universität, München

30. April: 13. Werkstattgespräch

Neuvorstellung von Dr. Doris Kunz

Teilprojekt D5: Dr. Stephan Pitter

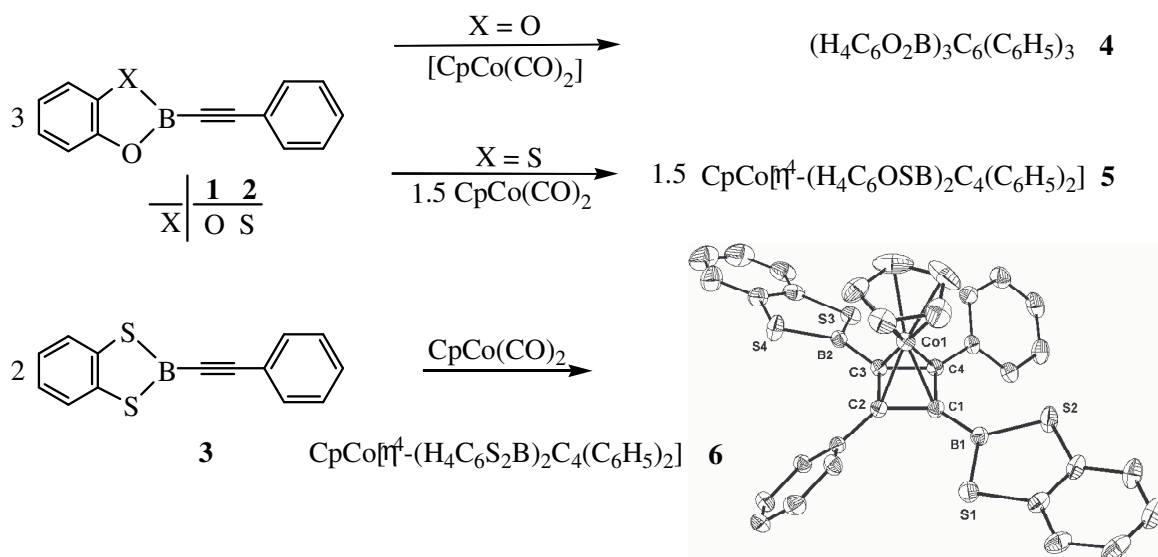
Cobalt-Mediated Cyclooligomerization Reactions of Borylacetylenes

A. Goswami, H. Pritzkow, W. Siebert

We have reported reactions of mono^[1] and diborylacetylenes^[2] with catalytic as well as stoichiometric amounts of [CpCo(CO)₂] which resulted in [2+2+2] cyclo-trimerizations of catecholborylacetylenes **1** and bis(catecholboryl)acetylenes. However, treatment of sulfur-bound monoborylacetylenes **2**, **3** with stoichiometric amounts of [CpCo(CO)₂] opened a long sought route^[3] to the new class of boryl-substituted (η^4 -cyclobutadiene)cobalt complexes **5** and **6**. An isomeric mixture (*cis*, *trans*) of (η^4 -cyclobutadiene)cobalt complexes **6** is obtained in the cobalt-mediated reactions of dithiocatecholborylacetylenes **3**. In an analogous manner, an isomeric mixture of (η^4 -cyclobutadiene)cobalt complexes **5** is achieved by reacting 1,3,2-benzothioxaborolyl-2-phenyl-acetylene **2** with a stoichiometric amount of [CpCo(CO)₂]. In addition, the presence of the trimerization product has been proved by

mass spectrum. Compounds **4**, **5** and **6** are characterized by spectroscopic and analytical data, as well as by a single crystal X-ray diffraction analysis for **6**. Analogous bisborylacetylenes have been found to follow the same reactivity pattern.

It is surprising that by changing the heteroatom(s) bound to boron causes a remarkable difference in the reactivity of **2** and **3** compared to that of **1** and related diborylacetylenes. Most likely, this behavior of **2** and **3** arises from interactions of sulfur atom(s) with cobalt, which might prevent the formation of coordinatively unsaturated cobaltcyclopentadiene complexes (the postulated precursor en route to cyclotrimerization products). Instead of cyclotrimerization products, the (η^4 -cyclobutadiene)cobalt complexes **5** and **6** are obtained.



^[1] Y. Gu, H. Pritzkow, W. Siebert, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2001**, 373-379.

^[2] C. Ester, A. Maderna, H. Pritzkow, W. Siebert, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2000**, 1177-1184.

^[3] A. Goswami, C. J. Maier, H. Pritzkow, W. Siebert, manuscript in progress.