



HeidelCat

Newsletter des SFB 623
der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Molekulare Katalysatoren:
Struktur und Funktionsdesign



We go beyond the surface

Ausgabe 6, Januar 2005

Editorial

Rasch nähert sich der Termin der Fortsetzungsbeurteilung unseres Sonderforschungsbereichs, der von der DFG für den **5. und 6. April 2005** festgelegt wurde. Der Fortsetzungsantrag (ca. 900 Seiten), diesmal bestehend aus nur einem Band sowohl mit den Berichten über die Ergebnisse der laufenden Förderperiode 2002/2 bis 2005/1 als auch den Anträgen für die nächste, diesmal 4-jährige Finanzierungsphase 2005/2 bis 2009/1, ist im Druck und wird termingemäß zum 8. Februar bei der DFG eingereicht werden.

Es ist in erster Linie dem Engagement, der Effizienz, der Kompetenz und den guten Nerven von Dr. Claudia Meier und Frau Kerstin Windisch zu verdanken, dass die Erstellung des Antrags trotz der unvermeidlichen Schwierigkeiten im geplanten Zeitrahmen geblieben ist, und ich möchte beiden – aber auch allen anderen, die hilfreich mitgewirkt haben – hiermit im Namen aller SFB-Mitglieder hohe Anerkennung und ganz herzlichen Dank aussprechen.

Der Finanzierungsantrag umfasst in den vier wissenschaftlichen Projektbereichen A – D 18 Fortsetzungsanträge, 7 neue Teilprojekte werden beantragt, 3 Teilprojekte sind abgeschlossen. In Gesprächen mit der Hochschulleitung konnte sichergestellt werden, dass die Universität die als notwendig erachteten Verstärkung der Grundausrüstung des SFB für die neue Förderperiode zusagt. Alle Teilprojektleiter werden nach Fertigstellung und Einreichung des Antragsbandes ein Exemplar erhalten.

Die Termine für die „Probelaufe“ der Begutachtung liegen fest (**4. und 23. März**) und sind bereits am 25. 1.05 per E-Mail zusammen mit anderen wichtigen Informationen und Unterlagen (Termine für die Fertigstellung der Folien und Poster, Template für die Poster, vorläufiger Zeitplan der Begutachtung) den Teilprojektleitern mitgeteilt worden. **Es ist unverzichtbar, dass alle Teilprojektleiter an den Terminen 4. und 23. März anwesend sind.**

Auch die Gutachter der diesmaligen Evaluierungsrunde stehen nun fest: es sind die Profs. Th. Carell (LMU München), G. Erker (Münster), A. Fürstner (MPI f. Kohlenforschung Mülheim), J. Manz (FU Berlin), O. Nuyken (TU München), J. Okuda (RWTH Aachen), H.-U. Reißig (FU Berlin) und K. Wieghardt (MPI f. Bioorgan. Chemie Mülheim). Als fachnaher Berichterstatter der DFG wird Prof. F. Schüth (MPI f. Kohlenforschung Mülheim) fungieren, als fachferner Berichterstatter Prof. Poehling (Hannover). Die kursiv gesetzten Kollegen waren schon bei der Einrichtungsbegutachtung dabei.

Über alle Details und Modalitäten der Begutachtung werden wir die SFB-Mitglieder seitens der Geschäftsstelle rechtzeitig informieren.

Über das Symposium „Modern Metallocene Chemistry and Catalysis“, das der SFB am 2. Juli 2004 anlässlich der Verleihung der Ehrendoktorwürde an H. H. Brintzinger veranstaltet hat, ist inzwischen ein von Doris Kunz (OCI) verfasster Bericht in den „Nachrichten aus der Chemie“ (Oktoberheft 2004) erschienen, auf den hiermit hingewiesen sei.

Vom 12. bis 14. Oktober fand im Schwarzwald (Freudenstadt-Lauterbad) der von uns organisierte SFB-Workshop „**Advances in Molecular Catalysis**“ zusammen mit drei anderen Sonderforschungsbereichen, in denen katalyserelevante Aspekte eine Rolle spielen, statt. Die SFBs 624 („*Templates - From the Design of Chemical Templates towards Reaction Control*“, Bonn), SFB 436 („*Metal-Mediated Reactions Modelled after Nature*“, Jena) und SFB 583 („*Redox-Active Metal Complexes: Control of Reactivity via Molecular Architecture*“, Erlangen-Nürnberg) waren stark vertreten und als externe Gastvortragende sprachen **Steve Buchwald** vom MIT und **Matthias Beller** vom IfOK Rostock. Nachstehend eine Zusammenfassung für diejenigen, die nicht teilnehmen konnten. Ein kürzerer Bericht wird auch wieder in den „Nachrichten“ erscheinen.

Gemeinsamer SFB-Workshop: "Advances in Molecular Catalysis"

Die Katalyse ist sicher eine der Schlüsseltechnologien des 21. Jahrhunderts. Die molekulare Katalyse, von großtechnischen Prozessen bis zur Biokatalyse im lebenden Organismus, ist dabei ein Gebiet, dem eine entscheidende Rolle in der Grundlagenforschung und in der Anwendung zukommen wird. Die Katalyse lieferte auch die Berührungspunkte von vier aktuellen Sonderforschungsbereichen der DFG: SFB 623 „Molekulare Katalysatoren: Struktur und Funktionsdesign“ (Heidelberg), SFB 624 „Template - Vom Design chemischer Schablonen zur Reaktionssteuerung“ (Bonn), SFB 583 „Redoxaktive Metallkomplexe - Reaktivitätssteuerung durch molekulare Architekturen“ (Erlangen) und SFB 436 „Metallvermittelte Reaktionen nach dem Vorbild der Natur“ (Jena), so dass die Idee eines gemeinsamen Workshops zur Diskussion von Problemen und Ergebnissen der Katalysatorforschung, aber auch darüber hinaus, nahe lag und vom 12. – 14. Oktober 2004 in Lauterbad im Schwarzwald realisiert wurde.

Initiator, Gastgeber und Organisator dieses Workshops mit ca. 60 SFB-Teilnehmern und zwei Gastreferenten war der Heidelberger SFB 623, dessen spezifischer Forschungsfokus Molekulare Katalysatoren sind, und der die anderen drei Sonderforschungsbereiche, in denen die Katalyse in einzelnen Teilprojekten eine Rolle spielt, in den Schwarzwald einlud. Der Sprecher des Heidelberger SFB, Peter Hofmann, widmete in seinen Eröffnungsworten die Tagung zwei jüngst verstorbenen Kollegen, die im Erlanger und im Bonner SFB tragende Rollen hatten, Dieter Sellmann und Bernd Hess.

Als erster Gastredner zeigte Stephen L. Buchwald (MIT, USA) eindrucksvoll, wie kleine, gezielte Veränderungen an Phosphanliganden die Reaktivität in Pd- und Cu-katalysierten C-C- oder C-N-Verknüpfungsreaktionen stark beeinflussen können, und dass mit geeigneten Liganden auch C-O und sogar C-S Verknüpfungen ablaufen können. Der zweite Gastreferent, Matthias Beller (IfOK, Rostock) demonstrierte, wie man konkrete Probleme Pd-katalysierter Kupplungsreaktionen in der industriellen Katalyse durch gezielte Optimierung elegant lösen kann und gleichzeitig neue chemische Konzepte entwickelt und zur Anwendung bringt.

Bei den Vorträgen des Jenaer SFB spannte sich der Bogen von der Aufklärung der CO₂-Aktivierung in Zn-haltigen Enzymen mit Hilfe von DFT-Methoden (Ernst Anders) und von der Frage, wie ein Hydro-

xoligand die Koordinationzahl von Magnesiumionen in bimetallic Enzymen beeinflusst (Jennie Weston) über die Verwendung von chiralen Kohlenhydraten und Nucleosiden als Liganden für Übergangsmetallkomplexe (Michael Gottschaldt) bis hin zum Bau von Halbleiteroberflächen für eine effiziente und kontrollierte Ladungstrennung, um nach dem Vorbild der Natur aus Sonnenlicht Energie gewinnen zu können (Susann Meyer). Ein ebenso breites Spektrum bot der Erlanger Sonderforschungsbereich. Die Funktion von Superoxiddismutasen kann mit siebenfach koordinierten Eisenkomplexen nachgeahmt werden (Ivana Ivanović-Burmazović). Die Synthese isolierter molekularer Drähte sowie der Bau eines molekularen Gyroskops (John A. Gladysz) und Platin-Komplexe mit neuen chiralen P,P- und P,N-Liganden für die enantioselective Hydrierung (Lutz Dahlenburg) zeigen die ebenso Vielfalt der Forschung innerhalb dieses SFB, wie der Aufbau von Dendrimeren mit Fullerenen als Zentralbausteinen (Andreas Hirsch) und die Photokatalyse, ein Prinzip, das bei dem Abbau organischer Schadstoffe in Luft oder Wasser durch Platinkomplexe, die auf Halbleiteroberflächen gebunden sind, verwirklicht ist (Horst Kisch).

Der Heidelberger SFB zeigte ein breites Spektrum facettenreicher Katalysatorforschung. Durch ausgefeilte NMR-spektroskopische Methoden können immobilisierte Rh- und Ni-Katalysatoren (Janet Blümel) genau charakterisiert und im Verein mit DFT-Rechnungen paramagnetische, homogene Chromkatalysatoren für die Olefinpolymerisation strukturell untersucht werden (Markus Enders). Die Einzelmolekülspektroskopie kann bei der Aufklärung von Metallkomplex-Nucleotid Konjugaten nützlich sein (Roland Krämer). Oxidative Prozesse stehen bei der Synthese von Eisen-Bispidinkomplexen für die katalytische Epoxidation von Alkenen (Peter Comba) und bei Cu-vermittelten Heterocyclisierungen (Manfred Doering) im Vordergrund. Vor einigen Jahren noch undenkbar war die computerchemische Simulation von Strukturen und Reaktionen in Proteinen (Jeremy C. Smith) oder das Auffinden hochselektiver Rh-Hydroformylierungskatalysatoren durch experimentelles und quantenchemisches High-Throughput-Screening (Peter Hofmann). Die Nutzung von CO₂ als Kohlenstoffquelle steht als Idee hinter der Addition von Silanen an CO₂ (Stephan Pitter). Ebenfalls atomökonomisch sind metallkatalysierte Domino- und Multikomponentenreaktionen, durch die sehr effektiv komplexe organische Verbindungen aufgebaut werden können (Thomas J. J. Müller). Molekulare Katalysatoren können eine beachtliche Größe erreichen: die katalytische Aktivität von Antikörpern in der Diels-Alder Reaktion

wurde um die katalytische Aktivität von Ribozymen für diese Reaktion und die Strukturanalyse eines RNA-Katalysatorsystems erweitert (Andres Jäschke). Die Organisation von zwei chiralen Peptid-substituenten an Metallocenen (Nils Metzler-Nolte) zeigte Anknüpfungspunkte zum Bonner SFB 624: kugelförmige Dendrimere können als Template sehr dicht funktionalisiert werden und besitzen so ein breites Anwendungsspektrum, beispielsweise als Sensoren oder in der medizinischen Diagnostik. (Fritz Vögtle). Mit Hilfe von Templaten können auch Festkörperoberflächen kontrolliert funktionalisiert und durch Scanning Tunneling Microscopy (STM) charakterisiert werden (Klaus Wandelt). Neue Wege zur Os-katalysierten Amino- und Dihydroxylierung von Alkenen (Kilian Müniz) wurden ebenso vorgestellt, wie neue Konzepte zur Nutzung der Radikalchemie in der Organischen Synthese (Andreas Gansäuer). Ein Vortrag über theoretische Studien zur direkten und templatgesteuerten N₂-Aktivierung (Markus Reiher) verband Aspekte aller 4 Sonderforschungsbereiche.

Dieser zweieinhalbtägige Workshop - zu dessen dichtem Programm auch zwei in einem Posterband dokumentierte Postersessions gehörten - bewies, dass permanenter Gedankenaustausch nicht nur innerhalb eines Sonderforschungsbereichs sehr wichtig ist, sondern dass solche gemeinsamen Workshops jedem SFB neue Impulse geben können und die Gelegenheit bieten, über den eigenen Tellerrand hinauszuschauen. Folgekonferenzen dieser Art sind deshalb sicher auch für die Zukunft sehr attraktiv.

Doris Kunz

Aktuelle Termine 2005 im Programm des SFB 623:

25. Januar Vortrag von Prof. Karl Wieghardt,
Max-Planck-Institut für Bioanorganische Chemie,
Mülheim an der Ruhr
11 Uhr c.t., Kleiner Hörsaal, INF 252
*„Koordinationschemie mit Radikalen:
alte Probleme –neue Lösungen“*

11. Februar Vortrag Prof. E. Peter Kündig
Department of Organic Chemistry
University of Geneva, Switzerland
11 Uhr c.t., Kleiner Hörsaal, INF 252
*„Transition Metal Lewis Acids in Asymmetric
Synthesis and Catalysis“*

18. Februar Vortrag Prof. Walter Thiel
Max-Planck-Institut für Kohlenforschung,

Mülheim an der Ruhr

11 Uhr c.t., Kleiner Hörsaal, INF 252

*„Theoretische Untersuchungen zur Katalyse mit
Enzymen“*

24. – 25. Februar :

3. Deutsches Ferrocen Kolloquium

Organisiert von Prof. Thomas J.J. Müller und
Prof. Nils Metzler-Nolte in Heidelberg
-unter Mitwirkung des SFB 623-

11. März :Vortrag Prof. Kazuyuki Tatsumi
Department of Chemistry, Nagoya University,
Japan

1. Vortrag: 11 Uhr c.t., Ort: siehe Aushänge
*„Organometallic Chemistry in Metalloenzymes –
Toward Better Fe/Mo/S Clusters as Models of the
Nitrogenase Active Sites“*

2. Vortrag: 15 Uhr c.t., Kleiner Hörsaal, INF 252
*„Activation of Dihydrogen by S-Bridged
Heterodinuclear Complexes“*

18. – 19. März:

Symposium: Leopoldina Meeting

Organisiert von der Deutschen Akademie der
Naturforscher Leopoldina und SFB 623
*„Dendrimers: Platforms for
Chemical Functionality“*

25. – 30. April Gastprofessur: Prof. Larry Que
Department of Chemistry, University of Minnesota,
Minneapolis, USA
Prof. Que wird voraussichtlich 2–3 Vorträge halten

4. Juli:

Schüler HFMC 2005:

als Vorveranstaltung des Heidelberg Forum of
Molecular Catalysis 2005

07. – 08. Juli:

Heidelberg Forum of Molecular Catalysis 2005

Mit Vorträgen von

Prof. Amir H. Hoveyda,

Department of Chemistry, Merkert Chemistry Cen-
ter, Boston College, Massachusetts, USA

Prof. Gregory Fu

Department of Chemistry, Massachusetts Institute
of Technology, Cambridge, USA

Prof. David W. C. McMillan

California Institute of Technology, Pasadena, USA

und Verleihung des **BASF Catalysis Award 2005**