

VORTRAG IM RAHMEN DES SONDERFORSCHUNGSBEREICHS 623
DER UNIVERSITÄT HEIDELBERG
MOLEKULARE KATALYSATOREN: STRUKTUR UND FUNKTIONSDSIGN

Freitag, 25. Juli 2003, 11.00 Uhr

Kleiner Hörsaal, Im Neuenheimer Feld 252

Dr. Ansgar Schäfer

BASF AG, Ludwigshafen

"Der Einsatz quantenchemischer Methoden in der industriellen Entwicklung homogener Katalysatoren"

Abstract:

An Katalysatoren für großtechnische chemische Prozesse werden hohe Anforderungen gestellt, damit die Verfahren wirtschaftlich arbeiten. Hohe Aktivität und Selektivität bei gleichzeitig hoher Stabilität sind hierbei die wesentlichen Kriterien. In Bereich der homogen katalysierten Reaktionen lassen sich diese Eigenschaften durch die Entwicklung maßgeschneiderter Katalysatormoleküle für die jeweilige Reaktion bzw. das gewünschte Produkt optimieren. Die Katalysatoren sind in der Regel metallorganische Verbindungen mit komplexen Liganden, deren Synthese meist sehr aufwendig ist. Zur Beschleunigung dieses Entwicklungsprozesses werden heute routinemäßig Methoden des Molecular Modeling und der Quantenchemie eingesetzt. Die Berechnung der freien Energieprofile der Reaktionsmechanismen ist inzwischen ohne Vereinfachungen in der Struktur der Katalysatorkomplexe durchführbar, wodurch quantitative Vergleiche von Katalysatoren und damit eine Fokussierung der experimentellen Arbeiten auf die aussichtsreichsten Kandidaten möglich werden. Diese Vorgehensweise wird am Beispiel der Hydroformylierung gezeigt.

Gäste sind herzlich willkommen.

Bei Interesse an einem Gesprächstermin bitte melden im:
Büro des SFB 623 Tel.: 06221-54-8427 Fax: 06221-54-8398

DER SPRECHER
gez. P. Hofmann