

Wie lässt sich Kohlenstoffdioxid ( $\text{CO}_2$ ) mit geringem Energieaufwand aus der Luft abscheiden und als nachhaltige Kohlenstoffquelle in der Synthesechemie einsetzen? Hat Schwefelhexafluorid ( $\text{SF}_6$ ) das Potenzial zum neuartigen Fluorierungsreagenz? Lassen sich ausgehend von Biodiesel wertvolle Chemikalien herstellen? Kann molekularer Wasserstoff ( $\text{H}_2$ ) als Energiespeicher dienen? Diese spannenden Forschungsfragen, mit denen sich meine Arbeitsgruppe gegenwärtig befasst, vereint eine grundsätzliche Gemeinsamkeit: Die betrachteten Moleküle sind weitgehend unreaktiv. Dies hat zur Folge, dass ihre chemische Umwandlung als Schlüsselschritt meist eine energieaufwendige Aktivierung erfordert. Eine zentrale Herausforderung, damit die Umwandlung der Moleküle in effizienter und selektiver Weise erfolgen kann, besteht darin, grundlegende Konzepte für die Bindungsaktivierung zu erarbeiten.

Vor diesem Hintergrund ist die Entwicklung neuer Methoden für die Aktivierung und katalytische Umwandlung besonders reaktionsträger Moleküle ein zentraler Aspekt unserer gegenwärtigen Forschungsaktivitäten. Ziel ist es, zum grundlegenden Verständnis der Chemie dieser Moleküle beizutragen und sie außerdem als Bausteine für chemische Reaktionen verfügbar zu machen – idealerweise im Zuge eines katalytischen Prozesses. Wir wollen dadurch neue Wege hin zu nachhaltigen Transformationen beschreiten und hoffen, einen Beitrag zu den globalen Herausforderungen Energiekonversion und Klimawandel leisten zu können.

Folgende Schwerpunkte sind Gegenstand aktueller Forschungsaktivitäten meiner Arbeitsgruppe:

### **Abscheidung und Fixierung von $\text{CO}_2$**

Die selektive und energieeffiziente Abtrennung von Kohlenstoffdioxid ( $\text{CO}_2$ ) aus Gasgemischen (Kraftwerksabgase oder Luft) und die nachfolgende Umwandlung von  $\text{CO}_2$  in nützliche Produkte ist eine wichtige Zielsetzung, um die Konzentrationen des Treibhausgases in der Atmosphäre zu verringern. In diesem Zusammenhang wird in meiner Arbeitsgruppe das Reaktionsverhalten verschiedener Stickstoffbasen mit  $\text{CO}_2$  untersucht. Ziel ist die Entwicklung eines Materials, das  $\text{CO}_2$  selektiv aus der Luft filtern kann, ohne dabei Feuchtigkeit mit aufzunehmen. Es ist anzunehmen, dass die Freisetzung von  $\text{CO}_2$  von einem solchen Material

mit deutlich geringerem Energieaufwand abläuft, da die Verdampfungswärme von Wasser nicht aufgewendet werden muss. Eine Strategie hierzu umfasst die Bildung von reversiblen CO<sub>2</sub>-Addukten mit speziellen Stickstoffbasen (Imidazolimininen). Über die Variation der strukturellen Parameter dieser Verbindungsklasse lassen sich wichtige Parameter einstellen wie die zur Freisetzung von CO<sub>2</sub> benötigte Temperatur und die Stabilität der CO<sub>2</sub>-Addukte in Gegenwart von Wasser. Die nachfolgende katalytische Umsetzung von CO<sub>2</sub> in wertvolle Produkte ist eine weitere Zielsetzung.

### **Synthese reaktiver Hauptgruppenverbindungen**

Ein intensiv bearbeiteter Forschungsschwerpunkt liegt in der Synthese und der Untersuchung der Eigenschaften von reaktiven Hauptgruppenverbindungen. Unter Ausnutzung spezieller Substituenteneffekte versuchen wir, ungewöhnliche Bindungssituationen hervorzurufen und somit die Reaktivität von molekularen Hauptgruppenverbindungen erheblich zu steigern. Beispielsweise entwickelten wir eine Methode, wie sich die Basizität von Phosphanen erheblich steigern lässt. Phosphane haben eine herausragende Bedeutung als Liganden in der homogenen Katalyse und werden als Reagenzien in einer Reihe von chemischen Reaktionen eingesetzt. Unsere Entdeckung eröffnet nicht nur neue Perspektiven für die vielen Bereiche der synthetischen Chemie, in denen Phosphane eingesetzt werden, sondern macht zudem völlig neue Anwendungsgebiete zugänglich. So wurde eine Möglichkeit zur Aktivierung und selektiven Fragmentierung von Schwefelhexafluorid (SF<sub>6</sub>) aufgezeigt. SF<sub>6</sub> ist ein ausgesprochen reaktionsträges, jedoch hochgradig klimaschädliches Gas, das in vielen Bereichen der Industrie und Medizin als Abfallprodukt anfällt. Die neuartige Methode der chemischen Aktivierung von SF<sub>6</sub> durch Lewis-Basen ermöglicht erstmals einen metallfreien, vollständigen Abbau des Treibhausgases SF<sub>6</sub> und verspricht neue Anwendungsmöglichkeiten für SF<sub>6</sub> als Fluorierungsmittel in der Synthesechemie.

### **Ligandendesign und Katalyse**

Ein weiterer Schwerpunkt beinhaltet die Entwicklung von Katalysatoren, die aus einem oder mehreren Metallatomen und einem kooperierenden Ligandensystem bestehen. Das Konzept der Metall-Ligand-Kooperativität ist von der Funktionsweise biologischer Katalysatoren, den Enzymen, inspiriert und basiert auf dem Prinzip der simultanen Aktivierung von Molekülen an verschiedenen Bindungsstellen eines Katalysators. Durch dieses Zusammenspiel von Metallzentren und Liganden können besonders starke chemische Bindungen in Molekülen aktiviert und mit hohen Geschwindigkeiten und Selektivitäten umgesetzt werden. Vor diesem Hintergrund entwickeln wir Kupfer-basierte Hydrierkatalysatoren, die auf dem Prinzip der kooperativen Aktivierung von molekularem Wasserstoff (H<sub>2</sub>) arbeiten und zur Verwendung von H<sub>2</sub> als Energieträger beitragen könnten. Ein weiteres Projekt umfasst die Entwicklung

eines Katalysators zur selektiven Spaltung einer C-O-Bindung in Fettsäuremethylestern (Biodiesel), wodurch die Verwendung dieses nachwachsenden Rohstoffs in der Synthesechemie ermöglicht werden soll. Konkrete Anwendungen haben unsere Katalysatoren bereits auf dem Gebiet der Polyurethansynthese gefunden. In Kooperation mit der BASF Coatings GmbH wurde ein äußerst aktiver multimetallischer Katalysator entwickelt, der das Potenzial hat, die bisher verwendeten giftigen zinnorganischen Katalysatoren in vielen Anwendungsbereichen zu ersetzen.