

Unsere Forschung

Lichtgetriebene Katalyse nutzt sichtbares Licht, um chemische Reaktionen schonend und energieeffizient anzutreiben. Sie gilt als ein vielversprechender Ansatz der Green Chemistry, da sie auf erneuerbare Energie setzt, umweltschädliche Reagenzien oder hohe Temperaturen vermeidet und dadurch im Sinne der Nachhaltigkeit steht. In diesem Projekt wurde die photo-katalytische Hydrierung von Anthracen mit einem Rhodium-Katalysator (siehe Abb. 1) untersucht und so eine selektive, nachhaltige Umwandlung unter milden Bedingungen entwickelt.

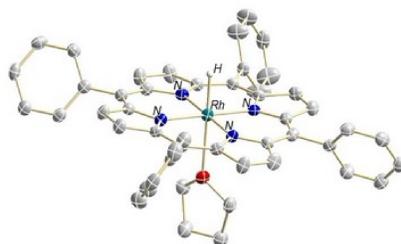
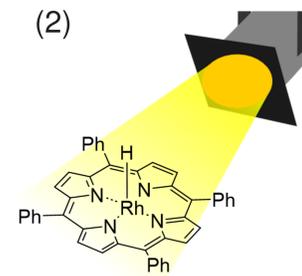
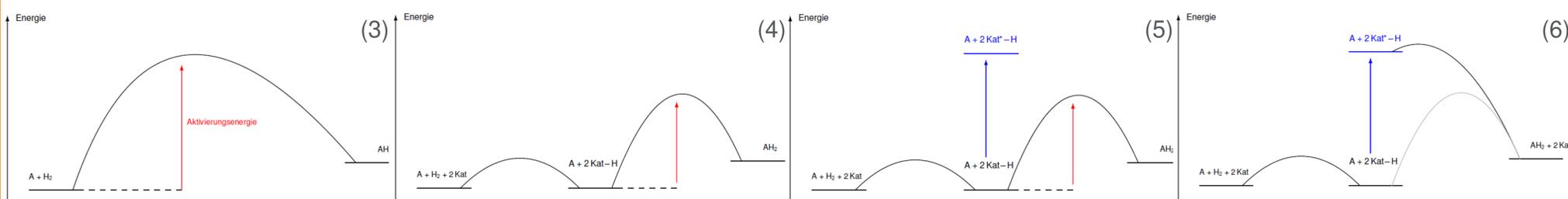


Abb. 1: Kristallstruktur des Katalysators

Für die lichtgetriebene Katalyse wurde zunächst ein Katalysator synthetisiert (siehe Abb. 1 & 12). Dieser konnte während des Forschungsprojektes vollumfänglich charakterisiert werden. Mittels des Katalysators war anschließend die photokatalytische Hydrierung von Anthracen möglich.



Lichtgetriebene Katalyse



(3) Die Hydrierungsreaktion $A + H_2 \rightarrow AH_2$ besitzt eine hohe Aktivierungsenergie, sodass sie nicht freiwillig ablaufen wird.

(4) Um die Aktivierungsenergie zu senken, kann man einen Katalysator verwenden. Dieser kann molekularen Wasserstoff H_2 spalten und binden. Für die darauffolgende Übertragung des Wasserstoffs auf das Zielmolekül A ist jedoch immer noch eine vergleichsweise hohe Aktivierungsenergie vonnöten.

(5) Durch die Anregung des Katalysatormoleküls $Kat-H$ mit Licht erhält das Molekül eine höhere Energie. (6) Der angeregte Zustand des Katalysators Kat^*-H kann das Wasserstoffatom mithilfe der aus dem Licht stammenden Energie auf das Zielmolekül übertragen und man erhält das Produkt AH_2 . Durch die Aufnahme der Lichtenergie läuft die Reaktion freiwillig ab.

Synthese

Der für das Forschungsprojekt verwendete Katalysator wurde mittels mehrstufiger Synthese hergestellt (siehe Abb. 7). Zu sehen ist eine vereinfachte Darstellung der Reaktionsschritte. Da der Katalysator luft- und wasserempfindlich ist, war es notwendig unter Schutzgas (wie bspw. Argon) in einer Glovebox oder unter Vakuum zu arbeiten.

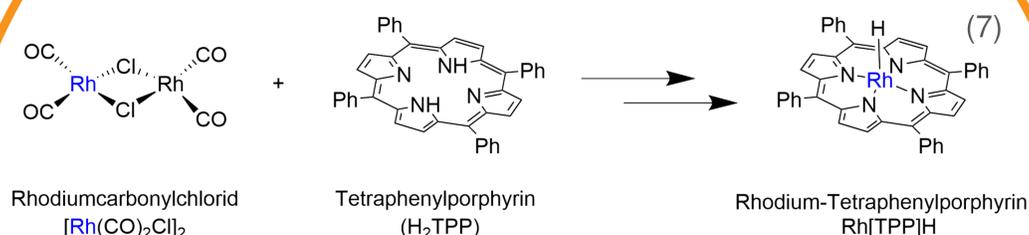
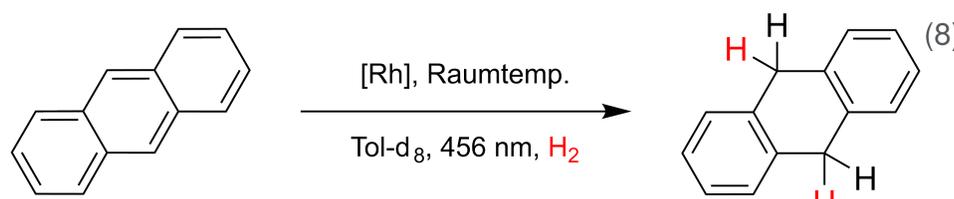


Abb. 7: Syntheseweg; B. B. Wayland, S. Ba et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 1991, 113, 5305-5311

Katalyse



Menge Katalysator / mol%	Reaktionszeit / Std.	Anthracen hydriert / %	Anthracen übrig / %
5	24	21	36
10	24	90	2

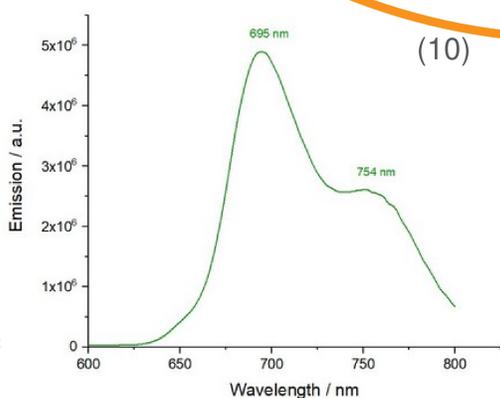
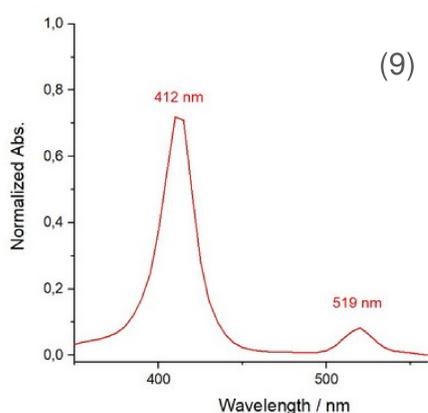
Tabelle 1: Ergebnisse der Katalyse.

Reaktionsgemisch wurde für jeweils 24 Std. mit blauem Licht ($\lambda = 465 \text{ nm}$) beschienen.

Methoden

Zur Aufklärung unseres Katalysators wurden verschiedene Methoden genutzt, die jeweils unterschiedliche Informationen bereitstellen:

- NMR zur Aufklärung der Struktur und Reinheit der Substanz
- Absorption/Emission zur Feststellung der Art der Anregung (siehe Abb. 9 & 10)
- IR zur Aufklärung der Bindungsstärken
- Röntgenstrukturanalyse zur Aufklärung der Struktur im Kristall



Fazit

Der Katalysator konnte erfolgreich charakterisiert und zudem die photokatalytische Aktivität nachgewiesen werden. Von zukünftigem Interesse ist die Aufklärung des exakten Ablaufs des Reaktionsmechanismus. Dafür werden die Reaktionsparameter angepasst:

- Wasserstoff (H_2)-Druck
- Katalysatorkonzentration
- Wellenlänge des Lichts
- andere Lösungsmittel

Mithilfe des FoLL-Projekts haben wir viele neue theoretische und praktische Grundlagen der Chemie kennengelernt.



Abb.11-13: Synthese, der fertige Katalysator und das Arbeiten an der Glovebox