



Leibniz-Institut für Katalyse

LIKAT Rostock



Leibniz-Institut für Katalyse

LIKAT Rostock

ZWEIJAHRESBERICHT
2021 | 2022

IMPRESSUM

Herausgeber:

Leibniz-Institut für Katalyse e. V.
LIKAT Rostock
Albert-Einsteinstraße 29 A
18059 Rostock
www.catalysis.de
Tel.: +49 381 1281-0
info@catalysis.de

Redaktion:

Dr. Martha Höhne
Tel.: +49 381 1281-382
martha.hoehne@catalysis.de

Fotos:

LIKAT/nordlicht (soweit nicht anders gekennzeichnet),
Abbildungsverzeichnis S. 143

August 2023

2 Zweijahresbericht 2021 | 2022



VORWORT

Chemie im Umbruch



Prof. Dr. Matthias Beller, *wissenschaftlicher Direktor* (rechts) und Dr. Mirko Kirschkowski, *kaufmännischer Direktor* (Foto: LIKAT)

Die Weltgemeinschaft macht sich für eine „grüne Wende“ stark, um den Klimawandel aufzuhalten und die natürlichen Ressourcen zu schonen. Nachwachsende Rohstoffe sollen die fossilen ersetzen – in kompletten Industrien ebenso wie im Alltag der Menschen. Deutschland verpflichtet sich bis zum Jahr 2045 zur Klimaneutralität. Und das Leibniz-Institut für Katalyse Rostock kann Wesentliches zu all diesen Herausforderungen beitragen. Denn die Katalyse zählt zu den Schlüsseltechnologien für die Umstellung von Wirtschaft, Alltag und Gesellschaft auf eine nachhaltige Basis.

Katalysatoren ermöglichen neue Verfahren und Kreislaufprozesse, die für ein klimaneutrales Wirtschaften essenziell sind. Im LIKAT erforschen mehr als 300 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter die Grundlagen dafür. Hierzulande entstehen 97 Prozent aller Produkte durch chemische Verfahren, und bei vier von fünf dieser Reaktionen sind Katalysatoren im Spiel. Mit ihnen gelingt die Umwandlung von Rohstoffen, und zwar zunehmend aus nachhaltigen Quellen, in Basischemikalien wie Wasserstoff und Methanol sowie in recycelbare, kreislauffähige Chemikalien und Materialien.

Nehmen wir Wasserstoff. Das Gas ist einer der Hoffnungsträger der Klima- und Energiewende, und das LIKAT verfügt auf diesem Feld über vielfältige Expertisen. Zum Beispiel entwickelten Institutsangehörige im Berichtszeitraum gemeinsam mit industriellen Partnern ein katalytisches System, das nach dem Batterie-Prinzip H_2 chemisch speichert und in hochreiner Form wieder abgibt. Diese „Wasserstoff-Batterie“, kombiniert mit Photovoltaik oder Windkraft, kann klimaneutrale Konzepte etwa in ländlichen Regionen unterstützen. Sie verwertet außerdem atmosphärisches CO_2 .

Forschung von hoher Qualität zu industrierelevanten Grundlagenthemen zählt zu den Stärken des LIKAT, sichtbar in etlichen gemeinsam mit Industriepartnern angemeldeten Patenten und Pilotprozessen. Jährlich bearbeitet das Institut rund 50 bi- oder multilaterale Projekte mit Industriebeteiligung. In den Jahren 2021 und 2022 legten die LIKAT-Forscherinnen und -Forscher die Basis für insgesamt 55 Patente und zwei Überführungen in den industriellen Pilotmaßstab bzw. direkt in die industrielle Produktion. Hervorgehoben seien die Kooperationen mit Evonik Industries, mit Henkel und Symrise. 2022 wurde ein Rahmenvertrag mit Apex Energies unterzeichnet, einem auf Wasserstofftechnologien spezialisierten Unternehmen aus der Region.

Daneben dehnt das LIKAT seine Forschungsaktivitäten auch auf vielversprechende neue Felder aus, um grundlegende Forschungsergebnisse in die Anwendung zu bringen. Ein Beispiel dafür ist die Elektrochemie, mit deren Hilfe u.a. unverzichtbare molekulare Bausteine aus CO_2 und grünem H_2 gewonnen werden können. Und das neue institutseigene Technikum *Catalysis2Scale* bietet den Angehörigen unseres Instituts und Partnern eine im Nordosten Deutschlands einzigartige Möglichkeit, Erkenntnisse aus dem Labor selbst im Pilotmaßstab zu überprüfen. Damit wird das LIKAT noch besser als bisher den in seiner Satzung verankerten Auftrag erfüllen können: Spitzen-Grundlagenforschung zu betreiben und Erkenntnisse daraus einer Anwendung zuzuführen. Und zwar auch unter schwierigen Bedingungen, wie wir während der Corona-Pandemie zeigten. Selbst in Zeiten des Lockdowns hielt das LIKAT mit einer Belegschaft aus 36 Ländern seinen Forschungsbetrieb in den Labors aufrecht.

In der öffentlichen Wahrnehmung steht die Chemie immer noch als Emittent von Treibhausgasen und als Energie-Großverbraucher in der Kritik, und ja, sie ist über viele Jahrzehnte Teil des Problems gewesen. Dennoch es wird keine Lösungen der vielfältigen technologischen und gesellschaftlichen Herausforderungen ohne sie geben. Um nachhaltig zu wirtschaften, die Weltbevölkerung zu ernähren, zukünftige Pandemien und derzeit noch nicht heilbare Krankheiten zu therapieren sowie die anfangs genannten Klimaziele zu erreichen, braucht es verbesserte chemische Technologien und neue verbesserte Katalysatoren. Als Institut der Leibniz-Gemeinschaft will das LIKAT dazu seinen Beitrag zum Nutzen unserer Gesellschaft leisten.

Matthias Beller

Mirko Kirschkowski



(Foto: LIKAT/Thomas Müller)

BLICK INS HEFT

2021 & 2022 im Rückblick S. 8

Das LIKAT in Zahlen..... S. 12

Organigramme S. 13

Forschungsauftrag..... S. 14

Forschungsstruktur..... S. 16

 Themenfelder 01 - 07

Aktuelle Projekte S. 27

Themengruppen S. 45

 Angewandte Carbonylierungen
 (R. Jackstell) S. 46

 Nachhaltige Redoxreaktionen
 (K. Junge) S. 47

 Theorie der Katalyse
 (H. Jiao) S. 48

 Katalyse für Energietechnologien
 (H. Junge) S. 49

 Katalyse für Life Sciences
 (H. Neumann) S. 50

 Katalyse später Übergangsmetalle
 (T. Beweries) S. 52

 Katalyse früher Übergangsmetalle
 (F. Reiß) S. 53

 Mechanismen der homogenen Katalyse
 (H.-J. Drexler) S. 54

 Katalytische Funktionalisierungen
 (J. Pospech) S. 55

 Reaktionstechnik
 (D. Linke) S. 57

 Reaktionsmechanismen
 (E. Kondratenko) S. 58

 Hochdurchsatztechnologien
 (U. Rodemerck) S. 59

 Aktivierung kleiner Moleküle (jetzt: Kat. mit P-haltigen
 Materialien)
 (C. Hering-Junghans) S. 60

 Selektive katalytische Synthesemethoden
 (S. Tin) S. 61

 Synergie zw. homo- & heterogener Katalyse
 (J. Rajenahally) S. 62

 Struktur-Wirk-Beziehungen
 (J. Strunk) S. 64

 Mikroverfahrenstechnik
 (N. Steinfeldt) S. 65

 Photokatalytische CO₂-Reduktion
 (T. Peppel) S. 66

 Magn. Resonanz- & Röntgenmethoden
 (J. Rabeah) S. 68

 Optische *in situ* Spektroskopie
 (C. Kubis) S. 69

 Anorganische Funktionsmaterialien
 (S. Wohlrab) S. 70

 Technologieorientierte Verfahren
 (U. Armbruster) S. 71

 Oberflächenchemie der angewandten Katalyse
 (A. Abdel-Mageed) S. 72

 Molekulare Elektrochemie
 (R. Francke) S. 74

 Katalysatordesign für die Elektrosynthese
 (B. Müller) S. 75

 Polymerchemie & Katalyse
 (E. Mejía) S. 76

 Biokatalyse
 (U. Kragl) S. 77

 Katalyse zu Heterocyclen
 (X.-F. Wu) S. 78

 Hydrierungen & Hydroformylierungen
 (J. Holz) S. 79

Nachwuchsgruppen..... S. 81

 Theorie der homogenen & Biokatalyse
 (M. Feldt) S. 82

 Moderne organische Synthesemethoden
 (O. El-Sepelgy) S. 83

„Uni in Leibniz“ S. 84

 Assoziierte Hochschul-
 forschungsguppen

Servicebereich Analytik..... S. 94

Personalia..... S. 96

Öffentlichkeit S. 101

 Aus der Presse

Transfer S. 110

 Transfertechnikum
 „Catalysis2Scale“

Gleichstellung S. 114

Abschlüsse S. 115

**Gremien, Organe, Services,
& Vertretungen**..... S. 116

Matrixstruktur S. 117

Publikationen S. 119

Januar

LIKAT heißt neuen Bereichsleiter für „Elektrochemie & Katalyse“ Robert Francke willkommen

Anfang Januar 2021 hat der Bereich „Elektrochemie & Katalyse“ mit dem Bereichsleiter und Heisenberg-Stipendiaten Dr. habil. Robert Francke seine Arbeit am LIKAT aufgenommen.

März

Alumnimeeting (virtuell)

Gemeinsam trotzten die LIKAT Alumni und die gegenwärtigen Mitarbeiter:innen der Pandemie: das regelmäßige Alumni-Treffen wurde kurzerhand ins Virtuelle verlegt. Neben Beiträgen der Alumni gab es im Anschluss die Möglichkeit zum Austausch an „virtuellen Coffeetables“.

Mai

Osama El-Sepelgy wechselt ans LIKAT

Zum 1. Mai nahm Dr. Osama El-Sepelgy als explorativer Themenleiter der Gruppe „Sustainable Excited-State Catalysis“ im Bereich „Angewandte Homogenkatalyse“ seine Arbeiten am LIKAT auf. Bisher war er am Biotechnologischen Institut der RWTH Aachen tätig.

Juli

Jagadeesh Rajenahally erhält Gastprofessur und wird beratendes Mitglied an der REVA Universität

Dr. Jagadeesh Rajenahally erhielt eine Gastprofessur und wurde beratendes Mitglied an der REVA Universität in Yelahanka, Bangalore (Indien).

August

Stephan Bartling erhält HOT TOPIC Vortragspreis

Im Rahmen des Cluster Meetings 2021 vom 18. bis 23. Juli in Prag erhielt Dr. Stephan Bartling (Bereich Analytik: Photoelektronenspektroskopie) einen Preis für eine der drei besten HOT TOPIC-Vorträge.

September

Katrin Zschau und Julian Barlen zu Besuch im LIKAT

Julian Barlen (MdL) und Katrin Zschau informierten sich im LIKAT über Möglichkeiten zur chemischen Energiespeicherung sowie zu alternativen Kraftstoffen der Zukunft und Wasserstofftechnologien mit dem Fokus auf das Verbundprojekts „Wasserstofffabrik MV“.

November

Gemeinsam für das Klima

Am Vorabend der 26. UN-Klimakonferenz in Glasgow schlossen sich gut zwei Dutzend Universitäten und Forschungseinrichtungen aus aller Welt zu einem Bündnis für die Bekämpfung des Klimawandels zusammen. Das LIKAT gehört zu den Gründungsmitgliedern.

September

Wieder dabei:

Nach pandemiebedingter Pause fand die „Lange Nacht der Wissenschaften“ als hybrides Format im Rostocker Klostergarten statt.



Februar

Konferenz mit 5000 Teilnehmer:innen

Eine bessere Welt gelingt nur mit Frauen in der Wissenschaft – Die gemeinsam organisierte Tagung der ICESCO und des LIKAT zählte ca. 5.000 Teilnehmer:innen: Forscherinnen und Studentinnen von 350 Universitäten in der islamischen Welt sowie Professorinnen, Nobelpreisträgerinnen, Politikerinnen und Motivatorinnen aus der ganzen Welt nahmen an der Video-Tagung von der Organisation der islamischen Welt für Bildung, Wissenschaft und Kultur (ICESCO), dem LIKAT in Rostock und von der Space Foundation, einer Non-Profit-Organisation zur Förderung von Weltraumtechnologien teil.

Mai

Armin Börner erhält Literaturpreis des VCI

Für sein 2019 bei wgb Theiss erschienenes Buch „Chemie – Verbindungen fürs Leben“ erhielt Prof. Dr. Armin Börner, Bereichsleiter Hydrierungen und Hydroformylierungen, den Literaturpreis des Fonds der Chemischen Industrie im VCI. Dieser betont in seiner Würdigung zur Verleihung des Literaturpreises 2021, dass Armin Börner seinem Publikum „einen vollkommen neuen Blick auf die Welt“ ermöglicht.

Juni

Vom Klimagas zum Rohstoff: LIKAT beteiligte sich mit dem Projekt „CO₂ 4 Future“ an der Woche der Umwelt.

Die Atmosphäre von CO₂ zu entlasten und das Klimagas künftig direkt für eine Wasserstoffwirtschaft nutzbar zu machen, ist Ziel von Forscherinnen und Forschern am Leibniz-Institut für Katalyse in Rostock. Konkrete Wege dorthin stellte das Institut in seinem Beitrag „CO₂ 4 Future“ im Rahmen der Woche der Umwelt vor, zu der Bundespräsident Frank-Walter Steinmeier und die Deutsche Umweltstiftung einluden.

Juli

Aufarbeitung der NS-Vergangenheit der LIKAT Gründungsväter

Im Auftrag des LIKAT legte der Historiker Dr. Florian Detjens einen Bericht zur NS-Vergangenheit der beiden LIKAT-Gründungsväter Profs. Günther Rienacker und Wolfgang Langenbeck vor. Ihre Lebensläufe sind Spiegel deutscher Geschichte – auch der dunklen Zeit der Diktatur und Unterdrückung. Sie zeigen: Wissenschaft ist kein Elfenbeinturm für sich selbst genügende Forscher. Wissenschaftler tragen Verantwortung für die Gesellschaft. Das LIKAT bekennt sich zu dieser Verantwortung, zu der auch ein offener und transparenter Umgang mit der eigenen Vergangenheit gehört. Der Bericht ist auf der LIKAT-Webseite zugänglich.

August

Mirko Kirschowski wird kaufm. Vorstand

Am 1. August übernahm Dr. Mirko Kirschowski die Funktion des kaufmännischen Direktors am LIKAT. Zuvor arbeitete er in verschiedenen Positionen des Wissenschaftsmanagements, etwa als Geschäftsführer des Deutschen Zentrums für Herzinsuffizienz des Universitätsklinikums Würzburg oder als Verwaltungsdirektor des Sigmund-Freud-Instituts in Frankfurt am Main.

September

Veronica Papa erhält Preis der SCI

Veronica Papa erhielt Preis der Italienischen Chemischen Gesellschaft (Società Chimica Italiana, SCI) für Ihre Doktorarbeit, die sie in der Themengruppe „Nachhaltige Redoxreaktionen“ von Dr. Kathrin Junge anfertigte.

Oktober

Milica Feldt verstärkt LIKAT

Seit Oktober 2021 verstärkt Dr. Milica Feldt als Nachwuchsgruppenleiterin mit ihrer Gruppe „Theorie & Katalyse“ das Portfolio des LIKAT. Sie widmet sich computergetützter Chemie mit dem Forschungsschwerpunkt „Katalyse mit Übergangsmetallen“. Ihr besonderes Interesse gilt der Untersuchung von Nicht-Häm-Eisenkomplexen. Milica Feldt ist studierte Physikerin und wird das LIKAT mit ihrer Expertise zur theoretischen Betrachtung des Phänomens Katalyse bereichern.

November

Rüdiger Selke (1934 - 2021)

Das LIKAT trauerte um den langjährigen Kollegen Prof. Dr. Rüdiger Selke. Er war Vorreiter in der Katalyseforschung mit Übergangsmetallkomplexen und maßgeblich an der Entwicklung des Isicom-Verfahrens beteiligt, der weltweit zweite asymmetrisch katalysierte Prozess, der im industriellen Maßstab umgesetzt wurde.

Dezember

Matthias Beller wurde erneut als Highly Cited Researcher ausgezeichnet.

Die Namen auf der „Who's who“-Liste rangieren im Web of Science™-Zitierindex für das jeweilige Fachgebiet und das Veröffentlichungsjahr unter den besten 1 Prozent der Zitate.

Januar

P-Campus Publikationspreis 2021 für Thomas Werner

Der P-Campus Publikationspreis 2021 ging unter anderem an LIKAT-Wissenschaftler Prof. Dr. Thomas Werner für die *Ecotoxicology and Environmental Safety*-Publikation „AMPA-¹⁵N – Synthesis and application as standard compound in traceable degradation studies of glyphosate“ (DOI: 10.1016/j.ecoenv.2021.112768)

Mai

Preis für gute Lehre

Dr. Jola Pospesch wurde für sehr gute Lehrleistungen am Insitut für Chemie der Universität Rostock ausgezeichnet.

Juni

Wissensdurstig: Die „Lange Nacht der Wissenschaften“

Wissensdurstig: Erstmals nach den pandemiebedingten Einschränkungen der vergangenen Jahre konnten wir im Rahmen der „Langen Nacht“ wieder Besucher live vor Ort begrüßen. Die Resonanz war sowohl auf Besucher:innen als auch LIKAT-Seite sehr groß.

Juli

Neues Transmissions-Elektronenmikroskop

Das gemeinsam mit der Interdisziplinären Fakultät der Universität Rostock betriebene Transmissions-Elektronenmikroskop (TEM) wird eingeweiht.

Juli

Feierliche Eröffnung des Catalysis2Scale-Technikums

Im institutseigenen Transferzentrum können die Forscherinnen und Forscher künftig die Anwendungsreife ihrer Erkenntnisse aus dem Labor von nun an selbst im Pilotmaßstab überprüfen. Damit rückt vor allem die Grundlagenforschung näher an die Praxis heran.

September

Chemiker im Wortlabor

Im großen Seminarraum fand erstmals eine Lesung mit dem Thema „CHEMIKER IM literarischen WORTLABOR“ statt. Drei Autoren (und ehemalige LIKAT-Chemiker) lasen aus ihren (nicht-wissenschaftlichen) Werken.

November

Eszter Baráth im Leibniz-Professorinnen-Programm

Als eine von fünf international hervorragend ausgewiesenen Wissenschaftlerinnen wird Dr. habil. Eszter Baráth im Rahmen des Leibniz-Professorinnenprogramms zur Etablierung einer Professur mit der Universität Rostock gefördert.

November

Matthias Beller als Highly Cited Researcher ausgezeichnet

Prof. Dr. Matthias Beller wurde erneut als „Highly Cited Researcher“ gelistet. Damit zählt er nach den Angaben von Clarivate Analytics zu den weltweit einflussreichsten Forschern.



April

Auf Augenhöhe mit dem akademischen „Hochadel“ – zwei LIKAT-Chemikerinnen führen zur Nobelpreisträger-Tagung

Mit Thea Mayer (TG Pospesch) und Aija Gudkova (TG Francke) sind gleich zwei junge Chemikerinnen aus dem LIKAT zur 71. Tagung der Nobelpreisträgerinnen und Nobelpreisträger in Lindau am Bodensee eingeladen.

Juni

Auszeichnung für Jagadeesh Rajenahally

Prof. Dr. Jagadeesh Rajenahally wurde für die Publikation von Forschungsarbeiten ausgezeichnet, die zu den 1 % der am häufigsten zitierten Arbeiten europäischer Einrichtungen gehören.

Juni

Beste Poster Pitch

Auf dem 55. Jahrestreffen der Deutschen Katalytiker wurde Stefan Peters (Bereich Wohlrab) mit einem Preis für den besten Poster-Pitch ausgezeichnet.

Juli

Übergabe des Bewilligungsbescheid „Forschungsfabrik Wasserstoff MV“

Mit der Vergabe der ersten Fördergelder an das LIKAT, startet das Verbundprojekt „Forschungsfabrik Wasserstoff MV“. Gemeinsam mit zwei weiteren Forschungseinrichtungen wird das LIKAT auf der Basis erneuerbarer Energien Verfahren und Technologien für CO₂-neutrale Produktionskreisläufe erkunden, optimieren und zur Anwendungsreife führen. Verbundpartner sind neben dem LIKAT das Rostocker Fraunhofer-Institut für Großstrukturen der Produktionstechnik, IGP, und das Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie, INP Greifswald.

August

ChemBioChem Early Career Award

Dr. Jola Pospesch erhielt auf dem 29. Nachwuchswissenschaftler Symposium für Bioorganische Chemie am KIT in Karlsruhe einen ChemBioChem Early Career Award.

Oktober

„Young Researchers Award“ der CGCA

Kangkang Sun, Doktorand im Bereich von Prof. Dr. Matthias Beller (TG „Homogene Katalyse für Life Sciences“ von Dr. Helfried Neumann), wurde mit dem „Young Researchers Award“ der Gemeinschaft chinesischer Chemiker und Chemieingenieure in Deutschland (CGCA) ausgezeichnet.

November

Matthias Beller erneut im Vorstand der Leibniz-Gemeinschaft

Prof. Dr. Matthias Beller wurde erneut in den Vorstand der Leibniz-Gemeinschaft gewählt. Er ist neben Sebastian Lenz (Direktor des Leibniz-Instituts für Länderkunde in Leipzig) und Stephan Junker (Geschäftsführer des Museums für Naturkunde Berlin – Leibniz-Institut für Evolutions- und Biodiversitätsforschung in Berlin) einer von drei Vizepräsidenten.

Dezember

Professur für Torsten Beveries

Im Rahmen der Sitzung des Fakultätsrates der MNF der Universität Rostock wurde PD Dr. habil. Torsten Beveries vom Dekan der MNF die Urkunde über die Verleihung der Bezeichnung Professor zur Gewinnung als außerplanmäßiger Professor verliehen.

DAS LIKAT IN ZAHLEN



in Mio. €

26,6 | 20,7

2021 | 2022

Haushalt

13,3 | 13,5

Grundfinanzierung

7,5 | 7,2

Drittmittel

2,8 | 2,5

davon Industrie

4,8 | 4,6

davon öffentl. Mittel

5,8 | -

Bauinvestitionen



3 | 2

Bachelor

11 | 16

Master

19 | 19

Promotion



123 | 128

2021 | 2022

Wissenschaftler:innen

100 | 110

Promovierende



55 | 68

Wissenschaft unterstützendes Personal



39 | 16

2021 | 2022

Patente



318 | 316

2021 | 2022

Publikationen

103 | 107

davon OA

161 | 198

davon IP>5

1 | 2

Bücher

11 | 13

Buchkapitel



ORGANIGRAMME



Leibniz-Institut für Katalyse

	Kuratorium Vors. Woldemar Venohr / WKM MV		Mitgliederversammlung Vors. Prof. Ralf Ludwig / Univ. Rostock		Wissenschafts- & Industriebeirat Vors. Prof. Brigitte Voit / IPF Dresden		
Vorstand	Prof. Matthias Beller		Dr. Eszter Baráth		Prof. Robert Francke		
					Dr. Mirko Kirschkowski		
					Stab Dr. S. Hinze		
	TF 01	TF 02	TF 03	TF 04	TF 05	TF 06	TF 07
FB Baráth	●	●	●	●	●	●	●
FB Beller	●	●	●	●	●	●	●
FB Beveries	●	●	●	●	●	●	●
FB Börner	●	●	●	●	●	●	●
FB Francke	●	●	●	●	●	●	●
FB Kondratenko	●	●	●	●	●	●	●
FB Kragl	●	●	●	●	●	●	●
FB Linke	●	●	●	●	●	●	●
FB Strunk	●	●	●	●	●	●	●
FB Wohlrab	●	●	●	●	●	●	●
NWG	●	●	●	●	●	●	●
Uni in Leibniz	●	●	●	●	●	●	●
	Servicebereich Analytik						
	TF 01 Struktur-Reaktivitäts-Beziehungen NN, W. Baumann (Stellv.)		TF 02 Kinetik, Theorie & Mechanismen E. Kondratenko, H. Jiao (Stellv.)		TF 03 Reaktionstechnik & Implementierung D. Linke, U. Armbruster (Stellv.)		TF 04 Erneuerbare Rohstoffe E. Baráth, A. Abdel-Mageed (Stellv.)
							TF 05 Energie & Umwelt R. Francke, H. Junge (Stellv.)
							TF 06 Effizientere Prozesse S. Wohlrab, B. Müller (Stellv.)
							TF 07 Neue Produkte & Verfahren T. Beveries, C. Hering-Junghans (Stellv.)
							Servicebereiche
							Analytik Dr. W. Baumann Chromatographie · EA XPS · IR · MS · NMR TEM · XRD · UV/Vis
							Verwaltung Dr. M. Kirschkowski Projektmanagement Finanzen · Einkauf Recht & Personal · IT
							Technik A. Schupp Haustechnik · Werkstätten
							Beauftragte Datenschutz Dr. T. Schareina Transfer U. v. Zweydrhoff Arbeitsschutz Dr. N. Rockstroh (ASA) C. Selle (FaSI)
	Personalvertretung		Betriebsrat · Dr. J. Holz Mental Health-First Aider · Dr. B. Müller		Ombudsperson · Dr. W. Baumann Gleichstellung · Dr. S. Hinze		Schwerbehinderte · A. Simmla PhD & PostDocs · T. Mayer, P. Hünemörder, C. Stein
							Diversität · U. von Zweydrhoff

LIKAT Rostock · Albert-Einstein-Str. 29A · 18059 Rostock · ☎ 0381 1281-0 · info@catalysis.de · catalysis.de · 06/2023



Servicebereich Verwaltung

Leibniz-Institut für Katalyse e.V. 01/2022
LIKAT Rostock
Albert-Einstein-Straße 29A, 18059 Rostock
Tel.: 0381 1281-0 Fax: +49 381 1281-5000
info@catalysis.de www.catalysis.de

Kaufmännische Direktion Dr. Mirko Kirschkowski 0381/1281-162		
Koordination Finanzen Steffi Willöper 0381 1281-102		
Team Haushalt & Finanzen Kerstin Alter -273 Christina Plothe -193 Jan Stetzkowski -320 Claudia Zielke -123	Team Projektmanagement Stefan Legler -254 Christin Mindt -191 Anja Radtke -204	Koordination Recht & Personal Ute von Zweydrhoff 0381 1281-156
Team Beschaffung Dr. Torsten Dwars -115 Torsten Weiss -127	Team Personal Anke Kirmse -221 Heike Koch -287 Jenny Pohler -152	Koordination Informationstechnik Jens Bindernagel 0381 1281-175
		Team Informationstechnik Jens Bindernagel -175 Andre Vesely -255 Andre Graupner -300 Steffen Günther -275
		Sicherheit & Compliance Zentrale Dienste Zentrale Dienste Endgeräte Fachapplikationen

FORSCHUNGSauftrag

Das Leibniz-Institut für Katalyse (LIKAT) und seine Vorgängerinstitutionen widmen sich seit 70 Jahren der Erforschung der Katalyse. Es begann mit Forschungsbestrebungen zur Herstellung künstlicher Butter in der Nachkriegszeit, um die Lebensmittelversorgung der Gesellschaft zu sichern.

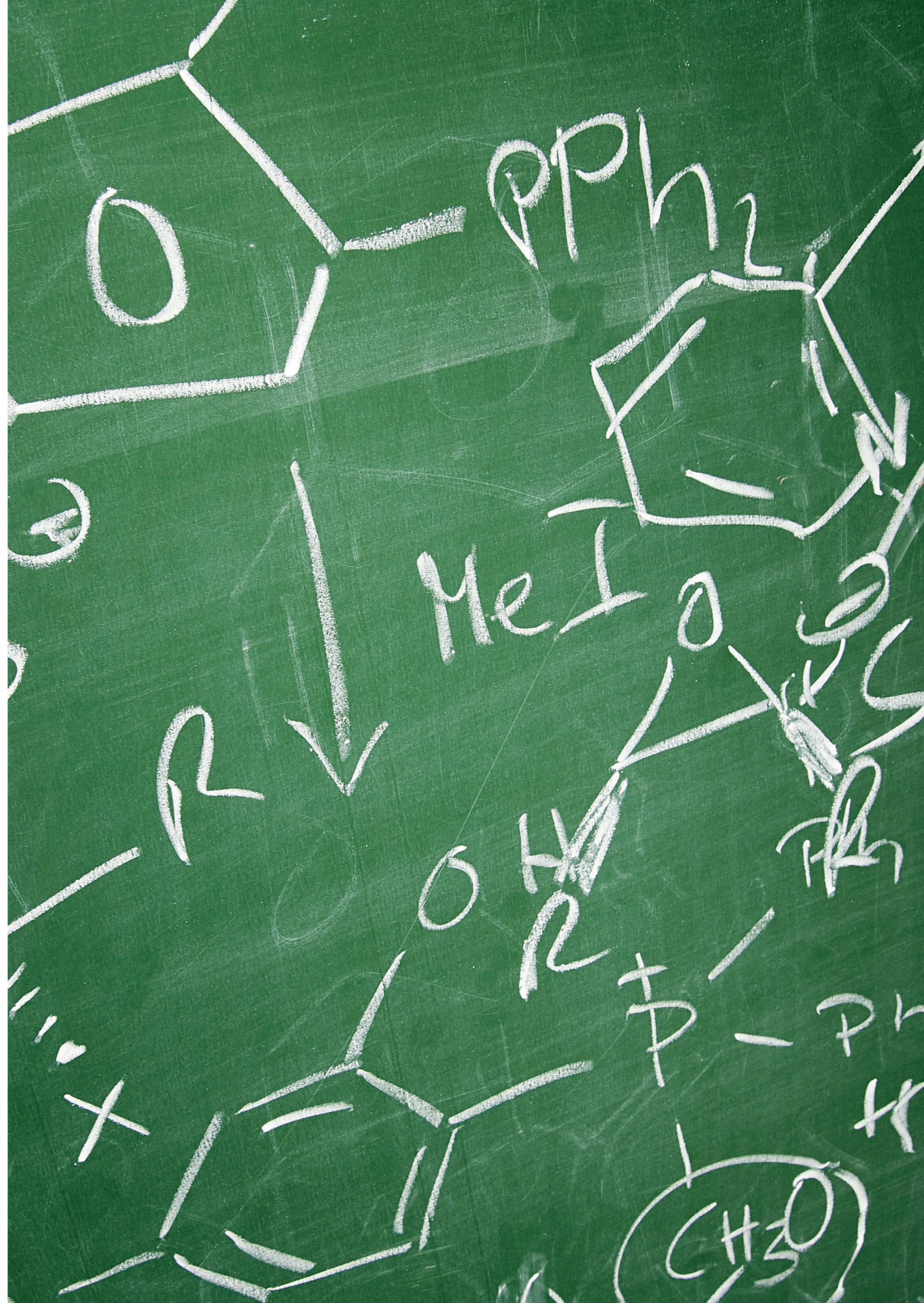
Heute ist das LIKAT in Rostock eines der größten öffentlich geförderten Forschungsinstitute in seinem Bereich in Europa und nimmt einen Platz an der Schnittstelle von Grundlagen und Anwendungen ein.

Das Institut hat seit der Gründung im Jahre 1952 vielfältige Veränderungen durchlaufen. Der ursprüngliche Hauptanspruch der Arbeiten am Institut besteht, ganz im Sinne der Leibniz-Gemeinschaft, bis heute: den Transfer von Ergebnissen der Grundlagenforschung zu chemischen Produkten oder Prozessen mit

Anwendungsrelevanz zu betreiben. Das LIKAT betreibt gesellschaftsrelevante state-of-the-art Katalysatorforschung, die neben den klassischen Chemiebereichen auch auf alternative Energietechnologien sowie in den Material- und Lebenswissenschaften angewandt wird. Dafür wird die gesamte Breite des modernen Forschungsinstrumentariums in einem Institut verfügbar gemacht. Innovative Forschungsansätze entstehen weniger durch ein Nebeneinander einzelner Wissenschaftsbereiche mit hervorragender Expertise, sondern durch die interdisziplinäre bereichsübergreifende Beantwortung relevanter Forschungsfragen. Die ganzheitliche Betrachtung des Phänomens Katalyse ermöglicht es dem Institut, mit seinen Forschungsergebnissen wesentliche Erkenntnisse beizutragen, um sein übergeordnetes Ziel, das Schließen von Stoffkreisläufen, zu erreichen.



Nur der solide Stamm der Grundlagenforschung als Basis ermöglicht dessen Untersuchung für etwaige Anwendungen. Diese angewandte Forschung (grüne Äste) trägt im besten Falle Früchte und resultiert in realen Produkten oder Prozessen für Industrie und Alltag. Das Leibniz-Institut für Katalyse forscht an der Schnittstelle von Grundlagen- und angewandter Forschung.



FORSCHUNGSSTRUKTUR

Die Forschungsarbeiten am LIKAT sind sieben Themenfeldern (TF) zugeordnet, die als zukunftsweisende, gesellschaftlich relevante Forschungsgebiete betrachtet werden. Die Institutsangehörigen wirken in diesen TF über Bereichsgrenzen hinaus und bündeln somit die Expertisen der verschiedenen Forschungsbereiche (FB) und Themengruppen (TG).

Diese Matrixstruktur fördert den Austausch verschiedener Disziplinen zu Forschungsfragen und ermöglicht, das fachliche Potenzial am LIKAT maximal auszuschöpfen.

Insgesamt wurden sieben Themenfelder identifiziert, die von zehn bestehenden Forschungsbereichen und ihren einzelnen Themengruppen bearbeitet werden.

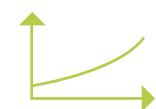
Methodisch ausgelegte TF:



TF 01

Struktur-Reaktivitäts-Beziehungen

Sprecher: N. N.
Stellv.: PD Dr. habil. Wolfgang Baumann



TF 02

Kinetik, Theorie & Mechanismen

Sprecher: Prof. Dr. Evgenii Kondratenko
Stellv.: Prof. Dr. Haijun Jiao



TF 03

Reaktionstechnik & Implementierung

Sprecher: Dr. David Linke
Stellv.: Dr.-Ing. Udo Armbruster



TF 04

Erneuerbare Rohstoffe

Sprecher: Dr. habil. Eszter Baráth
Stellv.: Dr. Ali Abdel-Mageed



TF 05

Energie & Umwelt

Sprecher: Prof. Dr. Robert Francke
Stellv.: Dr. Henrik Junge



TF 06

Effizientere Prozesse

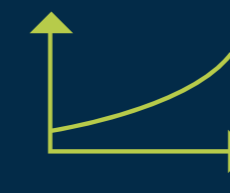
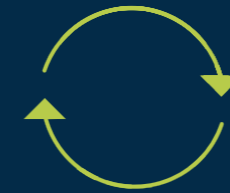
Sprecher: Dr. Sebastian Wohlrab
Stellv.: Dr. Bernd Müller



TF 07

Neue Produkte & Verfahren

Sprecher: Prof. Dr. Torsten Beweries
Stellv.: Dr. Christian Hering-Junghans

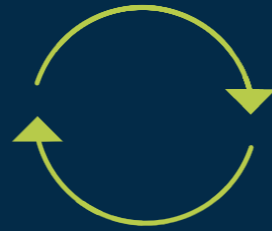


THEMENFELDER



TF 01 - Struktur-Reaktivitäts-Beziehungen

N. N.
PD Dr. habil. Wolfgang Baumann

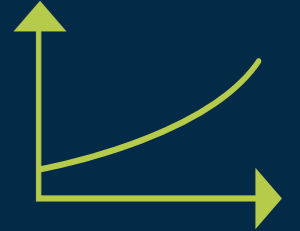


Themenfeld 01 befasst sich mit der Etablierung und Kombination moderner experimenteller, hauptsächlich analytischer, Methoden als Grundlage für ein wissenschaftliches Katalysatordesign. Dies umfasst die Entwicklung, Optimierung und Anwendung innovativer Methoden, Verfahren und Aufbauten zur Untersuchung katalytischer Reaktionen und von Katalysatorsynthesen. Ziel ist es, die Entwicklung neuer katalytischer Verfahren zu beschleunigen und bestehende Verfahren auf einer rationalen Basis effizienter zu gestalten. Ein anschauliches Beispiel für die Zusammenarbeit verschiedener Themengruppen in TF 01 ist die Entwicklung eines speziellen Spin-Trapping-Verfahrens, das selektiv verschiedene Radikale unterscheiden kann. Mit Hilfe dieses Verfahrens können vorwiegend präparativ arbeitende Gruppen mechanistisches Verständnis entwickeln und nachweisen, ob bei den entsprechenden Reaktionen

Radikalintermediate eine Rolle spielen. Bei der Untersuchung struktureller und elektronischer Eigenschaften heterogener und homogener Photo- und Elektrokatalysatorsysteme in der CO₂-Reduktion, Wasserspaltung und Methanoxidation zeigte sich, dass bekannte aktive Zentren aus der thermischen Katalyse vergleichbare Aktivitäten in den neuartigen Reaktionsführungen besitzen können. Die Zusammenarbeit in TF 01 ermöglichte die genauere Untersuchung dieser Erkenntnisse in temperaturabhängigen UV-Vis- und Raman-Messungen und die Entschlüsselung der Zusammenhänge zwischen optischen, elektronischen und katalytischen Eigenschaften des Materials. Künftig soll mit der Kombination von *operando*-FTIR-Spektroskopie und Kinetik sowie Chemometrie ein neuer experimenteller Vorstoß gewagt werden.

TF 02 - Kinetik, Theorie & Mechanismen

Prof. Dr. Evgenii Kondratenko
Prof. Dr. Haijun Jiao



Im Fokus von TF 02 stehen mechanistische und kinetische Aspekte der heterogenen, homogenen, Elektro- und Photokatalyse. Gegenstand der Untersuchungen sind großtechnische, zukunftsorientierte und nachhaltige katalytische Prozesse. Ziel ist es, Zusammenhänge zwischen makroskopischen Beobachtungen in Reaktoren mit der mikroskopischen Struktur der katalytisch aktiven Zentren/Phasen und der Reaktionsmikrokinetik auf möglichst elementarer Ebene abzuleiten. Dazu werden mit Hilfe mechanistischer und mikrokinetischer Untersuchungen Grundlagenbeziehungen zwischen der Struktur der aktiven Zentren und der Kinetik der selektiven und nichtselektiven Reaktionsschritte gewonnen. Diese bilden die Guidelines für eine kontrollierte Katalysatorherstellung und für die Entwicklung der neuen bzw. verbesserten Reaktorkonzepte, was insbesondere im Hinblick auf die sich ändernde Rohstoffbasis und auf neue Energietechnologien wichtig ist. TF 02 wendet dafür verschiedene Methoden an: transiente (zeitaufgelöste) Experimente mit isotope-markierten Molekülen, stationäre kinetische und mechanistische Messungen, spektroskopische Katalysatorcharakterisierung, mathematische

Modellierungen sowie numerische Analysen von zeitaufgelösten Experimenten sowie Dichtefunktionaltheorie (DFT)-Berechnungen. Die Kombination ermöglicht einen sehr detaillierten Blick auf die Wirkungsweise verschiedenster Katalysatoren. Die Zusammenarbeit in TF 02 fördert die Rationalisierung der experimentellen Ergebnisse, auf deren Basis Vorschläge zur gezielten Katalysatorentwicklung, Optimierung von Reaktionsbedingungen, Verbesserung von Reaktionsabläufen und Planung neuer Experimente gemacht werden können. TF 02 unterstützt damit die Forschungsarbeiten in den stofflich-orientierten Themenfeldern (TF 04-07). So ermöglichte bspw. die Mechanismusaufklärung zur Bildung zyklischer Carbonate aus Epoxiden und CO₂ die Optimierung der Reaktionsbedingungen, so dass cyclische Carbonate in Ausbeuten bis 99% isoliert werden können. Künftig ist die Erweiterung der Expertise um Theorie der homogenen und Bio-Katalyse (Nachwuchsgruppe, Milica Feldt) geplant. Zudem bieten Digitalisierung und Automatisierung ein großes Potenzial, existierende Methoden zu verbessern und neue Methoden bzw. Techniken zu entwickeln.

ANORGANISCHE FUNKTIONSMATERIALIEN
(Dr. Sebastian Wohlrab)

KATALYSE FÜR ENERGIETECHNOLOGIEN
(Dr. Henrik Junge)

KATALYSE FRÜHER ÜBERGANGSMETALLE
(Dr. Fabian Reiß)

KATALYSE SPÄTER ÜBERGANGSMETALLE
(PD Dr. habil. Torsten Beweries)

KATALYTISCHE FUNKTIONALISIERUNGEN
(Dr. Jola Pospesch)

MAGNETISCHE RESONANZ- & RÖNTGENMETHODEN
(Dr. Jabor Rabeah)

MODERNE ORGANISCHE CHEMIE
(Dr. Osama El-Sepelgy)

NACHHALTIGE REDOXREAKTIONEN
(Dr. Kathrin Junge)

OBERFLÄCHENCHEMIE DER ANGEWANDTEN KATALYSE
(Dr. Ali Abdel-Mageed)

OPTISCHE SPEKTROSKOPIE & THERMOANALYTISCHE METHODEN
(Dr. Christoph Kubis)

REAKTIONSMCHANISMEN
(Prof. Dr. Evgenii Kondratenko)

SELEKTIVE KATALYTISCHE SYNTHESMETHODEN
(Dr. Sergey Tin, jetzt: Dr. habil. Eszter Baráth)

STRUKTUR-WIRK-BEZIEHUNGEN
(Prof. Jennifer Strunk)

THEORIE DER HOMOGENEN & BIOKATALYSE
(Dr. Milica Feldt)

UNI IN LEIBNIZ (Prof. Dr. Björn Corzilius, Prof. Dr. Marko Hapke, Prof. Dr. Axel Schulz)

KATALYSE FRÜHER ÜBERGANGSMETALLE
(Dr. Fabian Reiß)

KATALYSE MIT PHOSPHORHALTIGEN MATERIALIEN (vormals:
AKTIVIERUNG KLEINER MOLEKÜLE)
(Dr. Christian Hering-Junghans)

MAGNETISCHE RESONANZ- & RÖNTGENMETHODEN
(Dr. Jabor Rabeah)

MECHANISMEN DER HOMOGENEN KATALYSE
(Dr. Hans-Joachim Drexler, vormals Prof. Detlef Heller)

OPTISCHE SPEKTROSKOPIE & THERMOANALYTISCHE METHODEN
(Dr. Christoph Kubis)

REAKTIONSMCHANISMEN
(Prof. Dr. Evgenii Kondratenko)

SYNERGIEN DER HOMO- & HETEROGENEN KATALYSE (jetzt:
KATALYSE FÜR NACHHALTIGE SYNTHESSEN)
(Prof. Dr. Jagadeesh Rajenahally)

THEORIE DER HOMOGENEN & BIO-KATALYSE
(Dr. Milica Feldt)

THEORIE DER KATALYSE
(Prof. Dr. Haijun Jiao)

UNI IN LEIBNIZ
(Prof. Dr. Ralf Ludwig, Prof. Dr. Klaus Neymeyr)

TF 03 - Reaktionstechnik & Implementierung

Dr. David Linke
Dr.-Ing. Udo Armbruster



Im Hinblick auf die Reaktionstechnik in Themenfeld 03 geht es um die Entwicklung des bestmöglichen Reaktordesigns und Betriebsregimes für katalysierte chemische Reaktionen. Dabei können verschiedene Reaktorkonzepte evaluiert, aber auch Reaktor- und Verfahrenskonzepte gemeinsam entwickelt werden. Neben der katalytischen Reaktion werden verfahrenstechnische Aspekte der Katalysatorsynthese behandelt. Zur Implementierung gehören (i) die Übertragung katalytischer Reaktionen vom Labormaßstab in den Pilot- oder technischen Maßstab und (ii) die Übertragung von Methoden aus Nachbardisziplinen und der Informationstechnologie auf die Katalyse, die das Potenzial haben, den Transfer von der Forschung in die technische Anwendung zu beschleunigen. Der dritte Schwerpunkt in TF 03 liegt auf Data Science. Das Projekt NFDI4Cat, in dem das LIKAT federführend tätig ist, zielt auf das Management von Forschungsdaten ab. Um diese Ziele zu verwirklichen, arbeiten Themengruppen aus verschiedenen Forschungsbereichen zusammen. TF 03 ein kompetenter Partner für die Industrie in Bezug auf den Transfer von Neuentwicklungen in der Katalyse vom Labor in die Anwendung sowohl im Bereich der Fein- als auch der Bulk-Chemie. Mehrere Industrieprojekte befassen sich mit reaktionstechnischen oder Upscaling-Fragen für homogen- und heterogenkatalytische Reaktionen. Eine industriell etablierte Duftstoffsynthese

konnte bspw. so verändert werden, dass das Produkt in weniger Reaktionsschritten und mit höheren Ausbeuten hergestellt werden kann. Zur Unterstützung dieser Aktivitäten betreiben und entwickeln die LIKAT-Forscherinnen und -Forscher in TF 03 Versuchsanlagen unterschiedlichen Maßstabs (vom Mikroreaktor bis zum Technikums-Maßstab), die Daten von hoher Qualität und Aussagekraft liefern. Hier spielt das *Catalysis2Scale*-Transfer-Technikum eine wesentliche Rolle. Im Gegensatz zu den TF 04 bis 07 konzentriert sich TF 03 weniger auf spezifische Reaktionen, sondern mehr auf Methodiken und Technologien. Dies hat zur Folge, dass die in TF 03 untersuchten Reaktionen oft auch Gegenstand der Forschung in den TF 04 bis 07 sind. Allerdings nicht wie dort mit dem Schwerpunkt auf grundlegender Katalysatorentwicklung, sondern mit Schwerpunkt auf reaktionstechnischen Aspekten. Bei der Entwicklung von kinetischen Modellen arbeitet TF 03 eng mit TF 02 zusammen, um eine mechanistische Basis für die Modelle zu schaffen. Das *Catalysis2Scale*-Technikum ermöglicht TF 03 künftig u.a., den Fokus auf die schnellere Übertragung vom Labor- in den Technikumsmaßstab zu legen. Weitere Schwerpunkte werden auf die Digitalisierung der Entwicklungskette sowie die Entwicklung effizienterer Reaktionstechnik gesetzt.

ANGEWANDTE CARBONYLIERUNGEN
(Dr. Ralf Jackstell)

ANORGANISCHE FUNKTIONSMATERIALIEN
(Dr. Sebastian Wohlrab)

BIOKATALYSE
(Prof. Dr. Udo Kragl)

HOCHDURCHSATZTECHNOLOGIEN
(Dr. Uwe Rodemerck)

HOMOGENE KATALYSE FÜR LIFE SCIENCES
(Dr. Helfried Neumann)

KATALYSE FÜR ENERGIETECHNOLOGIEN
(Dr. Henrik Junge)

OBERFLÄCHENCHEMIE DER ANGEWANDTEN KATALYSE
(Dr. Ali Abdel-Mageed)

POLYMERCHEMIE & KATALYSE
(PD Dr. habil. Esteban Mejía)

REAKTIONSTECHNIK
(Dr. David Linke)

SYNERGIE ZWISCHEN HOMO- & HETEROGENER KATALYSE (JETZT: KATALYSE FÜR NACHHALTIGE SYNTHESSEN)
(Prof. Dr. Jagadeesh Rajenahally)

TECHNOLOGIEORIENTIERTE VERFAHREN
(Dr. Udo Armbruster)

TF 04 - Erneuerbare Rohstoffe

Dr. habil. Eszter Baráth
Dr. Ali Abdel-Mageed



Themenfeld 04 bündelt Expertisen auf dem Gebiet der erneuerbaren Rohstoffe. In den Jahren 2019 – 2021 lag der Schwerpunkt auf der Erforschung katalytischer Umwandlungen nachwachsender Rohstoffe in Basischemikalien für Produkte unseres täglichen Lebens. Beispielsweise lassen sich aus Holzabfällen gewonnene Lignocellulose sowie deren Bestandteile oder Fettsäuren und Terpene nutzen, um diverse Polymere, Agrochemikalien, Lösungsmittel oder Aromastoffe herzustellen. Im ersten Schritt erfolgt dabei die Konvertierung der Biomasse in sogenannte Plattformchemikalien. Diese sind in der Regel in einfachen und ertragreichen Reaktionen in großen Mengen herzustellen und eignen sich als Synthesebausteine für zahlreiche andere Verbindungen. Diese Plattformchemikalien (bspw. Glycerin, Lävulin- oder Milchsäure, HMF, Furfural) werden in weiteren katalysierten Schritten in bestehende oder neue Chemikalien mit den gewünschten Eigenschaften umgewandelt. Da Biomasse einen Überschuss an Sauerstoff enthält, sind folgende Reaktionen für die ersten Schritte von großer Bedeutung: Hydrierung, Hydrogenolyse, Dehydratisierung, Decarbonylierung und Decarboxylierung. Im Berichts-

zeitraum wurde auch Kohlendioxid als Rohstoff genutzt, um es zum Beispiel in (Poly-)Carbonate umzuwandeln. Darüber hinaus wurden Fettsäuren durch katalytische Oxidation, Carbonylierung, Hydroformylierung oder Hydrierung in Monomere für Polymere umgewandelt. Für Terpene werden und wurden moderne katalytische Methoden der Umwandlung entwickelt, die vor allem für die Duftstoffindustrie interessant sind. Hier kommen sowohl molekular-definierte homogene als auch heterogene Katalysatoren zum Einsatz. Durch die Mitarbeit im Leibniz-WissenschaftsCampus ComBioCat wurden auch biokatalytische Verfahren (in Zusammenarbeit mit der Universität Greifswald) und Niedertemperaturplasma-Technologien (mit dem INP Greifswald) genutzt.

Die elektrochemische Veredelung erneuerbarer Rohstoffe, die ohne Einsatz stöchiometrischer Mengen an Reduktions- oder Oxidationsmitteln funktioniert, wird künftig eine zunehmende Rolle spielen. Ebenso werden Untersuchungen zum Ersatz unerwünschter Lösungsmittel oder unwirtschaftlicher Synthesestrategien verstärkt.

ANORGANISCHE FUNKTIONSMATERIALIEN
(Dr. Sebastian Wohlrab)

HOMOGENE KATALYSE MIT ERNEUERBAREN ROHSTOFFEN
(Dr. Sergey Tin)

KATALYSE MIT PHOSPHORHALTIGEN MATERIALIEN (vormals: AKTIVIERUNG KLEINER MOLEKÜLE)
(Dr. Christian Hering-Junghans)

KATALYSE ZU HETEROCYCLLEN
(Prof. Dr. Xiao-Feng Wu)

MODERNE ORGANISCHE CHEMIE
(Dr. Osama El-Sepelgy)

NACHHALTIGE REDOXREAKTIONEN
(Dr. Kathrin Junge)

OBERFLÄCHENCHEMIE DER ANGEWANDTEN KATALYSE
(Dr. Ali M. Abdel-Mageed)

POLYMERCHEMIE & KATALYSE
(PD Dr. habil. Esteban Mejía)

SELEKTIVE KATALYTISCHE SYNTHESMETHODEN
(Dr. Sergey Tin, jetzt: Dr. habil. Eszter Baráth)

SYNERGIE ZWISCHEN HOMO- & HETEROGENER KATALYSE (jetzt: KATALYSE FÜR NACHHALTIGE SYNTHESSEN)
(Prof. Dr. Jagadeesh Rajenahally)

THEORIE DER HOMOGENEN & BIOKATALYSE
(Dr. Milica Feldt)

UNI IN LEIBNIZ
(Prof. Dr. Thomas Werner)

TF 05 - Energie & Umwelt

Prof. Dr. Robert Francke
Dr. Henrik Junge

Themenfeld 05 befasst sich mit Grundlagen- und angewandter Forschung, die darauf abzielt, saubere und nachhaltige Ressourcen für zukünftige Prozesse im Bereich der Chemie und alternativen Energietechnologien zu nutzen. Im Fokus der Aktivitäten steht die Verwendung von Strom aus nachhaltigen Quellen, wie Sonnenlicht und Wind, zum Antrieb chemischer Synthesen. Ein Schwerpunkt liegt auf der Wasserstoffherzeugung, dessen Speicherung und Rückwandlung in elektrische Energie, und hier insbesondere der katalytischen Herstellung und Zersetzung flüssiger Energieträger (bspw. Methanol, Ameisensäure) aus grünem Wasserstoff und CO₂. Das Hinzufügen der natürlichen Aminosäure L-Lysin zu einem Ru-basierten Katalysatorsystem ermöglichte es, CO₂ direkt aus der Luft in Form von Formiaten zu binden und nach dem CCU-Konzept nachhaltig der Atmosphäre zu entziehen. Künftig sollen bei den untersuchten Prozessen verstärkt Katalysatorsysteme auf Basis gut verfügbarer Metalle eingesetzt

werden. Neue mechanistische Erkenntnisse in der photokatalytischen Wasserspaltung ermöglichen die Entwicklung von Systemen, die in einem wesentlich breiteren Wellenlängenbereich arbeiten. Ein weiterer Schwerpunkt liegt auf der Rückführung von Treibhausgasen in die chemische Produktion. Dies beinhaltet bspw. die Abtrennung von CO₂ aus der Luft in für chemische Reaktionen signifikanten Mengen sowie dessen anschließende Umsetzung zu Kraftstoffen, Monomeren und Plattformchemikalien. In der letzten Dekade wurden weiterhin Verfahren für die Reinigung von Abwässern und Abgasströmen entwickelt. Für letzteres wurden bspw. neue Ta- und Mo-Katalysatoren eingeführt, die bis zu 95% der NO_x mit NH₃ bei niedrigen Temperaturen umsetzen. Künftig wird auch in TF 05 die elektrochemische Katalyse eine größere Rolle spielen. Sie ermöglicht die direkte Nutzung grüner elektrischer Energie und die Vermeidung chemischer Oxidations- und Reduktionsmittel.

KATALYSE FÜR ENERGIETECHNOLOGIEN
(Dr. Henrik Junge)

MAGNETISCHE RESONANZ- & RÖNTGENMETHODEN
(Dr. Jabor Rabeah)

MIKROVERFAHRENSTECHNIK
(Dr. Norbert Steinfeldt)

MOLEKULARE ELEKTROCHEMIE
(Prof. Dr. Robert Francke)

OPTISCHE SPEKTROSKOPIE & THERMOANALYTISCHE METHODEN
(Dr. Christoph Kubis)

PHOTOKATALYTISCHE CO₂-REDUKTION
(Dr. Tim Peppel)

REAKTIONSMCHANISMEN
(Prof. Dr. Evgenii Kondratenko)

REAKTIONSTECHNIK
(Dr. David Linke)

TECHNOLOGIE-ORIENTIERTE VERFAHREN
(Dr. Udo Armbruster)

UNI IN LEIBNIZ
(Prof. Dr. Wolfram Seidel, Prof. Dr. Klaus Neymeyr, Prof. Dr. Malte Brasholz)



TF 06 - Effizientere Prozesse

Dr. Sebastian Wohlrab
Dr. Bernd Müller

Ziel des Themenfelds 06 ist die Energie- und Ressourcenoptimierung von wichtigen, industriell relevanten katalytischen Verfahren. Dabei stehen Entwicklungen von effizienteren Katalysatoren aber auch Verfahrensintensivierungen im Vordergrund. Hinsichtlich der Entwicklung effizienterer Katalysatoren sind neben wissenschaftlicher Weiterentwicklung auch gänzlich neue Materialkonzepte von Bedeutung. Um eine effizientere Prozessführung zu realisieren, werden innovative Technologien oder alternative Synthesewege exploriert. Der Kernansatz des Themenfeldes gilt der Optimierung katalytischer Kenngrößen wie Umsatz, Selektivität, Aktivität und Produktivität. Daneben kann die Steigerung der Katalysatorstabilität, aber auch schon die Verminderung von Prozessschritten durch Direktsynthesen einen effizienteren Einsatz von Ressourcen bedeuten. Ein anschauliches Beispiel ist die Realisierung einer sog. Dream reaction, deren Umsetzung seit über 60 Jahren von Industrie und Wissenschaft verfolgt wurde: Mit-

tels direkter Dicarbonylierung von 1,3-Butadien lassen sich Adipate, bedeutsame Plattformchemikalien und Monomere, die im Millionen-Tonnenmaßstab bspw. zur Herstellung von Nylon genutzt werden, erstmals in einem Schritt synthetisieren (Jackstell, Beller). Ausschlaggebend für den Erfolg war die Entwicklung eines neuen P(III)-Liganden (Neumann, Beller). Künftig soll auch in diesem Themenfeld ein Schwerpunkt auf der Entwicklung nicht-toxischer und gut verfügbarer 3d-Metall-basierter Katalysatoren gelegt werden. Zudem sollen mittels computergestützter Datenauswertung und neuer Simulationsmethoden Ressourcen geschont werden. Die Elektrokatalyse bietet das Potenzial, chemische Oxidations- und Reduktionsmittel durch elektrische Energie zu substituieren.



ANGEWANDTE CARBONYLIERUNGEN
(Dr. Ralf Jackstell)

ANORGANISCHE FUNKTIONSMATERIALIEN
(Dr. Sebastian Wohlrab)

HOCHDURCHSATZTECHNOLOGIEN
(Dr. Uwe Rodemerck)

HOMOGENE KATALYSE FÜR LIFE SCIENCES
(Dr. Helfried Neumann)

HYDROFORMYLIERUNGEN
(Dr. Jens Holz)

KATALYSATORDESIGN FÜR DIE ELEKTROSYNTHESE
(Dr. Bernd Müller)

MIKROVERFAHRENSTECHNIK
(Dr. Norbert Steinfeldt)

MOLEKULARE ELEKTROCHEMIE
(Prof. Dr. Robert Francke)

NACHHALTIGE REDOXREAKTIONEN
(Dr. Kathrin Junge)

REAKTIONSMCHANISMEN
(Prof. Dr. Evgenii Kondratenko)

REAKTIONSTECHNIK
(Dr. David Linke)

SYNERGIE ZWISCHEN HOMO- & HETEROGENER KATALYSE (jetzt: KATALYSE FÜR NACHHALTIGE SYNTHESSEN)
(Prof. Dr. Jagadeesh Rajenahally)

TECHNOLOGIEORIENTIERTE VERFAHREN
(Dr. Udo Armbruster)

UNI IN LEIBNIZ
(Prof. Dr. Thomas Werner)

TF 07 - Neue Produkte & Verfahren

Prof. Dr. Torsten Beweries
Dr. Christian Hering-Junghans



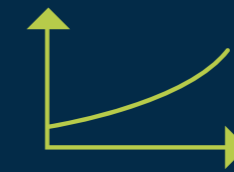
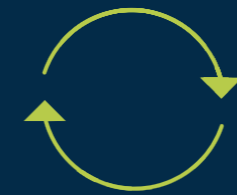
Ziel der Untersuchungen in Themenfeld 07 ist die Entwicklung, Charakterisierung und Testung neuer Katalysatoren und Produkte sowie die Etablierung neuer Verfahren. Die Forschung im TF 07 basiert auf der langjährigen Expertise der LIKAT-Forscherinnen und -Forscher sowohl in grundlegenden als auch angewandten Aspekten der homogenen und heterogenen Katalyse. Dabei werden Expertisen von metallorganischer und Koordinationschemie mit Hauptgruppenchemie, Photokatalyse sowie Organokatalyse kombiniert und ergänzt durch Aspekte der heterogenen Katalyse. Aus diesem Grund wird die Expertise vieler Themengruppen in TF 07 gebündelt. Seit der Etablierung der Matrixstruktur im Jahr 2019 ist es mit insgesamt 36,23 VZÄ aktuell das am stärksten besetzte Themenfeld und liefert entsprechend viele Publikationen. Neben industrienahe Forschungsprojekten

nimmt im TF 07 die Grundlagenforschung einen großen Teil der Aktivitäten ein. Die Relevanz dieser Arbeiten liegt u.a. in der Untersuchung von Reaktivitäten und der Ergründung neuer Methoden, die Rückschlüsse auf katalysebezogene Fragestellungen erlaubt. Grundlegende Untersuchungen zur katalysierten Fluorierung organischer Moleküle sind bspw. die Basis für die Entwicklung neuer Syntheseverfahren in der Agro- oder Pharmaindustrie. Künftig sollen in die Forschungsaktivitäten des TF 07 im Rahmen der Strategie LIKAT 2030 verstärkt erneuerbare Rohstoffe als Substrate integriert werden. Im Sinne einer Kreislaufwirtschaft werden u.a. Schwerpunkte auf die Rückgewinnung und Wiederverwendung von Katalysatorbestandteilen, wie Edelmetalle oder Phosphor, und Polymerbausteinen gesetzt.

BIOKATALYSE
(Prof. Dr. Udo Kragl)
HOCHDURCHSATZTECHNOLOGIEN
(Dr. Uwe Rodemerck)
HOMOGENE KATALYSE FÜR LIFE SCIENCES
(Dr. Helfried Neumann)
HYDROFORMYLIERUNGEN
(Dr. Jens Holz)
KATALYSE FRÜHER ÜBERGANGSMETALLE
(Dr. Fabian Reiß)
KATALYSE MIT PHOSPHORHALTIGEN MATERIALIEN (vormals:
AKTIVIERUNG KLEINER MOLEKÜLE)
(Dr. Christian Hering-Junghans)
KATALYSE SPÄTER ÜBERGANGSMETALLE
(Prof. Dr. Torsten Beweries)
KATALYSE ZU HETEROCYCLLEN
(Prof. Dr. Xiao-Feng Wu)
KATALYTISCHE FUNKTIONALISIERUNGEN
(Dr. Jola Pospech)

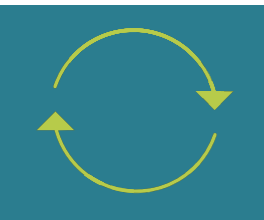
KATALYSATORDESIGN FÜR DIE ELEKTROSYNTHESE
(Dr. Bernd Müller)
MOLEKULARE ELEKTROCHEMIE
(Prof. Dr. Robert Francke)
NACHHALTIGE REDOXREAKTIONEN
(Dr. Kathrin Junge)
POLYMERCHEMIE & KATALYSE
(PD Dr. habil. Esteban Mejía)
REAKTIONSMCHANISMEN
(Prof. Dr. Evgenii Kondratenko)
REAKTIONSTECHNIK
(Dr. David Linke)
SELEKTIVE KATALYTISCHE SYNTHESMETHODEN
(Dr. Sergey Tin, jetzt: Dr. habil. Eszter Baráth)
THEORIE DER HOMOGENEN & BIOKATALYSE
(Dr. Milica Feldt)
UNI IN LEIBNIZ
(Prof. Dr. Marko Hapke, Prof. Dr. Udo Kragl,
Prof. Dr. Thomas Werner)





AKTUELLE PROJEKTE





Winzige Spezies, großer Einfluss: Operando-Spektroskopie entschlüsselt die große Aktivität einzelner Cu-Atome auf CeO₂-TiO₂-Katalysatorträger-Material

Mehr ist nicht immer besser: Erhöht man die Kupfermenge auf einem Ceroxid-Titandioxid-Trägerkatalysator, so steigt nicht notwendigerweise die Aktivität bei der katalytischen Oxidation von CO zu CO₂! Der Grund für diesen zunächst überraschenden Befund konnte durch eine Kombination verschiedenster analytischer Methoden, insbesondere Spektroskopie unter Reaktionsbedingungen („operando“) gefunden werden. Die optimale Kupfermenge liegt bei 0,26 Gewichtsprozent, da hier eine möglichst effektive Verteilung von Einzelatomen über die gesamte Katalysatoroberfläche realisiert wird.

Für diese technisch wichtige Reaktion werden bevorzugt Edelmetall-Katalysatoren eingesetzt. Kostengründe motivieren die Forschung nach Alternativen zu den teuren platin-, rhodium-, palladium- oder goldbasierten Katalysatoren.

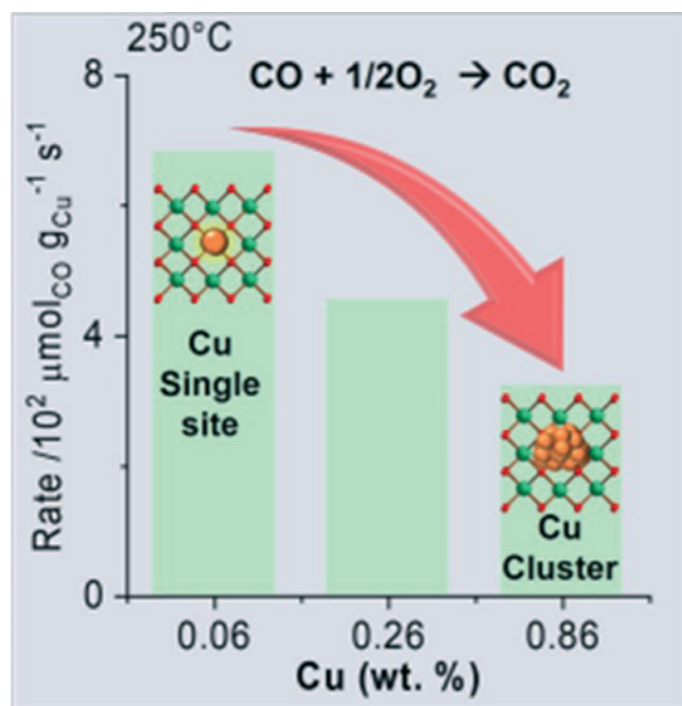


Abb. 1: Relative Reaktivität in Abhängigkeit vom Kupfergehalt des Katalysators. Der gesamte CO-Umsatz mit den drei Katalysatoren (unter identischen Bedingungen) beträgt ca. 20%, 75% und 35%, wenn gleich der Umsatz pro Masseneinheit Kupfer am größten beim Katalysator links ist.

Die Kombination von Kupfer- und Ceroxid ist diesbezüglich vielversprechend und sollte durch unsere Forschungen besser verstanden und weiter optimiert werden.

Es wurden Katalysatoren mit Kupferanteilen zwischen 0,06 und 0,86 Gewichtsprozent auf CeO₂-modifiziertem TiO₂ hergestellt und bezüglich ihrer katalytischen Leistung getestet (Reaktionsgasgemisch CO/O₂ mit Stickstoff stark verdünnt). Weiterhin wurde der Katalysator umfangreich charakterisiert, sowohl vor, nach als auch während der Reaktion (*in situ*), letzteres durch IR-, EPR- und Röntgenphotoelektronen-Spektroskopie. Der Umsatz zu CO₂ wurde gaschromatographisch ermittelt.

Die beste Leistungsfähigkeit (siehe Abbildung links) ist bei 0,26 Prozent Kupfergehalt zu finden, weil ein noch höherer Kupferanteil die Bildung von Aggregaten, Kupfer(oxid)clustern, auf der Oxidoberfläche begünstigt. Diese Verklüsterung reduziert die Anzahl der katalytisch aktiven Zentren. Photoelektronen-Spektroskopie erlaubt ferner den Schluss, dass zwischen den einzelnen Kupferatomen und den Ceratomen des modifizierten Trägers elektronische Wechselwirkungen (Redoxvorgänge) ablaufen, die eine erhöhte katalytische Aktivität bewirken.

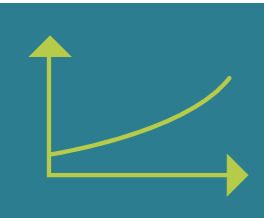
Die Resultate^[1] zeigen das Potential, das in den sogenannten „single site catalysts“, die auch „single-atom catalysts“ genannt werden und gegenwärtig starke Aufmerksamkeit genießen,^[2] steckt. Die Reaktivität dieser isolierten Atome in Wechselwirkung mit ihrer chemischen Umgebung, dem Katalysatorträger, verdient weitere detaillierte Untersuchungen, die nur in Kooperation verschiedener methodischer Ansätze, wie sie im LIKAT realisierbar ist, erfolgreich bearbeitet werden können: Beteiligt waren die Gruppen „Heterogen-katalytische Verfahren: Oberflächenchemie“, „Heterogen-katalytische Verfahren: Technologieorientierte Verfahren“, „Heterogen-katalytische Verfahren: Anorga-

nische Funktionsmaterialien“, „Magnetische Resonanz- und Röntgenmethoden“ und die analytische Abteilung.

Wissenschaftlicher Ansprechpartner:
PD Dr. habil. Wolfgang Baumann

[1] J. Mosrati, A. M. Abdel-Mageed, T. H. Vuong, R. Grauke, S. Bartling, N. Rockstroh, H. Atia, U. Armbruster, S. Wohlrab, J. Rabeah, A. Brückner, *ACS Catalysis* 2021, 11, 10933-10949. Tiny Species with Big Impact: High Activity of Cu Single Atoms on CeO₂-TiO₂ Deciphered by Operando Spectroscopy.
[2] Special Issue on "Heterogeneous Single-Atom Catalysis": *Chemical Reviews* (Issue 21) 2020, 120, 11699-12342.





Herstellung und Anwendungspotenzial von Katalysatoren auf Basis von kommerziellen Trägermaterialien und ZnO für die C₃H₈-Dehydrierung

Die nicht-oxidative Propandehydrierung zu Propen (PDH) ist eine wichtige umweltfreundliche Alternative zu öl-basierten Crackverfahren, um diese wichtige Plattformchemikalie herzustellen. Die gegenwärtigen PDH-Technologien verwenden Pt- oder Cr-haltige Katalysatoren, die unter den hohen Kosten von Pt oder der Toxizität von Cr(VI) leiden. Ermutigt durch die Anforderungen der ökologischen Nachhaltigkeit haben wir eine Herstellungsmethode mit einem Potenzial für großtechnische Anwendungen entwickelt, um industriell relevante PDH-Katalysatoren unter Verwendung von kommerziellen Trägermaterialien und ZnO herzustellen.

Motiviert durch die niedrigen Kosten und Umweltverträglichkeit von ZnO war unser Ziel, eine Herstellungsmethode zu entwickeln, die leicht von Gramm auf Kilogramm hochskaliert werden kann, um PDH-Katalysatoren mit industriell relevanter Performance zu liefern. Wir stellten die Hypothese auf, dass metallische Zn-Atome in der Gasphase bei der Reduktion von ZnO über dem Schmelzpunkt von Zn erzeugt und durch Träger-OH-Gruppen zu ZnO_x-Spezies oxidiert werden können.

Um die Katalysatoren herzustellen, mischten wir einfach ZnO- und kommerzielle Trägermaterialien oder verwendeten ein Zwei-Bett-System mit ZnO im vorderen Bett (Abb. 1).^[1,2] ZnO_x-Spezies wurden auf der Oberfläche des Trägers nach der Behandlung in einem H₂-Strom bei etwa 550°C erzeugt. Ihre Struktur und Konzentration kann

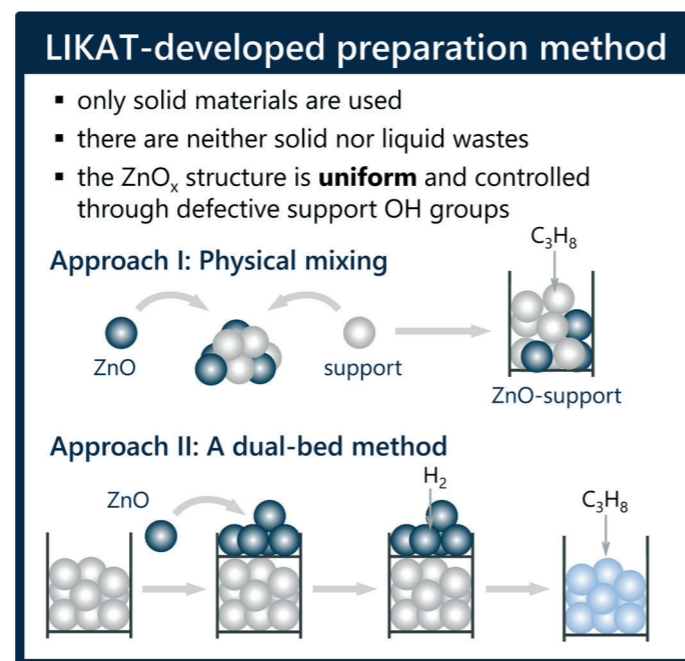


Abb. 1: am LIKAT-entwickelte Präparationsmethoden

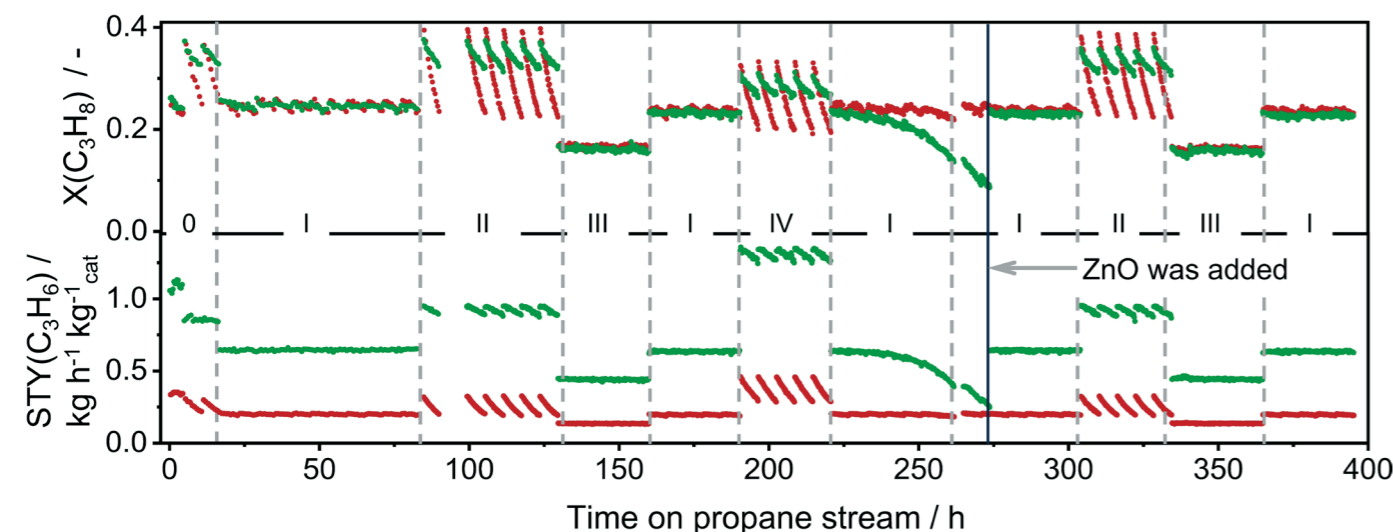


Abb. 2: Propanumsatz ($X(C_3H_8)$) und Propen-Raum-Zeit-Ausbeute ($STY(C_3H_6)$) am ZnO-S-1 (grün) und K-CrO_x/Al₂O₃ (rot) bei 550 °C unter verschiedenen industriell relevanten Bedingungen.

durch die Topologie von SiO₂ und das Vorhandensein von OH-Gruppen gesteuert werden. Diese Schlussfolgerung war möglich durch die Kombination komplementärer Methoden von TG Kondratenko, TG Jiao, TG Linke, TG Rodemerck, TG Rabeah, TG Wohlrab und „Analytik“ des LIKAT sowie Gruppen von Prof. Grunwaldt (KIT, Karlsruhe) und Prof. Jiang (China University of Petroleum, Peking). Die industrielle Relevanz unserer Methode wurde in einem Test mit einer physikalischen Mischung aus ZnO und Silikalit-1 (ZnO-S-1) über etwa 400 h im Propanstrom bei 550 °C unter industriell relevanten Bedingungen nachgewiesen (Abb. 2). Im Vergleich mit dem gleichzeitig getesteten Analogon des kommerziellen K-CrO_x/Al₂O₃-Katalysators zeigte die Mischung eine etwa dreimal höhere Propenproduktivität bei ähnlicher Propenselektivität.

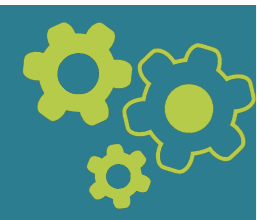
Wir stehen in Kontakt mit potenziellen Industriepartnern. Aus wissenschaftlicher Sicht ist geplant, den Einfluss der Art der ZnO_x-Spezies, die durch die Art der Trägermaterialien und defekter OH-Gruppen gesteuert werden kann, auf die Katalysatorleistung weiter aufzuklären. Das entwickelte Konzept soll auch auf andere Metalle ausgeweitet werden. Dazu ist ein DFG-Projekt in Vorbereitung sowie interne Studien im Gange.

Wissenschaftlicher Ansprechpartner:
Prof. Dr. Evgenii Kondratenko



[1] D. Zhao, X. Tian, D. E. Doronkin, S. Han, V. A. Kondratenko, J.-D. Grunwaldt, A. Perechodjuk, T. H. Vuong, J. Rabeah, R. Eckelt, U. Rodemerck, D. Linke, G. Jiang, H. Jiao, E. V. Kondratenko, *Nature* 2021, 599, 234-238. *In-situ* formation of ZnO_x species for efficient propane dehydrogenation.

[2] D. Zhao, K. Guo, S. Han, D. E. Doronkin, H. Lund, J. Li, J.-D. Grunwaldt, Z. Zhao, C. Xu, G. Jiang, E. V. Kondratenko, *ACS Catalysis* 2022, 12, 4608-4617. Controlling Reaction-Induced Loss of Active Sites in ZnO_x/Silicalite-1 for Durable Nonoxidative Propane Dehydrogenation.



Datenwissenschaftlich unterstützte Entwicklung von CO₂-Hydrierungskatalysatoren für die Produktion von Kohlenwasserstoffen

Motivation: Die Hydrierung von Kohlendioxid, die sog. CO₂-Fischer-Tropsch-Reaktion (CO₂-FT), zu höheren Kohlenwasserstoffen ist eine mögliche Lösung für das Problem der CO₂-Emissionen. Da die Zahl der wissenschaftlichen Veröffentlichungen zu diesem Thema stark zunimmt, wird es immer attraktiver, moderne Methoden für die Analyse der Literatur einzusetzen. Diese können bei der Systematisierung und Auswertung des umfangreichen Datenbestandes helfen, latentes Wissen extrahieren sowie die Ableitung neuer Ideen unterstützen.

Das Hauptziel der vorliegenden Studie besteht darin, die Literatur über Katalysatoren für die CO₂-Hydrierung zu analysieren, um Beziehungen zwischen Katalysatoreigenschaften und Leistung zu ermitteln, diese experimentell zu validieren und für die Entwicklung hochselektiver und aktiver katalytischer Materialien einzusetzen. Detaillierte Informationen über katalytische Leistung, Katalysatorzusammensetzung, Reaktionsbedingungen usw. wurden aus wissenschaftlichen Artikeln extrahiert und in eine SQL-Datenbank konvertiert.

Da es viele voneinander abhängige katalytische Leistungsparameter gibt, haben wir zu-

nächst einen Ansatz entwickelt, diese in eine kleine Anzahl voneinander unabhängiger Parameter umzuwandeln, um die Korrelation zu minimieren und damit die Aussagekraft der Analyse zu verbessern. Solche Parameter sind die Kettenwachstumswahrscheinlichkeit α und die Exzess-CH₄-Selektivität γ , die einen Methan-Überschuss im Vergleich zur Anderson-Schulz-Flory-Verteilung ausdrückt.^[1] Das thermodynamische Verhältnis η ^[2] wurde geschätzt, um die Annäherung an das Gleichgewicht der Reaktion der umgekehrten Wassergasreaktion (RWGS) zu analysieren. Schließlich wurde eine Random Forest (RF) Regression angewandt, um die wichtigsten Parameter zu ermitteln, die die Katalysatorleistung bestimmen.

Ergebnisse: Es wird allgemein angenommen, dass der Prozess der CO₂-Hydrierung in zwei Stufen abläuft: RWGS-Reaktion gefolgt von der CO-Hydrierung über den FT-Mechanismus. In diesem Fall sollte das thermodynamische Verhältnis η nicht höher als 1 sein. Betrachtet man allerdings das Verhältnis η für alle Katalysatoren aus der erhaltenen Datenbank, so stellt man

fest, dass etwa 20 % der Daten Werte von η höher als 1 haben (siehe Abb. 1A).

Das beobachtete Ergebnis könnte durch das Vorhandensein eines direkten Weges der CO₂-Hydrierung zu höheren Kohlenwasserstoffen über den FT-Mechanismus erklärt werden. Um diesen „hypothetischen“ Weg zu validieren, haben wir Katalysatoren auf Fe-Basis mit der Methode der organischen Verbrennung hergestellt und ihn unter CO₂-FT-Bedingungen in einem weiten Bereich an CO₂-Umsätzen getestet (siehe Abb. 1B).^[3] Es zeigte sich, dass die Selektivität für C₂+ -Kohlenwasserstoffe bei einem CO₂-Umsatz von Null etwa 30 % beträgt. Dies deutet auf das Vorhandensein eines direkten CO₂-Hydrierungsweges hin. Die XRD-Analyse des verbrauchten Katalysators ließ den Schluss zu, dass Fe₅C₂ für diese direkte Hydrierung von CO₂ zu C₂+ -Kohlenwasserstoffen verantwortlich sein könnte.

Der Einfluss der Reaktionsbedingungen und der Katalysatorzusammensetzung auf die Parameter α und γ , die die Schlüsselparameter der Katalysatorselektivität sind, wurde ebenfalls analysiert. Es wurde festgestellt, dass die Parameter nur geringfügig von den Reaktionsbedingungen abhängen und somit vorrangig durch den Katalysator bestimmt werden. Die Analyse der Bedeutung der Parameter bestätigte, dass die Dotierung mit Alkalimetallen die wirksamste Maßnahme zur Verbesserung der Katalysatorleistung ist. Die erzielten Ergebnisse wurden für die Entwicklung einer Strategie zum Screening selektiver und aktiver CO₂-FT-Katalysatoren verwendet (unser Weg bei der Katalysatorentwicklung ist in Abb. 1C dargestellt), die den Erfolg des Vorgehens mit vorgeschalteter Datenanalyse demonstriert.

Schlussfolgerungen: Die Literatur-Datenanalyse und die daraus abgeleiteten Experimente haben das Verständnis des CO₂-FT-Prozesses erweitert. Dies war die Grundlage für die Entwicklung gut funktionierender Katalysatoren für die Herstellung von Kohlenwasserstoffen aus CO₂.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass der Einsatz moderner ML- und Data-Science-Methoden zur Analyse von Literatur-Katalysatoren erhebliche Vorteile bringt. Die wissenschaftliche Arbeit wird beschleunigt und die Ableitung neuer Ideen und Hypothesen unterstützt.

Wissenschaftlicher Ansprechpartner:
Dr. David Linke

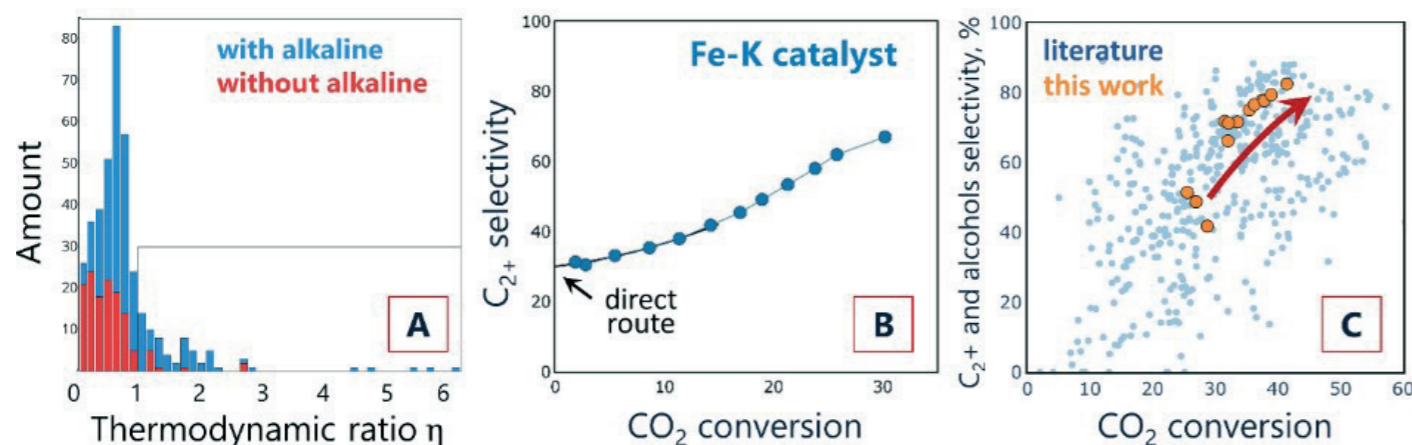
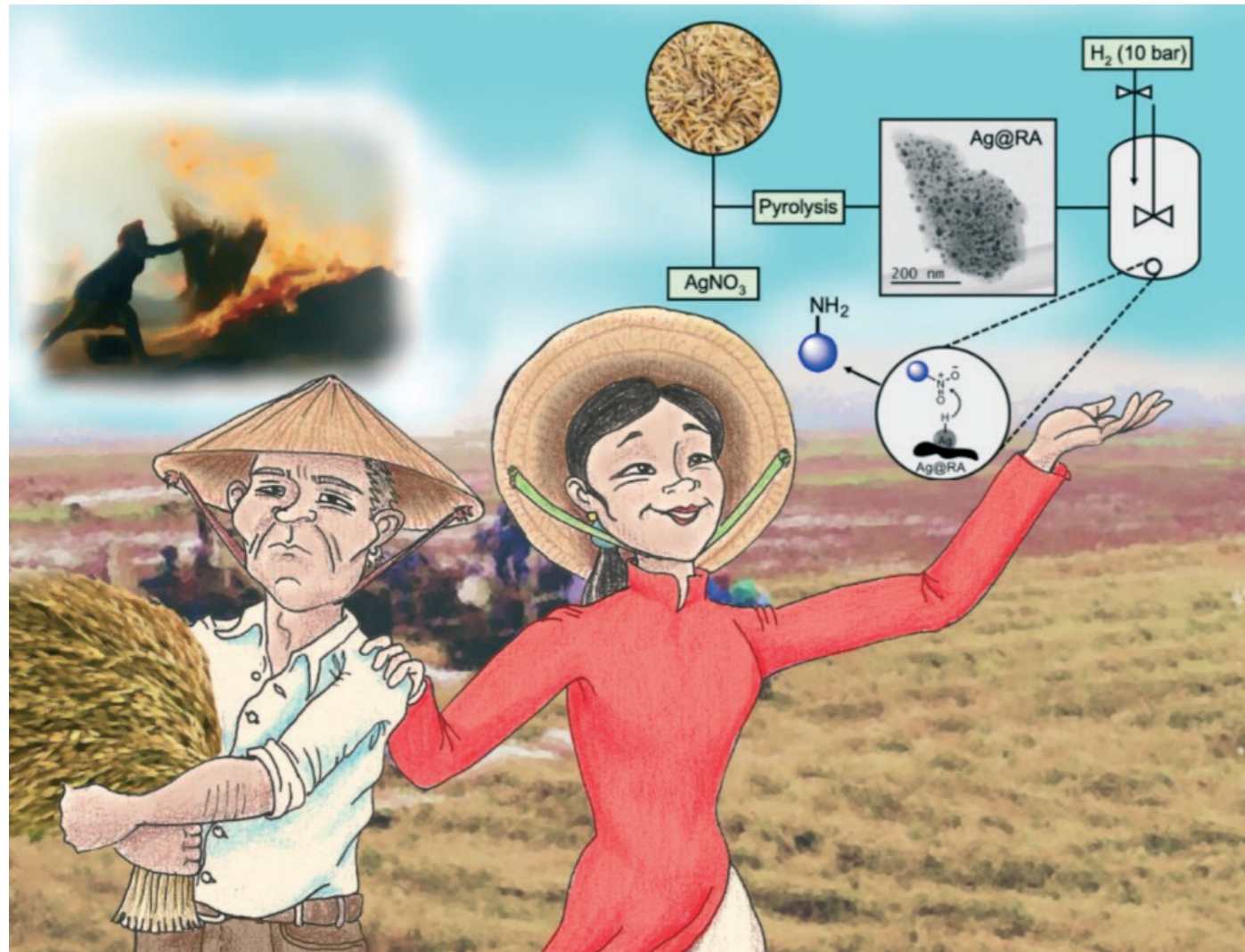


Abb. 1. A: Verteilung des thermodynamischen Verhältnisses η für die Katalysatoren aus der entwickelten Literatur-Datenbank. B: Abhängigkeit zwischen C₂+ -Kohlenwasserstoffselektivität und CO₂-Umsatz für den Fe-K-Katalysator (Temperatur 300 °C; Druck 15 bar, CO₂:H₂ = 1:3). C: Vergleich zwischen den Literaturdaten und den am LIKAT entwickelten Katalysatoren.

[1] A. Fedorov, D. Linke, *J. CO₂ Util.* **2022**, *61*, 102034. Data Analysis of CO₂ Hydrogenation Catalysts for Hydrocarbon Production.
[2] Y. Xu, P. Zhai, Y. Deng, J. Xie, X. Liu, S. Wang, D. Ma, *Angew.* **2020**, *132*, 21920-21928. Highly Selective Olefin Production from CO₂ Hydrogenation on Iron Catalysts: A Subtle Synergy between Manganese and Sodium Additives.
[3] A. Fedorov, H. Lund, V. A. Kondratenko, E. V. Kondratenko, D. Linke, *Appl. Catal.* **2023**, 122505. Elucidating reaction pathways occurring in CO₂ hydrogenation over Fe-based catalysts.



Entwicklung von Katalysatoren aus (Reis-) Bioabfall



(Abb.: Esteban Mejía)

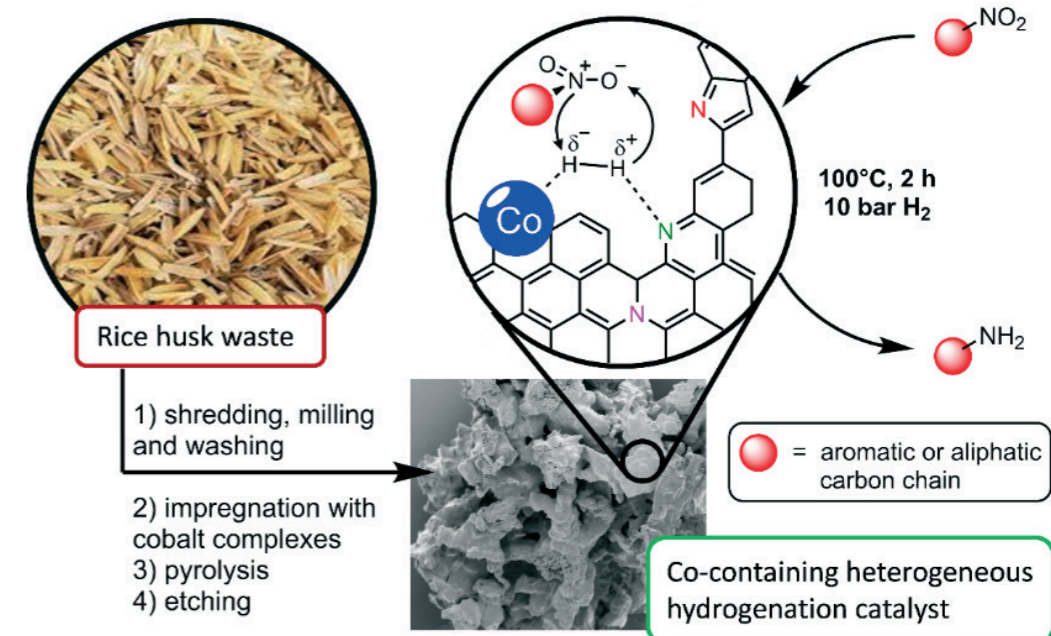
Reis oder Padi ist die mit Abstand wichtigste Nahrungspflanze für den menschlichen Verzehr und die Hauptnahrungsquelle für mehr als ein Drittel der Weltbevölkerung. Padi-Felder nehmen mehr als 10 % der weltweiten Anbaufläche ein, was zu einer geschätzten weltweiten Produktion von 501,96 Millionen Tonnen im Jahr 2020 führt. Die Bewirtschaftung und Entsorgung der nicht essbaren Reisnebenprodukte, vor allem Reishülsen und Stroh, stellt daher eine Herausforderung für die Umwelt dar, da traditionell große Mengen dieser Produkte im Freien verbrannt werden. Diese Praxis ist zwar für die Landwirte bequem, setzt aber große Mengen an Treibhausgasen und Feinstaub in die Atmosphäre frei. Daher ist die Entwicklung von Strategien für die nachhaltige Bewirtschaftung

und Verwertung von landwirtschaftlichen Reisabfällen von großer Bedeutung. Aufgrund des hohen Anteils an Kieselsäure in Reishülsen (RH) (bis zu 25 Gew.-%) wurden viele Forschungsanstrengungen der Gewinnung und Verwendung dieser biogenen Kieselsäure als Trägermaterial für heterogene Katalysatoren gewidmet. Das Ziel dieser Arbeit, die Verwendung von Reishülsen (RH), die ein landwirtschaftlicher Abfall sind, für die Synthese von katalytisch aktiven Materialien, ist beides:
 1) die Nutzung einer Ressource, die tatsächlich auf den Feldern wächst, und
 2) die Senkung des Energiebedarfs von chemischen Prozessen durch die Verwendung eines Katalysators.

Zusammengefasst wurde in dieser Arbeit die Nutzung von RH für die Entwicklung von Hydrierkatalysatoren realisiert. Die Herstellung des Ag-basierten Katalysators für die Nitrogruppenreduktion hat gezeigt, dass es grundsätzlich möglich ist, Metallionen an RH zu fixieren und durch carbothermische Reduktion in katalytisch aktive Partikel zu überführen. Der zweite Projektschritt zeigte, dass die Methodik auf die Verwendung anderer Metalle als aktive Zentren übertragen werden kann. Daher wurde der Co-basierte Katalysator durch Einführung von Co in Form von stickstoffreichen Komplexen hergestellt. Darüber hinaus wurden die katalytischen Eigenschaften sowie die Recyclingstabilität des hergestellten Katalysators durch Basen-Ätzen der Kohlenstoff-Silika-Verbundstruktur des RH-Trägers optimiert. Der Katalysator wurde für die Reduktion von Nitrogruppen verwendet. Schließlich wurde einer Ni-basierte Katalysator für die reduktive Umwandlung von Epoxiden zu Anti-Markovnikov Alkoholen verwendet. Die katalytische Leistung der drei Modellsysteme wurde durch Reaktionsoptimierung, ein umfangreiches Substratscreening und kinetische Studien bewertet. Darüber hinaus wurden die Struktur-Aktivitäts-Beziehungen der hergestellten Katalysatoren mit verschiedenen Charakterisierungsmethoden wie z.B. XRD, XPS, TPD, BET- Oberflächenanalyse, EA, IR und den Mikroskopietechniken SEM und STEM untersucht. So konnten die katalytisch aktiven Zentren identifiziert und die Wirkungsweise offengelegt werden. Außerdem wurde das hergestellte Ag-haltige Material erfolgreich als antimikrobielles Mittel

getestet. Es konnte gezeigt werden, dass die Ag-Nanopartikel auf pyrolysiertem RH in extrem geringen Mengen antimikrobielle Aktivität gegen die ESKAP-Erreger und pathogene Hefen besitzen. Die vorgestellte Methode profitiert von der bekannten antimikrobiellen Wirkungsweise von Ag NP und kombiniert diese mit einem einfachen und unkomplizierten Synthesansatz. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die in dieser Arbeit vorgestellten alternativen Wege der RH-Nutzung auf verschiedene Hydrierungsreaktionen unter Verwendung verschiedener Metalle und die Herstellung von Sanitärmaterialien angewendet werden können. Solche alternativen Behandlungsmethoden müssen jedoch in erster Linie das Vertrauen und die Akzeptanz der am meisten betroffenen Personen gewinnen: der Reisbauern. Andernfalls wird die traditionelle Methode der offenen Verbrennung die angewandte Lösung für das Abfallproblem bleiben, da sie eine reibungslose Reisproduktion und damit die Existenzgrundlage für ca. 4 Millionen Menschen allein in Vietnam sichert. Daher ist es von äußerster Wichtigkeit, dass Forschungen wie die hier vorgestellte nicht nur innerhalb der wissenschaftlichen Gemeinschaft diskutiert und präsentiert werden, sondern auch den Behörden und den Mitarbeitern der betroffenen Gemeinden vorgestellt werden.

Wissenschaftlicher Ansprechpartner:
 PD Dr. habil. Esteban Mejía

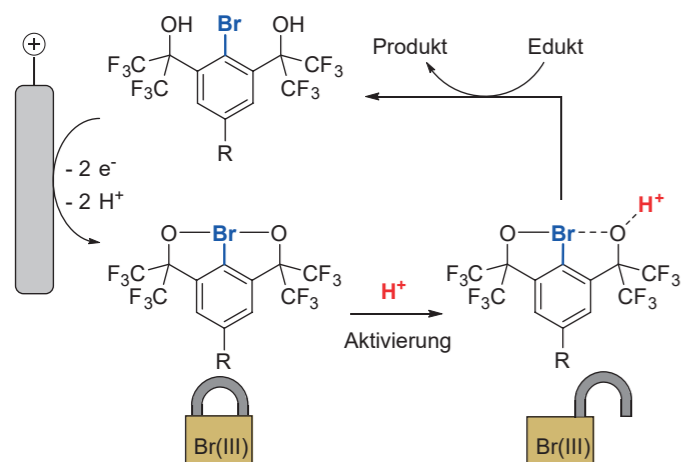




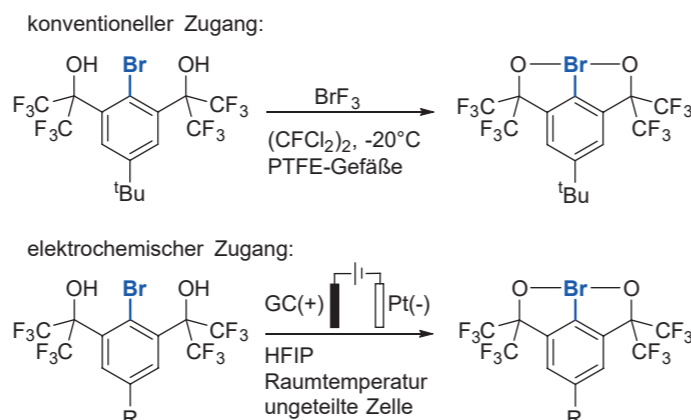
Einfacher und skalierbarer elektrochemischer Zugang zu hypervalenten Br(III)-Verbindungen

Kürzlich wurde von einer elektrochemischen Synthese von ungewöhnlichen OCO-Pincerkomplexen des Br(III) berichtet. Generell sind hypervalente Brom(III)-Verbindungen im Gegensatz zu den isoelektronischen Iod(III)-Verbindungen nur wenig untersucht worden, was auf die schwer kontrollierbare Reaktivität sowie die herkömmliche Syntheseroute über das hochgiftige und korrosive Bromtrifluorid zurückzuführen sein dürfte. Angesichts der vielfältigen katalytischen und stöchiometrischen Anwendungen der Iod(III)-Verbindungen und der interessanten Eigenschaften der Br(III)-Analoge (höhere Elektrophilie und Oxidationspotentiale) ist von einem hohen Anwendungspotential auszugehen. Im Vergleich zu den bekannten hochreaktiven Organobrom(III)-Verbindungen bieten die untersuchten OCO-Pincerkomplexe den Vorteil, dass die intrinsische Reaktivität durch die dreifache Koordination blockiert ist und bei Bedarf durch den Zusatz von Lewis-Säuren freigesetzt werden kann. Der präparative Nutzen wurde bereits durch den erfolgreichen Einsatz bei oxidativen Aren-Aren- und Amid-Aren-Kupplungen demonstriert.

Die ersten hypervalenten Iod(III)-Verbindungen wurden bereits 1886 von Conrad Willgerodt synthetisiert und das nur 75 Jahre nach der Entdeckung des Elements Iod.



Elektrosynthese hypervalenter Br(III)-Verbindungen.



Vergleich von konventionellem und elektrochemischen Zugang zu Bromanen

Allerdings sind den Synthesechemikern die Vorzüge dieser Verbindungsklasse erst in den letzten Jahrzehnten bewusst geworden, was zu einem Aufschwung in unzähligen Anwendungsbereichen geführt hat.

Das wachsende Interesse dieser Verbindungen ist auf ihre milden Eigenschaften in Kombination mit ihrem umweltfreundlichen Charakter und ihrer leichten Handhabbarkeit zurückzuführen, vor allem aber auf ihre leichte Verfügbarkeit. Eine Reihe von ihnen ist inzwischen auch kommerziell verfügbar. Brom(III)-Verbindungen versprechen ein stark erweitertes Anwendungsfeld. Allein die schwierige Synthese und die damit eingeschränkte Verfügbarkeit haben bisher eine ähnliche Entwicklung verhindert. Ein vereinfachter, elektrochemischer Zugang zu hypervalenten Br(III)-Verbindungen könnte das ändern.

Chelat-stabilisierte Aryl- λ^3 -Bromane wurden bereits von Martin et al. beschrieben. Die Produkte selbst sind luft- und feuchtigkeitsstabil. Für dessen Synthese muss aber Bromtrifluorid als Oxidationsmittel verwendet werden. Das hochgiftige BrF_3 greift selbst Glas an und ist keine Standardchemikalie in einem synthetischen Labor. Elektrischer Strom soll die „ungeliebte Chemikalie“ BrF_3 ersetzen.

Die anodische Oxidation der Arylbromide ge-

lingt in einer ungeteilten Zelle mit Glaskohlenstoff als Arbeitselektrode, Platin als Gegenelektrode, Tetrabutylammoniumtetrafluoroborat als Leitsalz und Hexafluorisopropanol (HFIP) als Lösemittel. Durch ein Scale-up der Elektrolyse sind Gramm-Mengen des Bromans in über 70%iger Ausbeute mit einer hohen Reinheit leicht verfügbar.

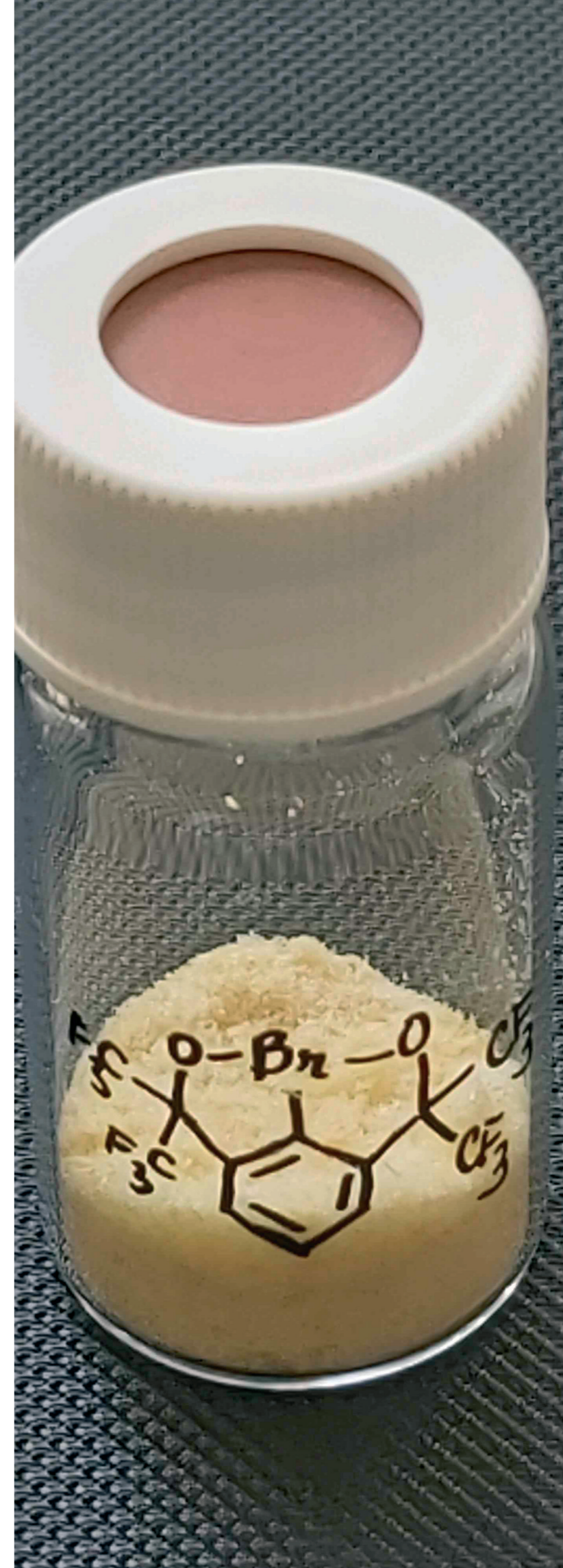
Der synthetische Nutzen dieser Verbindungen konnte bei oxidativen Kupplungen zu Biarylen, oxidativen Amid-Aren-Kupplungen oder der oxidativen Zyklisierung von Schiff-Basen zu Benzoxazolen bereits bewiesen werden.

Das entwickelte elektrochemische Syntheseverfahren für λ^3 -Bromane bietet erhebliche Vorteile im Vergleich zu den bestehenden Methoden, die auf hochtoxisches, gefährliches und schwer zu handhabendes BrF_3 als Schlüsselreagenz angewiesen sind. Daher glauben wir, dass unser Ansatz die Tür für die Entwicklung völlig neuer synthetischer Transformationen öffnen kann, die von den einzigartigen Eigenschaften der hypervalenten Brom(III)-Spezies profitieren könnten.

Wissenschaftlicher Ansprechpartner:
Prof. Dr. Robert Francke

- [1] N. Mohebbati, I. Sokolovs, P. Woite, M. Lokov, E. Parman, M. Ugandi, I. Leito, M. Roemelt, E. Suna, R. Francke, *Chem. Eur. J.* 2022, 28, e202200974. Electrochemistry and Reactivity of Chelation-stabilized Hypervalent Bromine(III) Compounds.
- [2] I. Sokolovs, N. Mohebbati, R. Francke, E. Suna, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, 15832-15837. Electrochemical Generation of Hypervalent Bromine(III) Compounds.

Aktuelle Projekte - TF 05





IREKA und SEGIWA zur Umsetzung der Nationalen Wasserstoffstrategie

2020 wurde die Nationale Wasserstoffstrategie von der Bundesregierung mit dem Ziel verabschiedet, Deutschland zu einem internationalen Vorreiter und Marktführer bei Wasserstofftechnologien zu machen. Um dies zu realisieren, werden drei Leitprojekte durch das BMBF gefördert.

Das Themenfeld 05 (TG Francke, TG H. Junge und FB Wohlrab) ist mit zwei Projekten am Leitprojekt „Hochskalierung und Serienfertigung von Elektrolyseuren“ (**H2Giga**) beteiligt. Ziel von H2Giga ist der Aufbau von möglichst 5 GW Elektrolysekapazität bis 2030 in Deutschland, um dem stetig wachsenden Bedarf an Wasserstoff zu entsprechen. Im Innovationspool von H2Giga werden Projekte gefördert, wie auch das vom LIKAT geleitete Verbundvorhaben **IREKA**, die auf die Untersuchung und Entwicklung von Verfahren, Technologien und Komponenten rund um die Elektrolyse hinzielen.

Ein weiteres LIKAT-Projekt wird unter der Leitung von Siemens Energy im Verbundvorhaben **SEGIWA** gefördert. Hierbei handelt es sich um ein Scale-up-Projekt, mittels dessen Technologien für die Serienfertigung von PEM-Elektrolyseuren entwickelt und etabliert werden. Beide Projekte werden von Dr. A.-E. Surkus koordiniert.

Ziel des Projekts: Die PEM-Elektrolyse basiert auf den Einsatz von IrO_2 als Anodenkatalysator. Bis jetzt gibt es noch keinen wirklichen Ersatz für diesen Elektrokatalysator, da die stark sauren und oxidativen Bedingungen an der Anode zur schnellen Korrosion führen. Bei stetig wachsendem Energieverbrauch wird jedoch in wenigen Jahrzehnten der Bedarf an Iridium die verfügbaren Ressourcen übersteigen. Dadurch wird der Preis sowohl des Iridiums als auch der darauf basierenden Technologien kontinuierlich ansteigen. Ein Ausbau der PEM-Elektrolysekapazitäten im großen Maßstab lässt sich daher langfristig nur umsetzen, wenn der Iridium-Einsatz signifikant reduziert wird. Das Verbundvorhaben

IREKA zielt daher auf die Reduzierung des Iridium-Gehalts von PEM-Anoden unter Beibehaltung der katalytischen Aktivität und Stabilität. Im LIKAT-Projekt SEGIWA wird dann der aussichtsreichste Kandidat in seiner Synthese hochskaliert und den Verbundpartnern als alternatives Anodenmaterial für industrielle Anwendungstests zur Verfügung gestellt.

Aufgabenteilung und Ergebnisse: Im LIKAT-Teilvorhaben IREKA soll durch Trägern der Iridiumgehalt gesenkt sowie die Morphologie des Komposits so verändert werden, dass die katalytisch aktiven Zentren homogen verteilt und besser erreichbar für die Wasseroxidation sind. Dadurch sollen die Aktivitätseinbrüche ausgeglichen werden, die aufgrund des reduzierten Iridium-Einsatzes zu erwarten sind. Um mögliche Verluste der elektrischen Leitfähigkeit abzufangen, wird der Träger dotiert, womit gleichzeitig die Korrosionsbeständigkeit verbessert werden soll. Ein weiterer Ansatz ist die Beimischung eines zweiten, gut verfügbaren Metalls, das durch die Gegenwart von Iridium vor Korrosion geschützt wird und gleichzeitig das Iridium bei der Katalyse unterstützt. Zur Umsetzung dieser Pläne arbeiten drei Arbeitsgruppen des LIKAT zusammen; die TG „Katalyse für Energietechnologien“, die sich damit beschäftigt, wie und in welcher Form das Iridium auf einem Träger immobilisiert werden kann, die TG „Oberflächenchemie in der angewandten Katalyse“, die den Fokus auf die Verbesserung der morphologischen Eigenschaften des Trägers und des Komposits legt und die TG „Molekulare Elektrochemie“, die die elektrochemische Testung hinsichtlich der katalytischen Eignung für die saure Wasseroxidation untersucht. Externer Partner in IREKA ist die Abteilung Galvanotechnik des IPA Stuttgart, die ihre Expertise zur Erzeugung von Iridium-haltigen Schichten nutzen. Die Projekte IREKA und SEGIWA starteten im Frühjahr 2021 mit einer vierjährigen Laufzeit. In der bisherigen Bearbeitungszeit gelang die Synthese eines geträgerten Ir-Sn-Oxids, das im Vergleich mit den



(Foto: Tobias Täufer)

bisher genutzten IrO_2 -Materialien eine ähnlich geringe Überspannung sowie bezogen auf den deutlich verringerten Iridiumgehalt eine verbesserte Austauschstromdichte aufweist.

Wissenschaftlicher Ansprechpartner:
Prof. Dr. Robert Francke, Dr. Sebastian Wohlrab,
Dr. Henrik Junge, Dr. Annette-Enrica Surkus



Entwicklung stabiler heterogener Ein-Atom-Katalysatoren für die Oxidationskatalyse

Die Optimierung heterogener Ein-Atom-Katalysatoren (SACs) ist unerlässlich, um sie für industrielle Anwendungen zu optimieren. Dies geschieht durch die systematische Modulation ihrer physikalisch-chemischen Eigenschaften, ihre katalytische Erprobung in industriell relevanten Prozessen und schließlich ihre Charakterisierung mit *Operando*-Methoden, um Struktur-Reaktivitäts-Beziehungen herzustellen. Wir konzentrieren uns in diesem Projekt auf heterogene Cu-SACs für die Oxidationskatalyse. Die erste ist die CO-Oxidation, die als Testreaktion dient und auch in der katalytischen Nachbehandlung und in PEM-Brennstoffzellen eingesetzt wird. Die zweite ist die Wasser-Gas-Verschiebung (WGS), die bei der Herstellung und Reinigung von Wasserstoff nach der Kohlenwasserstoffreformierung eingesetzt wird.

Ziele sind (i) die Synthese von heterogenen Cu-SACs auf CeO_2 - TiO_2 -Trägern, (ii) katalytische Tests bei der CO-Oxidation und LT-WGS und (iii) operative Charakterisierung mit verschiedenen Methoden.

Auf der Grundlage früherer Ergebnisse zu Cu-SACs, die von UiO-66 auf Zr-Basis geträgert werden, und des Verständnisses ihrer Struktur-Reaktivitäts-Beziehung^[1] haben wir die Eintopfsynthese von Cu-SACs auf CeO_2 - TiO_2 -Trägern optimiert und ihre katalytische Aktivität bei der CO-Oxidation und LT-WGS untersucht. Die CO-Oxidationsaktivität von Cu/ CeO_2 - TiO_2 -SACs kann durch Modulation des Ce/Ti-Verhältnisses fein abgestimmt werden. Die katalytische Aktivität folgt einer vulkanförmigen Abhängigkeit vom Ce/Ti-Molverhältnis, wobei die katalytische Aktivität bei einem Ce/Ti-Verhältnis von etwa 0,18 ihren Höhepunkt erreicht, während gleichzeitig die Cu-Beladung deutlich unter 0,1 Gew.-% liegt.^[2] Die Ergebnisse einer Vielzahl von Charakterisierungen deuten darauf hin, dass sich isolierte Cu-Einzelstellen zu kleinen CeO_x -Nanopartikeln zusammenschließen, die homogen auf

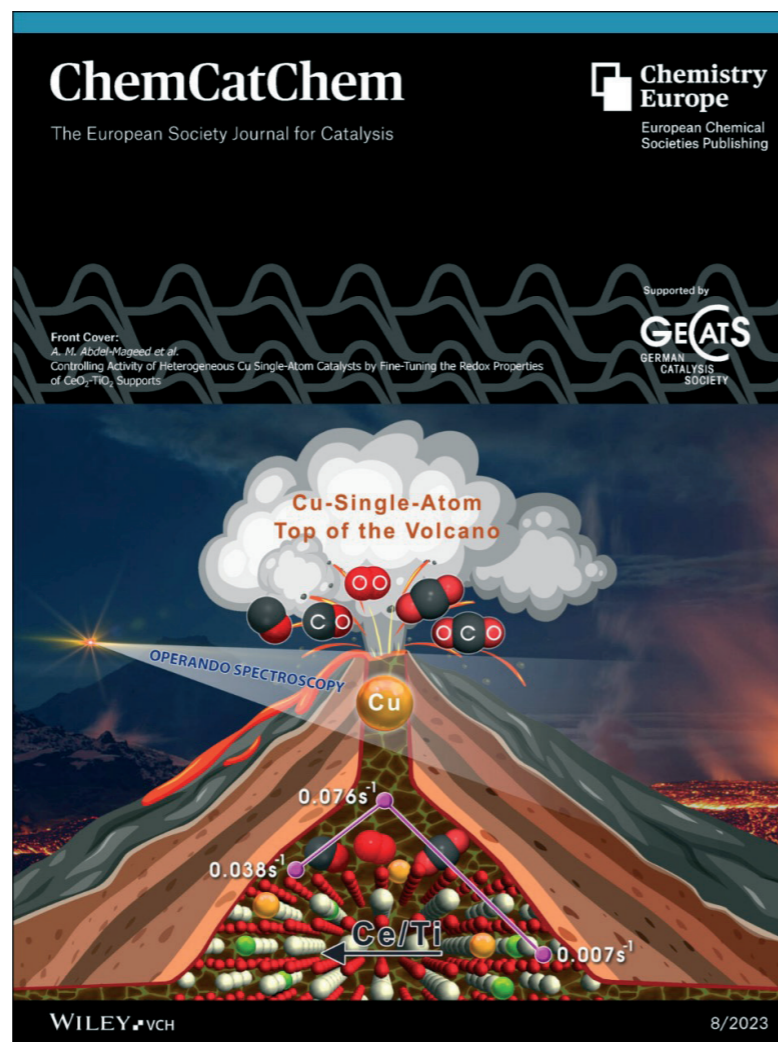


Abb.: Frontcover der in *ChemCatChem* veröffentlichten Arbeit, in der die für optimierte heterogene Cu-SACs bei der CO-Oxidation erstellte Strukturbeziehung hervorgehoben wird.^[2] (DOI: 10.1002/cctc.202300441)

TiO_2 verteilt sind.

Es wurde festgestellt, dass die Änderung des Ce/Ti-Verhältnisses die Redox Eigenschaften der $\text{Cu}^{1+}/\text{Cu}^{2+}$ - und $\text{Ce}^{3+}/\text{Ce}^{4+}$ -Redox-Shuttles und damit die katalytische Aktivität moduliert. Diese Materialien wurden außerdem in der Niedrigtemperatur-Wasser-Gas-Verschiebungsreaktion (WGS) zwischen 300 und 180°C getestet. Wir fanden heraus, dass Cu/ CeO_2 - TiO_2 (Ce/Ti \approx 0,18) in der gleichen Aktivitätsordnung liegt wie die hochaktiven Au-Trägerkatalysatoren.^[3, 4]

Cu-SACs zeigten jedoch eine höhere Stabilität während der Reaktion im Strom im Vergleich zu Katalysatoren auf Au-Basis, die während der Reaktion stark desaktivieren (Ergebnisse submitted).

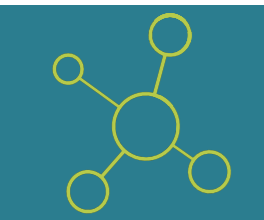
Künftig könnten die optimierten Materialien für die lösungsmittelfreie aerobe Oxidation primärer Alkohole in flüssiger Phase zu nützlichen Chemikalien verwendet werden. Darüber hinaus sollen ähnliche Synthesemethoden für die Architektur von SACs auf Edelmetallbasis (Pd, Ru und Pt) entwickelt und ihre Anwendbarkeit für die oben genannten Reaktionen untersucht werden.

Wissenschaftlicher Ansprechpartner:
Dr. Ali Abdel-Mageed

- [1] A. Abdel-Mageed, B. Rungtaweeworani, X. Pei, O. Yaghi, J. Behm, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 5201-5210.
- [2] A. Abdel-Mageed, S. Cisneros, J. Mosrati, H. Atia, T. Vuong, N. Rockstroh, S. Wohlrab, A. Brückner, J. Rabeah, *ChemCatChem* **2023**, e202201669.
- [3] A. Abdel-Mageed, G. Kučerová, J. Bansmann, J. Behm, *ACS Catal.* **2017**, *7*, 6471-6484.
- [4] J. Carter, A. M. Abdel-Mageed, D. Zhou, D. J. Morgan, X. Liu, J. Bansmann, S. Chen, J. Behm, G. Hutchings, *ACS Nano* **2022**, *16*, 15197-15205.

Aktuelle Projekte - TF 06





Synthese fluorhaltiger Bausteine mit CF₂-Funktion für die Wirkstoffforschung

Es ist lange bekannt, dass fluorhaltige Gruppen die Bioverfügbarkeit und die Aktivität eines Wirkstoffes erhöhen. Eigenschaften wie Löslichkeit, Lipophilie, metabolische Stabilität, Fähigkeit Wasserstoffbrücken zu bilden und chemische Reaktivität werden durch fluorhaltige Substituenten stark beeinflusst. Fluoroalkylierungsreaktionen haben daher an Bedeutung in den letzten Jahren stark zugenommen, das sich auch durch den sprunghaften Anstieg an Publikationen ausdrückt (Abb. 1a). Wichtige Beispiele für Fluorierungsmittel, die eine CF₃- oder CH₂F-Gruppe übertragen können, sind in Abb. 1b dargestellt. Weniger bekannt sind dagegen Reagenzien, die eine CF₂-R Gruppe enthalten. Ein Ziel ist daher, fluorhaltige Bausteine mit einer CF₂-Funktion für die Wirkstoffforschung zu synthetisieren, die sich in der Synthese von Pharmazeutika nutzen lassen.

In den letzten Jahren haben wir uns mit der Synthese von fluorhaltigen organischen Molekülen beschäftigt. Uns ist es gelungen, gem-Difluoroallylammoniumsalze (DFAAs) herzustellen, die als Difluoromethylierungsreagenzien^[1] verwen-

det werden können. Besonders das luftstabile 3,3-Difluorpropen-1-yl-piperidiniumtriflat ist in der Herstellung einfach und nützlich, da eine gem-Difluoroallylgruppe auf O-, N-, S-, C- und Se-Nukleophilen ohne Metallkatalysator übertragen werden kann. Die Synthese von 3,3-Difluorpropen-1-yl-piperidiniumtriflat geht von 3,3,3-Trifluorpropen und Piperidin aus, die sich basenkatalysiert zu γ,γ -Difluoroallylpiperidin umsetzen lassen.

Nachfolgende N-Methylierung mit Methyltriflat liefert das gewünschte Piperidiniumsalz, das auch in Grammaßstab hergestellt werden kann.^[1] Besonders interessant ist die allylische Substitution durch Sauerstoff- oder Stickstoffnukleophile, da sich auf einfache Weise die Struktur motive RCF₂-O und RCF₂-N herstellen lassen, die sonst nicht leicht zugänglich sind.^[2] Die allylische Funktion kann für den Aufbau von analogen Wirkstoffderivaten genutzt werden. Es konnten die Pharmaka Pramocaine und Aripiprazole dargestellt werden, mit geminaler CF₂-Gruppe.^[3]

In weiteren Versuchen soll, gezeigt werden, dass

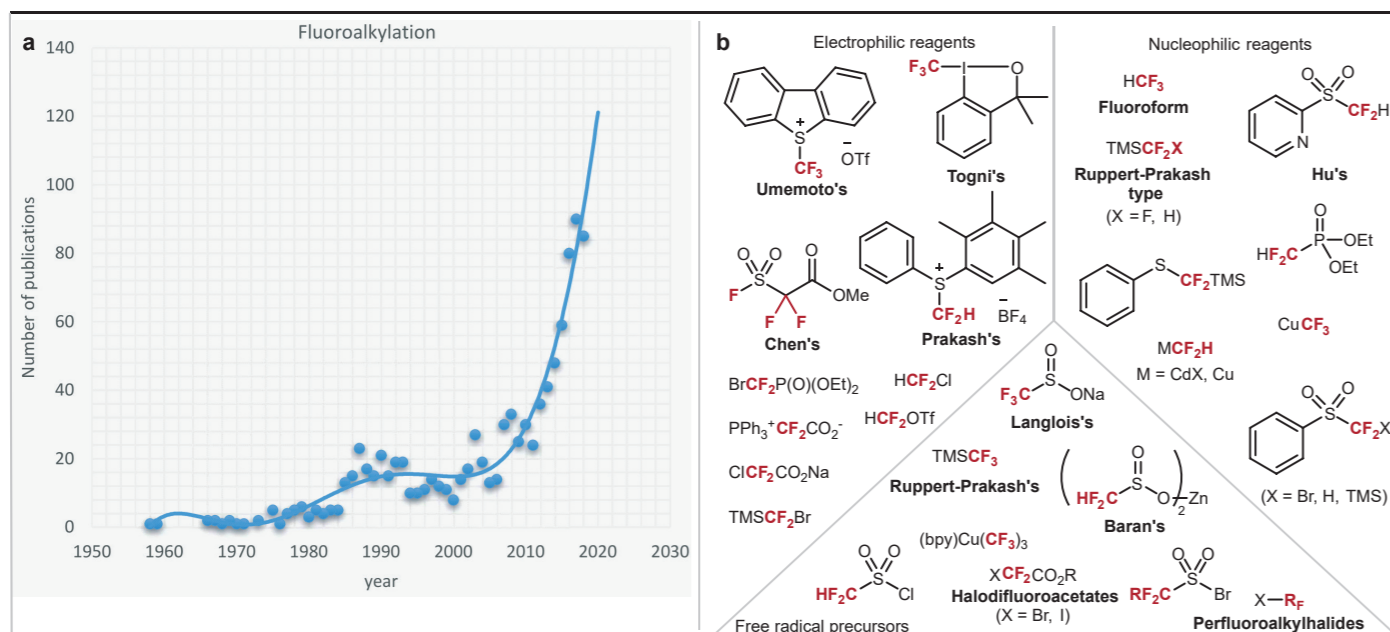


Abb. 1: a) links, Anstieg der Publikationen zu Fluoroalkylierungsreaktionen. b) rechts, wichtige Beispiele für Fluorierungsmittel, die eine CF₃- oder CH₂F-Gruppe übertragen können.

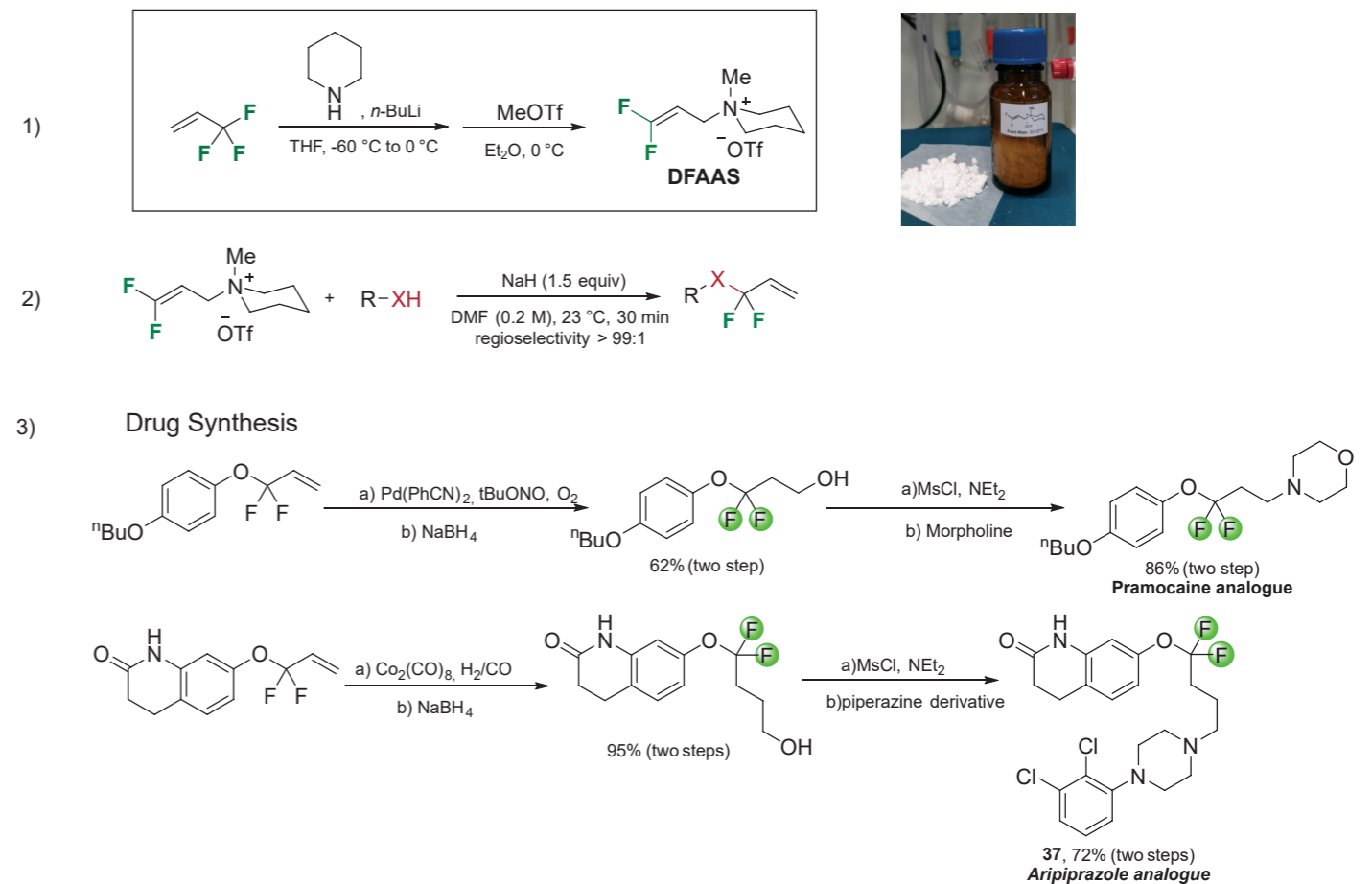


Abb. 2: Herstellung des Difluoromethylierungsreagenz (Kasten) und Übertragung einer gem-Difluoroallylgruppe auf O-, N-, S-, C, und Se-Nukleophile ohne Metallkatalysator

sich das 3,3-Difluorpropen-1-yl piperidiniumtriflat Reagenz auch bei anderen Wirkstoffsynthesen einsetzen lässt. Die allylische Funktion soll epoxidieren und das gebildete Epoxid mit Piperazinderivaten geöffnet werden. Das resultierende Strukturmotiv findet man in vielen Wirkstoffen (Abb. 3). Schließlich soll in Kooperation mit einer Pharmafirma die Wirksamkeit der analogen Medikamente getestet werden.

Wir konnten zeigen, dass sich 3,3-Difluorpropen-1-yl piperidiniumtriflat basenkatalysiert aus

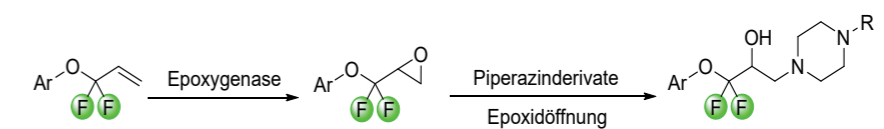


Abb. 3: Epoxidierung der allylischen Funktion und anschließende Öffnung des resultierenden Epoxids mit Piperazinderivaten

Wissenschaftlicher Ansprechpartner:
Dr. Helfried Neumann

[1, 2, 3] F. Ye, Y. Ge, A. Spannenberg, H. Neumann, L-W. Xu, M. Beller, *Nat. Commun.* 2021, 12, 3257. [4] S. Kopf, F. Ye, H. Neumann, M. Beller, *Chem. Eur. J.* 2021, 27, 9768–9773. [5] P. Wang, Y. Wang, H. Neumann, M. Beller, *Chem. Sci.* 2022, 13, 13459–13465. [6] P. Wang, J. Yang, K. Sun, H. Neumann, M. Beller, *Org. Chem. Front.* 2022, 9, 2491.



THEMENGRUPPEN

Angewandte Carbonylierungen

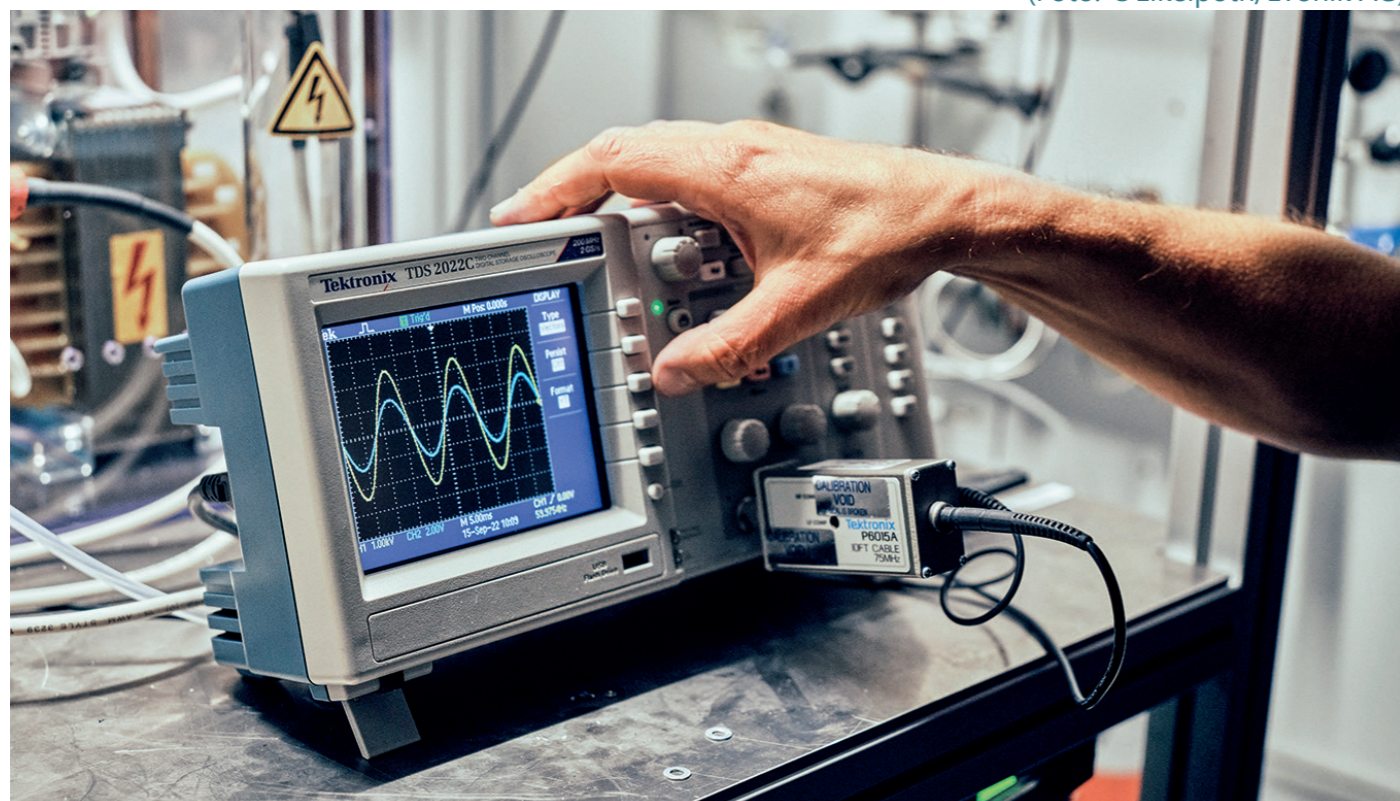


Dr. Ralf Jackstell
ralf.jackstell@catalysis.de

Die TG „Angewandte Carbonylierungen“ widmet sich gleichermaßen Grundlagenforschung [z.B. im Rahmen von BMBF, BMWI- und EU-Projekten (PlasCO², Cooperate, EWiMe4) sowie in Zusammenarbeit mit anderen universitären Einrichtungen (z.B. Universität Aarhus, Oslo) und der Industrie] und anwendungsorientierter Forschung (Kooperationen mit der Industrie, z.B. Evonik, BASF, Astra Zeneca, Creative Quantum, Miltiz Aromatics, Rafflenbeulanlagenbau, IIs, etc.). Schwerpunkte liegen dabei auf Hydroformlierungen, Alkoxy-carbonylierungen, Hydroxycarbonylierungen und Hydroaminomethylierungen mit industriell relevanten Rohstoffen (wie Olefinen, Alkinen, Alkoholen, Kohlendioxid) zu industriell relevanten Produkten (wie Aldehyden, Carbonsäuren, Ester, Amine, Alkohole) für Anwendungen in der Polymerchemie (Monomere, Weichmacher, alternative Kraftstoffe etc.). Die Hydrierung von CO zu Methanol wird bis zur Anwendungsreife in Miniplantanlagen untersucht. Ein weiteres Forschungsthema widmet sich der niedertemperaturplasma-induzierten Hydrierung von CO₂ zu CO sowie des niedertemperaturplas-

ma-induziertem „Dry Reforming“ von CO₂ und Methan zu CO als C1 Baustein. Um zur Übertragung in industrielle Anwendungen beizutragen, gehört prozessbegleitende Forschung zu unseren Aufgaben. Dies beinhaltet z. B. die Untersuchung von Aktivitäts-, Stabilitäts- und Selektivitätsverhalten neuer Katalysatoren in neuen Reaktionen zu bekannten und neuen Produkten von industrieller Bedeutsamkeit sowie das Herstellen von Produktmustern für anwendungstechnische Untersuchungen bei der Industrie in Kilogramm-Bereich. Ein weiterer Fokus liegt auf der Entwicklung und Testung neuer homogener und heterogener Katalysatoren für Carbonylierungsreaktionen und CO₂-Hydrierungen mit bekannten Edelmetallen und alternativen Katalysatormetallen wie Eisen, Cobalt, Mangan, Ruthenium oder Iridium. Auch die direkte Mitentwicklung und Testläufe von kleinen Demonstrationsanlagen in Kooperation mit Industriepartnern und universitären Einrichtungen gehören zu den Forschungsaktivitäten. Sie dienen der Validierung wichtiger Prozessparameter in Hydrierreaktionen von Kohlenmonoxid und Kohlendioxid.

(Foto: ©Eikelpoth/Evonik AG)



Nachhaltige Redoxreaktionen

Dr. Kathrin Junge
kathrin.junge@catalysis.de



Abb. 1: Cover zur Kobalt-katalysierten Etherbildung (links, DOI: 10.1002/chem.202200379) und zur Nickel-katalysierten Hydrodehalogenierung (rechts, DOI: 10.1002/cssc.202200247).

In der Thematik „Nachhaltige Redoxreaktionen“ werden Katalysatoren für verschiedene Modellreaktionen auf dem Gebiet der Oxidations- und Reduktionsreaktionen (Hydrierung von Carbonsäurederivaten) entwickelt, die hauptsächlich auf den Nichtedelmetallen Eisen, Cobalt, Mangan, Nickel sowie Molybdän basieren (Abb. 1).^{[1],[2]} Die Expertise der Forschungsgruppe stammt aus der homogenen Katalyse, besonders aus dem Bereich der Pincermetallkomplexe, die eine gezielte Steuerung der Katalysatoreigenschaften erlauben. Seit über 10 Jahren werden aber auch heterogene Systeme bearbeitet.^[3] Eine wichtige Rolle spielt der Aspekt der Nachhaltigkeit, der sich in der Wahl gut verfügbarer und preiswerter Katalysatormetalle, sowie der Etablierung neuartiger Katalysatorträgermaterialien aus Industrieabfällen bemerkbar macht. Die Testung der Katalysatoren erfolgt mittels Autoklaventechnik vom Parallelscreening im ml-Maßstab bis zum Upscaling im 2-Liter-Maßstab (Abb. 2). Die Synthese homogener Katalysatoren wird mit Schlenk- und Gloveboxtechnik realisiert, während die heterogenen Materialien mittels

Pyrolyse hergestellt werden. Im Zuge der aktuellen, gesellschaftlichen Diskussion um Nachhaltigkeit und Verknappung der Ressourcen besteht von Seiten der Industriepartner ein verstärktes Interesse an der Nutzung umweltfreundlicher, nichtedelmetall-basierter Katalysatoren. Die Forschungsgruppe verfügt über langjährige Erfahrungen mit Industriekooperationen aus verschiedenen Bereichen (Pharma, Life science, Agrochemicals). Hier können anwendungsorientierte Fragestellungen auf dem Gebiet der Redoxreaktionen mit hoher Flexibilität bearbeitet werden. Im Rahmen einer europäischen Kooperation mit Partnern aus der Forschung und Industrie werden seit neuesten Katalysatoren für Deuterierungsreaktionen entwickelt.

Abb. 2: Einsatz für Parallelreaktionen im Autoklav. (Foto: K. Junge/LIKAT)

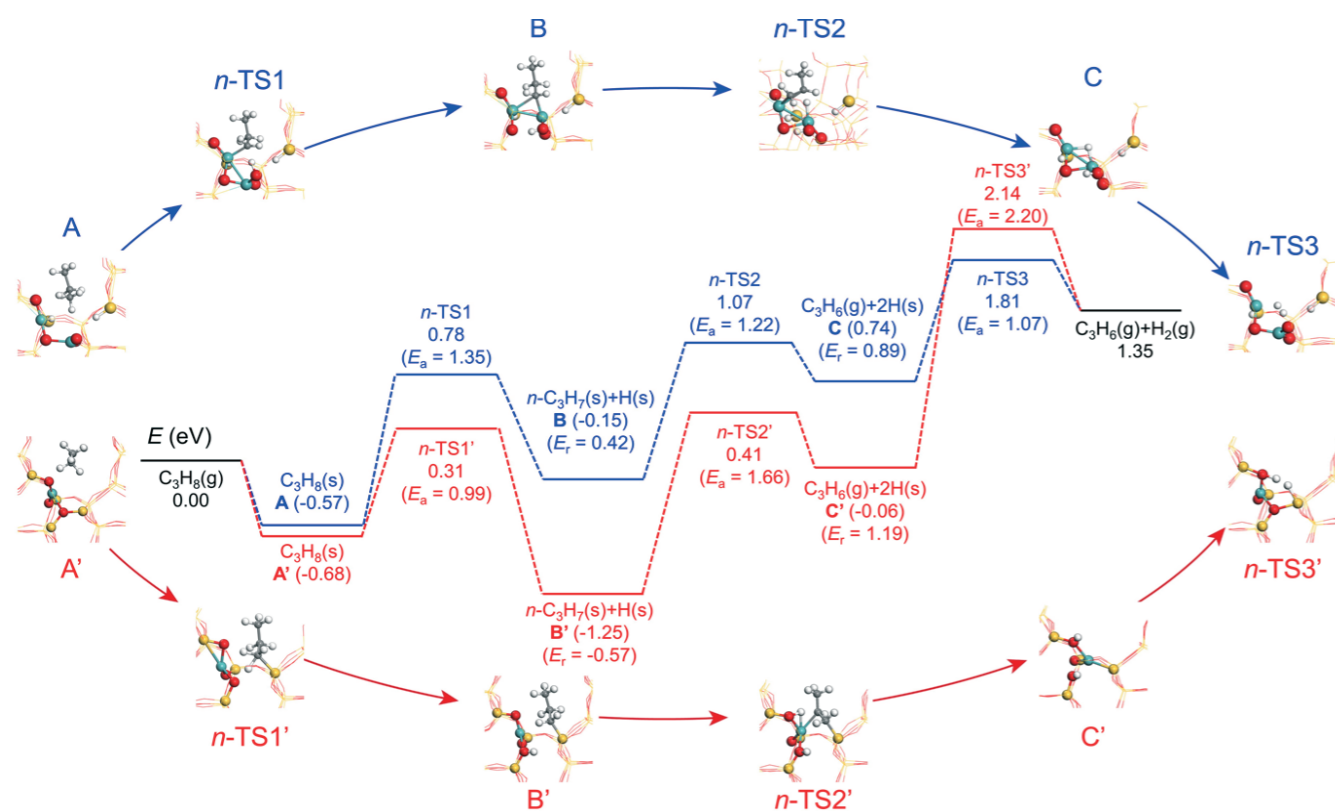
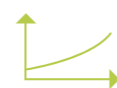


[1] W. Li, J. Rabeah, F. Bourriquen, D. Yang, C. Kreyenschulte, N. Rockstroh, S. Bartling, A.-E. Surkus, K. Junge, A. Brückner, A. Lei, M. Beller, *Nature Chemistry* 2022, 14, 334–341, Scalable and Selective Deuteration of (Hetero)arenes. [2] F. Bourriquen, N. Rockstroh, S. Bartling, K. Junge, M. Beller, *Angew. Chem.* 2022, 137, e202202423, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2022, 61, e202202423, Manganese catalysed deuterium labelling of anilines and electron-rich (hetero)arenes. [3] N. F. Both, A. Spannenberg, K. Junge, M. Beller, *Organometallics* 2022, 41, 1797–1805, Low-valent Molybdenum PNP Pincer Complexes as Catalysts for the Semihydrogenation of Alkynes (Special issue).

Prof. Dr. Haijun Jiao
haijun.jiao@catalysis.de

In den vergangenen zwei Jahren waren wir an mehreren internen Projekten und internationalen Kooperationen aus physikalischer organischer Chemie, Organometallchemie, homogener und heterogener Katalyse beteiligt und haben 34 wissenschaftliche Arbeiten veröffentlicht. Unser Ziel war das Verständnis und die Rationalisierung der Mechanismen katalytischer Reaktionen. Einige ausgewählte Ergebnisse werden zusammengefasst und hervorgehoben. Das erste Beispiel ist der Umwandlungsmechanismus von CO_2 und H_2 in Methanol zu Dimethoxymethan, der gemeinsam durch einen metallischen $[\text{P}^3\text{Co-H}]^+$ -Katalysator und einen HNTf₂-Säure-Cokatalysator in einer Dominosequenz katalysiert wird.^[1] Die vollständige Umwandlung besteht aus den Schritten der Co-katalysierten Hydrierung von CO_2 und HCOOCH_3 und der Säure-katalysierten Methylierung von HCOOH und $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{OH}$. Unsere Studie zeigt die individuelle Rolle von Metall und Säure und die Notwendigkeit ihrer Kombination.

Das zweite Beispiel ist eine gemeinsame Untersuchung des Reaktionsmechanismus der regio-divergenten reduktiven Öffnung von Epoxiden durch katalytische Hydrierung mit einem $\text{CpFe}(\text{CO})_3$ -Komplex.^[2] Die DFT-Studie begründete die unterschiedliche Aktivität und Selektivität von Aryl- und aliphatischen Epoxiden und erklärte die Rolle eines Lewis-Säure-Co-katalysators bei der Reaktion von aliphatischem Epoxid. Auf Grundlage kinetischer Analysen, Deuteriummarkierung und Berechnungen wurde ein mehrstufiger Reaktionsmechanismus vorgeschlagen. Das dritte Beispiel ist eine gemeinsame Untersuchung des Reaktionsmechanismus der Propandehydrierung.^[3] Die DFT-Studie identifizierte das reduzierte zweikernige Zn_2O_x -Cluster auf dem Defektoberflächen-Zeolith als aktiven Katalysator und begründete die beobachtete Aktivität und Selektivität. Ein vernünftiger Reaktionsmechanismus wurde vorgeschlagen (s. Abb.).

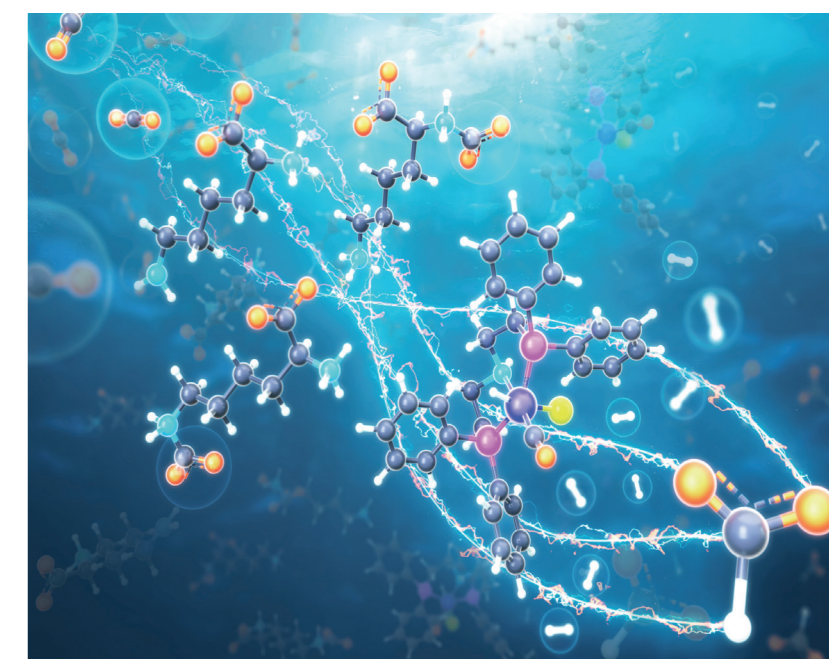


[1] Z. Wei, X.-X. Tian, M. Bender, M. Beller, H. Jiao, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 6908-6919. [2] L. Tadiello, B. M. Stadler, S. Tin, H. Jiao, J. G. de Vries, T. Gandini, L. Pignataro, C. Gennari, *ACS Catal.* **2022**, *12*, 235-246. [3] D. Zhao, X.-X. Tian, D. E. Doronkin, S. Han, V. A. Kondratenko, J.-D. Grunwaldt, A. Perechodjuk, T. H. Vuong, J. Rabeah, R. Eckelt, U. Rodemerck, D. Linke, G. Jiang, H. Jiao, E. V. Kondratenko, *Nature* **2021**, *599*, 234-238.

Dr. Henrik Junge
henrik.junge@catalysis.de



Die Gruppe „Katalyse für Energietechnologien“ beschäftigt sich seit 2003 mit der Erzeugung von Wasserstoff aus erneuerbaren Energien und Rohstoffen, der chemischen Speicherung sowie der Nutzung von grünem Wasserstoff zur Kohlendioxidverwertung durch Synthese von Energieträgern und industriell relevanten Produkten (z.B. Kohlenmonoxid, Ameisensäure, Methanol). Damit wird einem weltweit bedeutenden Forschungsschwerpunkt Rechnung getragen. Um praxisrelevante Beiträge zur Nutzung erneuerbarer Energien sowie von Kohlendioxid als C1-Baustein zu leisten, arbeiten wir derzeit in zwei Projekten mit weiteren Partnern an der Realisierung von Demonstrationsanlagen im Technikum des LIKAT. Dabei werden in der Themengruppe entwickelte Katalysatoren und Technologien zur Wasserstofferzeugung aus Methanol sowie Wasserstoffspeicherung in wässrigen Formiatlösungen eingesetzt. Ein weiteres Highlight aus dem Berichtszeitraum ist der



erfolgreiche Einsatz von Aminosäuren (Lysin, Arginin, deren Salze, aminosäurebasierte ionische Flüssigkeiten) zur Kohlendioxidabscheidung aus Luft sowie die anschließende Hydrierung zu Formiaten. Diese Arbeiten ermöglichen die Entwicklung eines CO_2 -basierten Kreislaufs zur Wasserstoffspeicherung (Wasserstoffbatterie) ohne Freisetzung des Kohlendioxids sowie ohne Einsatz toxischer Amine oder korrosiver Basen. In weiteren Arbeiten wurde die molybdänkatalysierte Ameisensäure-disproportionierung zu Kohlendioxid, Methanol und Methylformiat entwickelt. Für diese Reaktion kamen bislang nur Edelmetalle (Ir, Ru) zum Einsatz. Für unsere chemischen Umsetzungen entwickeln und synthetisieren wir sowohl Organometallkomplexe als auch geträgerte Nanopartikel und „single atoms“, die dann in klassischen thermischen Reaktionen als auch photokatalytischen Reaktionen eingesetzt werden. Dabei spielen insbesondere auch Nichtedelmetalle eine entscheidende Rolle. Zur Realisierung der Ziele arbeiten wir mit verschiedenen Partnern aus Wissenschaft und Industrie zusammen.



(Cover: DOI: 10.1021/jacsau.1c00489)

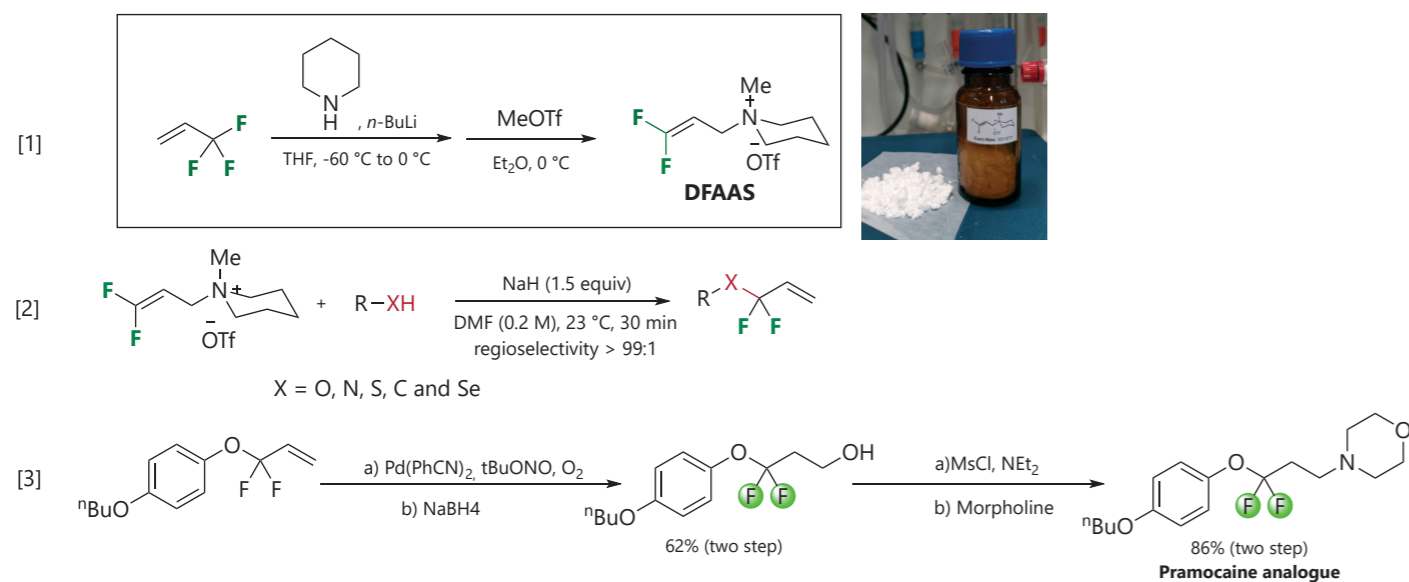
[1] E. Alberico, T. Leischner, H. Junge, A. Kammer, R. Sang, J. Seifert, W. Baumann, A. Spannenberg, K. Junge, M. Beller, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 13101-13119; HCOOH Disproportionation to MeOH promoted by Molybdenum PNP Complexes. [2] J. Schneidewind, Miguel A. Argüello Cordero, H. Junge, S. Lochbrunner, M. Beller, *Energy Envir. Sci.* **2021**, *14*, 4427-4436; Two-photon, visible light water splitting at a molecular ruthenium complex. [3] D. Wei, R. Sang, P. Sponholz, H. Junge, M. Beller, *Nature Energy* **2022**, *7*, 438-447; A carbon-neutral chemical hydrogen battery based on formic acid.

Dr. Helfried Neumann
helfried.neumann@catalysis.de



Ein Ziel ist fluorhaltige Bausteine für die Wirkstoffforschung zu etablieren, die sich in der Synthese von Pharmazeutika nutzen lassen. Es ist lange bekannt, dass fluorhaltige Gruppen die Bioverfügbarkeit und die Aktivität eines Wirkstoffes erhöhen. Neben den Reaktionen mit Fluorreagenzien ist es unser Ziel, Deuterierungsreaktionen zu finden mit denen sich via CH-Aktivierung aromatische Verbindungen deuterieren lassen. Diese Reaktionen sind für Pharmazeutika von Bedeutung, da sich durch den Einbau von Deuterium Wirkstoffe modifizieren lassen und sich ähnlich wie beim Fluor die Aktivitäten und die Bioverfügbarkeit erhöhen können. In Zusammenarbeit mit Evonik haben wir zum Ziel, hoch wirksame Palladiumkatalysatoren in homogener Phase für die Methoxycarbonylierung von Oktenmischungen, dem sogenannten Dibuten zu terminalen Estern industriell anzuwenden. Die Produkte werden als Vorstufen von Weichmachern benötigt. Gegenwärtig wird in einer Pilotanlage die Katalysatorstabilität getestet. Neben diesen Forschungszielen interessieren wir uns auch für Optimierungen von klassischen Kupplungsreaktionen wie Aminocar-

bonylierung und Alkoxy-carbonylierung mit reaktionsträgen Chloraromaten. In den letzten Jahren haben wir uns sowohl mit der Synthese von fluorhaltigen organischen Molekülen als auch mit Deuterierungsreaktionen beschäftigt. Deuterium und fluorhaltige Verbindungen spielen eine große Rolle in der Wirkstoffforschung. Uns ist es gelungen ein Difluoromethylierungsreagenz^[1] herzustellen, das eine gem-Difluoroallylgruppe auf O-, N-, S-, C- and Se-Nukleophilen ohne Metallkatalysator übertragen kann.^[2] Es lassen sich in weiteren Reaktionsschritten analoge Wirkstoff-derivate herstellen.^[3] In unserem 2. Forschungsschwerpunkt konnten wir Ruthenium-katalysiert einen H/D Austausch selektiv von aromatischen Carbonylverbindungen durchführen. Diese Reaktion gelingt mit einem transgenen Amin als Hilfsgruppe, das sich nach dem H/D Austausch wieder abgespalten lässt.^[4] Schließlich haben wir für die klassische Alkoxy-carbonylierung^[5] und Aminocarbonylierung^[6] Palladium- bzw Ruthenium-Katalysatoren gefunden, die in Kombination mit NaI respective CsCl reaktionsträge Chloraromaten umsetzen können.



Schema: [1] Herstellung des Difluoromethylierungsreagenz (Kasten) und [2] Übertragung einer gem-Difluoroallylgruppe auf O-, N-, S-, C- und Se-Nukleophile ohne Metallkatalysator.

[1],[2],[3] F. Ye, Y. Ge, A. Spangenberg, H. Neumann, L-W. Xu, M. Beller, *Nat. Commun.* 2021, 12, 3257. [4] S. Kopf, F. Ye, H. Neumann, M. Beller, *Chem. Eur. J.* 2021, 27, 9768–9773. [5] P. Wang, Y. Wang, H. Neumann, M. Beller, *Chem. Sci.* 2022, 13, 13459–13465. [6] P. Wang, J. Yang, K. Sun, H. Neumann, M. Beller, *Org. Chem. Front.* 2022, 9, 2491.



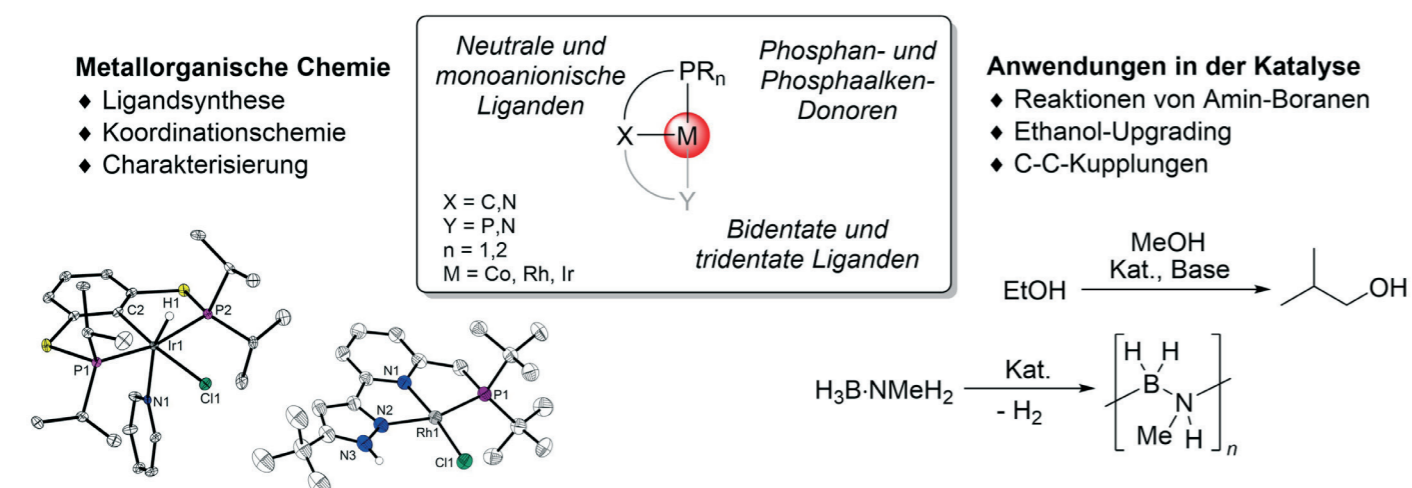
Katalyse später Übergangsmetalle

Prof. Dr. Torsten Beweries
torsten.beweries@catalysis.de



Die Gruppe befasst sich mit den Grundlagen von Katalysen später Übergangsmetallkomplexe auf der Basis präparativer und mechanistischer metallorganischer Chemie. Ziel ist es, über das Studium von Struktur-Wirkungsbeziehungen Erkenntnisse zur Optimierung katalytischer Prozesse zu gewinnen. Im Fokus stehen dabei verschiedene Aspekte der Aktivierung und Transformation von Amin-Boranen sowie kleiner, teilweise reaktionsträger Moleküle wie H_2O , N_2 , CO_2 oder H_2 . Im Vordergrund der Arbeiten in den vergangenen Jahren stand die Entwicklung neuer Katalysatoren mit PCP- und PNP-Pinzetten-Liganden für die katalytische Dehydrokupplung und Polymerisation von Amin-Boran-Addukten zu Oligo- und Polyaminoboranen. Diese Verbindungen sind isovalenzelektronisch zu allgegenwärtigen Polyolefinen und zeigen großes Potential als molekulare Vorstufen für neue B-N-Materialien. So konnte die Dehydropoly-

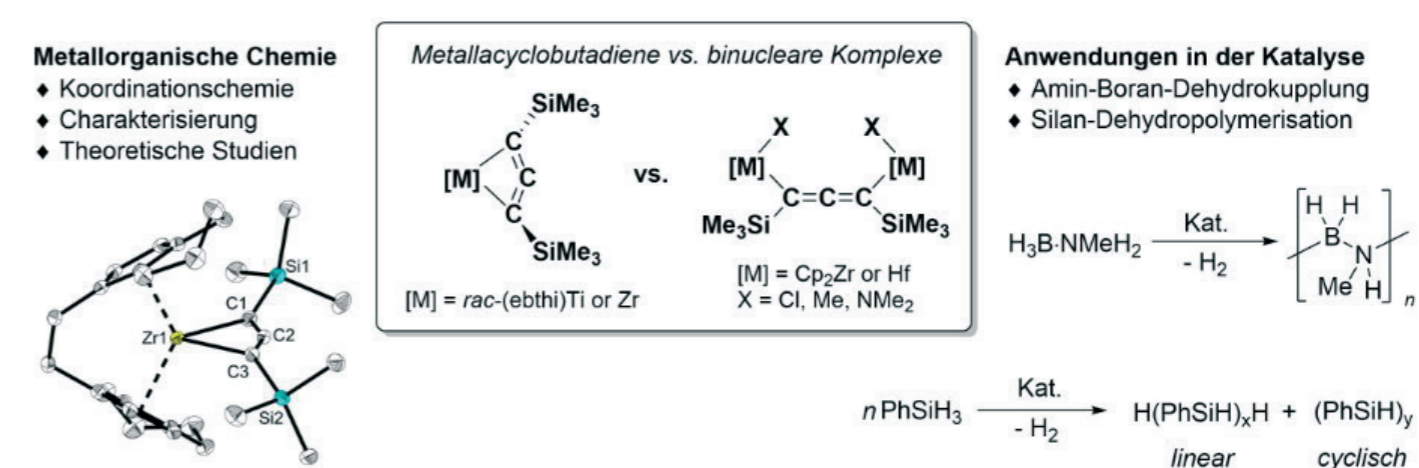
merisation mit einem Rhodium-Bis(thiophosphinit)-Komplex vom Typ $[(^R)PSCSP^R]Rh(H)(Cl)$ ($R = Ph, iPr$) realisiert und eingehend mechanistisch untersucht werden.^[1a] Ferner gelang die Synthese von analogen Iridium-Komplexen^[1b], welche für weitere organische Kupplungs- und Hydroelementierungs-Reaktionen genutzt werden können. In Zusammenarbeit mit der Gruppe Hering-Junghans („Katalyse mit phosphorhaltigen Materialien,“) wurde die Koordinationschemie von P,N-basierten Phosphaalken-Liganden am Rhodium und Iridium untersucht.^[2] Dabei unterliegen die Komplexe interessanten Aktivierungen des Phosphaalken-Liganden, welche zur Ausbildung einer Reihe neuartiger Phophan-Posphaalken-Komplexe führen. Gegenwärtig steht vor allem die Entwicklung und Nutzung kooperativer Pincer-Liganden^[3] für die Aktivierung und Kupplung von Amin-Boranen im Vordergrund.



[1a] P. Hasche, J. Haak, F. Anke, C. Kubis, W. Baumann, H. J. Drexler, H. J. Jiao, T. Beweries, *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 3514-3526.
[1b] A. Linke, D. Decker, H.-J. Drexler, T. Beweries, *Dalton Trans.* **2022**, *51*, 10266-10271. [2] a) P. Gupta, T. Täufer, J.-E. Siewert, F. Reiß, H.-J. Drexler, J. Pospech, T. Beweries, C. Hering-Junghans, *Inorg. Chem.* **2022**, *61*, 11639-11650; b) P. Gupta, H.-J. Drexler, R. Wingad, D. Wass, E. Baráth, T. Beweries, C. Hering-Junghans, *Inorg. Chem. Front.* **2023**, *10*, 2285-2293. [3] D. Decker, Z. Wei, J. Rabenhah, H.-J. Drexler, A. Brückner, H. Jiao, T. Beweries, *Inorg. Chem. Front.* **2022**, *9*, 761-770.

Katalyse früher Übergangsmetalle

Dr. Fabian Reiß
fabian.reiss@catalysis.de



Unsere Gruppe erforscht die Grundlagen von katalytischen Prozessen, die an frühen Übergangsmetallkomplexen ablaufen. Unser Hauptaugenmerk liegt dabei auf der reichhaltigen Chemie der Sandwich-Komplexe des Titans, Zirconiums und Hafniums, sogenannte Metallocene. Dieser Verbindungstypus erlaubt es uns an die Grenzen experimentell realisierbarer Bindungsverhältnisse zu gelangen und hoch gespannte 1-Metallacyclobuta-2,3-diene zu stabilisieren, die als metallorganische Analoga des nicht existenten 1,2-Cyclobutadiens gelten. Es gelang uns, zwei Vertreter der zuvor unbekannt 1-Zirconacyclobuta-2,3-diene zu synthetisieren und vollständig zu charakterisieren. Dabei konnte eine noch nie dagewesene intramolekulare C-H-Aktivierung aufgedeckt werden und Reaktivitätsstudien dieser neuen Verbindungsklasse durchgeführt werden.^[1] Die Reaktivität dieser Verbindungen wird dabei bisher durch klassische Insertionsreaktionen dominiert. Detaillierte quantenmechanische bindungstheoretische Analysen deckten die Struktur-Eigenschafts-Beziehungen dieser Verbindungsklasse auf und identifizierten die ansa-Metallocene als einzige Komplexgattung, die diese stabilisieren können. Klassische Metallocene führen bei gleichen Synthesebedingungen zu bimetallichen

Komplexen, in denen zwei Gruppe 4 Metalle über eine Allen-Einheit verbrückt sind. Diese Verbindungsklasse wurde in unserer Arbeitsgruppe hinsichtlich ihrer katalytischen Aktivität zur Dehydrokupplung von Amin-Boran Addukten^[2] und Silanen^[3] untersucht.

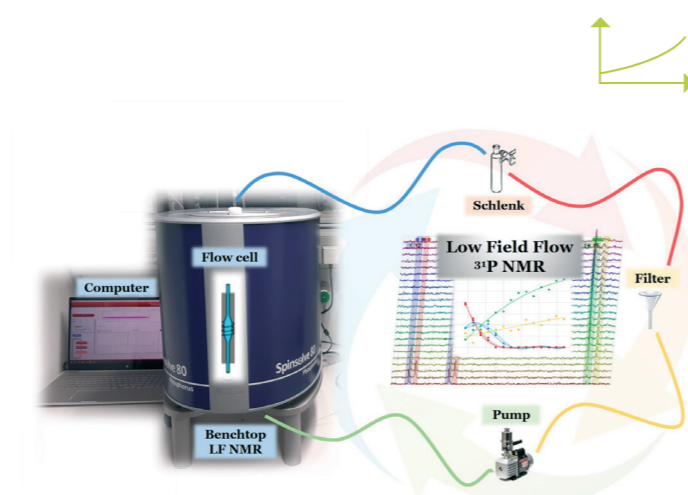


[1] X. Shi, S. Li, M. Reiß, A. Spannenberg, T. Holtrichter-Rossmann, F. Reiß, T. Beweries, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 16074-16084. 1-Zirconacyclobuta-2,3-dienes: synthesis of organometallic analogs of elusive 1,2-cyclobutadiene, unprecedented intramolecular C-H activation, and reactivity studies. [2] K. Lindenau, N. Jannsen, M. Rippke, H. Al Hamwi, C. Selle, H. J. Drexler, A. Spannenberg, M. Sawall, K. Neymeyr, D. Heller, F. Reiß, T. Beweries, *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 4034-4050. Mechanistic insights into dehydrocoupling of amine boranes using dinuclear zirconocene complexes. [3] K. Lindenau, A. Spannenberg, F. Reiß, T. Beweries, *RSC Adv.* **2022**, *12*, 26277-26283. T. Mono- and dinuclear zirconocene(IV) amide complexes for the catalytic dehydropolymerisation of phenylsilane.

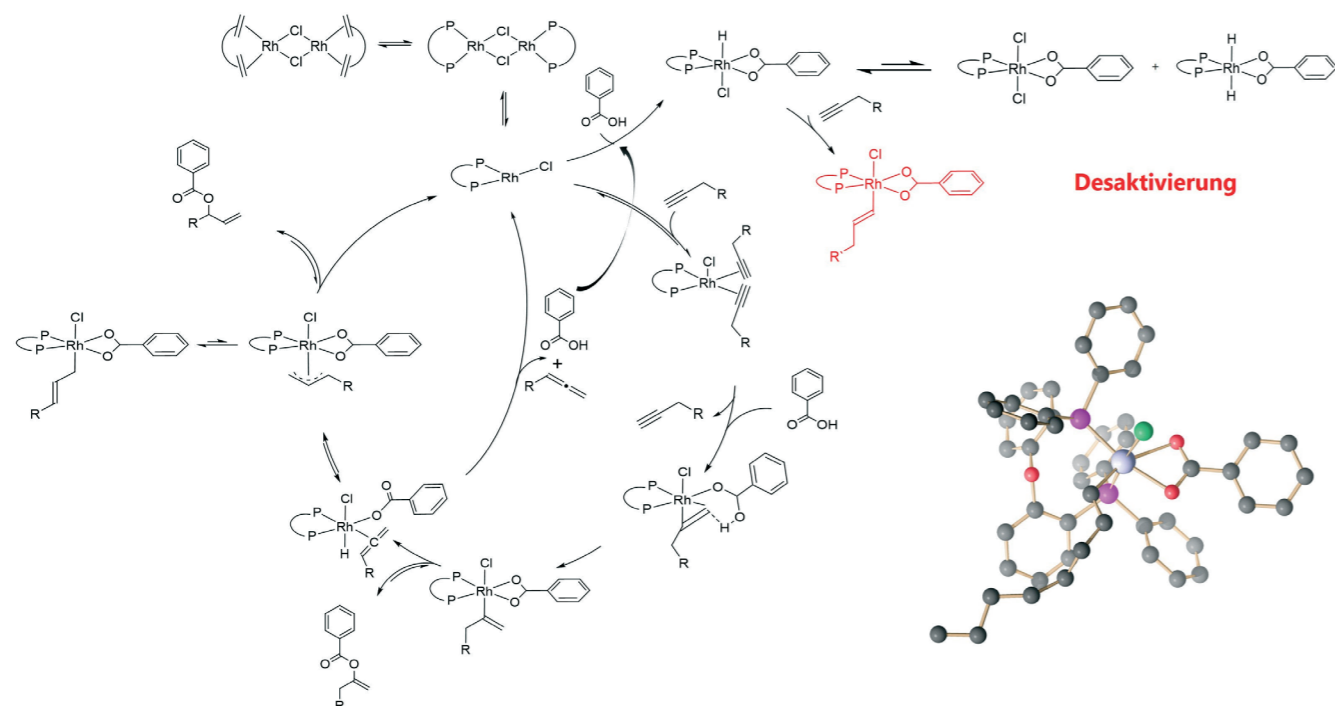
Mechanismen der homogenen Katalyse

Dr. Hans-Joachim Drexler
hans-joachim.drexler@catalysis.de

Die Gruppe führt Untersuchungen zur Katalysatoraktivierung und -desaktivierung sowie deren Einfluss auf Mechanismen von homogenen Katalysen durch. Neue Erkenntnisse sollen genutzt werden, um die betrachteten Reaktionen effizienter und nachhaltiger zu gestalten. Neben der von uns entwickelten Methode zur Online-Registrierung von Gasverbräuchen unter isobaren Bedingungen wird für kinetischen Untersuchungen von schnellen Reaktionen die stopped-flow UV/Vis-Spektroskopie unter anaeroben Bedingungen angewendet. Als weitere Methode wird die UV/Vis *in-situ* Spektroskopie genutzt und weiterentwickelt. In der letzten Zeit wurde als neues Analysewerkzeug ein 80 MHz ³¹P/¹H-NMR Tischgerät mit einer Durchflusszelle (Magritek) so weiterentwickelt, dass unter inerten Bedingungen einzelne Komponenten einer katalytischen Reaktion verfolgt werden können.^[1] Ein Schwerpunkt unserer Arbeiten im Bereich der Grundlagenforschung sind Untersuchungen zur Komplexchemie von Rhodium-Bis(phosphan)-Komplexen in homogenen Katalysen.



Als Beispiele sind hier der Einfluss von Lösungsmitteln auf die Aktivierung dieser Komplexe^[2] sowie Untersuchungen zur Katalysator-desaktivierung in der propargylichen C-H-Aktivierung zu nennen. Letztere Arbeiten wurden im Rahmen eines DFG-Projekts in Kooperation mit der Gruppe Breit (Freiburg) durchgeführt.^[3] In Kooperation mit der Industrie (z.B. Hansen & Rosenthal, DSM) wurden neben der Hydrierung auch Systeme zum Ersatz toxischer Lösungsmittel, z.B. bei der Extraktion untersucht. Kürzlich gelang die Überführung eines Verfahrens in den Pilotmaßstab.



[1] L. Tadiello, H.-J. Drexler, T. Beweries, *Organometallics* **2022**, *41*, 2833-2843. Low-field flow ³¹P NMR spectroscopy for organometallic chemistry: on-line analysis of rhodium diphosphine complexes. [2] N. Janssen, C. Fischer, C. Selle, C. Pribbenow, H.-J. Drexler, F. Reiß, D. Heller, T. Beweries, *Dalton Trans.* **2022**, *51*, 18068-18076. How Solvents Affect the Stability of Cationic Rhodium(I) Diphosphine Complexes: A Case Study of Acetonitrile Coordination. [3] S. Möller, N. Janssen, J. Rüger, H.-J. Drexler, M. Horstmann, F. Bauer, B. Breit, D. Heller, *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 14034-14041. Catalyst Deactivation During Rhodium Complex-Catalyzed Propargylic C-H Activation.

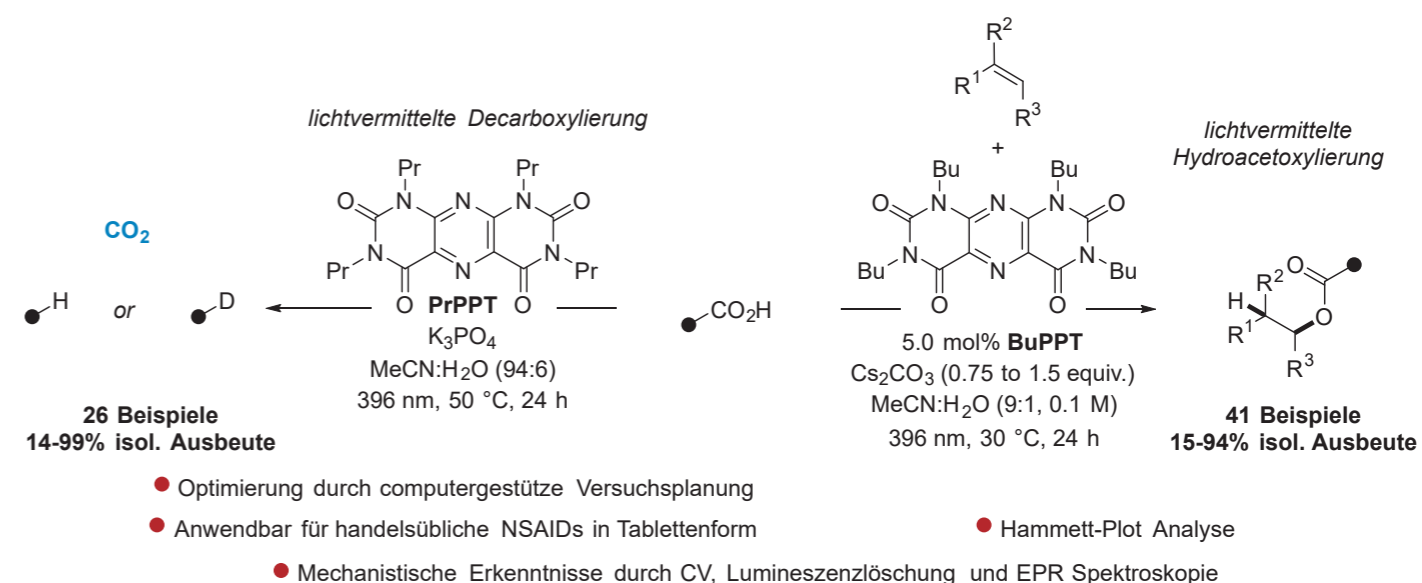
Katalytische Funktionalisierungen

Dr. Jola Pospech
jola.pospech@catalysis.de



Die Gruppe erforscht Strategien zur katalytischen Funktionalisierung biologisch aktiver Verbindungen im Grundzustand sowie durch lichtgesteuerte Chemie im angeregten Zustand. Ziel ist es, funktionelle Gruppentransferreaktionen zu entwickeln und die zugrunde liegenden mechanistischen Paradigmen zu erforschen. Der Schwerpunkt liegt dabei auf lichtvermittelten Hydrofunktionalisierungsreaktionen, Sauerstoffatomtransfer, Kohlendioxidaktivierung und C-H-Bindungsfunktionalisierungen. In den letzten Jahren konzentrierten sich die Forschungsbemühungen auf die Entwicklung neuer organischer Photoredox-Katalysatoren, die auf einem Pyrimidopteridinetetraon-Gerüst basieren.^[1] Die heteroaromatischen Katalysatoren wurden erfolgreich zur photovermittelten C-N-, C-H/D- sowie chemoselektiven C-C- und C-O-Bindungsbildungen eingesetzt, die traditionell die Zugabe redoxaktiver Co-Katalysatoren erfordern.^[2] Lichtvermittelte Hydro- und Deuterodecarboxylierung wurde mit Hilfe eines DoE-Ansatzes optimiert.^[3] Diese Decarboxylierungsmethode wurde im Rahmen der Deaktivierung von Arzneimittelrückständen, z. B. in Abwässern, getestet. Unter optimierten

Reaktionsbedingungen wurde die Umwandlung von handelsüblichen nichtsteroidalen Antirheumatika (NSAIDs) im Gramm-Maßstab realisiert. Darüber hinaus ermöglicht die Methodik die Deuterium-Markierung organischer Verbindungen unter Verwendung von D₂O als kostengünstige Deuteriumquelle. Weiterhin wurde eine photovermittelte Addition von Carbonsäuren an aktivierte Alkene entwickelt.^[2b] Die Decarboxylierung aliphatischer Carbonsäuren bei Ein-Elektronen-Oxidation wird in Gegenwart elektronenreicher Alkene konterkariert und eine Hydroacetoxylierung als bevorzugter Reaktionsweg etabliert. Alle Studien werden von detaillierten mechanistischen Untersuchungen zu Struktur-Reaktivitäts-Beziehungen unter Verwendung verschiedener spektroskopischer Techniken begleitet. Derzeit konzentriert sich die Gruppe auf die Entwicklung von Sauerstoff-Atom-Transfer-Reaktionen sowie neuer PPT-basierter Photoredoxkatalysatoren, die die Möglichkeit der Stereokontrolle durch nicht-kovalente Wechselwirkungen bieten.



[1] T. Taeufer, M. A. Argüello Cordero, A. Petrosyan, A.-E. Surkus, S. Lochbrunner, J. Pospech, *ChemPhotoChem* **2021**, *5*, 999-1003. [2a] T. Taeufer, R. Hauptmann, F. El-Hage, T. S. Mayer, H. Jiao, J. Rabeah, J. Pospech, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 4862-4869. [2b] A. Petrosyan, L. Zach, T. Taeufer, T. S. Mayer, J. Rabeah, J. Pospech, *Chem. Eur. J.* **2022**, *28*, e202201761. [3] T. S. Mayer, T. Taeufer, S. Brandt, J. Rabeah, J. Pospech, *J. Org. Chem.* **2022**, *10.1021/acs.joc.2c01664*.

Reaktionstechnik

Dr. David Linke
david.linke@catalysis.de



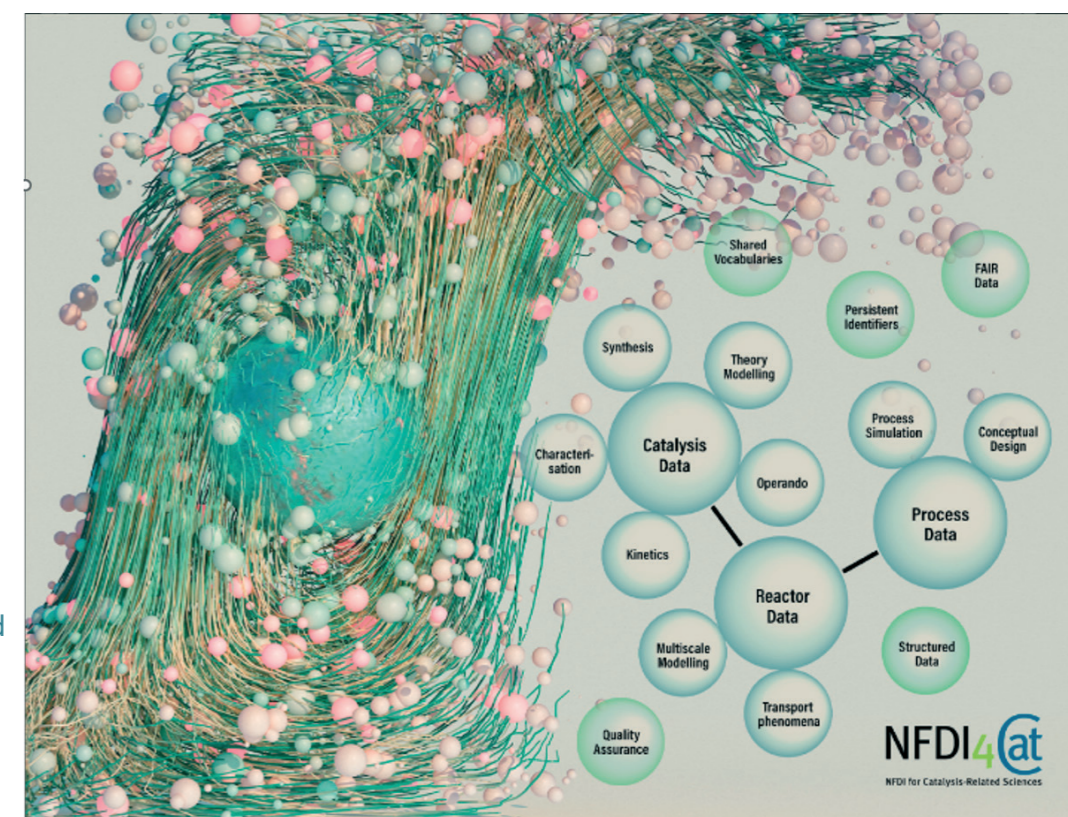
Die Gruppe arbeitet an der Schnittstelle zwischen Chemie, Reaktionstechnik und Datenwissenschaften und konzentriert sich auf die Entwicklung von katalytischen Gasphasenprozessen. Das Ziel ist die Unterstützung der Entwicklung neuer Prozesse durch Daten und Modelle.

Ein weiterer Arbeitsschwerpunkt ist das Datenmanagement und die Informations- und Wissensgewinnung aus Daten. Als datenaffine Gruppe wünschen wir uns seit geraumer Zeit, dass Daten in der Katalyse inklusiver aller relevanten Metadaten in maschinenlesbarer Form dokumentiert werden. Wir haben uns daher stark in die NFDI4Cat-Initiative eingebracht (Koordination der Antragsstellung).^[1,2] Seit Oktober 2020 widmet sich NFDI4Cat dem Forschungsdaten-Management in der Katalyse mit dem Ziel die Daten in maschinenlesbaren nach den sogenannten FAIR-Prinzipien (FAIR: Findable, Accessible, Interoperable, Reusable).^[3]

Im LIKAT wird ein lokales System „CaReD“ entwickelt, das den Wissenschaftler bei der Erzeugung FAIRer Daten unterstützt.

Einen erheblichen Anteil an den Arbeiten machen experimentelle Untersuchungen aus. Zur Katalysatorentwicklung und für kinetische Untersuchungen werden hoch effiziente Parallelreaktoren eingesetzt. Thema der Arbeiten sind Reaktionen, die alternative Rohstoffe (z.B. Bioethanol) einsetzen oder die alternative Reaktionswege darstellen (z.B. CO₂-basierte Kraftstoffe). Die Gruppe hat langjährige Erfahrung in Konstruktion und Bau von voll automatisierten Laborreaktoren von Milligramm- bis Miniplant- Maßstab. Die Miniplant der Gruppe wurde zuletzt mit einem industriellen Kooperationspartner für die Entwicklung eines neuen Festbettreaktor-Prozesses eingesetzt. Versuchszeiten bis 4500 h wurden bei sehr hoher Zuverlässigkeit trotz anspruchsvoller Bedingungen (70 bar) realisiert.

Abb. 1: *ChemCatChem*-Coverbild „A Unified Research Data Infrastructure for Catalysis Research - Challenges and Concepts,“ (C. Wulf et al.) (DOI: 10.1002/cctc.202001974)



[1] Wulf, C. et. al. *ChemCatChem* 2021, 13, 3223–36. doi: 10.1002/cctc.202001974. A Unified Research Data Infrastructure for Catalysis Research – Challenges and Concepts. [2] NFDI for Catalysis-Related Sciences - NFDI4Cat, <http://www.nfdi4cat.org/> [3] Wilkinson, M., Dumontier, M., Aalbersberg, I. et al., *Sci Data* 3 2016, 160018. <https://doi.org/10.1038/sdata.2016.18>. The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship.

Prof. Dr. Evgenii Kondratenko
evgenii.kondratenko@catalysis.de



In der Themengruppe „Reaktionsmechanismen“ beschäftigen wir uns mit der Entwicklung von heterogenen Katalysatoren und Reaktorkonzepten für herausfordernde Reaktionen mit alternativen Rohstoffen und kommerzielle Verfahren mit dem Fokus auf ihre Nachhaltigkeit und Umweltfreundlichkeit. Die Entwicklung wird durch mechanistische und kinetische Untersuchungen unterstützt. Das Ziel ist es, allgemeingültige Deskriptoren, die die Katalysator-Aktivität/Selektivität bestimmen, zu identifizieren und sie für die Katalysatorentwicklung zu nutzen.

Unsere Herangehensweise ist wie folgt. Bei der Katalysatorpräparation entwickeln wir Methoden, die die Herstellung von Materialien mit definierten Phasen bzw. geträgerten Metal(oxid)-Spezies ermöglichen, um direkte Zusammenhänge zwischen den strukturellen Charakteristiken und katalytischen Eigenschaften abzuleiten. Die Katalysatoren werden unter industrierelevanten Bedingungen getestet. Tiefere Erkenntnisse über den Reaktionsmechanismus werden aus der zeitlichen Produktana-

lyse (von Submillisekunden bis Minuten) und aus den zeitlich-/räumlich-aufgelösten Operando-UV-Vis spektroskopischen Untersuchungen gewonnen.

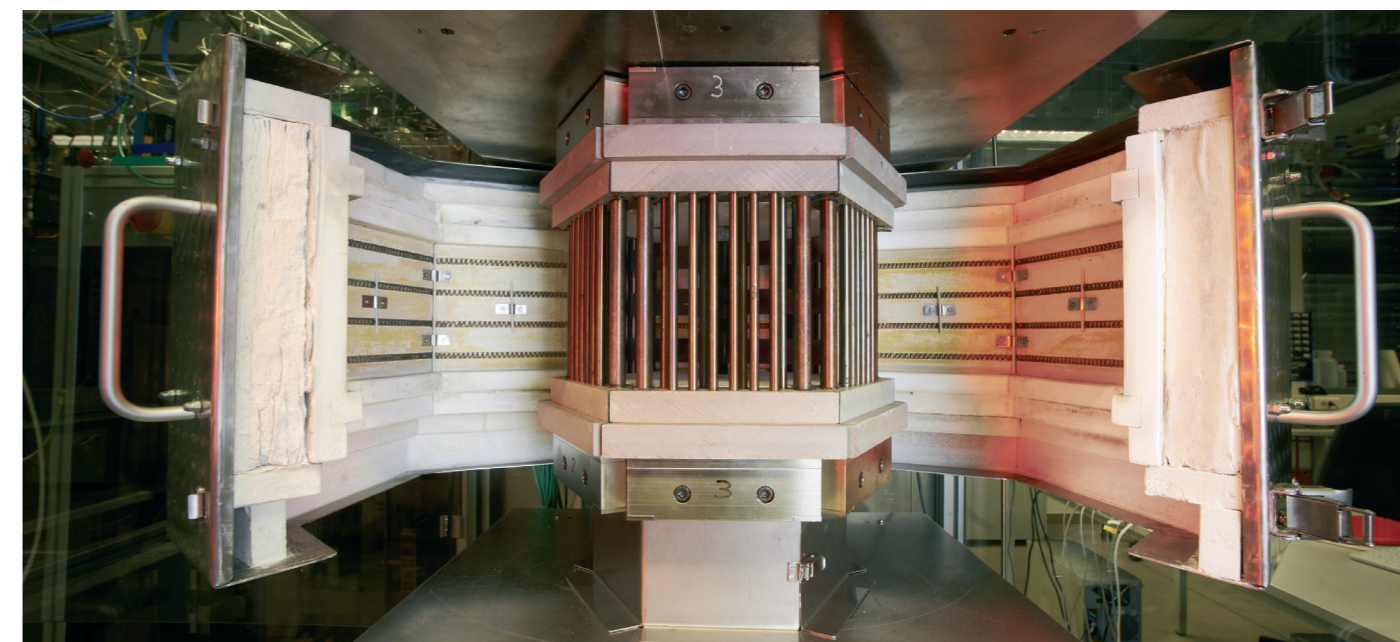
Aktuell arbeiten wir an der Herstellung von Plattformchemikalien aus CO_2 und CH_4 , die im Biogas vorkommen. Bei der CO_2 -Forschung liegt der Fokus auf der Erzeugung von höheren Kohlenwasserstoffen (Kraftstoffe und niedere Olefine),^[1] Methanol und Propanol.^[2] Im Rahmen eines Sino-Germany DFG-Projektes entwickeln wir reaktionstechnische Lösungen für die Erhöhung der Selektivität von $\text{C}_2\text{H}_4/\text{C}_2\text{H}_6$ bei der oxidativen CH_4 -Kopplung. Unsere langjährigen Aktivitäten auf dem Gebiet nicht-oxidative Propandehydrierung zu Propen werden weiter fortgeführt, um kostengünstige und umweltfreundliche Katalysatoren als Alternative zu den Cr- oder Pt-basierenden kommerziellen Katalysatoren zu entwickeln.^[3] Weiterhin unterstützen wir die Industrie bei der Entwicklung von Katalysatoren für die Ammoxidation von CH_4 zu HCN.



Abb.: Apparaturen zur ortsaufgelösten (links) und parallel zeitaufgelösten (rechts) Katalysatorcharakterisierung mittels UV-Vis-Spektroskopie unter industriell relevanten Bedingungen mit simultaner Analyse der Reaktionsprodukte. (Fotos: E. Kondratenko)

[1] Q. Yang, V. A. Kondratenko, S. A. Petrov, D. E. Doronkin, E. Saraçi, H. Lund, A. Arinchtein, R. Kraehnert, A. S. Skrypnik, A. A. Matvienko, E. V. Kondratenko, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, e202116517. Identifying Performance Descriptors in CO_2 Hydrogenation over Iron-based Catalysts Promoted with Alkali Metals. (doi.org/10.1002/anie.202116517) [2] D. D. Truong, P. T. M. Pham, E. V. Kondratenko, M. T. Le, *ACS Sustain. Chem. Eng.* **2022**, *10*, 16548-16554. Au/SiO₂-Based Catalysts for Propanol/Propanal Synthesis from CO_2 , C_2H_4 , and H_2 in a Dual-reactor System. (https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.2c03992) [3] T. Otroshchenko, G. Jiang, V. A. Kondratenko, U. Rodemerck, E. V. Kondratenko, *Chem. Soc. Rev.* **2021**, *50*, 473-527. Current status and perspectives in oxidative, non-oxidative and CO_2 -mediated dehydrogenation of propane and isobutane over metal oxide catalysts. (DOI: 10.1039/d0cs01140a)

Dr. Uwe Rodemerck
uwe.rodemerck@catalysis.de



(Foto: U. Rodemerck)

Hochdurchsatztechnologien steigern die Effektivität von Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Katalyse, da in kurzer Zeit sehr viele Katalysatormaterialien automatisiert hergestellt, charakterisiert und auf ihre katalytische Wirksamkeit getestet werden können. In der Themengruppe werden Hochdurchsatztechnologien entwickelt und für die Suche nach neuen, effizienteren heterogenen Katalysatoren für verbesserte katalytische Verfahren eingesetzt. Das zurzeit eingesetzte Instrumentarium umfasst:

- Effektive Suchstrategien für neue Katalysatoren (Statistische Versuchsplanung, evolutionäre Optimierung mit genetischen Algorithmen; Kooperation mit TG Linke)
- 2 Roboter für Katalysatorsynthesen, automatisierte Kalzinierapparatur mit 64 Reaktoren (Kalzinieren in verschiedenen Gasatmosphären)
- Mehrere automatisierte Testapparaturen mit je 15 oder 50 Reaktoren mit schneller GC-Analytik (bis 750°C, bis 20 bar)

- Automatisierte Parallelapparatur mit 8 Reaktoren und Massenspektrometer für temperaturprogrammierte Experimente (TPO, TPR, TPD)
- Automatisierte Berechnung von katalytischen Daten aus den GC-Analysen (Kooperation mit TG Linke)

Das vorhandene Instrumentarium wurde bisher erfolgreich für die Katalysatorentwicklung für viele unterschiedliche Reaktionstypen, wie Dehydrierung, Oxidation, Kondensation, Isomerisierung, Metathese, C-C-Kopplung, Methan-Reformierung, CO_2 -Fischer-Tropsch-Synthese u.a. erfolgreich eingesetzt. Gegenwärtig wird die Hochdurchsatztechnologie hauptsächlich für die Entwicklung von Katalysatoren für Reaktionen eingesetzt, die CO_2 als Rohstoff verwenden (CO_2 -Fischer-Tropsch in Kooperation mit TG Kondratenko oder Propandehydrierung mit CO_2) oder Wasserstoff gewinnen (NH_3 -Spaltung). Für letztere Reaktion wurde ein 50-Kanal-Reaktor hinsichtlich Materialverträglichkeit und Sicherheitstechnik angepasst.

[1] U. Rodemerck, E.V. Kondratenko, M. Stoyanova, D. Linke, *J. Catal.* **2020**, *389*, 317-327. Study of reaction network of the ethylene-to-propene reaction by means of isotopically labelled reactants. [2] M. Stoyanova, U. Bentrup, H. Atia, E.V. Kondratenko, D. Linke, U. Rodemerck, *Catal. Sci. Technol.* **2019**, *9*, 3137-48. The role of speciation of Ni^{2+} and its interaction with support for selectivity and stability in conversion of ethylene to propene. [3] T. Otroshchenko, G. Jiang, V. A. Kondratenko, U. Rodemerck and E.V. Kondratenko, *Chem. Soc. Rev.* **2021**, *50*, 473-527. Current status and perspectives in oxidative, non-oxidative and CO_2 -mediated dehydrogenation of propane and isobutane over metal oxide catalysts. (co-operation with TG Kondratenko)

Aktivierung kleiner Moleküle

(jetzt: Katalyse mit phosphorhaltigen Materialien)

Dr. Christian Hering-Junghans
christian.hering-junghans@catalysis.de

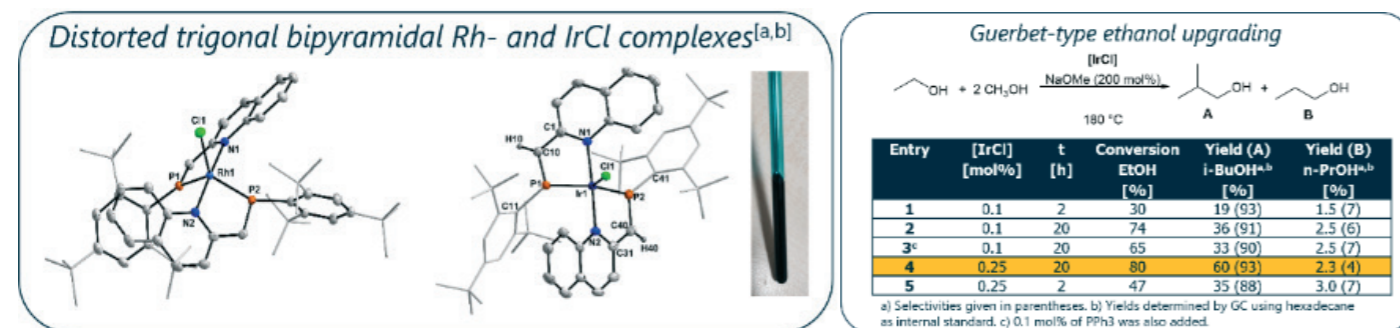


Abb. 1: Verzerrt trigonal bipyramidale Rh(I) und Ir(I) Komplexe mit Quinolin-Phosphaalken-Liganden und der Einsatz des Ir(I) Komplexes als Katalysator in der Guerbet-Reaktion.

In unserer Gruppe beschäftigen wir uns mit der grundlegenden Fragestellung des Ligandendesigns für die Aktivierung kleiner Moleküle. Dabei liegt der Fokus auf der Synthese von Ligandenarchitekturen mit Phosphaalken-Einheiten. Phosphaalkene sind Moleküle mit einer P=C Doppelbindung und bieten vielfältige Koordinationsmöglichkeiten und sollten insbesondere für die Stabilisierung elektronenreicher Metalle geeignet sein. Mit Hilfe der Phospha-Wittig Reaktion konnten wir eine Vielzahl von Pyridin-basierten Phosphaalkenen darstellen und haben insbesondere Quinolin-substituierte Phosphaalkene, zweizählige P,N-artige Liganden, im Detail untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass mit diesen Liganden ungewöhnliche verzerrt trigonal-bipyramidale Rh(I) und Ir(I) Komplexe gebildet werden (Abb. 1, links),^[1] wobei die Ir(I) Komplexe als Präkatalysatoren für

die Guerbet-Reaktion von Ethanol mit Methanol identifiziert wurden, wobei der potenzielle grüne Kraftstoff iso-Butanol in hohen Selektivitäten erhalten wurde (Abb. 1, rechts).^[2] Wir haben kürzlich gezeigt, dass Phospha-Reagenzien nicht nur für die Synthese von Phosphaalkenen eingesetzt werden können, sondern auch potente Phosphiniden-Überträger darstellen. Nun ist es uns gelungen N-H-Bindungen mit ArP(PMe₃) zu aktivieren,^[3] um eine Vielzahl verschieden substituierter sekundärer Aminophosphane zu erhalten, die ideale Vorstufen für P-chirale Liganden darstellen (Abb. 2). Darüber hinaus zeigten wir das ebenso O-H und E-O Bindungen aktiviert werden können.^[4,5] Insbesondere die Deoxygenierung von SO₂ hat potentielle Anwendungen in der Behandlung von Abgasströmen.^[5]

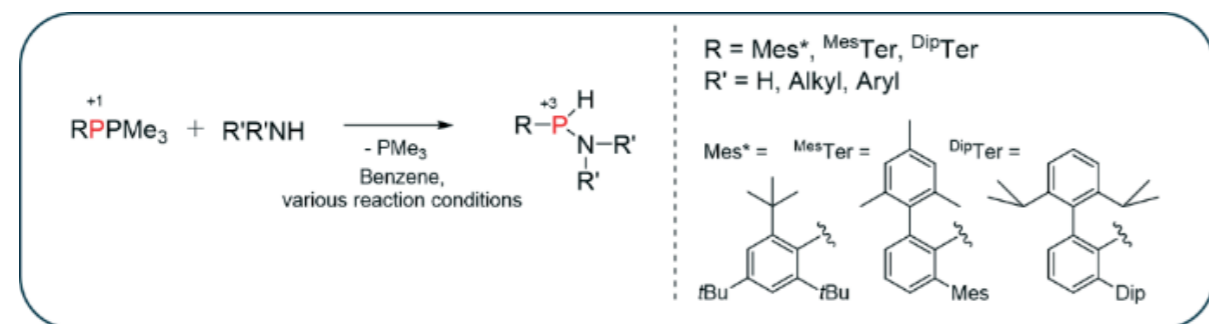


Abb. 2: N-H Bindungsaktivierung mit Phospha-Wittig Reagenzien.

[1] P. Gupta, T. Täufer, J.-E. Siewert, F. Reiß, H.-J. Drexler, J. Pospech, T. Beweries, C. Hering-Junghans, *Inorg. Chem.* **2022**, *61*, 11639–11650. [2] P. Gupta, H.-J. Drexler, R. Wingad, D. Wass, E. Baráth, T. Beweries, C. Hering-Junghans, *Inorg. Chem. Front.* **2023**, *10*, 2285–2293. [3] F. Dankert, J.-E. Siewert, P. Gupta, F. Weigend, C. Hering-Junghans, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, e202207064. [4] F. Dankert, M. Fischer, C. Hering-Junghans, *Dalton Trans.* **2022**, *51*, 11267–11276. [5] F. Dankert, P. Gupta, T. Wellnitz, W. Bauermann, C. Hering-Junghans, *Dalton Trans.* **2022**, *51*, 18642–18651.

Selektive katalytische Synthesemethoden

(jetzt: Themenleitung Dr. habil. Eszter Baráth)

Dr. Sergey Tin
sergey.tin@catalysis.de



Aufgrund der zunehmenden Verknappung fossiler Ressourcen und der Umweltbedenken der Gesellschaft wird der Umwandlung nachwachsender Rohstoffe in Grund- und Feinchemikalien jedes Jahr mehr Aufmerksamkeit geschenkt. Eine der bedeutsamsten Herausforderungen ist die katalytische Umwandlung von nicht essbaren Pflanzenmaterialien wie Zellulose, Lignin oder Lignozellulose in eine Reihe von Plattformchemikalien. Diese Plattformchemikalien werden dann in wertvolle Verbindungen für die chemische Industrie umgewandelt.

Eine dieser Plattformchemikalien, 5-Hydroxymethylfurfural, eine vielversprechende Plattformchemikalie,^[1] kann in 1-Hydroxy-2,5-Hexandion (HHD) umgewandelt werden.^[2]

Die selektive Oxidation von HHD führt zu 2,5-Diohexanal (DOH), einer reaktiven Verbindung mit drei Carbonylgruppen.^[3] DOH wurde in nützliche aromatische Verbindungen wie N-substituierte 2-Methyl-5-hydroxypyridin-Salze umgewandelt.^[4] Diese Pyridin-Salze können als Vorstufen für pharmazeutische Verbindungen dienen. Außerdem wurden 1,4-substituierte Benzolringe mit Hydroxy- oder tertiären Aminogruppen synthetisiert.^[5] Obwohl es normalerweise sehr schwierig ist, Benzolmoleküle aus nachwachsenden Rohstoffen in guter Ausbeute und Selektivität herzustellen, wurden die gewünschten Moleküle in bis zu 88 % Ausbeute erhalten.



[1] R. J. van Putten, J. C. van der Waal, E. de Jong, C. B. Rasrendra, H. J. Heeres, J. G. de Vries, *Chem. Rev.* **2013**, *113*, 1499–1597. Hydroxymethylfurfural, a versatile platform chemical made from renewable resources. [2] B. Wozniak, A. Spannenberg, Y. Li, S. Hinze, J. G. de Vries, *ChemSusChem* **2018**, *11* (2), 356–359. Cyclopentanone derivatives from 5-hydroxymethylfurfural via 1-hydroxyhexane-2,5-dione as intermediate. [3] S. Zheng, W. Smit, A. Spannenberg, S. Tin, J. G. de Vries, *Chem. Commun.* **2022**, *58* (29), 4639–4642. Synthesis of alpha-keto aldehydes via selective Cu(I)-catalyzed oxidation of alpha-hydroxy ketones. [4] S. Zheng, S. Chakraborty, E. Baráth, S. Tin, J. G. de Vries, *ACS Sustain. Chem. Eng.* **2022**, *10* (48), 15642–15647. Synthesis of N-substituted 3-hydroxypyridinium salts from bioderived 5-hydroxymethylfurfural in water. [5] S. Zheng, Z. Wei, B. Wozniak, F. Kallmeier, E. Baráth, H. Jiao, S. Tin, J. G. de Vries, *Nat. Sustain.*, article submitted. A new strategy for the synthesis of valuable benzenoid aromatics from bioderived 5-hydroxymethylfurfural (HMF) under mild conditions.

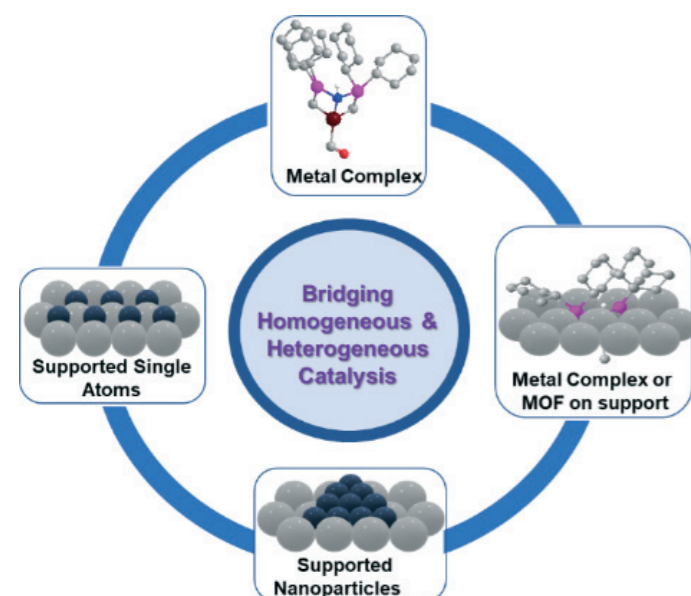
Synergie zwischen homo- und heterogener Katalyse

(jetzt: Katalyse für nachhaltige Synthesen)

Prof. Dr. Jagadeesh Rajenahally
jagadeesh.rajenahally@catalysis.de



Die Forschungsarbeiten der Gruppe konzentrieren sich auf: (i) Die Entwicklung kostengünstiger, langlebiger und praktischer Katalysatoren mit der Aktivität und Selektivität homogener Katalysatoren und der Stabilität und Wiederverwertbarkeit heterogener Katalysatoren und (ii) die Entwicklung nachhaltigerer und umweltfreundlicherer katalytischer Verfahren für die Synthese von Fein- und Masschemikalien, biowissenschaftlichen Molekülen sowie für die Aufwertung erneuerbarer Rohstoffe und Kunststoffabfälle.



keln (NPs) und einzelnen Atomen (SACs) durch Immobilisierung und Pyrolyse von homogenen Metallkomplexen oder metallorganischen Gerüsten auf anorganischen Trägern. Diese Materialien stellen hochaktive und selektive sowie stabile und wiederverwendbare Katalysatoren für Aminierungs-, Hydrierungs- und Oxidationsprozesse dar und ermöglichen den Zugang zu wichtigen Chemikalien.

Unter Verwendung geeigneter Katalysatoren führen wir fortgeschrittene organische Synthesen auf nachhaltigere, effizientere und selektivere Weise durch. Insbesondere konzentrieren wir uns auf die Entwicklung nachhaltiger und kosteneffizienter Verfahren für die Synthese von industriellen Fein- und Masschemikalien, funktionalisierten und strukturell vielfältigen Molekülen, Pharmazeutika und Agrochemikalien sowie für die Verwertung von erneuerbaren Rohstoffen (CO₂ und Biomasse) und Kunststoffabfällen. Für diese Synthesen verwenden wir katalytische C-N-, C-C-, C-O- und C-X- (X=F, Cl und Br) Bindungsbildungs- und -spaltungsreaktionen.

Die Gruppe arbeitet an der Entwicklung sowohl homogener als auch heterogener Katalysatoren für eine nachhaltige und fortschrittliche organische Synthese. Im Allgemeinen sind homogene Katalysatoren hochselektiv, aber nicht stabil, während heterogene Katalysatoren zwar stabil, aber nicht selektiv sind. Unsere Aufgabe ist es, homogene und heterogene Katalyse zu kombinieren, um „ideale“ Katalysatoren zu entwickeln. Wir konzentrieren uns auf die Herstellung von Katalysatoren auf der Basis von Nanoparti-



(DOI: <https://doi.org/10.1039/D2CY00232A>)

[1] V. G. Chandrashekar, W. Baumann, M. Beller, R. V. Jagadeesh, *Science* **2022**, *376*, 1433-1441. Nickel-catalyzed hydrogenative coupling of nitriles and amines for general amine synthesis. [2] V. G. Chandrashekar, T. Senthamarai, R. G. Kadam, O. Malina, J. Kašlík, R. Zbořil, M. B. Gawande, R. V. Jagadeesh, M. Beller, *Nature Catalysis* **2022**, *5*, 20-29. Silica supported Fe/Fe-O nanoparticles for the catalytic hydrogenation of nitriles to amines in the presence of aluminium additives. [3] T. Senthamarai, V. G. Chandrashekar, N. Rockstroh, J. Rabeah, S. Bartling, R. V. Jagadeesh, M. Beller, *Chem* **2022**, *8*, 508-531. A "universal" catalyst for aerobic oxidations to synthesize (hetero)aromatic aldehydes, ketones, esters, acids, nitriles and amides. [4] J. Gao, L. Feng, R. Ma, B. J. Su, A. M. Alenad, Y. Liu, M. Beller, R. V. Jagadeesh, *Chem Catalysis* **2022**, *2*, 178-194. Cobalt single-atom catalysts for domino reductive amination and amidation of levulinic acid and related molecules to N-heterocycles.



Struktur-Wirk-Beziehungen

Prof. Dr. Jennifer Strunk
jennifer.strunk@catalysis.de



In dieser Themengruppe fokussieren wir uns auf die Erlangung eines tiefgreifenden Verständnisses der zugrundeliegenden photophysikalischen, katalytischen und elektrochemischen Prozesse, um aus diesen Erkenntnissen eine Basis für die gezielte Entwicklung von Photokatalysatoren und Anwendungskonzepten im Hinblick auf eine großtechnische Umsetzung zu schaffen. Neben Reaktionen mit Relevanz für die Energiespeicherung (Kohlendioxidreduktion, Wasserspaltung) beschäftigen wir uns auch mit selektiven Oxidationsreaktionen von Alkoholen oder von Stickstoff.

Verschiedene Methoden der Spektroskopie, insbesondere der IR-Spektroskopie unter Reaktionsbedingungen und die optische Spektroskopie, sowie die elektrochemische Charakterisierung werden verwendet, um die optoelektronischen und katalytischen Eigenschaften zu studieren und die Ladungsträgerdynamik zu verfolgen. Um all diese Parameter zu erforschen, unterhält die Gruppe zusätzlich

Kooperationen mit anderen Arbeitskreisen, die über die geeigneten, spezialisierten Methodiken verfügen, zum Beispiel die transiente optische Spektroskopie. Es ist das Ziel, genau diejenigen strukturellen und elektronischen Eigenschaften des Photokatalysators zu identifizieren, die für eine hohe photokatalytische Aktivität verantwortlich sind. Mit diesem Wissen sollen effizientere Photokatalysatoren auf gezieltem Wege synthetisiert werden.



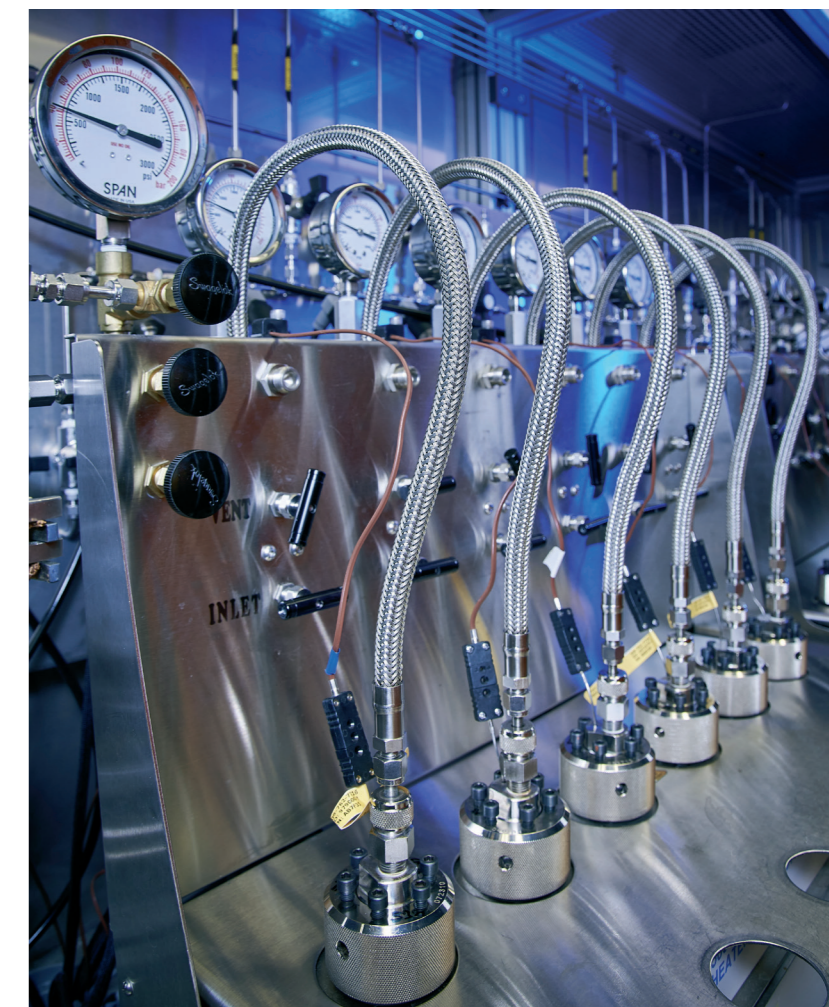
Mikroverfahrenstechnik

Dr. Norbert Steinfeldt
norbert.steinfeldt@catalysis.de



Der Eintrag umweltschädlicher Substanzen in die uns zur Verfügung stehenden Wasserressourcen ist ein schwerwiegendes Problem, dessen Bedeutung in Zukunft noch zunehmen wird. Ein Schwerpunkt der Themengruppe Mikroverfahrenstechnik ist daher die Entwicklung von photokatalytisch aktiven Materialien mit deren Hilfe diese Stoffe (z.B. Phenole, Antibiotika, Schmerzmittel) unter Lichteinwirkung vollständig zu CO₂ und Wasser abgebaut werden können. Die Austestung der Katalysatoren erfolgt dabei sowohl in Batchreaktoren^[1] als auch in Photoreaktoren, die eine kontinuierliche Reaktionsführung erlauben. Während im Batchreaktor vorwiegend Suspensionen zum Einsatz kommen, werden die Photokatalysatoren bei kontinuierlichen Prozessen als dünne Schicht auf entsprechende Trägermaterialien aufgebracht, um eine größtmögliche Bestrahlung der vorhandenen Oberfläche mit Licht zu gewährleisten. Im vorliegenden Beispiel wurden aus einem Titanblech elektrochemisch TiO₂ Nanoröhrchen erzeugt. Diese sind amorph und müssen, um photokatalytisch zu wirken, durch eine thermische Nachbehandlung in eine kristalline TiO₂-Modifikation umgewandelt werden. Unsere Untersuchungen haben gezeigt, dass die Anwesenheit von Wasserdampf bei der Kristallisation sowohl die sich ausbildende Struktur als auch die photokatalytische Aktivität der TiO₂-Schichten positiv beeinflusst.^[2] Darüber hinaus zeigten die unter Wasserdampfbeteiligung hergestellten Schichten eine höhere Stabilität gegenüber einer häufig zu beobachteten Desaktivierung. Ein weiteres Arbeitsgebiet der Themengruppe ist die Entwicklung kontinuierlich geführter, in einer Flüssigphase stattfindender Mehrphasenprozesse für die Herstellung von Feinchemikalien. Zu dieser Thematik wurde sowohl mit der Themengruppe „Flüssigphasenoxidation“ (Dr. Angela Köckritz, jetzt Dr. Ali Abdel-Mageed)

als auch mit der Nachwuchsgruppe „Moderne Organische Chemie“ (Dr. El-Sepelgy) zusammengearbeitet. Ein bisher für heterogen katalysierte Flüssigphasenprozesse nicht ausreichend gelöstes Problem ist die Standfestigkeit der eingesetzten Katalysatoren. Zu diesem Zweck wurden kommerziell verfügbare Al₂O₃-Kugeln mit Ru bzw. Ru-M (M= Sn, Zn, Cu, or Fe) Nanopartikel beschichtet und für die Hydrierung von 1-Iodo-4-Nitrobenzen eingesetzt.^[3] Für alle untersuchten Katalysatoren nahm die Aktivität mit der Zeit ab.



[1] S. Ding, T. Dong, T. Peppel, N. Steinfeldt, J. Hu, J. Strunk, *J. Colloid and Interface Sci.* **2022**, *607* (2022), 1717-1729. Construction of amorphous SiO₂ modified β-Bi₂O₃ porous hierarchical microspheres for photocatalytic antibiotics degradation. [2] M. Sebek, T. Peppel, H. Lund, I. Medic, A. Springer, P. Mazierski, A. Zaleska-Medynska, J. Strunk, N. Steinfeldt, *Chem. Eng. J.* **2021**, *425*, 130616. Thermal annealing of ordered TiO₂ nanotube arrays with water vapor-assisted crystallization under a continuous gas flow for superior photocatalytic performance. [3] M. Sebek, H. Atia, N. Steinfeldt, *J. Flow. Chem.* **2021**, *11*, 333-344. Synthesis of flow-compatible Ru-Me/Al₂O₃ catalysts and their application in hydrogenation of 1-iodo-4-nitrobenzene.

Photokatalytische CO₂-Reduktion

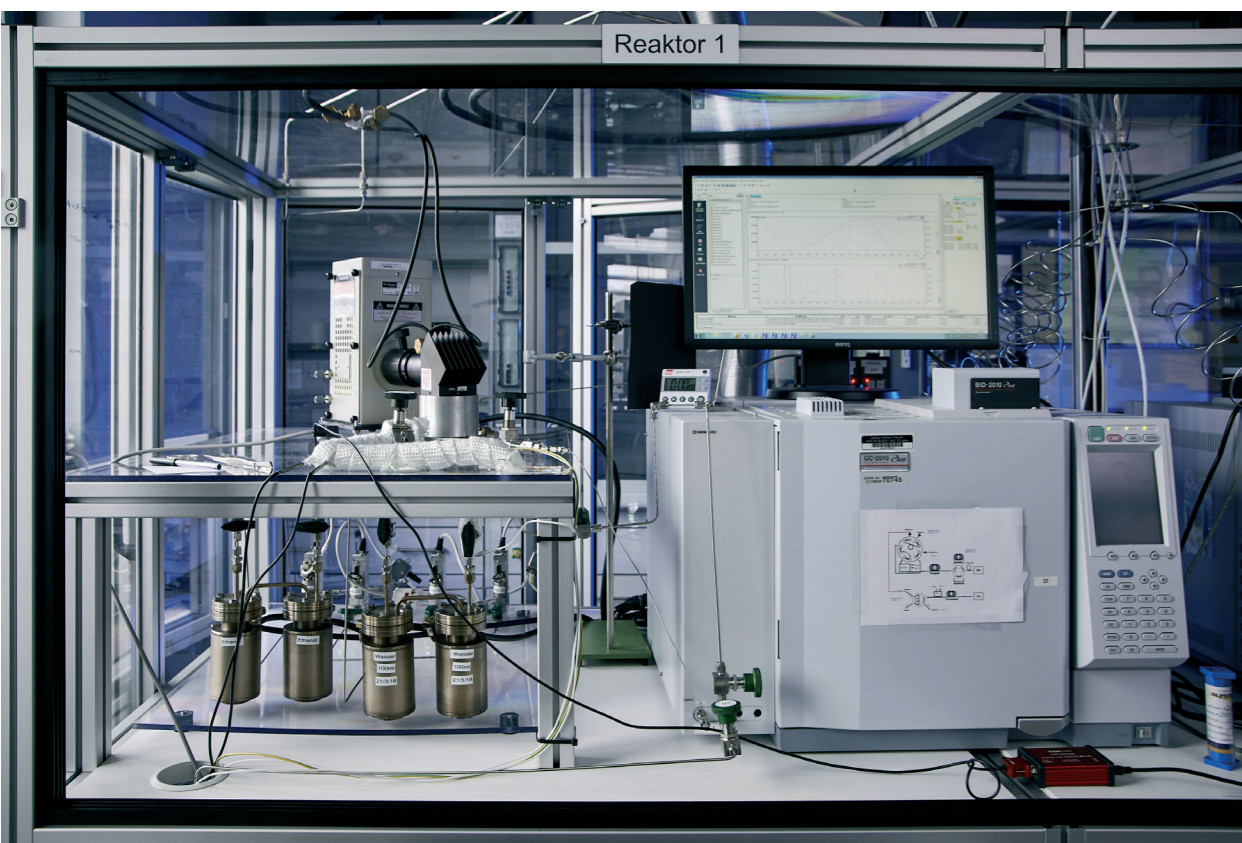
Dr. Tim Peppel
tim.peppel@catalysis.de



Es ist wohlbekannt, dass die photokatalytische Umsetzung von CO₂ und H₂O zu Produkten wie CH₄ und CO im Prinzip möglich ist. Jedoch sind die bisher erreichten Umsätze viel zu gering für eine Anwendung auf industrieller Größenordnung. Der Schwerpunkt unserer Arbeiten liegt auf der Implementierung verlässlicher, reproduzierbarer Versuchsabläufe für die photokatalytische CO₂-Reduktion, um eine Basis zu schaffen, die eine Aufklärung mechanistischer Details des Reaktionspfads erlaubt. Die zentrale Herausforderung ist der völlige Ausschluss kohlenstoffhaltiger Verunreinigungen in jedem Reaktorsystem. Da CO₂ thermodynamisch extrem stabil ist, würde jede Verunreinigung schneller zu (scheinbaren) Produkten reagieren als das CO₂ selbst. Ausbeuten würden so überschätzt und falsche Schlussfolgerungen in Bezug auf die Produktverteilung gezogen werden. Die (Spuren-) Gasanalytik basiert sowohl auf Gaschromatogra-

phie als auch auf Massenspektrometrie. In den Jahren 2021/22 konnten mittels Verbreiterung der Reaktionsbedingungen sowohl qualitative als auch quantitative Aussagen über die Nutzbarkeit von verschiedensten Halbleitermaterialien (z. B. TiO₂, g-C₃N₄, SiC, GaN), plasmonischen Systemen, aber auch Z-Schema-Photokatalysatoren, deren Funktionsweise von der natürlichen Photosynthese inspiriert ist, für Energiespeicherreaktionen getroffen werden. So sind nun Experimente bei bis zu 180 °C, mit molekularen Photokatalysatoren und unter Verwendung von H₂ oder CH₄ als Reaktionspartner standardmäßig möglich. Sämtliche Arbeiten erfolgten in enger Abstimmung und Koordination mit der Themengruppe „Struktur-Wirk-Beziehungen“, sodass auch *in situ*-Studien an „single site“- und „single atom“-Katalysatoren durchgeführt werden konnten.

Abb.: Set-up im Labor - der Photoreaktor ist direkt an die Gasanalytik gekoppelt. Die Messungen müssen unter hochreinen Bedingungen durchgeführt werden. Nur so kann garantiert werden, dass C-haltige Produkte nicht aus Verunreinigungen sondern aus dem extrem stabilen CO₂ resultieren.



[1] N. G. Moustakas, F. Lorenz, M. Dilla, T. Peppel, J. Strunk, *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 17213-17219. Pivotal Role of Holes in Photocatalytic CO₂ Reduction on TiO₂. [2] F. Lorenz, N. G. Moustakas, T. Peppel, J. Strunk, *Chem. Ing. Tech.* **2022**, *94*, 1776-1783. Comparative Studies of Oxygen-Free Semiconductors in Photocatalytic CO₂ Reduction and Alcohol Degradation. [3] P. Naliwajko, T. Peppel, J. Strunk, *Reac. Kinet. Mech. Cat.* **2022**, *135*, 2291-2305. Thermal and light induced infrared blackening of ZnO revisited: rediscovery of fundamental scientific knowledge.



Magnetische Resonanz- & Röntgenmethoden

Dr. Jabor Rabeah
jabor.rabeah@catalysis.de



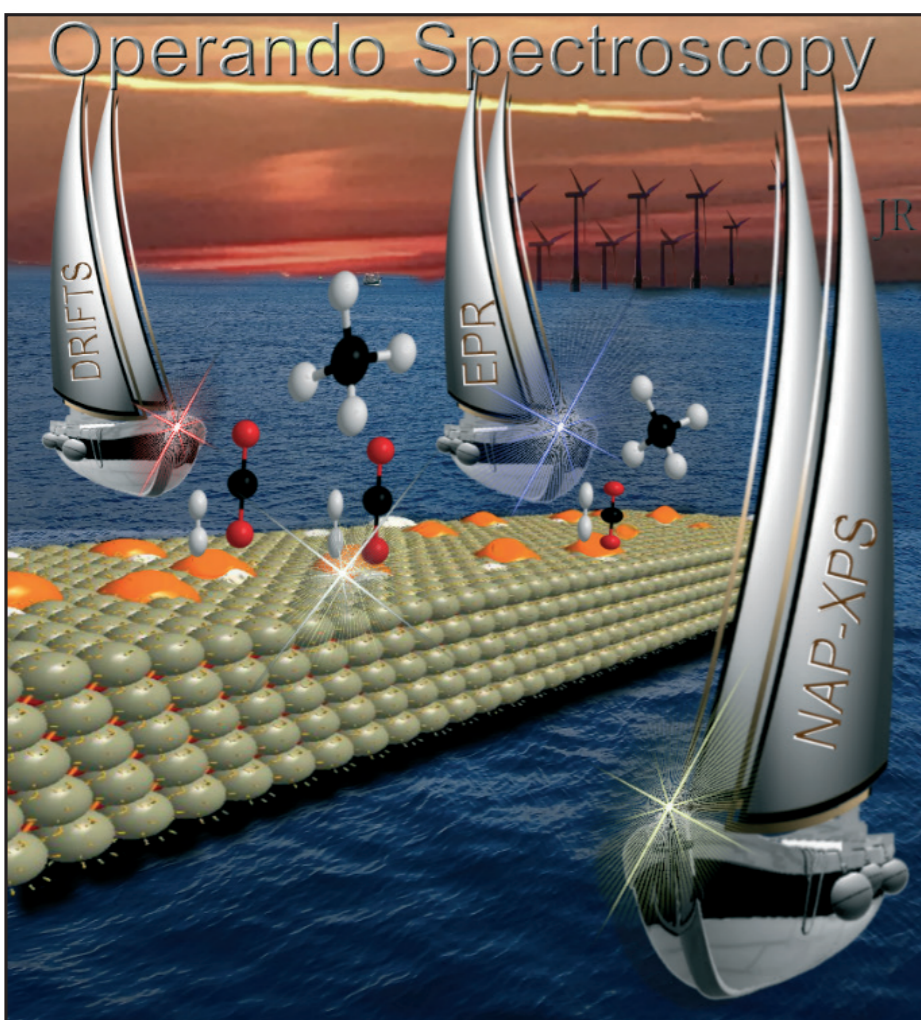
Unser grundlegendes Verständnis katalytischer Reaktionen hat sich durch die simultane Überwachung des dynamischen Verhaltens katalytischer Stellen unter Reaktionsbedingungen erheblich verbessert. Ein Fokus der Forschungsarbeiten liegt auf der Nutzung und Anpassung EPR-Spektroskopie für die Echtzeitüberwachung verschiedener katalytischer Reaktionen. Sie wurde in Kombination mit anderen spektroskopischen Techniken eingesetzt, um verschiedene Reaktionsmechanismen aufzuklären. Es hat sich gezeigt, dass die EPR-Spektroskopie eine wichtige Rolle bei der Bestimmung der Beziehung zwischen der chemischen Struktur der aktiven Stellen und ihrer katalytischen Aktivität spielt. Als Beispiele sind die CO₂-Met-

hanisierung über geträgerten Ru-Katalysatoren,^[1] die CO-Oxidation und PROX-Reaktion über geträgerten Cu-Einzelatom-Katalysatoren,^[2] die umgekehrte Wasser-Gas-Shift-Reaktion über geträgerten Au-Katalysatoren und die N-Formylierung von Aminen mit C3-Biomasse-basierten Plattformmolekülen^[3] zu nennen.

Darüber hinaus ist die Themengruppe stark in nationale und internationale wissenschaftliche Kooperationen eingebunden wie bspw. in einem gemeinsamen Projekt mit der Gruppe von Prof. Arne Thomas, TU-Berlin, um die photokatalytische H₂O₂-Produktion über COF-basierten Katalysatoren zu untersuchen. Da einige der katalytischen Reaktionen einen Elektronentransfer zwischen Katalysator und Substrat beinhalten, der in der Regel auf einer Zeitskala von <1 Millisekunde abläuft (Valenzänderungen von Übergangsmetallionen und Bildung kurzlebiger radikalischer Zwischenprodukte), wurde ein Schnellscan-Instrument für *In-situ*-EPR-Messungen eingesetzt, um die kinetische Analyse solcher Prozesse in Echtzeit zu ermöglichen.

Die *Operando*-Elektronenspinresonanz-Spektroskopie (ESR, EPR) eignet sich hervorragend zur Verfolgung katalytischer Prozesse, an denen Spezies mit ungepaarten Elektronen beteiligt sind, wie z. B. geträgerte und ungeträgerte Übergangsmetalloxid-Katalysatoren und/oder radikalische Intermediate. (Abb.: J. Rabeah)

Die *Operando*-Elektronenspinresonanz-Spektroskopie (ESR, EPR) eignet sich hervorragend zur Verfolgung katalytischer Prozesse, an denen Spezies mit ungepaarten Elektronen beteiligt sind, wie z. B. geträgerte und ungeträgerte Übergangsmetalloxid-Katalysatoren und/oder radikalische Intermediate. (Abb.: J. Rabeah)



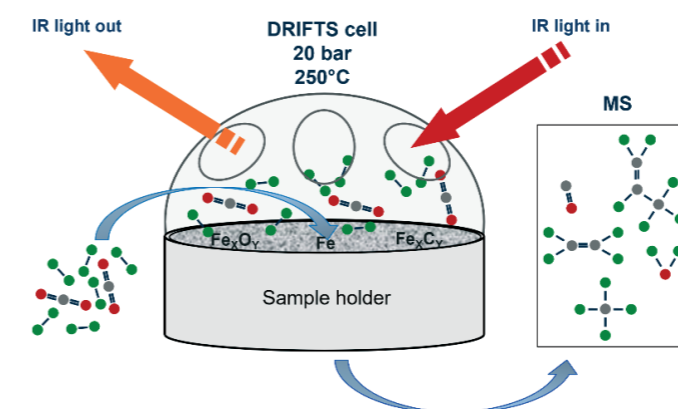
[1] S. Cisneros, A. Abdel-Mageed, J. Mosrati, S. Bartling, N. Rockstroh, H. Atia, H. Abed, J. Rabeah, A. Brückner, *Science* **2022**, *25*. [2] J. Mosrati, A. M. Abdel-Mageed, T. H. Vuong, R. Grauke, S. Bartling, N. Rockstroh, H. Atia, U. Armbruster, S. Wohlrab, J. Rabeah, A. Brückner, *ACS Catalysis* **2021**, *11*, 10933-10949. [3] X. Dai, X. Wang, J. Rabeah, C. Kreyenschulte, A. Brückner, F. Shi, *Chem.Eur.J.* **2021**, *27*, 16889-16895.

Optische Spektroskopie & Thermoanalytische Methoden

Dr. Christoph Kubis
christoph.kubis@catalysis.de



Die Themengruppe führt *in situ* / *operando* spektroskopische Untersuchungen an heterogenen und homogenen Katalysatorsystemen durch, um mechanistische und kinetische Aspekte zu studieren. Dabei wird eine Vielzahl von analytischen Techniken eingesetzt, insbesondere FTIR- (Transmission, DRIFTS, ATR), Raman-, UV-vis- und NMR-Spektroskopie als auch thermoanalytische Methoden.



Operando DRIFTS/MS-Kopplung für Untersuchungen an Eisenoxid-basierten Katalysatoren für die Fischer-Tropsch Synthese mit CO₂.

Die Simultankopplung mehrerer spektroskopischer Methoden mit der Produktanalyse (MS, GC) führt zu einer Ergebnismaximierung für die Aufklärung von Struktur-Wirkungsbeziehungen. Dieser Ansatz wird durch Experiment-Design Strategien sowie chemometrischer Datenanalyse weiter verbessert. Das wissenschaftliche Interesse liegt derzeit auf folgenden Themen: Valorisierung von CO₂, Carbonylierungen von Alkenen, Hydrodeoxygenierung von Lignin-Derivaten sowie der Oligomerisierung von Alkenen. In dem BMBF-Projekt PlasCO₂ (033RC030) arbeiten wir derzeit mit dem INP Greifswald an der Konstruktion einer NT-Plasma DRIFTS-Zelle zur Untersuchung von Adsorbatspezies wäh-

rend der Plasma-induzierten Umsetzung von CO₂ zu CO. Studien zur Bildung aktiver Intermediatphasen vom Typ MoO_xC_yH_z in Metal-molybdat-haltigen Molybdänoxid-basierten Katalysatoren für die HDO von Anisol werden im DFG-Projekt (442613239) durchgeführt. Forschungsarbeiten zur *in situ* Charakterisierung von Adsorbatspezies während der CO₂-Fischer-Tropsch Synthese mit geträgerten Eisenoxid-basierten Katalysatoren erfolgt innerhalb des DFG Projekts (406695057), welches Teils des Schwerpunktprogramms SPP2080 ist. Die Aufklärung elementarer und industrieller Fragestellung zur Rhodium- und Cobalt-katalysierten Hydroformylierung von Alkenen mittels *in situ* FTIR- und NMR-Spektroskopie kombiniert mit chemometrischer Datenprozessierung erfolgt im Rahmen einer langjährigen Kooperation mit Evonik Oxeno GmbH & Co. KG.

[1] J. Weiß, C. Rautenberg, T. Rall, C. Kubis, E. Kondratenko, U. Bentrup, A. Brückner, *Chemistry-Methods* **2021**, *1*, 308-314. [2] Y. Hu, Z. Wei, A. Frey, C. Kubis, C.-Y. Ren, A. Spannenberg, H. Jiao, T. Werner, *ChemSusChem* **2021**, *14*, 363-372. [3] P. Kucmierczyk, S. Behrens, C. Kubis, W. Baumann, Z. Wei, H. Jiao, K. Dong, A. Spannenberg, H. Neumann, R. Jackstell, A. Börner, R. Franke, M. Beller, *Catal. Sci. Technol.* **2022**, *12*, 3175-3189. [4] B. Zhang, C. Kubis, R. Franke, *Science* **2022**, *377*, 1223-1227. [5] J. Weiß, Q. Yang, U. Bentrup, E. V. Kondratenko, A. Brückner, C. Kubis, *ChemCatChem* **2022**, *14*, e202200577. [6] H.-J. Ai, B. N. Leidecker, P. Dam, C. Kubis, J. Rabeah, X.-F. Wu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202211939. [6] B. Spiegelberg, H. Jiao, R. Grauke, C. Kubis, A. Spannenberg, A. Brandt, A. Taden, H. Beck, S. Tin, J. G. de Vries, *Adv. Synth. Catal.* **2022**, *364*, 1251-1263

Dr. Sebastian Wohlrab
sebastian.wohlab@catalysis.de

Die Gruppe widmet sich der Entwicklung neuer funktioneller Materialien für die Intensivierung nachhaltiger Kreislaufströme. Dazu zählen folgende Schwerpunkte:

Nutzbarmachung erneuerbarer Kohlenstoffquellen

Zur notwendigen Entgegnung eines zukünftigen Kohlenstoffmangels untersuchen wir Möglichkeiten der direkten katalytischen Umsetzung von Biomethan und Kohlendioxid.

Während der Selektivoxidation von Methan fiel vor allem der Einfluss von zugesetztem Wasser auf die Reaktion auf. Die dabei gefundenen Abhängigkeiten der Methanaktivierung und Formaldehydzerersetzung können zu einer Selektivitätssteigerung der untersuchten Reaktion führen.^[1]

Wir entwickeln zudem mit der Bundesanstalt für Materialforschung eine neue Methode zur zeit- und orts aufgelösten Charakterisierung mittels XANES. Ziel ist es, Katalysatoren für die Methanaktivierung bei der Arbeit zu verstehen und somit wissenschaftliche Anpassungen am Kataly-



satormaterial vorzunehmen, um auf langzeitstabile und effizientere Prozesse hinzuwirken. Wir erarbeiten weiterhin Konzepte zur Entnahme von Kohlendioxid aus der Luft (DAC – Direct Air Capture) bzw. zu dessen Aufkonzentrierung. Für die Folgeverwertung wird vor allem die Synthesegaserzeugung durch reverse Wasser-gas-Shift-Reaktion erprobt. Als interessante Entdeckung sind dabei Ni-Cu Kern-Schale-Partikel zu nennen. Diese sind größenunabhängig selektiv für die CO-Erzeugung, während reine Ni-Katalysatoren bevorzugt die Methanisierung fördern.

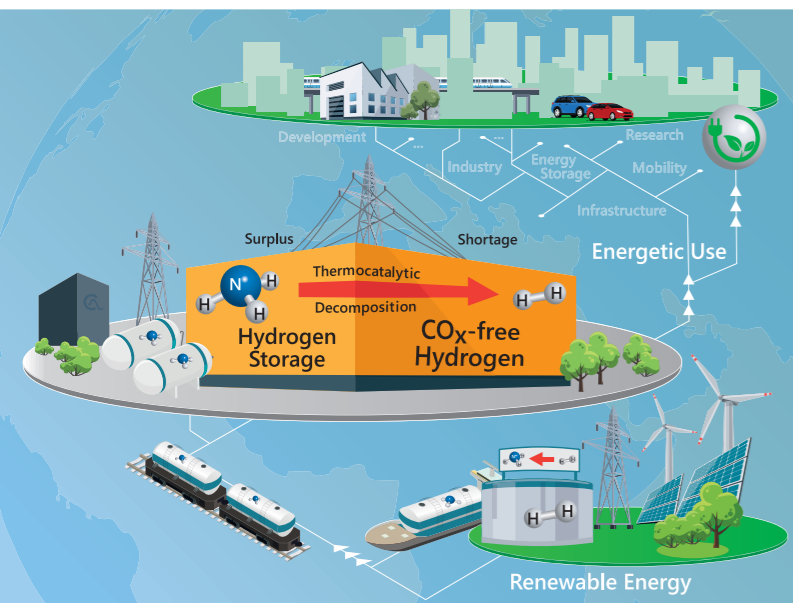
Chemische Wasserstoffspeicherung

Das Funktionsprinzip einer chemischen Wasserstoffbatterie beinhaltet zwei Reaktionen: Die Fixierung von Wasserstoff an einen Grundkörper, wie CO_x oder N, sowie die Freisetzung durch Zersetzung der Speicherstruktur. Wir arbeiten konkret an Problemstellungen zur Freisetzung von Wasserstoff aus solchen Molekülen. Am Beispiel des Ammoniaks als Speichermolekül wurde jüngst der Stand der Technik von uns dargestellt.^[2]

Membrantechnologien

Wir modellieren Eigenschaften neuer Materialien für die Anwendung in der Stofftrennung. So werden die Trenneigenschaften von Mixed Matrix Membranen, z.B. mit Monte Carlo, Molekulardynamik und Quantenmechanik simuliert,^[3] um diese dann in eine reale Anwendung zu überführen. Angedacht sind zukünftige Membranverfahren für die Stofftrennung, zur Verminderung von Energiebedarfen, sowie bei der katalytischen Reaktionsführung zur Gleichgewichtsverschiebung.

(Abb. DOI: <https://doi/10.1002/cctc.202201604>.)



[1] B. Kunkel, S. Wohlrab, *Catal. Commun.* **2021**, *155*, 106317. Enhancement and limits of the selective oxidation of methane to formaldehyde over V-SBA-15: Influence of water cofeed and product decomposition. [2] S. Peters, A. M. Abdel-Mageed, S. Wohlrab, *ChemCatChem* **2023**, *15*, e202201185. Thermocatalytic Ammonia Decomposition – Status and Current Research Demands for a Carbon-Free Hydrogen Fuel Technology. [3] I. Salahshoori, M. N. Jorabchi, M. Asghari, S. Ghasemi, S. Wohlrab, *J. Mater.* **2023**, *23*, 1862-1886. Insights into the morphology and gas separation characteristics of methylene diisocyanate (MDI)-functionalized nano-TiO₂ polyurethane: quantum mechanics and molecular simulations studies.

Dr.-Ing. Udo Armbruster
udo.armbruster@catalysis.de



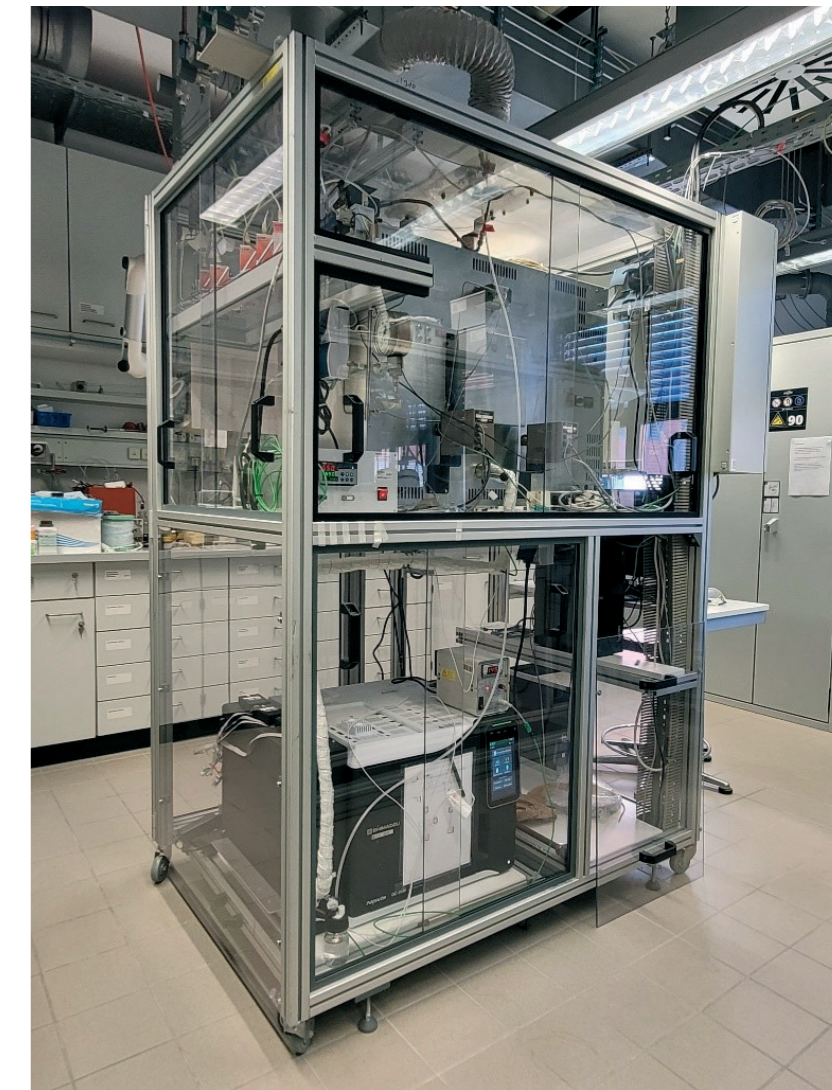
Die Themengruppe entwickelt heterogene Katalysatoren und Synthesewege für die stoffliche oder energetische Nutzung nachwachsender Rohstoffe, Plattformchemikalien sowie von CO₂. Die langjährige Erfahrung der Themengruppe zu heterogen katalysierten Hochdruckreaktionen wird hier ideal genutzt. Wir streben an, solche Umsetzungen bevorzugt in kontinuierlichen Prozessen zu gestalten und frühzeitig auch Erkenntnisse für die technische Anwendung zu gewinnen.

Die flexible Ausstattung ermöglicht Katalysatortests unter verschiedenen Reaktionsbedingungen auch in größeren Reaktoren und mit geformten Katalysatoren (Tabletten) und wird vermehrt für Industriekooperationen nachgefragt. Zur Charakterisierung fester Katalysatoren für die Aufklärung ihrer Wirkungsweise betreibt die Themengruppe ein eigenes Sorptionslabor, in dem verschiedene Methoden (BET, TPX-MS-Kopplung), zusammengeführt sind. Diese Expertise steht auch anderen Wissenschaftlern im Institut sowie externen Forschungspartnern zur Verfügung.

Aktuelle Schwerpunktthemen in öffentlich geförderten Projekten (BMW-, BMBF) sind die Umwandlung von Plattformchemikalien wie Lävulinsäure oder Glycerin und die Nutzung von CO₂. Besonders zu nennen sind die Methanolsynthese, die Fischer-Tropsch-Synthese und das trockene Reformieren von CO₂ mit Methan. Für die beiden letzteren Prozesse wurden im Jahr 2021 jeweils neue Testanlagen mit erweiterten Optionen in Betrieb genommen. In diesen laufenden Projekten steht auch die Formgebung der Katalysatoren im Blickpunkt. Alle diese Arbeiten und die Erfahrungen aus aktuellen Industriekooperationen zur Ammoniak- und Methanolsynthese und aus der Umweltkatalyse (Entstickung und Entschwefelung) werden wert-

volle Beiträge für den Betrieb des neuen *Catalysis2Scale*-Technikums im LIKAT liefern.

Abb.: Neue Fischer-Tropsch-Versuchsanlage mit online-GC zum Betrieb mit konventionellem Rohrreaktor oder Membran-Reaktor. (Foto: U. Armbruster)



[1] Q. L. M. Ha, H. Atia, C. Kreyenschulte, H. Lund, S. Bartling, G. Lisak, S. Wohlrab, U. Armbruster, *Fuel* **2022**, *312*, 122823. Effects of modifier (Gd, Sc, La) addition on the stability of low Ni content catalyst for dry reforming of model biogas. (<https://10.1016/j.fuel.2021.122823>) [2] S. Nieß, U. Armbruster, S. Dietrich, M. Klemm, *Catalysts* **2022**, *12*, 374. Recent Advances in Catalysis for Methanation of CO₂ from Biogas. (<https://doi.org/10.3390/catal12040374>) [3] M.T. Le, S. Singh, M. Nguyen-Quang, A.B. Ngo, A. Brückner, U. Armbruster, *Sci. Tot. Environ.* **2021**, *784*, 147394. (<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.147394>)

Dr. Ali Abdel-Mageed
ali.abdel-mageed@catalysis.de



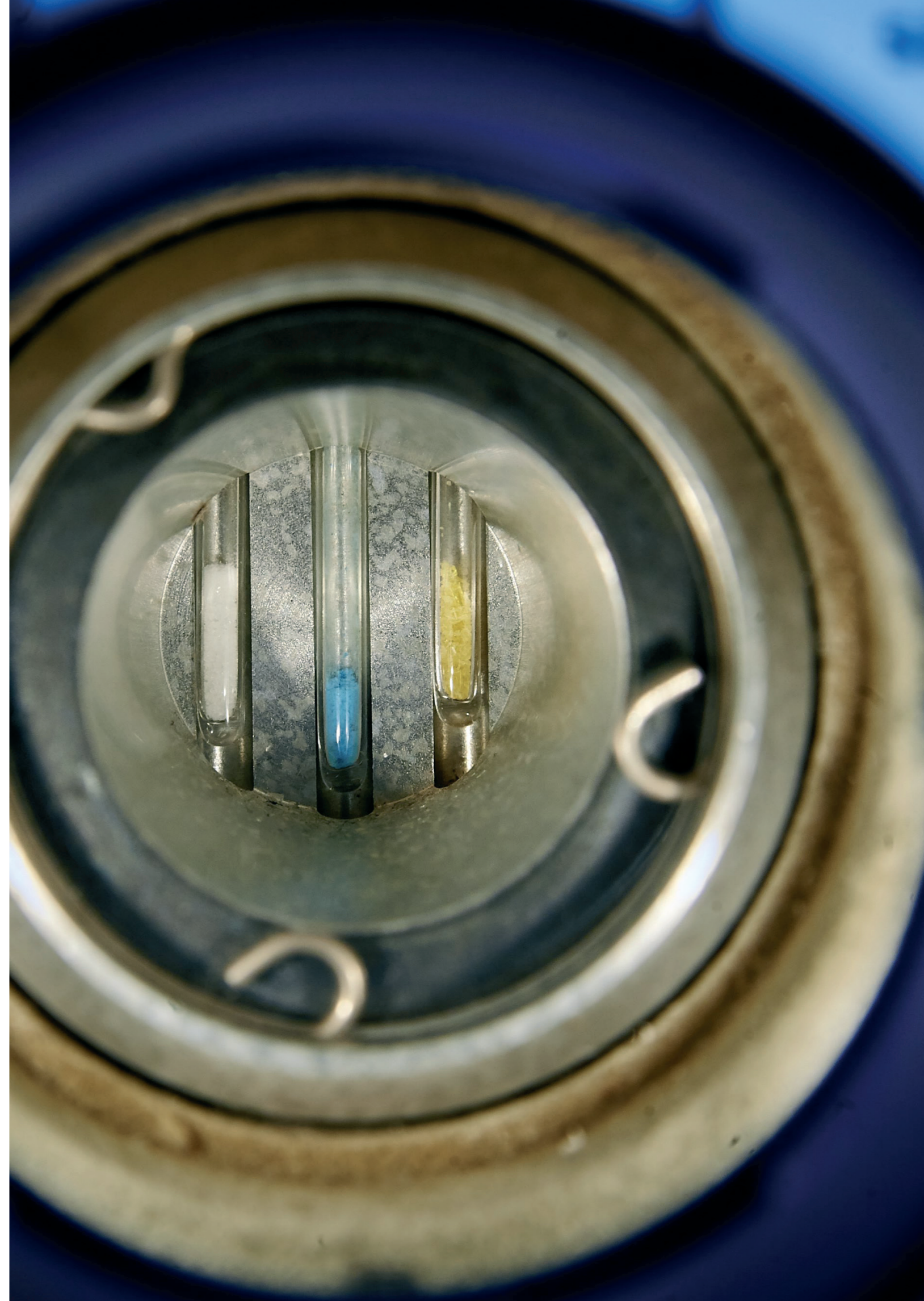
Entwicklung heterogener einatomiger Katalysatoren

Die Entwicklung von Einzelatomkatalysatoren (SAC) gilt als das ultimative Konstruktionsprinzip für heterogene Katalysatoren mit dem Hauptziel, die Verwendung teurer Metalle zu rationalisieren. Um diese Materialien für industrielle Anwendungen nutzbar zu machen, sollten ihre Aktivität und Stabilität deutlich verbessert werden. Wir konzentrieren uns hier auf die Entwicklung von CeO_2 - TiO_2 geträgerten Metall-SACs (Cu, Pd und Ru) mit Hilfe der Ein-Topf-Sol-Gel-Methode und deren anschließende Verwendung in ausgewählten katalytischen Prozessen. Wir zeigen, dass die Aktivität für die CO-Oxidation und die Wassergasverschiebung auf Cu/ CeO_2 - TiO_2 -SACs durch Modulation des Ce/Ti-Verhältnisses erheblich gesteuert werden kann. Die Aktivität folgt einer vulkanförmigen Abhängigkeit vom Ce/Ti-Molverhältnis, wobei die Reaktionsraten bei einem Ce/Ti-Verhältnis von etwa 0,18 kulminieren.^[1] Diese Erkenntnisse bilden zusammen die Grundlage für die Optimierung von SACs auf der Basis anderer Edelmetalle.

CO₂-Reduktion bei Umgebungsdruck

Die wesentlichen Auswirkungen des Klimawandels erfordern die Entwicklung grüner Alternativen zu den bestehenden kohlenstoffbasierten Energietechnologien. Die Umwandlung des aus der Luft abgeschiedenen CO₂ in Methan oder Synthesegas über eine Reverse-Water-Gas-Shift (RWGS)-Reaktion gilt als effiziente Möglichkeit, dieses Treibhausgas zu umgehen und in einem geschlossenen Energiekreislauf zu nutzen. Geträgerte Ru-Katalysatoren, insbesondere Ru/ TiO_2 , sind bei niedrigen Temperaturen (< 200°C) hochaktiv und ihre Eigenschaften können zur Feinabstimmung der Selektivität für ein bestimmtes Produkt gesteuert werden. Jüngste

Ergebnisse zeigen, dass Ru/ TiO_2 -Katalysatoren mit großer Oberfläche (> 200 m²·g⁻¹) bei Temperaturen < 200°C CO mit 100 % Selektivität erzeugen können.^[2] Im Gegensatz dazu zeigen Katalysatoren auf Basis von Trägern mit geringerer Oberfläche (< 100 m²·g⁻¹) eine 100 %ige Selektivität für Methan, wobei in diesem Fall die katalytische Aktivität durch das Zusammenspiel von Ru-Partikelgröße und Reduzierbarkeit des Trägers gesteuert wird.^[3] Die weitere Verbesserung dieser Katalysatoren für Anwendungen bei niedrigeren Temperaturen ist Gegenstand aktueller Studien.



[1] A. M. Abdel-Mageed, S. Cisneros, J. Mosrati, H. Atia, T. H. Vuong, N. Rockstroh, S. Wohlrab, A. Brückner, J. Rabeah, *ChemCatChem* 2023, e202201669. [2] A. M. Abdel-Mageed, K. Wiese, A. Hauble, J. Bansmann, J. Rabeah, A. Brückner, R. J. Behm, *J.Catal.* 2021, 400. [3] S. Chen, A. M. Abdel-Mageed, *Int. J. Hydrog. Energy* 2023. [4] A. M. Abdel-Mageed, B. Rungtaweeworanit, S. Impeng, J. Bansmann, J. Rabeah, S. Chen, T. Häring, S. Namuangrak, K. Faungnawakij, A. Brückner, R. J. Behm, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, 62, e2023019.

Molekulare Elektrochemie

Prof. Dr. Robert Francke
robert.francke@catalysis.de



Ein Schwerpunkt der Themengruppe ist die Entwicklung elektrochemischer Synthesen von organischen Verbindungen. Unsere umfangreiche Ausstattung und Expertise erlaubt es, den Versuchsaufbau und die Art der Reaktionsführung an eine Vielzahl verschiedener präparativer Fragestellungen anzupassen. So kommen je nach Bedarf geteilte und ungeteilte Zellen zum Einsatz, welche im potentiostatischen oder galvanostatischen Modus betrieben werden können. Die Entwicklungsarbeiten werden üblicherweise durch elektroanalytische Studien ergänzt, wodurch zum einen mechanistische Einblicke gewonnen werden, zum anderen aber auch Informationen, welche für die Optimierung von Reaktionsparametern nützlich sind. Als weiteres Werkzeug setzen wir, falls es die Problemstellung erfordert, homogene Elektrokatalysatoren

(Mediatoren) oder katalytisch aktive Elektrodenmaterialien ein. Dieser Ansatz erlaubt sowohl eine gezielte Steuerung der Selektivität als auch eine Absenkung der kinetischen Überspannung. Zur Beschleunigung der Optimierung kommen Screening-Apparaturen zum Einsatz, welche die Durchführung von bis zu acht Elektrolysen gleichzeitig pro Aufbau erlaubt. Zur Skalierung der Reaktion stehen diverse Durchflusszellen zur Verfügung, welche bei Bedarf mit unterschiedlichen analytischen Methoden zur Online-Produktanalyse gekoppelt werden können.

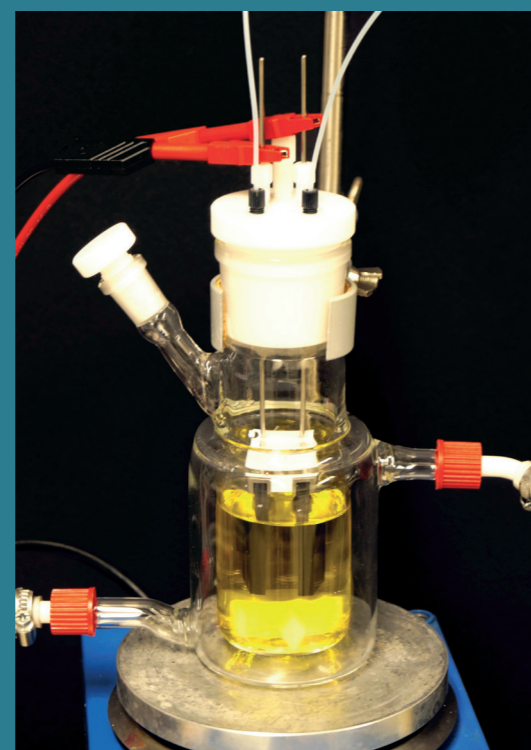
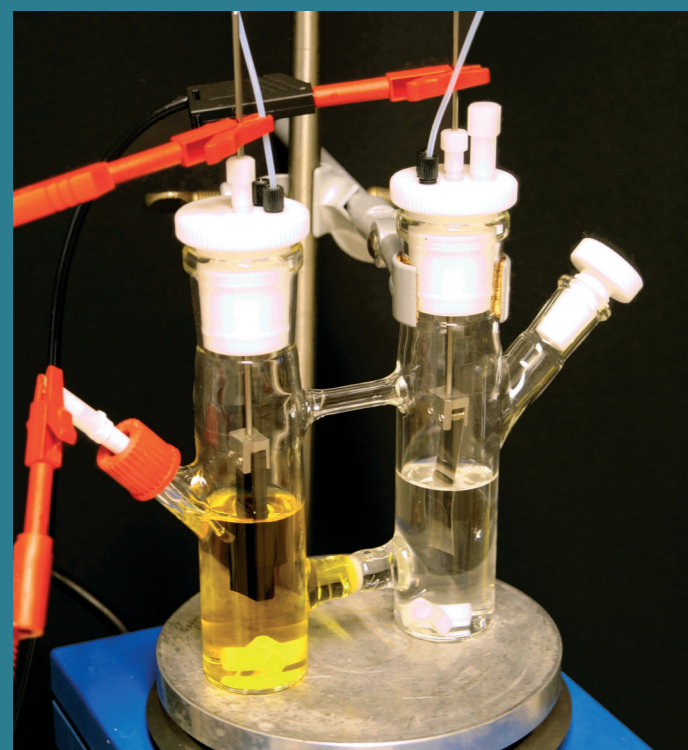


Abb.: Geteilte Zelle (links), Ungeteilte Zelle (rechts) (Fotos: Robert Francke)

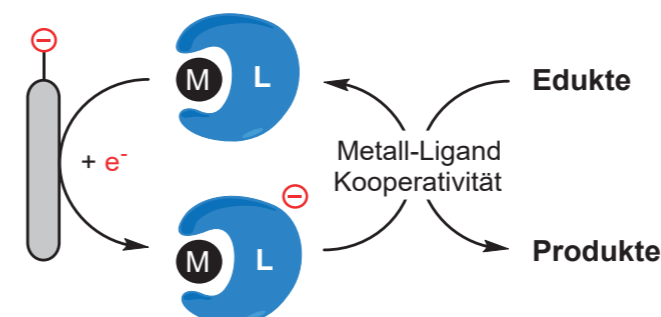
R. Francke, „Concepts for Sustainable Organic Electrosynthesis“, *Curr. Opin Electrochem.* 2022, 36, 101111.
R. Francke, M. Májek, „Mediated Electron Transfer in Electrosynthesis: Concepts, Applications, and Recent Influences from Photoredox Catalysis“ in *Sustainable and Functional Redox Chemistry* (Ed.: S. Inagi), 2022, Royal Society of Chemistry, Cambridge.
R. Francke, P. Enders, „Methods and Materials Applied in Electrosynthesis“ in *Science of Synthesis: Electrochemistry in Organic Synthesis* (Ed.: L. Ackermann), Thieme, Stuttgart, 2022, 33-72.

Katalysatordesign für die Elektrosynthese

Dr. Bernd H. Müller
bernd.mueller@catalysis.de



Eine Möglichkeit zur Durchführung elektrochemischer Synthesen besteht in der Verwendung homogener Katalysatoren („Mediatoren“). Diese sind redoxaktive Spezies, die als elektrochemisch regenerierbare Reagenzien betrachtet werden können. Der Elektronentransfer erfolgt zunächst zwischen Elektrode und Katalysator unter der Ausbildung der aktiven Spezies. Letztere reagiert mit einem Substrat, das sich daraufhin zum gewünschten Produkt umsetzt. Durch diese indirekte Elektronenübertragung lassen sich in der Regel große Überspannungen vermeiden und Selektivitäten steuern. Der Mediator als Elektronenüberträger wird an der Elektrode immer wieder zurückgewonnen und verbraucht sich bei der Elektrosynthese nicht. Die Reaktion des Mediators mit dem Substrat findet in homogener Phase statt.

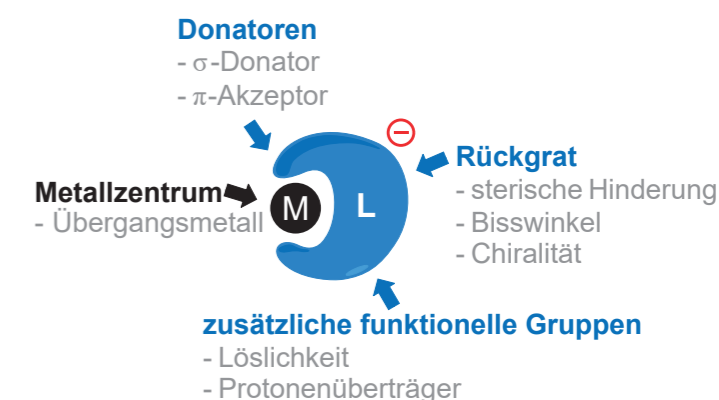


Medierte Elektrokatalyse

Das Elektrodenmaterial spielt bei der Planung von Elektrosynthesen üblicherweise eine große Rolle. Bei mediierten Elektrosynthesen sind die Elektroden jedoch nicht mehr der Ort der primären Reaktion des Substrates. Analog zur klassischen homogenen Katalyse lässt sich der Mediator über die Wahl des Übergangmetalls und der Ligandenstruktur maßschneidern, um den Bedürfnissen der gewünschten Reaktion gerecht zu werden. Das erweitert die Möglichkeiten der Elektrosynthese hinsichtlich Selektivität und möglicher Reaktionsmechanismen.

Katalysatoroptimierung / Rationales Ligandendesign

Ziel ist die Erforschung der Mechanismen bereits bekannter mediierten Elektrosynthesen und die Entwicklung neuer Synthesen, die diesem Syntheseprinzip folgen bis hin zur Anwendungsreife.



[1] R. Francke, M. Roemelt, B. Schille, *Chem. Rev.* 2018, 118, 4631–4701. [2] L. F. T. Novaes, J. Liu, Y. Shen, L. Lu, J. M. Meinhardt, S. Lin, *Chem. Soc. Rev.* 2021, 50, 7941-8002.

Polymerchemie & Katalyse

PD Dr. habil. Esteban Mejía
esteban.mejia@catalysis.de

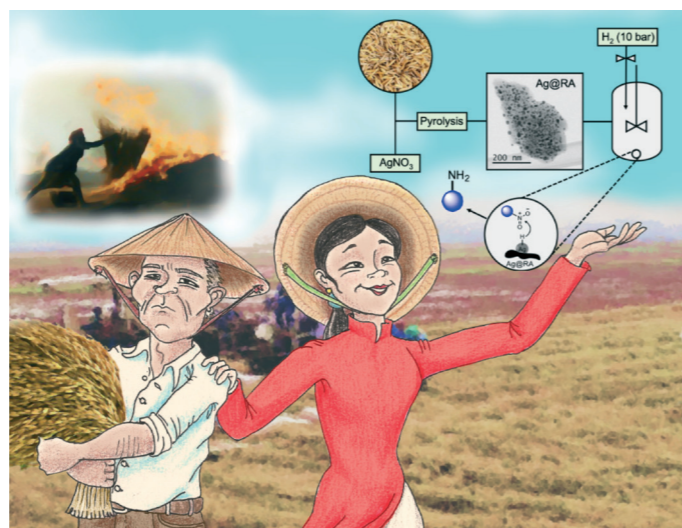


Die Chemie, einer der Hauptakteure des Fortschritts und (wohl) Verursacher der meisten seiner Übel, wurde aufgerufen, diese Probleme frontal anzugehen.

Dafür war eine „komplette Umstellung“ der Art und Weise, wie Chemiker ihre Prozesse gestalten und ihre Ergebnisse verwalten, notwendig. Der Paradigmenwechsel kam mit der Entwicklung des Konzepts der „Grünen Chemie“ und ihrer zwölf Prinzipien, in deren Zentrum die Katalyse steht.

Geleitet von den Prinzipien der Grünen Chemie ist die Anwendung katalytischer Technologien zur Entwicklung nachhaltiger Prozesse und Produkte die zentrale Forschungsmotivation der Gruppe „Polymerchemie & Katalyse“. Unsere Hauptforschungsaktivitäten umfassen:

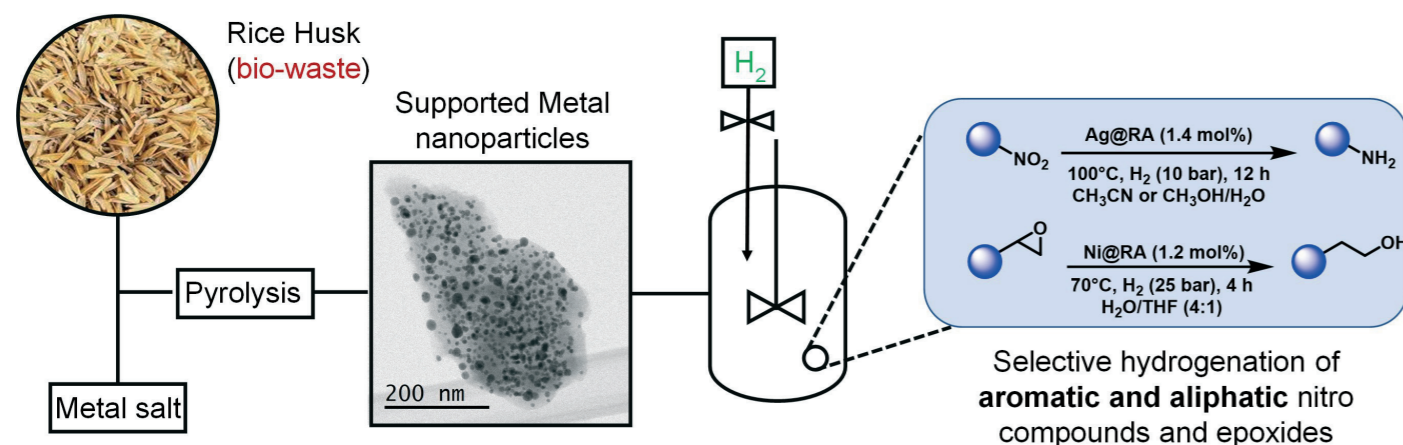
- (i) Die Entwicklung von sicheren Polymerisationskatalysatoren für Konsumgüter (Silikone), zusammen mit neuartigen Base-Metall-Systemen zur Herstellung biologisch abbaubarer Polymere und die nachhaltige Synthese von CO₂-Epoxid-Copolymeren.
- (ii) Die Entwicklung neuartiger katalytischer Systeme auf Kupferbasis für die Synthese von Enynen und Heterocyclen, die eine Verbesserung gegenüber bestehenden Technologien darstellen und ohne den Einsatz von Edelmetallen und vorfunktionalisierten Substraten funktionieren.



Diese Systeme umfassen molekulare Koordinationsverbindungen und künstliche Metalloenzyme.

(iii) Die Entwicklung metallfreier Katalysatoren für aerobe Oxidationsreaktionen, einschließlich heterogener Carbokatalysatoren und persistenter Radikalkationen.

(iv) Die Synthese und Anwendung heterogener Katalysatoren, die aus Reisstroh-Abfall entwickelt wurden, etablieren einen alternativen Weg für die Valorisierung landwirtschaftlicher Reis-Bioabfälle. Die hochwertigeren Produkte (die Katalysatoren) haben das Potenzial, einen direkten Einfluss auf die chemische Industrie zu bewirken.



[1] X. Guo, F. Unglaube, U. Kragl and E. Mejía, *Chem. Commun.* **2022**, 58, 6144 – 6147. B(C₆F₅)₃-Catalyzed transfer hydrogenation of esters and organic carbonates towards alcohols with ammonia borane. [2] F. Unglaube, J. Schlapp, A. Quade, J. Schäfer, E. Mejía, *Catal. Sci. Technol.* **2022**, 12, 3123-3136. Highly active heterogeneous hydrogenation catalysts prepared from cobalt complexes and rice husk waste. (Included in the themed collection: Emerging Investigator Series) [3] X. Guo, J. Rabeah, R. Sun, D. Wang, E. Mejía, *ACS Appl. Mater. Interfaces.* **2021**, 13, 42889-42897. Fluorescent Hybrid Porous Polymers as Sustainable Heterogeneous Photocatalysts for Cross-Dehydrogenative Coupling Reactions.

Biokatalyse

Prof. Dr. Udo Kragl
udo.kragl@catalysis.de



Ein Schwerpunkt der Forschungsarbeiten ist die Herstellung von Oligomeren und Polymeren, die als Vorstufen für Klebstoffe, Dichtmaterialien und Beschichtungen verwendet werden. Zusammen mit Kooperationspartnern werden dabei einerseits neue Katalysatoren entwickelt, andererseits aber auch verfahrenstechnische Fragen behandelt. Für den Test in Formulierungen werden dabei Mustermengen hergestellt. Dabei geht es um Vermeidung von toxischen oder umweltgefährdenden Substanzen in den Klebstoffformulierungen. Die Herstellung von Polymeren mit geringen Polydispersitäten, durch Charakterisierung und Optimierung der Prozessparameter und Weiterentwicklung der Katalysatoren steht dabei im Vordergrund der

Arbeiten. Daneben werden Verfahren für Mehrphasenkatalyse sowie Derivatisierung nachwachsender Rohstoffe untersucht.

Aktuelle Forschungsthemen umfassen:

- Mehrphasenkatalyse
- C-C-Knüpfungsreaktionen wie etwa Heck-, Suzuki oder Stille-Kupplung, Hydroformylierung
- Katalysatorentwicklung für stereoselektive Polymerisation im Bereich der Polyole
- Reaktoren & Autoklaven für Mehrphasenreaktionen; Verwendung von Synthesegas (CO/H₂)
- Silikon-basierte Polymere
- Polyether-basierte funktionelle Materialien

[1] J. Romischke, A. Scherkus, M. Saemann, S. Krueger, R. Bader, U. Kragl, J. Meyer, *Gels* **2022**, 8, 296. Swelling and Mechanical Characterization of Polyelectrolyte Hydrogels as Potential Synthetic Cartilage Substitute Materials. [2] A. Jastram, T. Lindner, C. Luebbert, G. Sadowski, U. Kragl, *Polymers* **2021**. Swelling and Diffusion in Polymerized Ionic Liquids-Based Hydrogels. [3] (218) M. Gronbach, L. Krauber, T. Broese, C. Oppermann, U. Kragl, *Food Anal. Methods* **2021**. Sublimation for Enrichment and Identification of Marker Compounds in Fruits. [3] A. Jastram, J. Claus, P. A. Janmay, U. Kragl, *Polymer Testing* **2021**, 93, 106943. Rheological properties of hydrogels based on ionic liquids.



Themengruppen

Katalyse zu Heterocyclen

Prof. Dr. Xiao-Feng Wu
xiao-feng.wu@catalysis.de

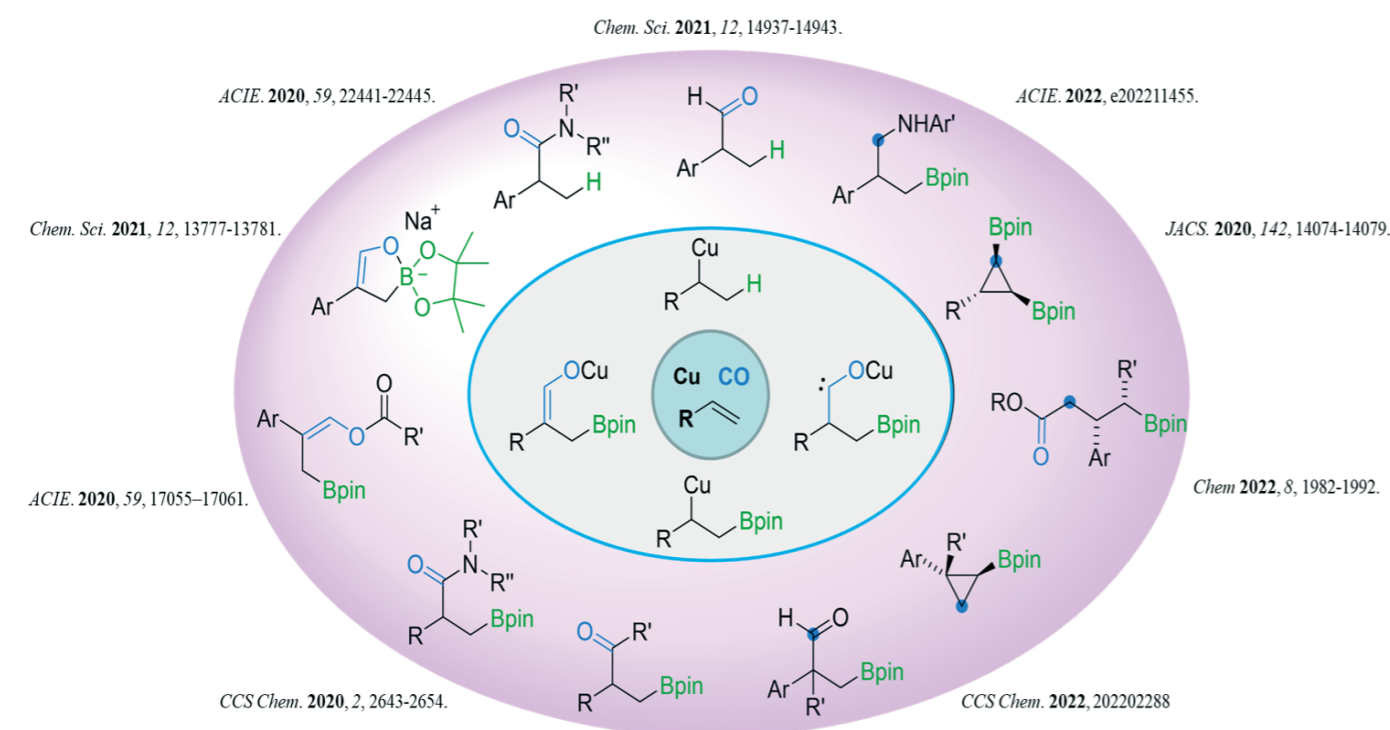


Die Carbonylierung steht im Mittelpunkt der modernen Chemie. Die Umwandlung von CO kommt sowohl der akademischen Forschung als auch industriellen Anwendungen zugute.

Alkene sind interessante Struktureinheiten mit wichtigen synthetischen Anwendungen in verschiedenen Bereichen. Daher ist die Verwendung eines reichlich vorhandenen und kostengünstigen Kupferkatalysators für die carbonylative Umwandlung von Alkenen sehr attraktiv.

In den letzten zwei Jahren haben wir uns mit der kupferkatalysierten Carbonylierung von Alkenen beschäftigt. In unseren katalytischen Systemen mit LCu-H oder LCuBpin als aktiver Spezies wurden Alkene aktiviert und eingefügt und anschließend für die CO-Insertion vorbereitet. Schließlich wurden β -borsubstituierte Ketone, β -borsubstituierte Amide, β -borsubstituierte Aldehyde, borsubstituierte Cyclopropa-

ne, γ -borsubstituierte Amine, γ -borsubstituierte Ester usw. selektiv hergestellt.^[1,2] Bemerkenswerterweise können chirale Produkte mit ausgezeichneter Enantioselektivität unter Verwendung chiraler Liganden hergestellt werden.^[3,4]



[1] F.-P. Wu, H.-Q. Geng, X.-F. Wu, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2022, 61, e202211455. [2] F.-P. Wu, Y. Yang, D. P. Fuentes, X.-F. Wu, *Chem* 2022, 8, 1982. [3] H.-Q. Geng, T. Meyer, R. Franke, X.-F. Wu, *Chem. Sci.* 2021, 12, 14937. [4] Y. Yuan, F.-P. Wu, X.-F. Wu, *Chem. Sci.* 2021, 12, 13777.

Hydroformylierungen

Dr. Jens Holz
jens.holz@catalysis.de



Aspekte der asymmetrischen und homogenen Hydrierung fanden ihre Berücksichtigung in der Bearbeitung von zwei Projekten mit der *Idorsia Pharmaceutical Ltd. (Schweiz)*. In diesen konnten Vorschläge unterbreitet werden, die zum einen die Substitution eines schwer zugänglichen Bisphosphin-Liganden in der Rh-katalysierten Hydrierung einer α -Aminosäure-Vorstufe durch einfachere und kommerziell besser verfügbare Bisphospholan-Verbindungen ermöglichen und zum anderen konnten Wege aufgezeigt werden, wie in einem anderen Zwischenschritt der Synthese einer Vorstufe die technisch anspruchsvollere Reduktion einer Carbonylverbindung mit Überschüssen an Borhydriden durch eine homogen-katalysierte Hydrierung mit Ru-Präkatalysatoren ersetzt werden kann (Abb. 1).

gen zur regioselektiven Hydroformylierung interner Olefine im Rahmen des langjährigen Projekts mit der *Evonik Operations GmbH*. Durch die vorzugsweise Synthese neuartiger Bisphosphit-Verbindungen soll eine Steuerung der Rh-katalysierte Hydroformylierung mit definierten Verteilungsverhältnissen zwischen den *n*- und *iso*-Aldehyden erreicht werden. Andere wichtige Aspekte liegen in der zu erreichenden Selektivität (keine Nebenreaktionen) und Geschwindigkeit der Reaktion. Durch Variationen sterischer und elektronischer Parameter in den verwendeten Bisphosphiten konnte einige potenzielle Liganden hergestellt werden. Dies manifestiert sich in zahlreichen eingereichten Patenten.^[1] Neben der Rh-Katalyse wurde auch die Hydroformylierung mit Cobalt-Katalysatoren unter-

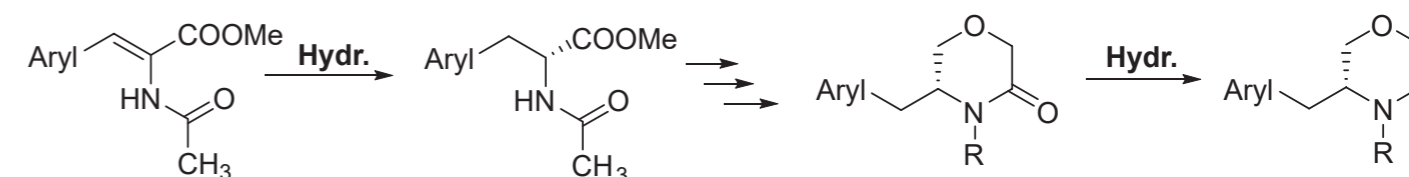


Abb. 1: Exemplarische Darstellung der untersuchten Zwischenschritte.

Mit der *Bayer AG* wurden vertiefende Studien zur Iridium-katalysierten Hydrierung von TMQA zu (R)-THQA mittels *in situ* und *ex situ* NMR-Spektroskopie durchgeführt. Das Hauptaugenmerk lag auf den Untersuchungen zur Rezyklisierung der eingesetzten Iridium-Katalysatoren (Schema 2).

Nach der Übernahme des Themas „Hydroformylierung“ liegt der Hauptschwerpunkt der Aktivitäten auch weiterhin in den Untersuchun-

sucht. Hier konnte herausgestellt werden, dass bereits mit nicht modifizierten (phosphinfreien) Cobalt-Carbonyl-Komplexen die Hydroformylierung von Olefinen bereits bei vergleichsweise milden Bedingungen (50 bar, 140°C) mit hoher Regioselektivität und Aktivität verläuft.^[2]

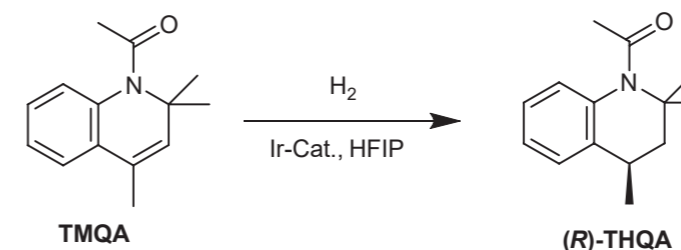


Abb. 2: Iridium-katalysierte Hydrierung von TMQA zu (R)-THQA.

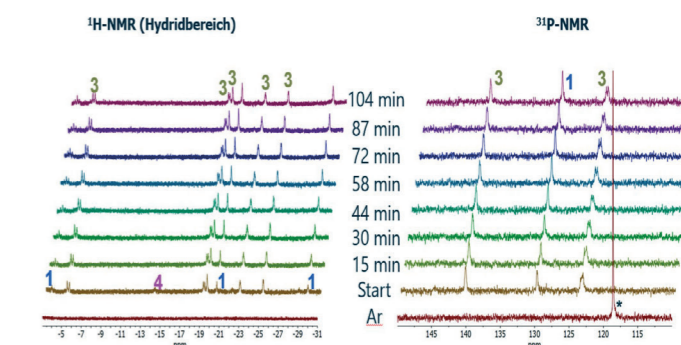


Abb. 3: Dynamische *in situ* HP-NMR Spektren während der Hydrierung von TMQA.

[1] einige Beispiele EP 4 059 939 A1 (18.03.2021), EP 4 0599 18 A1 (18.03.2021), EP 4 098 646 A1 (02.06.2021) u.a. [2] B. Zhang, C. Kubis, R. Franke *Science* 2022, 377, 1223-1227.

NACHWUCHSGRUPPEN

Dr. Milica Feldt
milica.feldt@catalysis.de



Die Nachwuchsgruppe „Theorie & Katalyse“ ist an der Untersuchung der Reaktivität von Eisenkatalysatoren interessiert, wobei der Schwerpunkt auf Nicht-Häm-Eisen-Oxo-Spezies liegt. Die Idee ist, hochpräzise Berechnungsprotokolle zu verwenden, um die Reaktivität biomimetischer Nicht-Häm-Eisen-Oxo-Komplexe sowie von Nicht-Häm-Eisen-Enzymen und den Einfluss verschiedener Spinzustände und der Metallumgebung auf die Reaktivität zu untersuchen. Ziel ist es, die Erkenntnisse aus theoretischen und experimentellen Studien von Nicht-Häm-Eisenkomplexen und Enzymen zu nutzen, um ein künstliches Metalloenzym auf Eisenbasis rechnerisch zu entwerfen, das in der Lage sein sollte, C-H-Bindungen verschiedener Substrate selektiv zu aktivieren. Darüber hinaus werden die enzymatische Reaktivität und die homogene Katalyse nicht nur

im Falle von Nicht-Häm-Eisenkomplexen, sondern allgemein untersucht. Das Verständnis der Schlüsselfaktoren, die für eine hohe/niedrige Reaktivität von Enzymen und Übergangsmetallkatalysatoren verantwortlich sind, kann bei der Entwicklung neuer verbesserter Katalysatoren helfen. Um dieses Verständnis zu erreichen, kann die Theorie eine wichtige Rolle spielen, da sie die Aspekte von Enzymen und homogenen Katalysatoren untersuchen kann, die durch Experimente nicht oder nur schwer zugänglich sind.

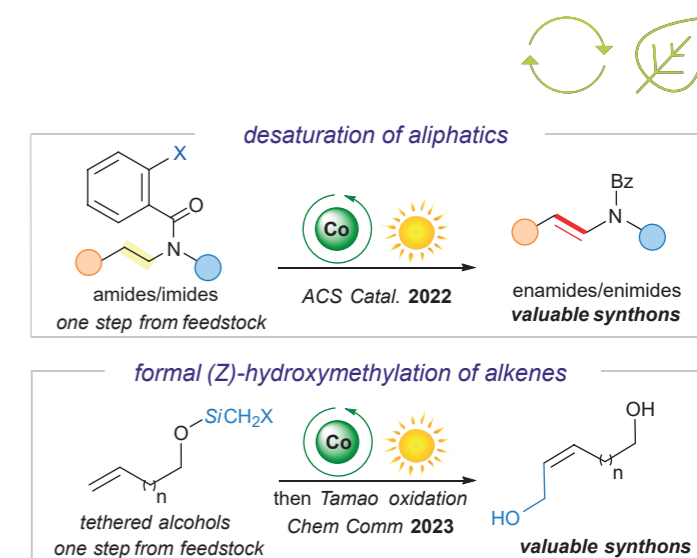
Außerdem werden wir verschiedene hybride Ansätze für die Anwendung auf diese Systeme testen und entwickeln. Das Hauptziel wird sein, einen Ansatz mit der gewünschten Genauigkeit zu finden, der gleichzeitig die Rechenkosten erschwinglich hält.

[1] Z. Amanollahi, L. Lampe, M. Bensberg, J. Neugebauer and M. Feldt, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2023**, *25*, 4635-4648. On the accuracy of orbital based multi-level approaches for closed-shell transition metal chemistry. [2] Feldt and Q. M. Phung, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2022**, <https://doi.org/10.1002/ejic.202200014>. Ab Initio Methods in First-Row Transition Metal Chemistry. [3] M. Feldt, C. Martín-Fernández and J. N. Harvey, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2020**, *22*, 23908-23919. Energetics of Non-Heme Iron Reactivity: Can Ab Initio Calculations Provide the Right Answer? [4] M. Feldt, Q. M. Phung, K. Pierloot, R. A. Mata and J. N. Harvey, *J. Chem. Theory Comput.* **2019**, *15*, 922-937. Limits of Coupled-Cluster Calculations for Non-Heme Iron Complexes.

Dr. Osama El-Sepelgy
osama.elsepelgy@catalysis.de

Innovative Grundlagenforschung ist von entscheidender Bedeutung, um die dringenden Herausforderungen zu bewältigen, die sich aus unseren aktuellen gesellschaftlichen, ökologischen und wirtschaftlichen Anforderungen ergeben. Zu den dringlichsten Herausforderungen des 21. Jahrhunderts gehört die Nutzung reichlich vorhandener, aber nicht reaktionsfähiger Ausgangsstoffe, da die Entwicklung dieser Technologien die nachhaltige Produktion von lebenswichtigen Fein- und Massenchemikalien ermöglichen würde.

Um dieses Ziel zu verfolgen, konzentriert sich unsere Gruppe auf die Entwicklung noch nie dagewesener nachhaltiger Konzepte durch die Verbindung von Basismetallkatalyse mit dem sichtbaren Licht der Sonne. Wir glauben, dass die Bestrahlung von Basismetallkatalysatoren mit sichtbarem Licht das Reaktionsergebnis durch unvorhersehbare katalytische Wege ver-



ändern kann. Das Hauptziel unserer Gruppe ist es, die synthetische Chemie neu zu definieren, indem wir neue Strategien anwenden, die sich hauptsächlich auf die photoangeregte Basismetallkatalyse konzentrieren. Wir streben die Entdeckung neuer Reaktivitäten an, die mit der Grundzustands-Chemie nicht möglich sind.

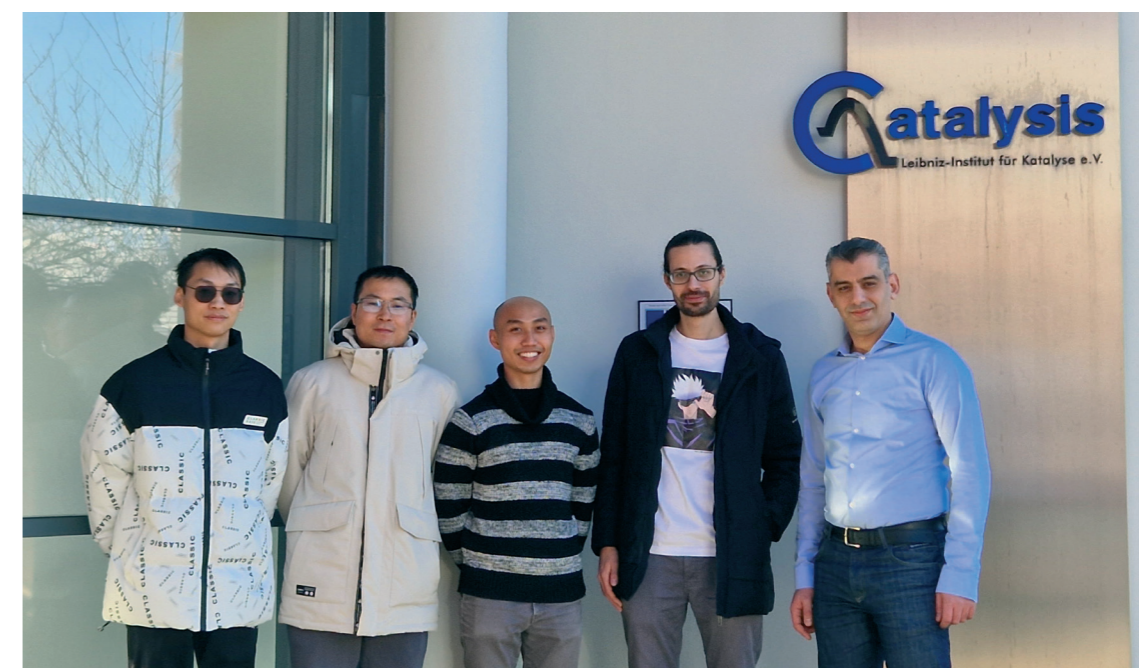


Abb. 1: Nachwuchsgruppe „Moderne organische Chemie“ von Dr. Osama El-Sepelgy (re.) (Foto: O. El-Sepelgy)

[1] C. Wang, L. M. Azofra, P. Dam, E. J. Espinoza-Suarez, H. T. Do, J. Rabeah, A. Brückner, O. El-Sepelgy, *Chem. Commun.* **2023**, 3862-3865. Photoexcited cobalt catalysed endo selective alkyl Heck reaction. [2] C. Wang, L. M. Azofra, P. Dam, M. Sebek, N. Steinfeldt, J. Rabeah, O. El-Sepelgy, *ACS Catal.* **2022**, *12*, 8868-8876. Catalytic Desaturation of Aliphatic Amides and Imides Enabled by Excited-State Base-Metal Catalysis. [3] C. Wang, O. El-Sepelgy, *Curr. Opin. Green Sustain.* **2021**, *32*, 100547. Reductive depolymerization of plastics catalyzed with transition metal complexes.

UNI IN LEIBNIZ

ASSOZIIERTE HOCHSCHULFORSCHUNGSGRUPPEN

Kooperation mit der Universität

Bereits im Sommer 2006 hat das LIKAT einen weit reichenden Kooperationsvertrag mit der Universität Rostock unterzeichnet, der in den vergangenen Jahren stetig erweitert wurde und von dem LIKAT und Universität gleichermaßen profitieren. Der Vertrag ermöglicht dem LIKAT, Forschungsgruppen der Universität Rostock in hohem Maße in die Forschungsarbeiten des Instituts einzubinden: aus den naturwissenschaftlichen Instituten, der Interdisziplinären Fakultät, den Ingenieurwissenschaften oder dem medizinischen Bereich.

Die Zusammenarbeit im Rahmen von Uni in Leibniz wurde mit Beginn des Jahres 2020 als Ideenwettbewerb neu ausgerichtet. Forschende der Universitäten können zu vorab definierten Fragestellungen Anträge formulieren und am

LIKAT einreichen. Voraussetzung ist ihre Kooperation mit Mitarbeitenden des LIKAT, z.B. durch die gemeinsame Betreuung von Promovierenden, für die das LIKAT Ressourcen bereitstellt. Ein derartiger Ideenwettbewerb fördert den Austausch zwischen Hochschule und LIKAT und ermöglicht die interne Anschubfinanzierung hoch risikobehafteter Forschung, die in zukünftigen gemeinsamen Forschungsprojekten münden kann und soll. Die vorab-Definition der Fragestellung durch das LIKAT sorgt für die Forschungsausrichtung dieser Kooperationen entsprechend der Forschungsstrategie des Instituts.

Derzeit gibt es acht assoziierte Hochschulforschungsgruppen von drei verschiedenen Universitäten.

Photochemie & Photokatalyse
Prof. Dr. Malte Brasholz

Numerische Analyse
Prof. Dr. Klaus Neymeyr

Magnetresonanz im Festkörper
Prof. Dr. Björn Corzilius

Materialdesign
Prof. Dr. Axel Schulz

Cycloadditionen
Prof. Dr. Marko Hapke

Intermetallische Kooperativität
Prof. Dr. Wolfram Seidel

Schwingungsspektroskopie
Prof. Dr. Ralf Ludwig

Organokatalyse
Prof. Dr. Thomas Werner

Photochemie & Photokatalyse

Prof. Dr. Malte Brasholz
Universität Rostock
Organische Chemie - Synthesemethoden und Katalyse
malte.brasholz@uni-rostock.de

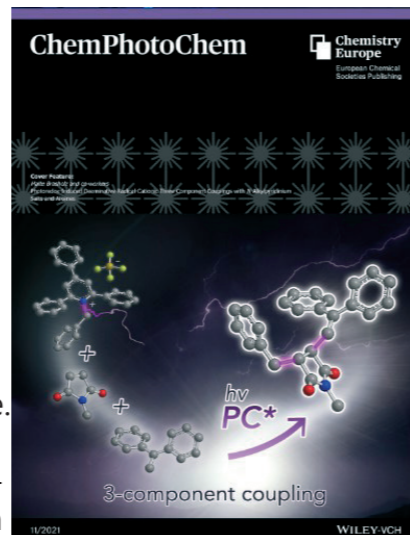


Unser zentrales Forschungsinteresse ist die Entwicklung neuer Syntheseverfahren mit den Methoden der Photochemie und Photokatalyse, denn diese eröffnen häufig einen Zugang zu ungewöhnlichen Produktstrukturen, welche mit Hilfe konventioneller thermischer Reaktionsführung nicht zugänglich sind. Insbesondere die Photokatalyse mit sichtbarem Licht macht die klassischen Elementarschritte photochemischer

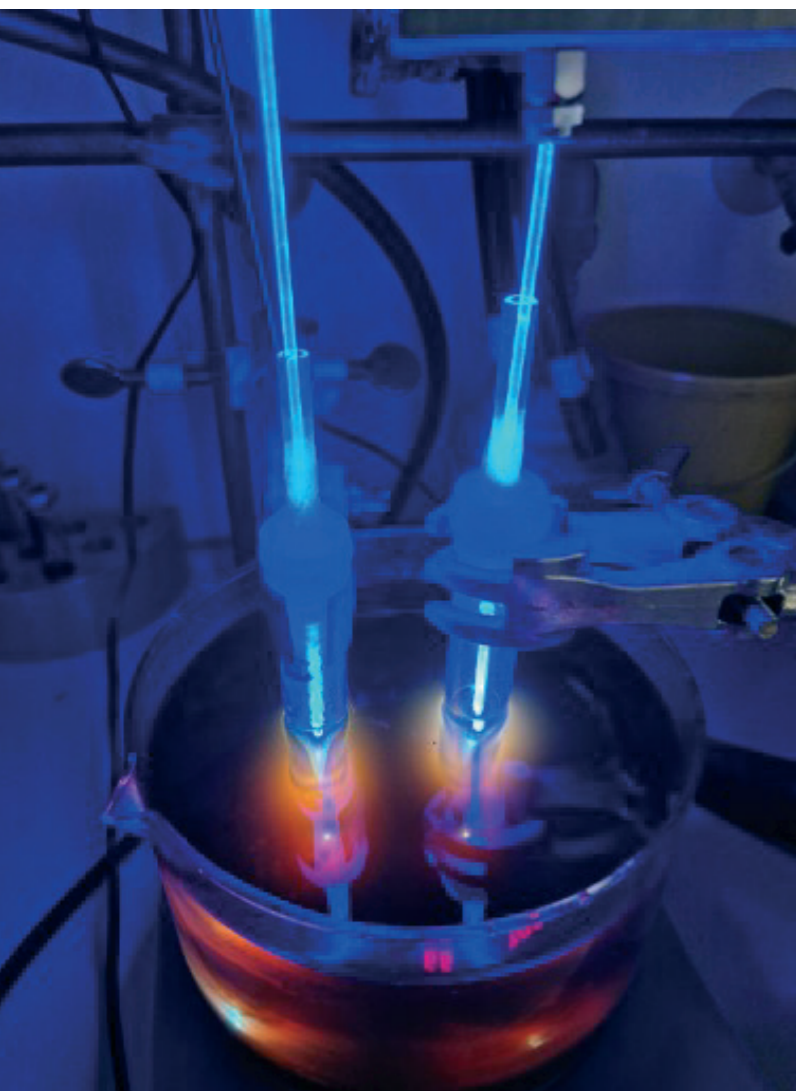
Umwandlungen in katalytischen Verfahren nutzbar. Dazu zählen Photoelektronentransfer-Reaktionen, Atom- und Gruppentransferreaktionen sowie durch Energietransfer induzierte Prozesse. Zu den wichtigsten von uns untersuchten Reaktionstypen zählen photoinduzierte radikalische Additionen und Mehrkomponenten-Kupplungen, sowie verschiedene Spielarten von Cycloadditionen, insbesondere solche die unter dehydrogenierenden Bedingungen ablaufen. Ein weiterer Schwerpunkt liegt im Bereich grüner Oxidationsreaktionen unter Beteiligung reaktiver Sauerstoffspezies, insbesondere zur Funktionalisierung von heterocyclischen Verbindungen.

Die Anwendung von in der Arbeitsgruppe entwickelter synthetischer Methodik konnte ebenfalls in der Naturstoffsynthese demonstriert werden, sowie in der Entwicklung von biologisch hoch aktiven Alkaloid-Derivaten, welche eine neue Klasse von Antitumor-Wirkstoffen bilden. Dazu kooperieren wir eng mit Wissenschaftler/innen aus den Bereichen der Onkologie und Zellbiologie der Universitätsmedizin Rostock. Weiterhin untersuchen wir die Heterogenisierung homogen-photokatalytischer Prozesse an ausgewählten Beispielen.

(Foto.: M. Brasholz)



(Cover DOI: 10.1002/cptc.202100237)



[1] P. Seefeldt, R. Dasi, A. Villinger, M. Brasholz, *ChemPhotoChem* 2021, 5, 979-983. Photoredox-induced deaminative radical-cationic three-component couplings with N-alkylpyridinium salts and alkenes. [2] M. Frahm, A. Voss, M. Brasholz, *Chem. Commun.* 2022, 58, 5467-5469. A short total synthesis of (\pm)-mersicarpine via visible light-induced cascade photooxygenation. [3] R. Dasi, A. Villinger, M. Brasholz, *Org. Lett.* 2022, 24, 8041-8046. Photocatalytic Azetidine Synthesis by Aerobic Dehydrogenative [2 + 2] Cycloadditions of Amines with Alkenes. [4] A. Eichhorst, M. Gallhof, A. Voss, A. Sekora, L. Eggers, L. T. Huyen, C. Junghanss, H. Murua Escobar, M. Brasholz, *ChemMedChem* 2022, 17, e20220016. Spirooxindol-1,3-oxazine alkaloids: highly potent and selective antitumor agents evolved from iterative structure optimization.

Magnetresonanz im Festkörper

Prof. Dr. Björn Corzilius
Universität Rostock
Physikalische Chemie - NMR-Festkörperspektroskopie
bjoern.corzilius@uni-rostock.de



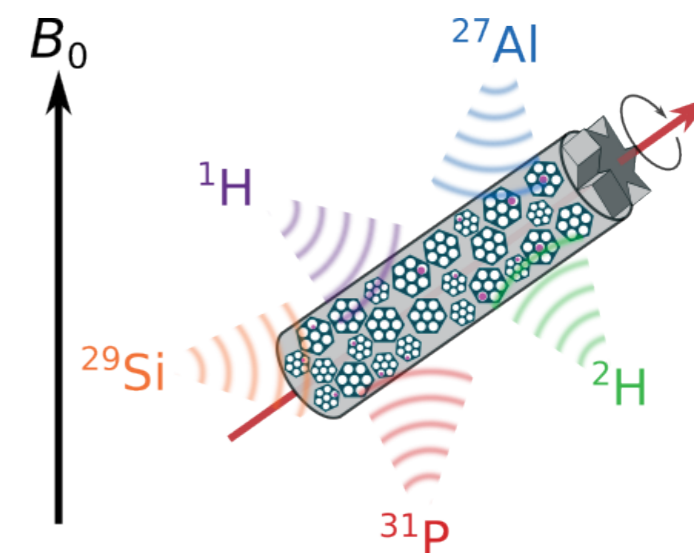
Magic-Angle Spinning NMR und Dynamische Kernspinpolarisation

In Zusammenarbeit mit einigen Gruppen aus dem LIKAT werden mittels Kernmagnetresonanzspektroskopie (NMR) Aufklärungen der Struktur und des elektronischen Zustandes der aktiven Zentren verschiedener heterogener Katalysatorsysteme durchgeführt.

Die NMR-Spektroskopie eignet sich hier besonders gut, da es den Aufbau von Molekülen und Festkörpern auf atomarer Ebene aufklären kann, ohne strukturelle Fernordnung zu benötigen. Somit ist die Festkörper-NMR die Methodik der Wahl zur Untersuchung von amorphen Festkörpern, Materialien, (Bio-)Polymeren oder kolloidalen Suspensionen.

Besonderer Fokus liegt auf der Ergründung des Reaktionsmechanismus der katalytischen Buten-Dimerisierung mittels Nickel-geträgerter mesoporöser Silizium-Aluminiumoxide. Neben Untersuchungen zur Oberflächenazidität werden dafür Untersuchungen an den paramagnetischen Ni-Zentren durchgeführt, um das Zusammenspiel verschiedener Säurezentren und deren Verteilung mit den aktiven Zentren zu ergründen.

Ein inhärentes Problem der NMR ist jedoch die geringe Sensitivität, da nur ein winziger Bruchteil (1 von 10 000) der Kernspins zum Signal beiträgt. Unter Anwendung der dynamischen Kernspinpolarisation (DNP) kann die Besetzungsdifferenz der Kernspins vergrößert werden, indem spezielle paramagnetische Polarisationsmittel zur Probe hinzugegeben und hochfrequente Mikrowellenstrahlung eingestrahlt wird. Neben der Signalverstärkung kann mit Hilfe von spezifischer Hyperpolarisation



(Abb.: M. Schröder)

von Kernspins gezielt die räumliche Faltung von Proteinen untersucht werden.^[1] Neben der Funktionalisierung mit paramagnetischen Polarisationsmarkern kann auch die Dynamik von Methylgruppen ausgenutzt werden, um durch heteronukleare Kreuzrelaxation andere Atome und funktionale Gruppen in deren Nähe zu beleuchten. So konnte mittels NMR-Spektroskopie hochspezifisch die Bindestelle in einem Ribonukleoprotein charakterisiert werden.^[2] Momentan wird diese neuentwickelte Methodik mit frequenzselektiver dipolarer Rückkopplung kombiniert, um weitere Spezifität in der Festkörper-NMR-Spektroskopie zu generieren.

[1] T. Biedenbänder, V. Aladin, S. Saeidpour, B. Corzilius, *Chem. Rev.* 2022, 122, 9738-9794.

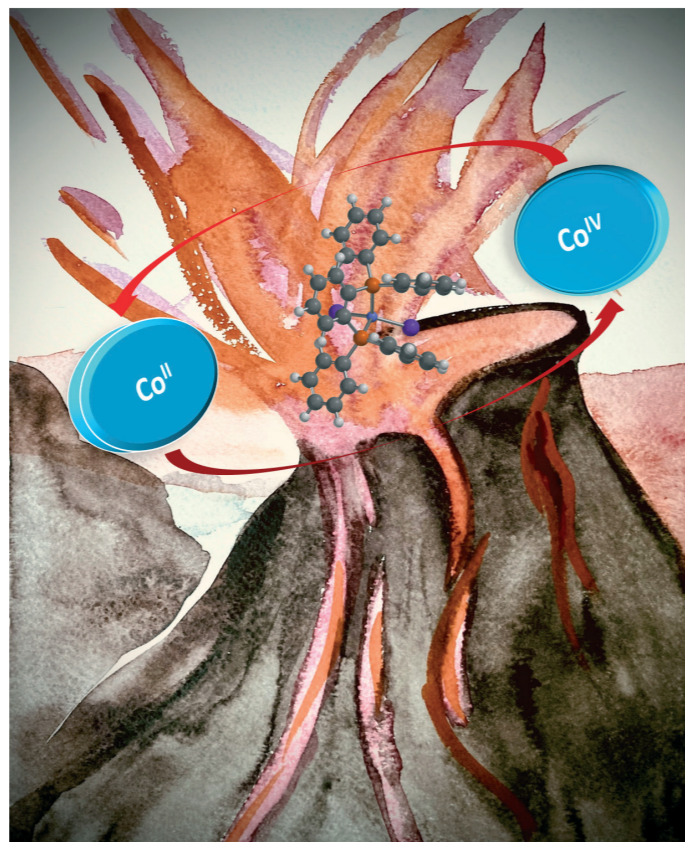
[2] V. Aladin, A. K. Sreemantula, T. Biedenbänder, A. Marchanka, B. Corzilius, *Chem. Eur. J.* 2023, 29, e202203443

Cycloadditionen

Prof. Dr. Marko Hapke
Johannes-Kepler-Universität Linz
Institut für Katalyse (INCA)
marko.hapke@jku.at



Die Aktivierung und selektive Transformation von Substraten mit (Einfach- und Mehrfach-) Bindungen ist ein zentrales Anliegen in unserer Gruppe. Wir haben in den letzten Jahren insbesondere die Entwicklung von neuen cobalt-basierten Katalysatorsystemen für die Umsetzung von C-C- oder C-N-Dreifachbindungen wie Alkinen und Nitrilen mittels [2+2+2] Cycloadditionsreaktionen vorangetrieben, die sich mit dem geeigneten Katalysatorsystem auch stereoselektiv gestalten lässt.^[1, 2] Neben den Cobalt(I)-Systemen, die in aller Regel Anwendung finden, gelang es uns, Cobalt(III)-Präkatalysatoren zu identifizieren, die ebenfalls die Cyclisierung von Triinen bzw. Diinen und Nitrilen zu den Aren- und Pyridinderivaten katalysieren können.^[3] Der Einsatz von Präkatalysatoren in solch hohen Oxidationsstufen ohne zugesetztem Reduktionsmittel waren bislang unbekannt. Die Erforschung von unterschiedlichen und ungewöhnlichen Oxidationsstufen eines Katalysatormetalls wie Cobalt in katalytischen Transformationen ist ein hochinteressantes Gebiet und gerade in *in situ*-generierten Systemen nicht trivial.^[1b] Wir haben uns bei der Umsetzung von Phosphaalkinen, R-C≡P, als P-Homologen der Nitrile, R-C≡N, auf die Untersuchung von solchen Oxidationsstufen konzentriert und dabei gefunden, dass bemerkenswerterweise ein Cobalt(II)-Bisphosphan-Katalysator bei relativ hohen Temperaturen (160-210 °C) in der Lage ist, aus den Phosphaalkinen und funktionalisierten Diinen effizient die entsprechenden Phosphinine (Phosphabenzene) zu generieren.^[4] Interessanterweise toleriert der Katalysator Nitrilgruppen im Substrat und setzt selektiv die Phosphaalkine um. Die Phosphinine sind eine sehr interessante Verbindungsklasse, beispiels-



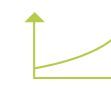
(Abb.: M. Hapke)

weise als Liganden für Übergangsmetalle oder heterocyclische Aromaten. Wir studieren gegenwärtig weitere 3d-Metallkomplexe wie die des Eisens und Mangans als Präkatalysatoren und sind auch dabei auf interessante Reaktivitäten in Cyclotrimerisierungen gestoßen. Für die Reaktionen nutzen wir neben klassischen Bedingungen auch Mikrowellentechnik, photochemische Reaktoren und zunehmend Flow Chemistry (in Kooperation mit der JKU Linz). Daneben gilt unser Interesse gegenwärtig stereoselektiven C-H-Funktionalisierungsreaktionen und dem chemischen Recycling von Polyolefinen.^[5]

[1] a) T. Gläsel, M. Hapke, in *Cobalt in Catalysis and Synthesis* [Eds.: M. Hapke, G. Hilt], Chapter 9, Wiley-VCH, Weinheim, 2020, pp. 287-335. Cobalt-Catalysed [2+2+2] Cycloadditions. b) T. Gläsel, B. N. Baumann, M. Hapke, *Chem. Rec.* 2021, 21, 3727-3745. Cobalt Catalysts for [2+2+2] Cycloaddition Reactions: Isolated Precatalysts and *in situ* Generated Catalysts. [2] P. Jungk, F. Fischer, M. Hapke, *ACS Catal.* 2016, 6, 3025-3029. *In Situ*-Generated Chiral Co(I)-Catalyst for Asymmetric [2+2+2] Cycloadditions of Triynes. [3] F. Fischer, M. Eder, M. Hapke, *Catalysts* 2021, 11, 596. CpCo(III) Precatalysts for [2+2+2] Cycloadditions. [4] T. Gläsel, H. Jiao, M. Hapke, *ACS Catal.* 2021, 11, 13434-13444. Synthesis of Phosphinines from Co^{II}-Catalyzed [2+2+2] Cycloaddition Reactions. [5] Overview: K. Faust, P. Denifl, M. Hapke, *ChemCatChem*, 2023, 15, e202300625. Recent Advances in Catalytic Chemical Recycling of Polyolefins.

Schwingungsspektroskopie

Prof. Dr. Ralf Ludwig
Universität Rostock
Physikalische und Theoretische Chemie
ralf.ludwig@uni-rostock.de



Die Arbeitsgruppe Ludwig ist sowohl an der Universität Rostock als auch am Leibniz-Institut für Katalyse angesiedelt. Der Forschungsbereich am Leibniz-Institut konzentriert sich zunächst auf den Einsatz der Schwingungsspektroskopie in der Katalyse. Dies umfasst den Aufbau einer Hochdruck *in-situ*-IR-Spektroskopie, die Optimierung der experimentellen Anordnung sowie die Entwicklung und Anwendung von Programmen zur Entfaltung der Schwingungsspektren. Berechnete Schwingungsspektren unterstützen die Interpretation der gemessenen Spektren und erlauben Vorhersagen für die Empfindlichkeit der IR-Spektroskopie. Die schwingungsspektroskopischen Eigenschaften können mit Resultaten aus der NMR-Spektroskopie korreliert und so daraus Struktur-Eigenschaftsbeziehungen gewonnen werden. Darüber hinaus beschäftigt sich unsere Arbeitsgruppe „Physikalische und Theoretische Chemie“ in der Chemie mit der Untersuchung von Clustern, Flüssigkeiten und Grenzflächen. Mit einem geeigneten Methodenspektrum schlagen wir eine Brücke zwischen Experiment und Theorie. Dabei stehen der IR-, Raman- und NMR-Spektroskopie quantenchemische Rechnungen, CPMD-Simulationen und klassische Molekulardynamische Simulationen gegenüber. Dieses Methodenspektrum möchten wir peu à peu auch für das Verständnis von Prozessen in der Katalyse einsetzen.

Wichtige Themengebiete sind:
Anomalien, Struktur und Dynamik von Wasser und wässrigen Lösungen, Eigenschaften ionischer Flüssigkeiten, Wasserstoffbrückennetz-

werke, Hydratation von Ionen, organischen und biologischen Molekülen, hydrophobe Effekte, der Einfluss von Temperatur, Druck und Additiven auf das Aggregationsverhalten organischer Moleküle und auf die Struktur von Biomolekülen. Hauptziel ist die Vorhersage makroskopischer Eigenschaften auf Grundlage molekularer Wechselwirkungen. Zu unseren Kooperationspartnern gehört Bayer Pharmaceuticals.



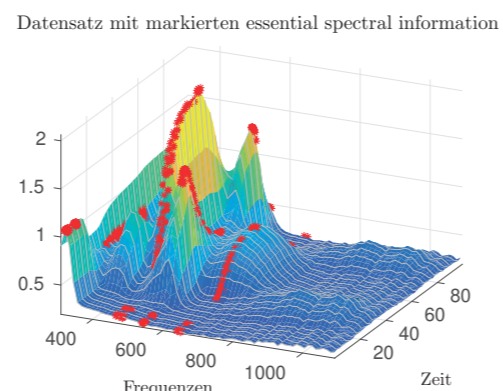
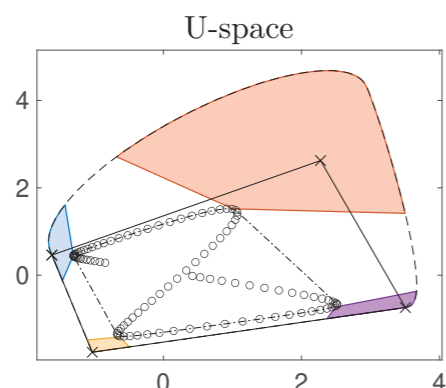
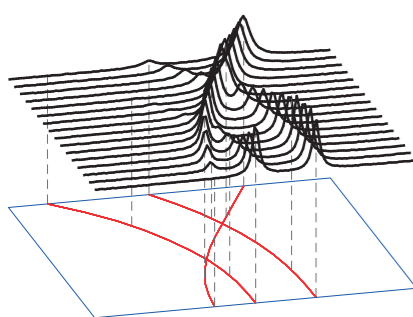
Abb. 1: Mit Hilfe des Bruker VERTEX 80 FTIR Spektrometer + Stopped-Flow-Einheit können rapid-scan-FTIR-Experimente durchgeführt werden. Ein gasgelagerter Scanner mit Geschwindigkeiten bis 320 kHz ermöglicht bei einer Auflösung von 2 cm⁻¹ die Aufnahme von von IR-Spektren im Abstand von 100 ms. In Verbindung mit einer Stopped-Flow-Einheit können so Studien zur Kinetik homogener Reaktionen erfolgen. (R. Ludwig)

[1] B. Golub, K. Fumino, P. Stange, V. Fossog, R. Hempelmann, D. Ondo, D. Paschek, R. Ludwig, *J. Phys. Chem. B*, 2021, 125, 4476-4488. Balance Between Contact and Solvent-Separated Ion Pairs in Mixtures of the Protic Ionic Liquid [Et₃NH][MeSO₃] with Water Controlled by Water Content and Temperature. [2] E. Shelepova, R. Ludwig, D. Dietmar; N. N. Medvedev, *J. Mol. Liq.* 2021, 329, 115589. Structural similarity of an ionic liquid and the mixture of the neutral molecules. [3] F. Ullah, S. Irshad, S. Khan, M. A. Hashmi, R. Ludwig, T. Mahmood, K. Ayub, *J. Phys. Chem. Solids*, 2021, 151, 109914. Nonlinear optical response of first-row transition metal doped Al₁₂P₁₂ nanoclusters; a first-principles study. [4] S. Irshad, F. Ullah, S. Khan, R. Ludwig, T. Mahmood, K. Ayub, *Opt. & Laser Technol.* 2021, 134, 106570. First row transition metals decorated boron phosphide nanoclusters as nonlinear optical materials with high thermodynamic stability and enhanced electronic properties; A detailed quantum chemical study.

Numerische Analyse

Prof. Dr. Klaus Neymeyr
Universität Rostock
Institut für Mathematik
klaus.neymeyr@uni-rostock.de

PD Dr. Mathias Sawall
Universität Rostock
Institut für Mathematik
mathias.sawall@uni-rostock.de



Die Themengruppe „Numerische Analyse“ entwickelt chemometrische Analysewerkzeuge für die Extraktion von Reinkomponenteninformationen aus hochdimensionalen spektroskopischen Messdaten und setzt dafür mathematische Methoden etwa der Optimierung, der numerischen linearen Algebra und der Modellierung ein.

Ausgangspunkt sind hochaufgelöste Spektrenserien chemischer Reaktionssysteme. Aus diesen Daten soll auf die Zahl der beteiligten chemischen Komponenten, deren Spektren und die zugehörigen Konzentrationsprofile geschlossen werden. Das Lambert-Beersche Gesetz gibt der Zerlegungsaufgabe die Form eines nichtnegativen Matrixfaktorisierungsproblems, welches im Regelfall viele und zudem sehr verschiedene Lösungen besitzt.

Die Arbeitsgruppe entwickelt Werkzeuge für die Handhabung und Visualisierung dieser Lösungsmengen mit dem Ziel, die chemisch relevanten Lösungen zu extrahieren. Damit stellen wir Chemikerinnen und Chemikern Analysewerkzeuge zur Verfügung, die ein tieferes Verständnis insbesondere katalytischer Reaktionssysteme der homogenen Katalyse ermöglichen. Die numerische Verfahrensentwicklung wird

durch entsprechende Programmimplementierungen begleitet. Am LIKAT bestehen Kooperationen vorrangig mit den Gruppen von Prof. Brückner (Börner/Kubis) sowie Profs. Francke und Ludwig.

Eine aktuelle Fragestellung ist die Methodentwicklung zur Subsystemidentifikation und -analyse in Zusammenarbeit mit der AG Francke für spektroelektrochemische Daten.^[1] Hervorzuheben ist die Identifikation von „essential spectral information“ für gestörte/verrauschte Daten. Solche Analysen bestimmen solche Teile einer Messserie, die einen Einfluss auf die Eindeutigkeit der Lösungen haben.

Zudem analysiert die Arbeitsgruppe Daten mit einem Rangdefizit, welche im Zusammenhang mit bestimmten Reaktionskinetiken wie der Michaelis-Menten Kinetik auftreten. Solche Rangdefizite erschweren die Reinkomponentenextraktion und stellen eine besondere Herausforderung dar.^[2,5]

Für NMR-Daten entwickeln wir splinebasierte Peakverfolgungstechniken für Zeitreihenanalysen.^[3] Aktuell verfolgen wir einen Ansatz mittels neuronaler Netze, bei dem das Netz die Parameter einer Summe von Funktionen im Sinne optimaler Modellbildung schätzen soll.

[1] M. Sawall, C. Ruckebusch, M. Beese, R. Francke, A. Prudlik, K. Neymeyr, *Anal. Chim. Acta* **2022**, *1233*, 340448. An active constraint approach to identify essential spectral information in noisy data. [2] T. Andersons, M. Sawall, K. Neymeyr, *J. Math. Chem.* **2022**, *60*, 1750-1780. Analytical enclosure of the set of solutions of the three-species multivariate curve resolution problem. [3] D. Meinhardt, H. Schröder, J. Hellwig, E. Steimers, A. Friebel, T. Beweries, M. Sawall, E. von Harbou, K. Neymeyr, *J. Magn. Reson.* **2022**, *339*, 107212. Model-based signal tracking in the quantitative analysis of time series of NMR spectra. [4] K. Neymeyr, M. Sawall, A. C. Olivieri, *J. Chemom.* **2021**, *35*, e3363. On the signal contribution function with respect to different norms. [5] M. Sawall, K. Neymeyr, *J. Chemom.* **2021**, *35(3)*, e3316. On the Area of Feasible Solutions for rank-deficient problems: I. Introduction of a generalized concept.

Materialdesign

Prof. Dr. Axel Schulz
Universität Rostock
Anorganische Chemie
axel.schulz@uni-rostock.de



Die Forschungsgruppe beschäftigt sich mit anorganischer und elementorganischer Nichtmetall-Molekülchemie aus den Bereichen der CN-, EN- (E = P, As, Sb, Bi) und SN-Synthese-Chemie. Die Arbeitsgruppe Schulz ist sowohl an der Universität Rostock als auch am Leibniz-Institut für Katalyse angesiedelt. Der Forschungsbereich am Leibniz-Institut gliedert sich in zwei Themenbereiche:

- Innovative Ligand- und Materialsynthesen
- Funktionsmaterialien (CN, PN, SN)

wobei die Verknüpfung von Hauptgruppenelementverbindungen-Nebengruppenelementverbindungen-Katalyse im Vordergrund steht. Weitere Themen finden Sie auf unserer Uni-Homepage.

Im Vordergrund der experimentellen Arbeiten steht die Synthese und vollständige Charakterisierung von neuartigen Hauptgruppenmolekülverbindungen aus den zuvor beschriebenen Substanzklassen. Viele der von uns dargestellten Verbindungen sind klein und „überschaubar“ und sind daher sehr gut geeignet für eine vollständige Charakterisierung (Gasphase: IR, Massenspektrometrie; Lösung: multinukleare NMR-Spektroskopie; Feststoff, Röntgenbeugung, Raman-, IR-Spektroskopie, Festkörper-NMR-Spektroskopie). Zur einer umfassenden Charakterisierung einer neuen Substanz gehört die eingehende Untersuchung von Korrelationen zwischen:

Struktur ↔ Bindung ↔ Eigenschaften.

[1] J. Bresien, D. Michalik, A. Schulz, A. Villinger, E. Zander *Angew. Chem.* **2021**, *133*, 1530 – 1535; *Angew. Chem Int. Ed.* **2021**, *60*, 1507 – 1512. Aza-diphospha-indane-1,3-diyls: A class of resonance-stabilized biradicals. [2] T. Völzer, H. Beer, A. Schulz, S. Lochbrunner, J. Bresien *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, *23*, 7434 – 7441. Photoisomerization of a P-based diradical: Ultrafast dynamics through a conical intersection. [3] K. Bläsing, R. Labbow, A. Schulz, A. Villinger *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 13798 – 13802. Silylated Sulfuric Acid: Preparation of a Tris(trimethylsilyl)oxosulfonium [(Me₃Si-O)₃SO]⁺ Salt. [4] L. Szych, Y. Pilopp, J. Bresien, A. Villinger, J. Rabeah, A. Schulz *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, e202114792. A Persistent Phosphanyl-Substituted Thioketyl Radical Anion. [5] L. Eickhoff, L. Ohms, J. Bresien, A. Villinger, D. Michalik, A. Schulz *Chem. Eur. J.* **2022**, *28*, e202103983. A Phosphorus Based Pacman Dication Generated by Cooperative Self-Activation of a Pacman Phosphane. [6] J. Surkau, K. Bläsing, J. Bresien, D. Michalik, A. Villinger, A. Schulz *Chem. Eur. J.* **2022**, e202201905. A Lewis Acid Stabilized Ketenimine in an Unusual Variant of the Electrophilic Aromatic Substitution.



Intermetallische Kooperativität in supramolekularen Komplexverbindungen

Prof. Dr. Wolfram Seidel
wolfram.seidel@uni-rostock.de



Forschungsgegenstand der Gruppe sind koordinationschemische und metallorganische Fragestellungen, wobei die klassische Synthesechemie zu den Kernkompetenzen zählt. Im Zentrum des Interesses stehen dabei kooperative Effekte zwischen verschiedenartigen Metallzentren, die mit möglichst hoher Effektivität über spezifische Liganden vermittelt werden. Kooperative Wechselwirkungen bilden nicht nur die Grundlage für moderne, intelligente Materialien wie Einzelmolekülmagnete oder Substanzen für die Umwandlung von Licht in speicherfähige Energieformen, auch die Wirkungsweise einer großen Zahl von Metalloproteinen basiert auf bimetallicen Reaktionsmustern. In derartigen Systemen mit mehreren kooperativ wirkenden Metallzentren können reaktionsträge Substrate aktiviert oder lichtgetriebene Ladungstrennungen als zentralem Vorgang jeder Photokatalyse erzwungen werden.

Unsere Forschungsarbeiten lassen sich dabei in folgende zwei Themenbereiche einteilen:

1. Untersuchungen zum koordinationschemischen Potential von Alkinliganden, die in beiden α -Positionen über Heteroatome verfügen

Als Donorzentren für Alkinliganden kommen

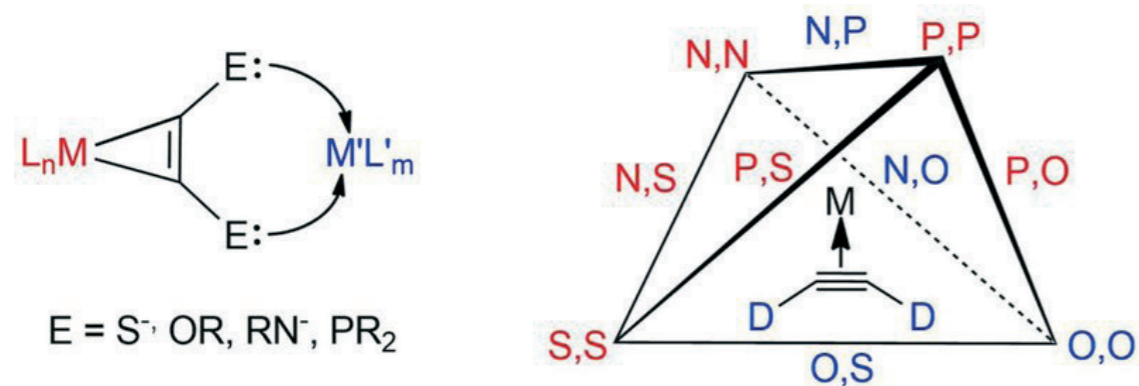


Abb. 1: Koordination von Alkinliganden, die in beiden α -Positionen über Heteroatome verfügen

neben terminalem Sauerstoff -O- und Stickstoff -NR- vor allem klassische Donoren der 3. Periode wie Schwefel -S- und Phosphor als -PR₂ in Betracht. Die Entwicklung neuer Koordinationsmotive bzw. Konnektivitäten sowie umfassende Untersuchungen zur elektronischen Struktur und zum kooperativen Verhalten der verbundenen Metallzentren liegen dabei im Fokus unserer Arbeiten.

Grundsätzlich gilt es, die elektronischen Wechselwirkungen der verknüpften Metalle zu erkunden. Eine potenzielle Anwendung unseres Ansatzes liegt in der Entwicklung redoxaktiver Metalloliganden für die Katalyse.

2. Entwicklung neuartiger Dithiolenliganden als funktionale Brückenliganden

Die Arbeiten zum Thema lichtinduzierte Ladungstrennung und Energieübertragung in polynuklearen Komplexen basieren auf Untersuchungen mit Phenanthrolin-5,6-dithiolat (phendt²⁻). Phenanthroline mit Donor-Substitution in der 5,6-Position sind besonders starre Brückenliganden, die eine vorteilhafte Bedingung für sehr schnelle Elektronentransferprozesse zwischen verbundenen Metallen erfüllen.

[1] C. Timmermann, P. Thiem, D. Wanitschke, M. Hüttenschmidt, J. Romischke, A. Villinger, W. W. Seidel, *Chem. Sci.* **2021**, 10.1039/D1SC06149F. Migratory insertion of isocyanide into a ketenyl-tungsten bond as key step in cyclization reactions. [2] S. Ludwig, K. Helmdach, M. Hüttenschmidt, E. Oberem, J. Rabeah, A. Villinger, R. Ludwig, W. W. Seidel, *Chem. Eur. J.* **2020**, 26, 16811-16817. Metal/Metal Redox Isomerism Governed by Configuration. [3] H. Lange, H. Schröder, E. Oberem, A. Villinger, J. Rabeah, R. Ludwig, K. Neymeyr, W. W. Seidel, *Chem. Eur. J.* **2020**, 26, 11492-11502. Facile Synthesis of a stable side-on Phosphinyne Complex by Redox Driven Intramolecular Cyclisation.

Organokatalyse

(jetzt: Ressourceneffiziente Katalyse)

Prof. Dr. Thomas Werner
th.werner@uni-paderborn.de



Wir beschäftigen uns mit der Entwicklung und Anwendung von nachhaltigen katalytischen Prozessen.

Ein Aspekt unserer Arbeit ist die Entwicklung und Implementierung von phosphorbasierten Organokatalysatoren und Synthesemethoden, wie z.B. Halogenierungen, Olefinierungen und Reduktionen unter Verwendung der PIII/PV-Redoxkatalyse. Dies ermöglicht es, die Menge an Phosphor zu reduzieren, die für wichtige organische Transformationen benötigt wird. Darüber hinaus sind wir an der Verwendung von häufig vorkommenden Metallen, sogenannten „earth abundant metals“, wie z.B. Fe, Ca, Mn in der Katalyse interessiert.

Ergänzt werden unsere methodischen Arbeiten durch den Fokus auf die Umwandlung von erneuerbaren Rohstoffen. In diesem Zusammenhang arbeiten wir an der Nutzung von CO₂ als

C1-Baustein, z. B. für die Herstellung von biobasierten Carbonaten. Darüber hinaus verwenden wir die gewonnenen Produkte als Synthesebausteine, Lösungsmittel und Monomere z.B. für isocyanat-freie Polyurethane sowie als Linker für Hybridmaterialien. Neben CO₂ nutzen wir auch andere erneuerbare Rohstoffe, wie Fette und deren Derivate, sowie Zucker und Terpene.

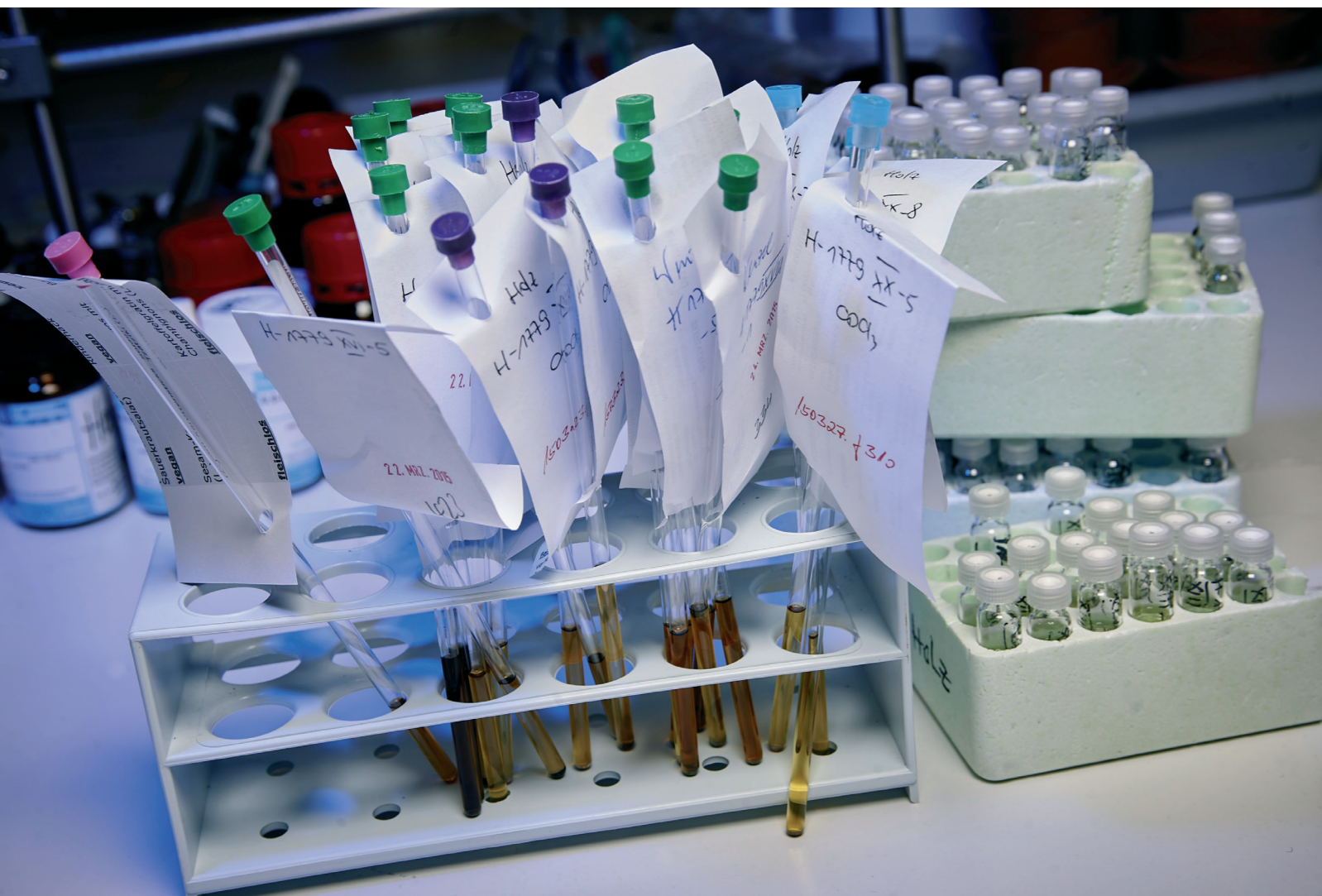
Ein weiterer Aspekt unserer Forschung ist die Evaluierung von Recyclingkonzepten für homogene Katalysatoren, z. B. deren Immobilisierung auf anorganischen Trägern unter Verwendung neuartiger Immobilisierungsmethoden, wie Plasmatechniken. Unterstützt wird unsere Arbeit durch mechanistische Untersuchungen (experimentell, spektroskopisch und theoretisch), die in Kooperation mit Kollegen am LIKAT und der Universität Rostock durchgeführt werden.



PD Dr. habil. Wolfgang Baumann
wolfgang.baumann@catalysis.de

Der Service-Bereich Analytik unterstützt die Forschergruppen im Leibniz-Institut für Katalyse, indem er die für ein erfolgreiches Arbeiten notwendigen analytischen Dienstleistungen bereitstellt. In enger Abstimmung mit den Auftraggebern werden die benötigten Methoden erarbeitet und an die konkreten Fragestellungen angepasst. Die analytischen Methoden werden hierbei von Mitarbeitern mit langjähriger Erfahrung betreut. Wichtig ist die Kooperation mit dem Institut für Chemie der Universität Rostock, die in der gemeinsamen Nutzung von Großgeräten und gegenseitigem Personalaustausch besteht. Den mit der Corona-Pandemie verbundenen Maßnahmen zum Trotz konnte die Arbeit ohne größere Einschränkungen aufrechterhalten werden.

Abb.1 : NMR-Probenröhrchen



Wegen der sehr unterschiedlichen Arbeitsrichtungen der Forschungsbereiche muss der Gerätebestand sowohl den Anforderungen molekularchemischer Syntheselabors als auch denen der Festkörper- und Oberflächencharakterisierung gerecht werden. Wir bemühen uns, den aktuellen technischen Stand zu halten (und gegebenenfalls auch unkonventionelle Lösungen zu finden). So wurden im Berichtszeitraum einige Geräte (*Gaschromatographie-Massenspektrometrie-Kopplung, Titrierstationen*) durch Modelle der neuesten Generation ersetzt. Die Methoden der *Elementaranalyse* haben im Transfer-Technikum neu eingerichtete Laboratorien bezogen. Damit sind die Arbeitsbedingungen und die organisatorischen Abläufe klar verbessert worden.

Im Bereich der Festkörper- und Oberflächenanalytik wurden neue Möglichkeiten geschaffen: Die Universität Rostock hatte im letzten Berichtszeitraum zusammen mit dem LIKAT (im Rahmen der Interdisziplinären Fakultät) ein

Hochleistungs-Elektronenmikroskop installiert und in Betrieb gesetzt, die Anschaffung eines *NAP-XPS-Gerätes (Near Ambient Pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy)* für das LIKAT war aus Mitteln der Europäischen Union realisiert worden.

Jetzt gelang es ein *Rasterelektronenmikroskop (Environmental SEM)* zu beschaffen, das im Jahr 2023 seinen Dienst aufnehmen wird. Diesen drei Geräten ist gemeinsam, dass sie nicht nur die bisher übliche Untersuchung von Substanzproben im Hochvakuum gestatten. Es ist möglich, Katalysatorproben unter einer Gasatmosphäre, sozusagen „bei der Arbeit“ zu beobachten (Veränderungen der Morphologie mit Variation von Temperatur und Gaszusammensetzung). Nähere Informationen dazu im Bericht des Themenfeldes 01 „Struktur-Reaktivitäts-Beziehungen“.

Das „Environmental SEM“ ist gerade im Zusammenhang mit dem Betriebsbeginn des Technikums eine wertvolle Ergänzung zum bestehenden Transmissionselektronenmikroskop (TEM), da es erlaubt, Beschichtungen und Oberflächen von Katalysatorträgern wie Monolithen in ihrer Gesamtheit hochauflösend und unter reaktionsähnlichen Zuständen zu untersuchen, was im TEM nicht zerstörungsfrei möglich ist.

Die Analytik leistet weiterhin einen Beitrag zur Außendarstellung des LIKAT, da ihre Mitarbeiter an Publikationen aller Forschungsbereiche beteiligt sind und auch eigene Ergebnisse publizieren. Im Rahmen verfügbarer Kapazitäten erbringen wir analytische Dienstleistungen für externe Auftraggeber, sowohl für Einrichtungen der Universität Rostock als auch gelegentlich für andere Institutionen und Firmen.

Elektronenmikroskopie

In einem Rasterelektronenmikroskop (REM, engl. SEM) wird eine Probenoberfläche mit einem fokussierten Elektronenstrahl abgerastert und die emittierte Strahlung aufgefangen. Dadurch lassen sich sowohl die Oberflächenstruktur als auch die elementare Zusammensetzung von Festkörpern in einer Größe von einigen Zentimetern mit einer Auflösung im Nanometerbereich untersuchen. Die Auflösung ist etwas schlechter als im Transmissionselektronenmikroskop (TEM) welches bis zu atomaren Strukturen aufklären kann, dabei aber die dann sehr dünne (wenige Dutzend Nanometer) Probe durchstrahlen muss. Ein REM schließt die Lücke zwischen Lichtmikroskopie und TEM in der Charakterisierung von Strukturgrößen und ist daher eine wichtige Ergänzung.

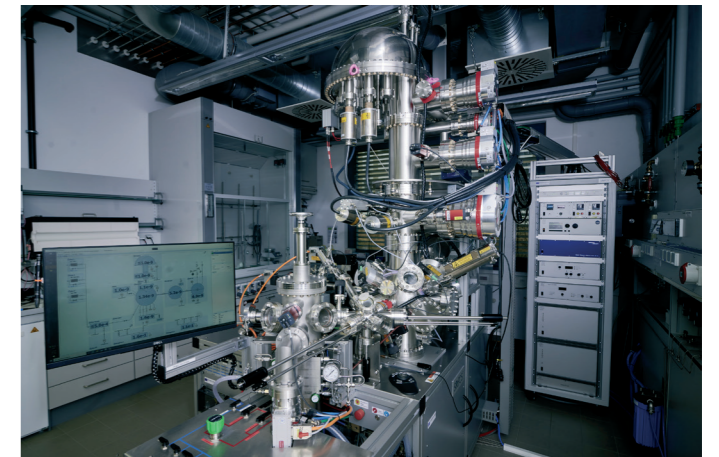


Abb. 2: Das 2020 in Betrieb genommene NAP-XPS (Near Ambient Pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy)

Im Service-Bereich Analytik werden derzeit folgende Methoden betrieben:

- Chromatographie (GC und HPLC)
- Massenspektrometrie, z. T. mit Chromatographie-Kopplung (GC-MS und LC-MS)
- Hochauflösende Kernresonanz-Spektroskopie (NMR)
- Röntgenbeugung an Pulvern und Einkristallen (XRD)
- Optische Spektroskopie-Methoden (IR, UV-Vis und CD/ORD)
- Element-Analytik (AAS, ICP-OES, RFA, Verbrennungsanalyse, Titration und Photometrie einschl. Aufschlussmethoden)
- Photoelektronen-Spektroskopie (ESCA, XPS)
- Analytische Elektronenmikroskopie (Cs-korrigiertes STEM) mit EELS und EDX, künftig auch Raster-EM)
- Kapillar-Elektrophorese (CE)

Robert Francke

Nachhaltige Chemie durch Reaktionen unter Strom

Mit Robert Francke und seiner Expertise in der präparativen Elektrochemie sichert sich das LIKAT einen Erfahrungsvorsprung in einem Forschungsfeld, das derzeit zu den meistgefragten wissenschaftlichen Disziplinen zählt. Es geht u.a. darum, mit dem Einsatz von Strom auf nachhaltige und klimaschonende Weise wertvolle Grund- und Feinchemikalien zu erzeugen. 2021 kam Robert Francke ans Institut, er leitet dort den Bereich „Elektrochemie & Katalyse“ und hat seit 2022 eine Heisenberg-Professur inne. Sein Team erforscht die Gewinnung sowohl von komplexen chemischen Verbindungen als auch von einfachen Molekülen, etwa Wasserstoff, einem Protagonisten der Energiewende, der ja ebenfalls unter Spannung entsteht: durch Elektrolyse von Wasser. Robert Francke studierte



und promovierte an der Universität Bonn, arbeitete danach an der University of California und habilitierte sich 2020 an der Universität Rostock. Seine Forschungsarbeit wurde früh gefördert, er erhielt das Liebig-Stipendium vom FCI, dem Fonds der Chemischen Industrie, und war Feodor-Lynen-Stipendiat der Alexander-von-Humboldt-Foundation.

Eszter Baráth

Harmonie von mehreren Effekten

Mit zehn Jahren wollte sie Goldschmiedin werden, doch dann studierte Eszter Baráth Chemie – zum Glück für das LIKAT, wo sie seit November 2021 den Forschungsbereich „Katalyse & erneuerbare Rohstoffe“ leitet. Sie spürt den Druck der Öffentlichkeit, „die Umwelt zu schützen und auch soziale Verantwortung zu übernehmen“, wie sie in einem Interview einmal sagte. Und sie ist überzeugt, dass Chemie und Katalyse diesem Anspruch gerecht werden. Auch weil sie mit neuen nachhaltigen Synthesewegen für eine breite Nutzung erneuerbarer Rohstoffe und Materialien sorgen. Zu ihren Einsichten gehört es, dass eine „überzeugende Reaktion nicht unbedingt in einem gut definierten dominierenden Effekt begründet ist, sondern eher eine schöne Harmonie von mehreren Effekten darstellt“. In



Foto: E. Baráth

ihrer Ausbildung hatte Eszter Baráth Praktika in Ludwigshafen und Kyoto absolviert, sie promovierte in Veszprem, forschte in Rennes und Heidelberg und habilitierte sich 2020 in München. Seit Ende 2022 wird sie auch als Leibniz-Professorin gefördert.

Mirko Kirschkowski

Konsolidierung und planvolle Optimierung

Seit August 2021 ist Mirko Kirschkowski der Kaufmännische Direktor des LIKAT, dessen Kurs in puncto Finanzen er damals als „Konsolidierung und planvolle Optimierung“ bezeichnete. Denn für ein Forschungsinstitut wie dem LIKAT werde es aufgrund der in Krisenzeiten stark belasteten Haushalte von Bund und Land schwerer als bisher zu wachsen und sich weiterzuentwickeln. Und natürlich fühle er sich ebenso wie der wissenschaftliche Direktor, Matthias Beller, in hohem Maße dem Steuerzahler verpflichtet. Mirko Kirschkowski arbeitete u.a. als Geschäftsführer des Deutschen Zentrums für Herzinsuffizienz der Uni Würzburg und als Verwaltungsdirektor des Sigmund-Freud-Instituts in Frankfurt am Main. Und als promovierter Historiker wisse



er, „dass die Persönlichkeit von Menschen zu allen Zeiten durch unterschiedlichste, auch widersprüchliche Facetten geprägt wird“. Und dass diese Menschen bei aller Unterschiedlichkeit miteinander kooperieren und gemeinsam Großartiges hervorbringen können.

Milica Feldt

Theorie der Katalyse

Sie hat Physik studiert und sagt von sich, dass ihre Chemie-Kenntnisse „manchmal etwas dürftig“ seien. Das darf man getrost bezweifeln, denn immerhin hat das LIKAT Milica Feldt die Funktion einer Nachwuchsgruppenleiterin übertragen. Seit dem Herbst 2021 erforscht sie mit ihrer Gruppe Nicht-Häm-Eisenkomplexe. Was den zwischenmenschlichen Umgang betrifft, verwendet Milica Feldt in einer Intranet-Vorstellung anlässlich ihrer Arbeitsaufnahme am LIKAT eine Metapher aus der Chemie: Unterschiedliche Übergangsmetalle würden sich in ein und derselben Umgebung recht unterschiedlich verhalten, „genau wie Menschen“. Milica Feldt promovierte in Göttingen. Als Postdoc war sie unterwegs in der physikalischen Chemie (Göttingen und Belgrad), in der organischen Chemie



Foto: M. Feldt

(Münster) und in der Gruppe „Theoretical and Computational Chemistry“ von Jeremy Harvey an der KU Leuven, Belgien. Ihre Leistung wurde vielfach mit Reise-Stipendien geehrt und mit einem Posterpreis auf dem Kongress der International Society for Theoretical Chemical Physics 2019 in Tromsø.

Osama El-Sepelgy

Kombination von Photokatalyse und lichtangeregter Biokatalyse

Seit Mai 2021 forscht Osama El-Sepelgy am LIKAT. Er leitet im Bereich „Angewandte Homogenkatalyse“ die Nachwuchsgruppe „Moderne organische Chemie“. Ziel ist die Erkundung neuer Strategien, mit denen sich jene Rohstoffe erschließen lassen, die wie das Kohlendioxid reichlich vorhanden, aber wenig reaktionsfreudig sind. Es geht dabei um die nachhaltige, vor allem klimaschonende Produktion von Fein- und Massenchemikalien – eine der Herausforderungen des 21. Jahrhunderts. Osama El-Sepelgy konzentriert sich mit seiner Gruppe auf die Kombination der Photokatalyse von Nichtedelmetallen mit der photoangeregten Biokatalyse. Osama El-Sepelgy studierte Chemie



an der Mansoura University in Damietta, Ägypten, absolvierte sein Praktikum an der Leipziger Universität und promovierte 2014 an der Jagiellonen-Universität in Krakau. Als Postdoc ging er zur RWTH Aachen, von wo er nach Rostock ans LIKAT wechselte.

Barbara Heller

Das Gute tun und öffentlich machen

Im Sommer 2021 ging Barbara Heller, zuletzt kaufmännische Direktorin des LIKAT, in den Ruhestand. Sie studierte an der Universität Rostock Chemie und wurde dort promoviert. Ein Vierteljahrhundert forschte sie im Bereich der organischen Chemie und Katalyse, zum Schluss als Themenleiterin am IfOK, das 2006 zum Leibniz-Institut für Katalyse wurde. Dort übernahm Barbara Heller die Öffentlichkeitsarbeit, das bedeutete u.a., Menschen und Medien über die Katalyse und eben die Chemie aufzuklären, also über ein Fach, das gemeinhin als „schwierig“ und unbeliebt gilt. Mit Charme, der richtigen Portion Hartnäckigkeit und dem Grundsatz „Tue Gutes und rede drüber“ knüpfte sie die Kontakte zu den Redaktionen und vermochte Journalisten für die exzellenten Forschungsergebnisse



aus dem LIKAT zu interessieren. Später übernahm Barbara Heller den Stab des Instituts und, zunächst kommissarisch, die Institutsverwaltung. In all diesen Funktionen sorgte sie dafür, dass das LIKAT mit seinem wissenschaftlichen Standing und seinem weltweiten Renommee in auch Nicht-Eingeweihten ein Begriff ist.

Johannes Gerardus de Vries

Nachwachsende Rohstoffe für die Chemie

Arbeiten zu den sogenannten Plattformchemikalien sind am LIKAT eng mit der Expertise von Johannes de Vries verbunden, der Ende 2021 in den Ruhestand ging. Dabei geht es um eine Wende in der Chemie, nämlich den Ersatz von Erdöl und Erdgas durch nachwachsende Rohstoffe. 2014 kam Johannes de Vries, gebürtiger Amsterdamer, ans LIKAT, er baute den Bereich „Katalyse mit erneuerbaren Rohstoffen“ auf. Wenig später erforschten am LIKAT mehrere Arbeitsgruppen das Potenzial etwa von Holzabfällen für die chemische Fertigung von Grundstoffen. Die Forschung zur Plattformchemikalie Levulinsäure z.B. wurde im Rahmen des Leibniz-Wettbewerbs, SAW, gefördert. Bereits vor 20 Jahren entwickelte Johannes de Vries in den Niederlanden ein katalytisches Verfahren, mit dem sich im Labor aus Holz ein Monomer



für Nylon herstellen ließ. Er hatte in Groningen studiert und promoviert. Er forschte und lehrte in den USA, Großbritannien, Österreich und den Niederlanden, schob Forschungsprogramme und -projekte an und ist bis heute weltweit Mitglied wichtiger Gremien von wissenschaftlichen Gesellschaften.

ÖFFENTLICHKEIT

AUS DER PRESSE

Hürdenlauf zum Wasserstoff – Doktorand entdeckt am LIKAT eine neue Art der H₂O-Spaltung

August 2021

Es klingt einfach, und die Natur macht es uns vor: Grüne Pflanzen speichern Sonnenenergie, indem sie – mittels Licht und Chloroplasten – Wasser in Wasserstoff und Sauerstoff spalten. Die Forschung reizt es, auf ähnliche Weise zum Wasserstoffgas (H₂) zu gelangen, denn „grün“ produziert gilt es als Protagonist einer nachhaltigen Energie- und Grundstoffwirtschaft. Jacob Schneidewind vom Rostocker Leibniz-Institut für Katalyse hat mit seiner Dissertation einen Weg dorthin gezeigt. Er deckte den Mechanismus einer neuen Art der Wasserspaltung auf, mit der die Photolyse kostengünstig möglich werden kann. Der Bericht darüber erschien im Fachmagazin ENERGY & ENVIRONMENTAL SCIENCE.

Grüner Wasserstoff lässt sich auf unterschiedliche Weise gewinnen. Technisch genutzt wird aktuell die Elektrolyse mittels Katalysator und Elektrizität, die von Wind oder Sonne stammt. Eleganter und womöglich kostengünstiger ist freilich die Photolyse, bei der das Sonnenlicht mithilfe eines Katalysators direkt die Wasserspaltung bewirkt – ohne Umweg über Strom aus Wind- oder Solaranlagen. Unter dem Stichwort „künstliche Photosynthese“ erkundet die Chemie derzeit intensiv diesen photokatalytischen Weg.

Was es braucht: Wasser, Lichtquelle, Katalysator

Vor 12 Jahren berichtete ein Team vom Weizmann-Institut, Israel, im SCIENCE-Magazin von einer chemischen Reaktion, bei der ein neuartiger Katalysator mit Hilfe von Licht Wasser spaltete. „Doch niemand verstand, auf welche Weise das geschah“, sagt Dr. Jacob Schneidewind. „Klar war nur, dass noch niemand diese Art der Wasserspaltung gesehen und beschrieben hatte. Sie unterscheidet sich auch komplett von der natürlichen Photosynthese.“ Hier gab es etwas grundsätzlich Neues über die Wasserspaltung zu lernen. Und einen neuen Weg zu erkunden, diese Vorgänge technisch zu nutzen. Drei Jahre studierte Jacob Schneidewind

in seiner Promotion am LIKAT die Original-Reaktion der israelischen Kollegen mittels Wasser, einer Lichtquelle und dem Katalysator aus Ruthenium. Ziel war es, die Abläufe auf molekularer Ebene aufzuklären und die Prozesse am Rechner zu simulieren.



Photoreaktor im Labormaßstab: Die Kombination aus Lichteinstrahlung und dem richtigen Katalysator ermöglicht die Spaltung von Wasser in seine Bestandteile (Symbolbild)

Vier Hürden für Photonen

Kurze Reminiszenz an den Bio-Unterricht in der Sekundarstufe: Bei der Photolyse in grünen Pflanzen entstehen aus jeweils zwei H₂O-Molekülen ein Sauerstoff-Molekül (O₂) sowie exakt vier Protonen des Wasserstoffs (H⁺) und vier Elektronen (e⁻). Jacob Schneidewind erläutert: „Die Energie für die Freisetzung der vier Elektronen stammt von ebenfalls vier absorbierten Lichtteilchen, den Photonen. Um genügend Photonen zu gewinnen, benutzt die Natur mehrere absorbierende Zentren.“

Man könne sich die Reaktion wie einen energetischen Hürdenlauf vorstellen, sagt Jacob Schneidewind. „Bis zum Ziel, also der Wasserspaltung, sind dann vier Hürden zu überwinden.

Wird auch nur eine davon gerissen, misslingt die Photolyse – zumindest für diesen Molekülverband.“ Soweit der Ablauf in der Natur.

Original lässt Fragen offen

Im Labor am Weizmann-Institut erfolgte die Photolyse aber nicht an mehreren absorbierenden Zentren, sondern nur an einem einzigen Punkt. „Das erschien seltsam“, sagt Dr. Schneidewind. „Dass ein katalytisches Zentrum allein vier Photonen absorbieren würde, ist extrem unwahrscheinlich.“ Ebenso wenig würde die Energie eines einzelnen Photons ausreichen, um alle vier Hürden zu überspringen. Dafür gab es keine sinnvolle Erklärung.

Als Doktorand arbeitete sich Jacob Schneidewind in die Quantenchemie und die Kinetik chemischer Reaktionen ein, mit deren Hilfe er Reaktionen am Rechner modellieren konnte. Im Labor baute er das israelische Experiment mit wechselnden Lichtquellen nach, vom kurzwelligen, energiereichen blauen Licht bis zum energieschwachen Rotbereich. Kollegen an der Universität Rostock übernahmen die Analysen mittels Hochgeschwindigkeits-Spektroskopie.

Die Lösung: zwei Hürden reichen aus

„Es hat uns alle überrascht zu sehen, was da im System geschieht“, sagt Jacob Schneidewind. Tatsächlich kommt der photokatalytische Weg zum Wasserstoff mit zwei Photonen aus

statt mit üblicherweise vier. Und sowohl die Absorption der Photonen als auch die eigentliche Spaltungsreaktion laufen an einem einzigen Zentrum ab, welches aus einem Paar von Ruthenium-Atomen besteht. „Wenn das erste Photon seine Hürde genommen hat, entsteht eine neue Verbindung, die das zweite Photon absorbiert. Und diese benötigt für die zweite Hürde sogar weniger Energie als für die erste Hürde nötig war.“ Somit lässt sich eine größere Bandbreite des Lichts nutzen, was die Effizienz deutlich verbessern kann.

Strukturell scheint alles aufgeklärt. Was folgt technisch daraus? „Man könnte z.B. durchsichtige Plastschläuche mit einer Suspension oder Lösung aus Wasser und Katalysator füllen und großflächig der Sonne aussetzen“, sagt Dr. Schneidewind. Dieser Ansatz wäre, mit dem richtigen Katalysator, drei- bis viermal kostengünstiger als die Kombination von Solarzellen und Elektrolyseur. Einen geeigneten Katalysator dafür plant Jacob Schneidewind ab Herbst mit einer eigenen Nachwuchsgruppe an der RWTH Aachen zu entwickeln, wohin er nach seiner Promotion gewechselt ist.

Nachhaltige Energie-Konzepte gehen u.a. davon aus, künftig grünen Wasserstoff in sonnenreichen Regionen zu produzieren und nach Europa zu importieren. Das Wissen aus dem LIKAT wird helfen entsprechende Technologien zu entwickeln.

Dr. Jacob Schneidewind

2012 - 2014 Frühstudium an der Universität zu Köln (Chemie)

2014 - 2015 Studium am Yale-NUS College, Singapur (Liberal Arts)

2015 - 2016 Forschungsaufenthalte bei Prof. Dr. Robert H. Morris (University of Toronto) und Prof. Dr. Matthias Beller (LIKAT, Rostock)

2016 - 2016 B. Sc. (Chemie, 2016), M. Sc. (Chemie 2017) Universität Rostock

2017 - 2021 Promotion unter Prof. Dr. Matthias Beller (LIKAT, Rostock)

seit 2022 Nachwuchsgruppenleiter an der RWTH Aachen

aktueller Kontakt:

schneidewind@itmc.rwth-aachen.de

Originalpublikation DOI: [10.1039/d1ee01053k](https://doi.org/10.1039/d1ee01053k)



Dr. Jacob Schneidewind in Aachen (Foto: Martin Grolms)

Aus der Presse

LIKAT-Forscher und APEX entwickeln eine Wasserstoff-Batterie

Juni 2022

Chemiker am Leibniz-Institut für Katalyse, LIKAT, entwickelten gemeinsam mit der Firma APEX ein katalytisches System, das Wasserstoff chemisch speichert und in hochreiner Form beliebig wieder abgeben kann. Auf dieser Basis könnten in Zukunft Anlagen nach dem Prinzip einer Batterie jederzeit und überall Wasserstoff spenden, z.B. um Brennstoffzellen zu betreiben. Die Forschungsgruppe von Dr. Henrik Junge veröffentlichte ihre Erkenntnisse im Fachjournal *NATURE ENERGY*, das die Arbeit von einer Kommentatorin zudem als Highlight bewerten ließ. Die Rede ist dort u.a. von einer „bemerkenswerten Aktivität“ des Katalysators sowie von einer „außergewöhnlichen“ Effizienz der chemischen Reaktionen.

Tatsächlich kann diese Arbeit das weltweite Bemühen, Öl und Gas als Energierohstoffe abzulösen und CO₂-neutrale Prozesse zu nutzen, einen guten Schritt voranbringen. Denn Wasserstoff ist als künftige Basis für den Energiesektor zwar mittlerweile akzeptiert, wie Dr. Henrik Junge erläutert, allerdings ist seine Speicherung immer noch problematisch. Wasserstoff ist in Gegenwart von Sauerstoff explosiv und als Gas unter normalen Bedingungen flüchtig und von geringer Dichte, weshalb führende Forschungslabore vor allem chemische Wege seiner Speicherung erkunden.

Ameisensäure als Speichermedium

Dr. Duo Wei, Postdoktorand am LIKAT in Rostock, verwendete als Speichermedium für Wasserstoff Ameisensäure und ihre Salze, sogenannte Formiate. Bereits vor einem Jahr beschrieben die Rostocker Chemiker im Fachjournal *CHEMICAL SCIENCE*, wie sie mittels Kohlendioxid aus der Luft und der Aminosäure L-Lysin katalytisch Wasserstoff in Formiaten speichern. Dr. Junge: „Natürlich wäre es elegant, wenn wir im selben System den Wasserstoff bei Bedarf wieder freisetzen können, um ihn zu nutzen.“ Genau das ist mit der aktuellen Arbeit gelungen. Den Katalysator, der all die notwendigen chemischen Reaktionen ermöglicht, entwickelten die Chemiker auf der Basis eines Mangan-Komplexes, er kommt also, anders als bei den meisten bisherigen Hydrierungen üblich, ohne Edelmetall aus. Es gibt weitere Vorzüge, wie der Direktor des LIKAT, Prof. Dr. Matthias Beller, erläutert. Normalerweise wird bei der Rückgewinnung von Wasserstoff aus Formiaten das zur Speicherung verwendete Kohlendioxid wieder frei. „Wir hingegen halten das CO₂ dauerhaft in unserem Reaktionssystem fest.“ Der Trick besteht darin, dass die Forscher das CO₂ an eine gewöhnliche Aminosäure binden, die in der Natur und in uns selber vorkommt.

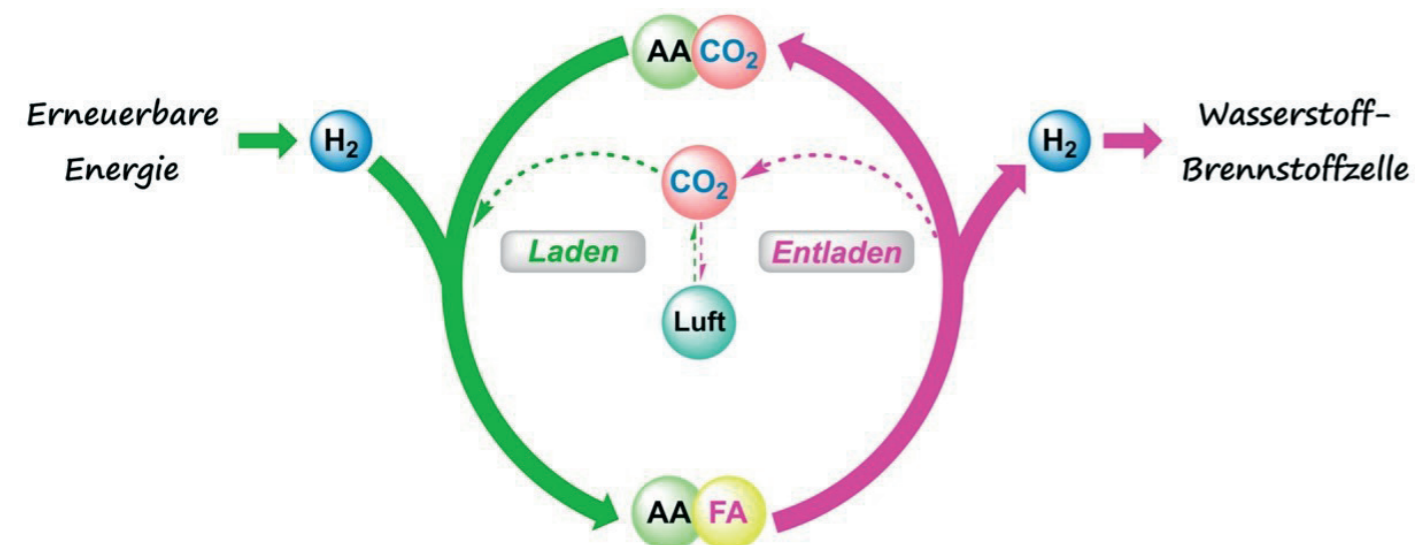


Abb. 1: Die Wasserstoff-Batterie basiert auf der kohlenstoffneutralen chemischen Speicherung und Freisetzung von H₂: CO₂, Aminosäure (AA) und H₂ werden zu Formiat, dem Salz der Ameisensäure (FA), umgewandelt. Das CO₂ verbleibt im Kreislauf (fette Pfeile), was Vorteile hat gegenüber dem CO₂-Recycling (gepunktete Pfeile). Grafik: LIKAT

Hohe Ausbeuten von 90 bzw. 80 Prozent

Das neu entwickelte Reaktionssystem folgt dem Prinzip einer elektrischen Batterie, mit dem Unterschied, dass anstelle von elektrischem Strom Wasserstoff genutzt wird. Eine solche Batterie wird also einmal zu Beginn mit CO₂ aus der Luft befüllt. Sie kann dann den Zyklus der Hydrierung (H₂-Speicherung) und Dehydrierung (H₂-Freisetzung) mehrmals durchlaufen, wobei stets neuer Wasserstoff in den Speicher geladen wird.

Unter anderem die hohen Ausbeuten dieses Prozesses – mehr als 90 Prozent für die H₂-Speicherung und 80 Prozent H₂-Freisetzung – hebt ein Kommentar hervor, mit dem das Journal *NATURE ENERGY*, solche bahnbrechenden Entwicklungen üblicherweise bewerten lässt. Die Kommentatorin Sheri Lense beeindruckte an dem Resultat ihrer Rostocker Kollegen die „bemerkenswerte Aktivität“ des Katalysators und eine „außergewöhnlich hohe Gesamt-TON“ (TON = turnover number, Umsatzzahl) noch nach zehn Ladungszyklen.

Ein Verfahren auf dieser Basis wird seinen vollen Charme künftig vor allem dann entfalten, wenn der zu speichernde Wasserstoff aus erneuerbaren Quellen der Region kommt, etwa Windkraft oder Photovoltaik. Henrik Junge: „Solche Quellen sprudeln ja nicht kontinuierlich. Deshalb braucht die Wasserstoffwirtschaft auf grüner Basis große Speicherkapazitäten, vorzugsweise chemischer Art, auch lokal vor Ort.“

Patentantrag mit APEX Group

Das alles ist Grundlagenforschung, wie Dr. Junge betont, doch in hohem Maße geeignet, Wirtschaft und Energiesektor mit klimaneutralen Verfahren transformieren zu helfen. Hinzu kommt, dass die Chemie CO₂ in der Atmosphäre zunehmend als Rohstoffquelle erkennt, Ausgangsstoff für vielfältige nützliche Produkte, wie Henrik Junge sagt. Für die praktische Nutzung wird die Kooperation des LIKAT mit der APEX Group sorgen. Dr. Peter Sponholz, Leiter für Forschung und Entwicklung bei APEX zählt zum Autoren-Team des *NATURE ENERGY*-Papers. Der Antrag zu einem gemeinsamen Patent, das von APEX angemeldet wurde, läuft gerade.

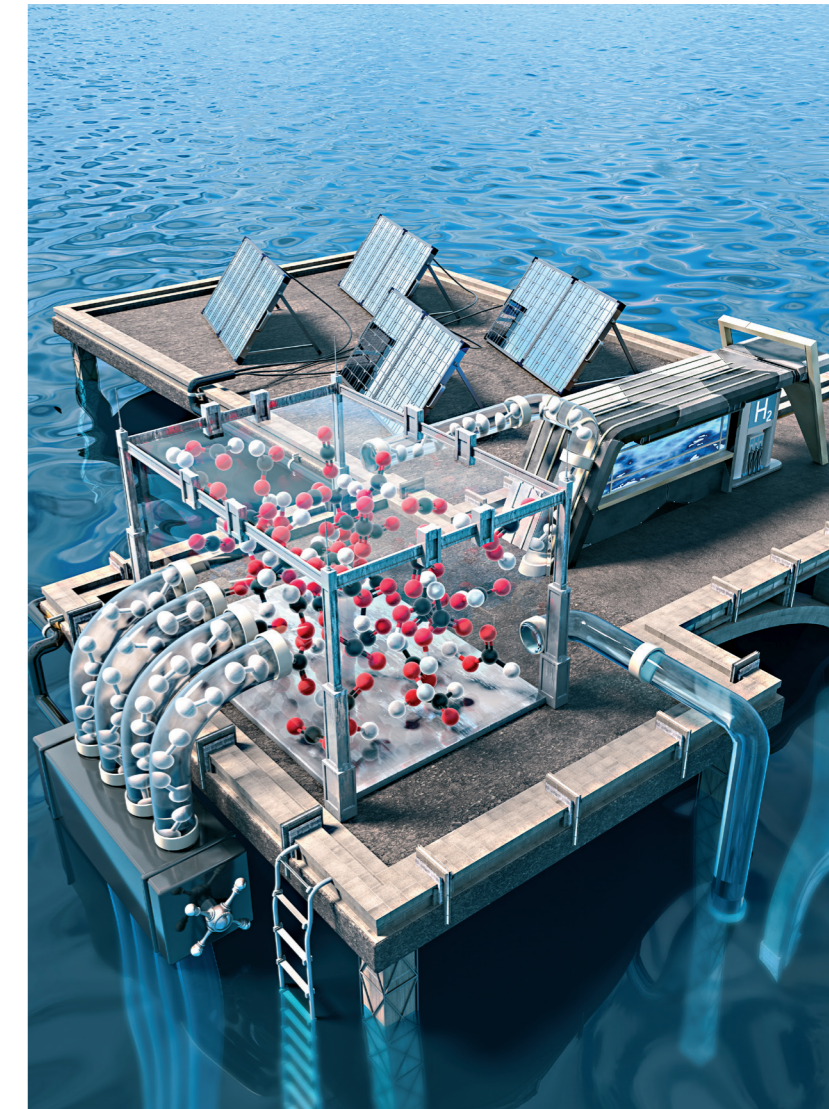


Abb. 2: LIKAT Wie in dieser Montage können wir uns die Wasserstoff-Batterie der Zukunft vorstellen: Die Sonne liefert den Strom für die elektrolytische Produktion (rechts im Bild) von Wasserstoff (H₂, weiße Kugeln) aus Wasser. Der H₂ wird in den Batteriespeicher (Kasten in der Mitte) geladen und dort mit CO₂ (Kombination aus schwarzen und roten Kugeln) mittels eines Katalysators und einer Aminosäure zu Formiat (Kombination aus roten, schwarzen und weißen Kugeln) umgewandelt, bei Bedarf wieder freigesetzt (Ableitung von H₂ über die gekrümmten Rohre) und z. B. in einer Brennstoffzelle (links im Bild) genutzt. (Bildmontage: LIKAT)

Wissenschaftlicher Ansprechpartner:

Dr. Henrik Junge (Themenleiter „Katalyse für Energietechnologien“)
 Telefon: +49 (0) 381 12 81 – 174
 E-Mail: henrik.junge@catalysis.de

Original-Publikation:

<https://doi.org/10.1038/s41560-022-01019-4>

Leibniz-WissenschaftsCampus ComBioCat: Enzym und Metall kombiniert für künftige Katalysatoren

August 2022

Als Biokatalysatoren bewältigen Enzyme den Stoffwechsel aller Lebewesen. Sie tun dies äußerst präzise, denn schon eine einzige falsch umgesetzte Substanz könnte fatale Folgen für den Organismus haben. Diese selektive Vorgehensweise von Enzymen und ganz allgemein von Proteinen nutzen Nachwuchsforscher vom Leibniz-WissenschaftsCampus ComBioCat, um Katalysatoren der Zukunft zu entwickeln: sogenannte künstliche Metalloenzyme. Kombinationen aus Bio- und chemischen Katalysatoren sollen künftig komplexe Moleküle z.B. für die Pharmazie zielsicher und zuverlässig designen.

Das Beste aus zwei Welten

Am Leibniz-Institut für Katalyse in Rostock, LIKAT, ist Doktorand Paul Hünemörder im Rahmen des WissenschaftsCampus ComBioCat gerade dabei, einen Kupfer-Katalysator mit einem Enzym bzw. Protein zu verknüpfen. Der neue Katalysator soll gewissermaßen „das Beste aus zwei Welten“ vereinen, erläutert er. „Chemische Katalysatoren arbeiten schnell und erzeugen hohe Ausbeuten, leider dabei auch unerwünschte Nebenprodukte.“ Das passiere Biomolekülen nicht, weil sie „höchst selektiv vorgehen“. Die Entwicklung von Metalloenzymen ist ein neues Forschungsfeld der Chemie. Am LIKAT laufen die Arbeiten in der Forschungsgruppe von Esteban Mejía, Doktorvater von Paul Hünemörder. „Die Kunst besteht darin, auf der molekularen Ebene Anschlussstellen zu finden, an denen sich Protein und Metall verknüpfen lassen“, erläutert Esteban Mejía. Industriell sind noch keine künstlichen Metalloenzyme im Einsatz. Es scheiterte nach den Worten von Mejía und Hünemörder bisher auch daran, dass die Proteine dazu modifiziert, d.h. gentechnisch verändert werden müssen.“ Damit seien sie zu teuer, um sie breit zu nutzen.

Enzym aus der Natur

Auf der chemischen Seite entschied sich Paul Hünemörder für Kupfer als reaktives Zentrum. Die Suche nach einem geeigneten Enzym oblag Biochemikern der Universität Greifswald. Ihre



Abb. 1: Der Kupfer-Katalysator, der chemische Teil des künftigen Metalloenzym, wird getestet, und zwar in einer Lösung zyklischer Alkene. Die Reaktion startet unter UV-Licht. (Foto: LIKAT/P. Hünemörder)

Wahl fiel auf ein Protein namens Lactococcus Multidrug Resistance Regulator, kurz: LmrR. Als Protein bewirkt es in Milchsäurebakterien Antibiotikaresistenzen. Sein Vorteil: Es lässt sich so verwenden, wie es in der Natur vorkommt, und braucht nicht gentechnisch verändert zu werden.

Proteine erlangen ihre Wirkung vor allem durch ihre komplexe Faltung, ihre Protein-Struktur. Bei LmrR entsteht dadurch eine flache Tasche, „eine Art Schlitz“, wie Paul Hünemörder sagt. Das brachte ihn auf die Idee, den synthetischen Teil des Katalysators mit jeweils einem Kupfer-Atom im Zentrum wie eine Münze in diesen Schlitz zu versenken und auf diese Weise mit dem Protein zu verbinden.

Korsett für das Kupfer-Atom

Voraussetzung ist eine Art Korsett für das Kupfer-Atom, ein Katalysator-Gerüst, in der Fachsprache Ligand. Die Suche nach einer geeigneten Substanz gestaltete sich nach Paul Hünemörders Worten recht schwierig. Einzig Terpyridin eignete sich, ein sogenannter Pincer-Ligand, der so heißt, weil er dank seiner Form den Katalysator gewissermaßen in die Zange (engl.: Pincer) nimmt.

„Das Wichtigste aber ist, dass dieser Ligand dem Kupfer-System eine sehr flache Struktur verleiht“, sagt Paul Hünemörder. „Womit der Katalysator perfekt in den ‚Schlitz‘ des Enzyms passt.“ Nach ersten Tests scheint das auch zu funktionieren. Das Metalloenzym, das in diesem Falle strenggenommen ein „Metalloprotein“ ist, soll künftig sogenannte zyklische Alkene zu Vor- und Zwischenprodukten für Pharmazeutika umwandeln. Welchen Vorteil bringt es dort?

Bild und Spiegelbild

Zyklische Alkene existieren von der Struktur her oftmals linkshändig und rechtshändig, vorstellbar wie Bild und Spiegelbild. In der Natur sorgen die Enzyme mit ihrer hochpräzisen katalytischen Wirkung, dass nur eine, und zwar die „echte“, Variante entsteht. Bei einer chemischen Synthese hingegen können beide Varianten erzeugt werden. Chemisch sind sie völlig identisch, doch in ihrer physiologischen Wirkung unterscheiden sie sich mitunter dramatisch. Das Schmerzmittel Contergan verursachte in den 50er Jahren schwere Missbildungen an ungeborenen Kindern, weil es im Organismus der Schwangeren die Bildung einer spiegelbildlichen Molekülvariante bewirkte. Industriell müssen also solche Endprodukte bisweilen aufwändig getrennt werden, damit die gewünschte Molekül-Variante zum Einsatz kommt.

Genau dies würde durch die Verwendung eines künstlichen Metalloenzym entfallen. Ziel der Arbeiten in Rostock und Greifswald ist es, dass die selektive Arbeitsweise des Proteins LmrR einzig die gewünschte Form an Zwischenprodukten hervorbringt. Chemiker bezeichnen diese Reaktion deshalb als asymmetrisch.

Mechanismusforschung

Das Kupfer-Zentrum im Katalysator erledigt seine Arbeit inzwischen „schnell und verlässlich“, wie Paul Hünemörder mit seiner studentischen Forschungsgruppe im Labor nachweisen konnte. Nun heißt es zu beweisen, dass auch der Protein-Teil des neuen Katalysators funktioniert, d.h. die „Händigkeit“ der Ausgangsstoffe erkennt und nur die „richtige“ Variante reagieren lässt. Mit einem Ergebnis rechnet Paul Hünemörder im Herbst.

Die Forscher sind überzeugt davon, dass künstliche Metalloenzyme künftig der Chemieindustrie einen entscheidenden Vorteil verschaffen werden. Und auch theoretisch sind die Arbeiten ein Gewinn. In Analysen zum Reaktionsmechanismus identifizierten die jungen Chemiker eine Zwischenstufe, die sich als essentiell für den chemischen Prozess erwies, aber in der Fachliteratur bisher keine Rolle spielte. Die Erkenntnisse können helfen, das Reaktionsprinzip auf andere Substanzklassen zu übertragen.



Wissenschaftlicher Ansprechpartner:

Paul Hünemörder (Promotionsstudent in der Themengruppe „Katalyse & Polymerchemie“
Telefon: +49 (0) 381 12 81 – 416
E-Mail: paul.huenemoerder@catalysis.de

Abb. 2: Paul Hünemörder (Foto: LIKAT/Maslack)

Spürhund für Abbauprodukte von Arzneien – LIKAT vereinfacht Verfahren zur Molekülmarkierung mittels Deuterium

Januar 2022

Medikamente, die wir zu uns nehmen, werden bei ihrem Abbau im Körper chemisch verändert. Bei neuentwickelten Wirkstoffen, und nicht nur dort, ist es wichtig zu wissen, welche Abbauprodukte (Metabolite) dabei entstehen, denn diese können unverträglich oder gar schädlich sein. Um solche Metabolite aufzuspüren, markieren Chemiker die zu untersuchenden Substanzen mit dem Wasserstoff-Isotop Deuterium. Durch diese Deuterierung lassen sich Wirkstoffe bei ihrem Ab- und Umbau präzise verfolgen. Am LIKAT in Rostock gelang der Forschungsgruppe von Kathrin Junge im Bereich von Matthias Beller, die Markierung chemischer Verbindungen durch einen neuen Katalysator erheblich zu vereinfachen.

„Bei der sogenannten Deuterierung wird eine bestimmte Anzahl von Wasserstoff-Atomen im Medikament durch Deuterium ersetzt“, erläutert Dr. Kathrin Junge. Der Unterschied zwischen beiden: Während Wasserstoff in seinem Atomkern nur ein einzelnes Proton besitzt, enthält der Deuterium-Kern zusätzlich zu seinem Proton noch ein Neutron.

Deuterium und Wasserstoff sind sozusagen Geschwister: Isotope des Wasserstoffs. Chemisch verhalten sich beide völlig identisch. Nur physikalisch unterscheiden sie sich durch das höhere Molekulargewicht von Deuterium. Das gestattet es, ein deuteriertes Medikament in jeglichen Stadien seines Abbaus aufzuspüren und zu analysieren.

Das Forscher-Team berichtet darüber im renommierten Fachjournal NATURE CHEMISTRY.

Billiger und nachhaltiger als bisher

Weltweit nutzen Chemiker für die Deuterierung üblicherweise Deuterium-Gas. Dafür benötigen sie Katalysatoren, die ein Edelmetall, etwa Platin, enthalten. Das Team am LIKAT hingegen verwendet deuteriertes Wasser, D₂O. Das ist billiger und auch besser verfügbar als Deuterium-Gas, wie Dr. Junge sagt.

Ihre Gruppe entwickelte eigens dafür einen Katalysator. Und auch der ist preiswerter und nachhaltiger als bisher üblich. „Wir verwenden

Eisen anstelle der üblichen Edelmetalle und benutzen Cellulose als Trägermaterial, das in der Holzindustrie abfällt.“

Der Katalysator arbeitet, auch das ist ein Unterschied, „sehr selektiv“, wie Kathrin Junge erläutert. Das heißt, er sorgt dafür, dass nicht sämtliche Wasserstoff-Atome im Molekül durch Deuterium ersetzt werden, sondern nur an bestimmten Positionen im Molekül.

Deuterierung: Hot topic der Chemieforschung

Die Molekülmarkierung mittels Deuteriums hilft nicht nur Abbaumechanismen von Wirkstoffen aufzuklären. Das Deuterium kann, wie Pharmazeuten feststellten, Medikamente in ihrer Wirkung deutlich verstärken. 2017 gab die US-amerikanische Zulassungsbehörde FDA das erste deuterierte Medikament frei. Seitdem entwickelt sich das Gebiet zum hot topic der Chemieforschung, sagt Kathrin Junge.

Am LIKAT war mit den Arbeiten hauptsächlich Dr. Wu Li befasst. Im Labor unterstützt wurde er von Florian Bourriquen, Doktorand am LIKAT. Beide haben nachweisen können, dass ihr Verfahren nicht nur für eine gewählte Modell-Substanz funktioniert, sondern für ein breites Spektrum von Substanzen. Sie testeten rund 90 Verbindungen, darunter Naturstoffe wie Aminosäuren und DNA-Nukleotide, Hormone wie Melatonin und Estradiol sowie pharmazeutische Wirkstoffe wie Thyrosol gegen Schilddrüsenüberfunktion und das antiseptisch wirkende Thymol.

Der Reaktionsmechanismus für die Deuterierung mittels D₂O sowie die Struktur der deuterierten Substanzen wurden durch Analysegruppen am LIKAT aufgeklärt.

Methode für verbesserte Wirkung von Medikamenten

Die medizinische Wirkung solcher deuterierten Stoffe einzuschätzen, sei Sache der pharmazeutischen Forschung, sagt Dr. Kathrin Junge. Dafür stünde nun mit den Resultaten aus dem LIKAT eine Methode bereit, die deutlich einfacher umzusetzen ist als die bisherige Verfahrens-

weise. Künftig würden solche Aspekte, auch die der Nachhaltigkeit, in den Zulassungsverfahren von Medikamenten eine viel größere Rolle als bisher spielen.

Die neuen Erkenntnisse zur Deuterierung werden u.a. in ein aktuelles EU-gefördertes Forschungsprojekt einfließen, in dem auch mehrere europäische Pharma-Firmen mitarbeiten.

Wissenschaftlicher Ansprechpartner:

Dr. Kathrin Junge (Themenleiterin „Nachhaltige Redoxreaktionen“)

Telefon: +49 (0) 381 12 81 – 138

E-Mail: kathrin.junge@catalysis.de

Original-Publikation:

„Scalable and selective deuteration of (hetero)arenes“
<https://www.nature.com/articles/s41557-021-00846-4>



TRANSFER

„THEORIA CUM PRAXI“ - FORSCHEN FÜR DIE PRAXIS

Der Wissens- und Technologietransfer (WTT) gilt mittlerweile neben Lehre und Forschung als dritte Säule der Wissenschaft. Im Sinne der Leibniz-Gemeinschaft bedeutet Transfer den „Austausch zwischen Wissenschaft und außerakademischer Welt“, der stets in zwei Richtungen erfolgt: Einerseits die Bereitstellung wissenschaftlicher Erkenntnisse für gesellschaftliche Bedarfe oder Entscheidungsprozesse, andererseits die Integration gesellschaftsgenerierter Fragestellungen und Probleme in aktuelle Forschungsfragen. Beides bedarf eines intensiven Dialogs auf zielgruppenspezifischer Ebene.

Transfer als zentrale Aufgabe

Als öffentlich gefördertes Institut sind wir verpflichtet, unsere Forschungsergebnisse zielgruppenspezifisch in die Gesellschaft zu vermitteln.

Das LIKAT verortet sich an der Schnittstelle von Grundlagenforschung und angewandter Forschung. Es ist somit ein Bindeglied zwischen akademischen Forschungseinrichtungen (Universitäten, Institute der Max-Planck-Gesellschaft) und industrieller Forschungsabteilungen (Unternehmen der chemischen, petrochemischen und pharmazeutischen Industrie).

Das LIKAT versteht unter Wissens- & Technologietransfer alle Aktivitäten, die dazu dienen, wissenschaftliche Erkenntnisse und Technologien zielgruppengerecht aufzuarbeiten und in die außerakademische Welt zu transferieren. Darüber hinaus ermöglicht der Dialog mit Gesellschaft, Politik und Wirtschaft das Anpassen der Forschungsfragen an gesellschaftliche Debatten und Problemstellungen.

Insbesondere der Technologietransfer, als technische Nutzbarmachung und kommerzielle Verwertung, gehört schon lange zu den Profilkonstanten des LIKAT. Dies äußert sich in einer Vielzahl an Transferbeispielen wie Industrieko-

operationen, Überführungen und Patentierungen. Die enge Einbindung von Industriepartnern als künftige Nutzer in den Forschungsprozess steht beispielhaft für erfolgreichen beidseitigen Transfer.

Kooperationen mit der Wirtschaft sind Grundvoraussetzung für den Technologietransfer (technische Nutzbarmachung und kommerzielle Verwertung). Eine wichtige Rolle dabei spielt das *Catalysis2Scale*-Transfertechnikum (Bild rechts). 2021 und 2022 waren Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des Instituts an insgesamt 55 Patentanmeldungen und darüber hinaus an zehn Überführungen beteiligt.

Zunehmend gewinnt der Wissenstransfer am LIKAT als „zielgruppenspezifische und qualitätsgesicherte Übersetzung wissenschaftlicher Erkenntnisse“ sowie umgekehrt als „Übersetzung von Problembeschreibungen und Bedarfen aus Wirtschaft, Politik und Gesellschaft in wissenschaftliche bearbeitbare Forschungsfragen“ an Bedeutung. Prädestiniert für solch erfolgreichen Wissenstransfer sind Leibniz-Formate wie *Leibniz fragt*, *Leibniz im Bundestag* oder *Book a Scientist*, an denen sich das LIKAT regelmäßig beteiligt.

Wissenstransfer findet u. a. durch wissenschaftliche Ausbildung, Veranstaltungen wie der Sommer-Workshop Rostock's Eleven und die „Lange Nacht der Wissenschaften“, Pressearbeit, soziale Medien, Besuche von Schüler:innen, der Durchführung von Praktika und der Beteiligung an diversen öffentlichkeitswirksamen Veranstaltungsreihen (Wissenskarawane, Girlsday, Tag der Naturwissenschaften etc.) statt.

Allen Mitarbeiter:innen des LIKAT steht eine Transferbeauftragte zur Seite. Es gibt klare Definitionen, Regeln und Empfehlungen zu Transferaktivitäten in der *Strategie 2023*.



DAS CATALYSIS2SCALE-TECHNIKUM

Arbeitsbeginn	Herbst 2019	Gesamtfläche	> 1000 m ²
Eröffnung	4. Juli 2022	Laborfläche	ca. 200 m ²
		Bürofläche	ca. 150 m ²
Gesamtkosten	ca. 12,5 Mio. €	Versuchshalle	ca. 650 m ²

Mit dem institutseigenen und im Nordosten Deutschlands einzigartigen Transfer-Technikum zur Erprobung und Überleitung von chemischen Forschungsergebnissen aus dem Labor in die Praxis (Pilotmaßstab) schafft das LIKAT ein weiteres Alleinstellungsmerkmal. Die „Kreislaufwirtschaft“ als Gebot künftiger Produktionsabläufe wird die strategische Richtung für Untersuchungen im Technikum vorgeben: Hauptsächlich werden Prozesse untersucht, die CO₂ in wertvolle und nachhaltige Stoffe umsetzen, wie synthetische Treibstoffe und Grundchemikalien.

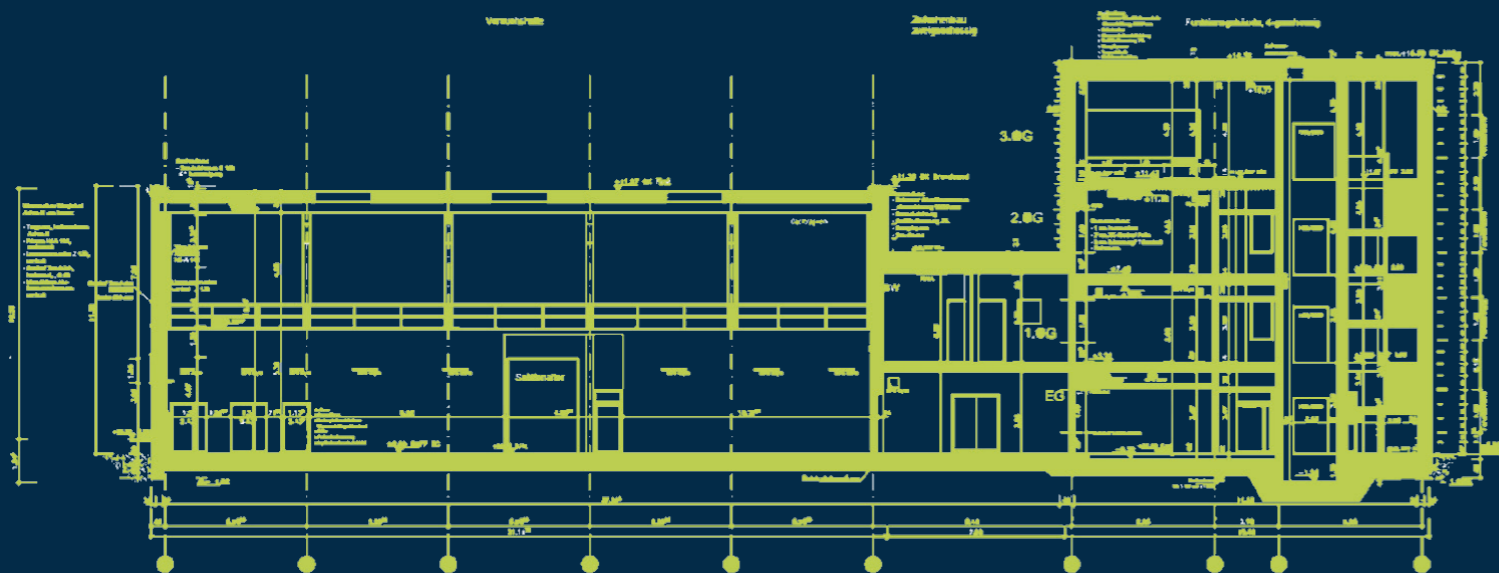
Das Technikum verfügt über ein Funktionsgebäude und eine Gebäudehalle für den Infrastrukturbereich. In der 750 m² großen Halle ist die gleichzeitige Durchführung mehrerer Pilotierungen möglich. Die jeweiligen Projekte/Apparaturen können durch flexible Raumteilsysteme voneinander getrennt werden. Eine abgeteilte Lagerfläche für technische Gase bzw. Gasbündel (Wasserstoff; Synthesegas, CO₂, Methan; ca. 30 m³) wird für Anwendungen mit diesen Substraten vorgehalten. Erzeugte Produkte werden in einem umzäunten Außenlager (überdacht; 50-75 m²) zwischengelagert.

Hauptforschungsthemen

- Abscheidung von CO₂ aus der Atmosphäre und Punktquellen (grüner Kohlenstoff)
- Erzeugung von grünem Wasserstoff und dessen Umwandlung zu (kohlenstoffbasierten) E-Fuels und nachhaltigen Chemikalien
- Etablierung der Forschungsfabrik Wasserstoff MV
- Herstellung und Weiterentwicklungen von innovativen Hochleistungsmaterialien und Katalysatoren (Multi-kg-Maßstab)

Gebäude

- Funktionsgebäude:** 5 Labore, 7 Büros, Messwarte und Lagerfläche für Ausgangsstoffe sowie Produkte
- Versuchshalle:** Geschossfläche von 750 m² für Pilotanlagen mit flexiblen Raumtrennsystemen, begehbaren Abzügen, Autoklavenräumen (für Arbeiten unter hohem Druck, Explosionsschutz integriert)
- Infrastruktur:** Photovoltaik & Stromspeicher, Elektrolyseur & Wasserstoffspeicher, CO₂-Abscheidungsanlage & Speicher, Abluftreinigung



Transfer von Wissen aus dem Labor in die Praxis – Technikum am LIKAT in Rostock am 4. Juli 2022 eröffnet

Von nun an kann am Leibniz-Institut für Katalyse die Anwendungsreife der Erkenntnisse aus dem Labor selbst im Pilotmaßstab überprüft werden. Das neue „Catalysis2Scale“-Technikum wurde nach gut zweieinhalb Jahren Bauzeit am 4. Juli feierlich eröffnet. Es bietet u.a. Versuchsständen für chemische Reaktionen im Kilogramm-Bereich Platz, womit vor allem die Grundlagenforschung näher an die Praxis heranrücken wird. Der Bau wurde mit ca. 12 Mio. Euro vom Bund und Land Mecklenburg-Vorpommern gefördert.

Mit den Möglichkeiten des Technikums wird sich das LIKAT künftig auch an jenen Ausschreibungen für Förderprojekte beteiligen können, die einen Nachweis für das Funktionieren der Laborchemie im Kilogramm-Bereich fordern. Damit wird das LIKAT noch deutlicher als bisher seinem in der Satzung verankerten Auftrag gerecht: Grundlagenforschung an der Spitze zu betreiben und Erkenntnisse daraus einer Anwendung zuzuführen.

Ein Forschungsschwerpunkt des LIKAT liegt in der Entwicklung neuer Katalysatoren und Reaktionen, die eine nachhaltige Chemie auf Basis erneuerbarer Rohstoffe und Energie ermöglichen. Wasserstoff spielt dabei eine besondere Rolle als Energieträger und Rohstoff, sofern er aus erneuerbaren Quellen gewonnen wird. Am Technikum werden beispielsweise Wege einer CO₂-neutralen Erzeugung und Speicherung von grünen Kraft- und Rohstoffen aus Wasserstoff erprobt.

Das Technikum bietet die Möglichkeit, im LIKAT entwickelte Katalysatoren für semiindustrielle Nutzungen verfügbar zu machen. Bisher gibt es bundesweit noch keine Forschungseinrichtung, die das in dieser Größenordnung kann. Mit Hilfe einer Förderung durch das Wirtschaftsministerium Mecklenburg-Vorpommerns versorgt sich das Technikum über eine Photovoltaikanlage mit elektrischer Energie. Grüner Wasserstoff wird über Elektrolyse generiert und CO₂ soll aus der Luft gewonnen werden. Beide Rohstoffe sollen am Technikum in innovativen Verfahren zu e-Fuels sowie zu Energiespeichermitteln und Grundchemikalien, wie Kerosin und Methanol, verarbeitet werden. Sämtliche chemischen Prozesse benötigen neue Katalysatoren,

die am LIKAT entwickelt werden. So gibt es für die CO₂-Abscheidung aus der Atmosphäre bisher noch keine marktreifen Lösungen. Neben den Forschenden des LIKAT werden auch Existenzgründer und etablierte Unternehmen am Technikum Hand in Hand arbeiten können und voneinander profitieren. Zu den ersten Projekten gehört die Entwicklung eines Demonstrators für sogenannte Wasserstoff-Batterien, die das LIKAT gemeinsam mit der APEX Group entwickelt.

Start für die „Forschungsfabrik Wasserstoff MV“ – Nordosten als Vorreiter für Technologien der Energiewende

Mit der Vergabe der ersten Fördergelder an das Leibniz-Institut für Katalyse, LIKAT, startet das Verbundprojekt „Forschungsfabrik Wasserstoff MV“. Gemeinsam mit zwei weiteren Forschungseinrichtungen wird das LIKAT auf der Basis erneuerbarer Energien Verfahren und Technologien für CO₂-neutrale Produktionskreisläufe erkunden, optimieren und zur Anwendungsreife führen. Verbundpartner sind neben dem LIKAT das Rostocker Fraunhofer-Institut für Großstrukturen der Produktionstechnik, IGP, und das Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie, INP Greifswald. Die Forschungsarbeiten werden im LIKAT-eigenen Catalysis2Scale-Technikum erfolgen.



Abb.: Freuen sich über den Fördermittelbescheid für das PtX-Transfer-Projekt am LIKAT: Reinhard Meyer, Wirtschaftsminister Mecklenburg-Vorpommerns und Fördermittelgeber (rechts), Bettina Martin, Wissenschaftsministerin, und Prof. Dr. Matthias Beller, Direktor des LIKAT. Der Bescheid wurde am 4. Juli 2022 zur Eröffnung des neuen Technikums am LIKAT überreicht. (Foto: LIKAT)

Das LIKAT bekennt sich ausdrücklich zu seiner Verantwortung, Chancengleichheit und Geschlechtergleichstellung aktiv zu fördern, und hat dies im Jahr 2012 in seiner Satzung verankert. Gleichstellung meint dabei nicht nur die Ermöglichung gleicher Chancen der Geschlechter, sondern darüber hinaus die Herbeiführung von ausgewogenen Geschlechteranteilen durch bindende Maßnahmen.

Die Gleichstellungsbeauftragte des LIKAT und ihre Stellvertreterin werden seit 2006 im Vierjahresrhythmus gewählt. Maßnahmen zur Vereinbarkeit von Beruf und Familie, wie die Betriebsvereinbarung zur Gleitzeit oder Dual-Career-Maßnahmen, sind wesentliche Bestandteile des Arbeitslebens am Institut.

Während der Schul- und Kita-Schließungen in der Corona-Pandemie waren in den Jahren 2019 und 2020 vor allem junge Eltern herausgefordert.

Mit seiner Forschungsarbeit ist das Institut in wichtige Projekte eingebunden und seinen Partnern verpflichtet. Der Laborbetrieb am LIKAT wurde deshalb weitestgehend aufrecht erhalten, natürlich unter Einhaltung der erforderlichen Maßnahmen für den Gesundheitsschutz. Von Anfang an räumte der Vorstand zusätzlich zur betrieblich vereinbarten Gleitarbeitszeit allen Beschäftigten größtmögliche Flexibilität ein, damit sie ihren familiären Fürsorgepflichten nachkommen können. Soweit gewünscht und möglich, arbeiten die Beschäftigten mobil.

Ebenfalls zur Vereinbarkeit von Beruf und Familie richtete das LIKAT einen sogenannten

Gemeinschaftsfonds ein. Er entstand eigens zur Absicherung von Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern in befristeten Arbeitsverhältnissen während einer Schwangerschaft, Elternzeit oder Pflegezeit und ist mittlerweile fester Bestandteil des Institutshaushaltes. Der Fonds bietet den Beschäftigten Planungssicherheit und bindet sie enger als bisher an das Institut.

Aktuell sind etwa ein Drittel aller Mitarbeitenden am LIKAT Frauen. Bis 2021 war die Verwaltungslleitung durch eine kaufmännische Direktorin besetzt, die als Teil des Vorstandes gemeinsam mit dem wissenschaftlichen Direktor des Instituts eine Doppelspitze bildet. Der Vorstand bestand in den Jahren 2021/2022 zu 60% aus Frauen, ein Anteil, den das LIKAT bewahren möchte. In der Leitung der Forschungsbereiche und Themengruppen sind Frauen hingegen deutlich unterrepräsentiert. Das wollen wir nachhaltig ändern, z.B. durch aktive Rekrutierung neuer Mitarbeiterinnen.

Der Erfolg der Gleichstellungsarbeit am LIKAT wird stetig überprüft. Mindestens einmal im Jahr geben wir geschlechterspezifische Statistiken bekannt. In den regelmäßigen Evaluierungen durch die Leibniz-Gemeinschaft entscheidet u.a. der Stand unserer Gleichstellungsmaßnahmen wesentlich über den Verbleib in der Gemeinschaft und damit über die weitere Förderung. Regelmäßig stellt sich das LIKAT zudem einer Kontrolle im Rahmen eines externen Audits durch das TEQ-Zertifikat. 2020 wurde uns das Zertifikat zum vierten Mal in Folge verliehen.

2021

Promotionen

Budweg, Svenja (Beller), El-Hage, Firas (NG Pospech), Hauptmann, Richy (NG Pospech), Hervochon, Julien (extern) (Beller), Iffländer, Karl Friedrich (Strunk), Kunkel, Benny (Wohlrab), Leonard, David (Beller), Liu, Xin (de Vries), Marx, Maximilian (Beller), Meyer, Tim (Börner), Ngo, Anh Binh (Brückner), Perechodjuk, Anna (Linke), Schneider, Carolin (Beller), Schneidewind, Jacob (Beller), Stefanow, Vivian (de Vries), Täufer, Tobias (NG Pospech), Wang, Fan (Beller), Yuan, Yang (Börner), Zhang, Youcan (Börner)

Master

Krauß, Laura (Linke), Leidecker, Benedict (Börner), Löbner, Sebastian (Wohlrab), Lorenz, Felix (Strunk), Makhmutov, Denis (extern) (Linke), Mollaert, Guillaume (extern) (Beller), Mürdel, Felix (Strunk), Phong Dam, Le Quoc (extern) (Brückner), Schömig, Nadja (Strunk), Trang, Pham Minh (Francke), Wellnitz, Tim (NG Hering-Junghans)

Bachelor

Albrecht, Ole (Francke), Hildebrandt, Laura (Francke), Zach, Luisa (NG Pospech)

2022

Promotionen

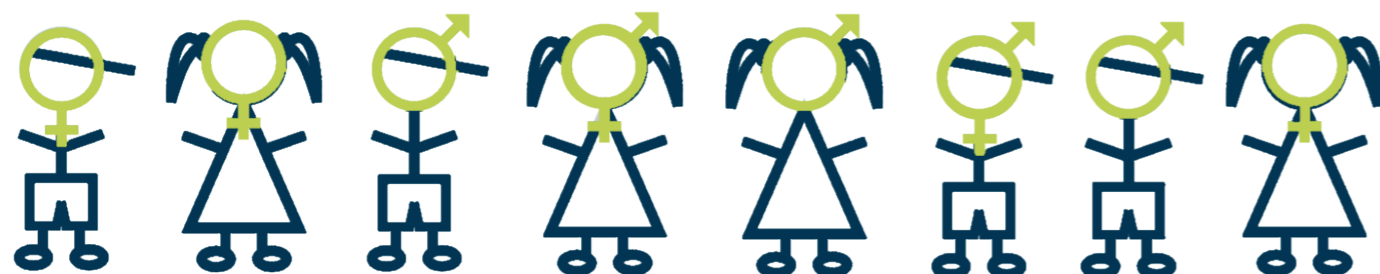
Ai, Han-Jun (Börner), Aydin, Zeynep (Linke), Chandrashekhar, Vishwas (Beller), Dell'Acqua, Andrea (de Vries), Dühren, Ricarda (Beller), Guo, Xuewen (Kragl), Kopf, Sara (Beller), Krake, Everaldo (Baumann), Kucmierczyk, Peter (extern) (Beller), Lang, Moritz (Strunk), Mosrati, Jawaher (Wohlrab), Naliwajko, Pawel (Strunk), Rothe, Julia (Beweries), Skrypnik, Andrey (Linke), Spiegelberg, Brian (de Vries), Sun, Kangkang (extern) (Beller), Wu, Fupeng (Börner), Yang, Qingxin (Linke), Zhao, Fengqian (Börner),

Master

Bossow, Dennis (Strunk), Staude, Josh (Strunk), Rippke, Mirko (Beweries), Schönke, Eric (Francke), Gräber, Leo (Kragl), Nguyen, Duc Manh (extern) (Kragl), Giap Van, Hung (Strunk), Brandt, Sina (Beweries), Gudkova, Aija (Francke), Scherkus, Anton (Francke), Gutgesell, Merlin (Strunk), Thaens, Jannik (Beller), Schlapp, Janina (Beweries), Hollack, Johannes (Strunk), Räsch, Erik (Strunk), Patel, Harvi (Strunk)

Bachelor

Hirte, Paula (extern) (Wohlrab), Lorenzen, Ludwig (Beweries)



GREMIEN, ORGANE, SERVICES & VERTRETUNGEN

Das Leibniz-Institut für Katalyse (LIKAT Rostock) ist eine Forschungseinrichtung der Leibniz-Gemeinschaft und hat die Rechtsform eines eingetragenen Vereins (e.V.). Als ein An-Institut der Universität Rostock ist das LIKAT ein organisatorisch sowie rechtlich eigenständiges Forschungsinstitut mit den Organen Mitgliederversammlung, Kuratorium und Wissenschafts- und Industriebeirat. Die Finanzierung wird paritätisch durch Bund und Länder getragen. Die fachliche Zuständigkeit liegt auf Seiten des Sitzlandes Mecklenburg-Vorpommern beim Ministerium für Bildung, Wissenschaft und Kultur und auf Seiten des Bundes beim Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF).

Mitgliederversammlung

Prof. Dr. Ralf Ludwig *Vorsitz, Uni Rostock*
 Prof. Dr. Norbert Stoll, *Stellv. Vorsitz, Uni Rostock*
 Woldemar Venohr, *BM MV*
 Dr. Wenke Apt, *BMBF*
 Prof. Dr. Wolfgang Schareck, *Uni Rostock*
 Prof. Dr. Reinhard Schomäcker, *TU Berlin*
 Prof. Dr. Karlheinz Drauz
 Prof. Dr. Manfred Hennecke, *BAM (Gast-Wiss.)*
 Dr. Thomas Heidemann, *BASF SE*
 Prof. Dr. Ulrich Bathmann, *Leibniz-Institut für Ostseeforschung Warnemünde*
 Prof. Dr. Uwe Bornscheuer, *Uni Greifswald*

Kuratorium

Woldemar Venohr, *Vorsitz, BM MV*
 Dr. Wenke Apt, *stellv. Vorsitz, BMBF*
 Prof. Dr. Wolfgang Schareck (seit 05/23 Prof. Dr. Elisabeth Prommer), *Uni Rostock*
 Dr. Norbert Richter, *Symrise AG*
 Prof. Dr. Michael Dröscher, *Gesellschaft Deutscher Naturforscher und Ärzte (GDNÄ)*
 Prof. Dr. Manfred Hennecke, *BAM (Gast-Wiss.)*
 Dr. Hans Jürgen Wernicke, *DECHEMA*
 Prof. Dr. Barbara Albert, *TU Darmstadt*
 Dr. Steffen Hasenzahl, *Evonik Operations GmbH*

Wissenschafts- & Industriebeirat

Prof. Dr. Brigitte Voit, *Vorsitz, Leibniz-Institut f. Polymerforschung*
 Prof. Dr. Ivana Fleischer, *stellv. Vorsitz, Universität Tübingen*
 Prof. Dr. Hansjörg Grützmacher, *ETH Zürich*
 Prof. Dr. Martin Muhler, *Ruhr-Universität Bochum*
 Prof. Dr. Richard Fischer, *Technische Universität München*
 Prof. Dr. Rüdiger Beckhaus, *Carl von Ossietzky Universität Oldenburg*
 Prof. Franziska Schönebeck, *RWTH Aachen*
 Dr. Dorit Wolf, *Evonik Operations GmbH*
 Prof. Dr. Aina Nova, *University of Oslo*
 Prof. <dr. Arne Thomas, *Technische Universität Berlin*

Vorstand

Prof. Dr. Matthias Beller, *Wissenschaftlicher Direktor* | Dr. Mirko Kirschowski, *Kaufmännischer Direktor* | Prof. Dr. Robert Francke | Dr. habil. Eszter Bárath
 (bis März 2023 Prof. Dr. Angelika Brückner und Prof. Dr. Jennifer Strunk)

Themenfeld-Sprecher:innen

TF 01 NN (bis 03/2023 Prof. Angelika Brückner), PD Dr. habil. Wolfgang Baumann
 TF 02 Prof. Dr. Evgenii Kondratenko & Prof. Haijun Jiao
 TF 03 Dr. David Linke & Dr.-Ing. Udo Armbruster
 TF 04 Dr. habil. Eszter Bárath & Dr. Ali Abdel-Mageed
 TF 05 Prof. Dr. Robert Francke (bis 05/2023 Prof. Dr. Jennifer Strunk) & Dr. Henrik Junge
 TF 06 Dr. Sebastian Wohlrab & Dr. Bernd Müller
 TF 07 Prof. Dr. Torsten Beweries & Dr. Christian Hering-Junghans

Uni in Leibniz - Assoziierte Hochschulforschungsgruppen

Prof. Dr. Malte Brasholz, *Uni Rostock*
 Prof. Dr. Björn Corzilius, *Uni Rostock*
 Prof. Dr. Marko Hapke, *JKU Linz*
 Prof. Dr. Ralf Ludwig, *Uni Rostock*
 Prof. Dr. Klaus Neymeyr, *Uni Rostock*
 Prof. Dr. Axel Schulz, *Uni Rostock*
 Prof. Dr. Wolfram Seidel, *Uni Rostock*
 Prof. Dr. Thomas Werner, *Uni Paderborn*

Forschungsbereichsleitung

Dr. habil. Eszter Bárath
 Prof. Dr. Matthias Beller
 Prof. Dr. Torsten Beweries
 Prof. Dr. Armin Börner
 Prof. Dr. Robert Francke
 Prof. Dr. Evgenii Kondratenko (bis 03/2023 Prof. Dr. Angelika Brückner)
 Prof. Dr. Udo Kragl
 Dr. David Linke
 Prof. Dr. Jennifer Strunk
 Dr. Sebastian Wohlrab

Servicebereichs- & Stabsleitung

PD Dr. habil. Wolfgang Baumann, *Analytik*
 Dr. Mirko Kirschowski, *Verwaltung*
 Andreas Schupp, *Technik*
 Dr. Sandra Hinze, *Stab*

Personalvertretungen

Dr. Jens Holz, *Betriebsrat* | Dr. Thomas Schareina, *Datenschutz* | Dr. Sandra Hinze, *Gleichstellung* | PD Dr. habil. Wolfgang Baumann, *Ombudsperson* | Anja Simmla, *Schwerbehindertenvertretung* | Thea Mayer, Paul Hünemörder, Carolin Stein, *Doktorand:innen- & PostDoc-Vertretung*

MATRIXSTRUKTUR

Themenfelder	Struktur-Reaktivitäts-Beziehung 01	Kinetik, Theorie & Mechanismen 02	Reaktionstechnik & Implementierung 03	Erneuerbare Rohstoffe 04	Energie & Umwelt 05	Effizientere Prozesse 06	Neue Produkte & Verfahren 07
Forschungsbereiche	NN Wolfgang Baumann	Evgenii Kondratenko Haijun Jiao	David Linke Udo Armbruster	Eszter Baráth Ali Abdel-Mageed	Robert Francke Henrik Junge	Sebastian Wohlrab Bernd Müller	Torsten Beweries Christian Hering-Junghans
Synergien in der Katalyse Eszter Baráth	Sel. Kat. Synthesemethoden Eszter Baráth	Kat. m. phosphorhaltigen Materialien Christian Hering-Junghans Kat. f. nachhaltige Synthesen Jagedeesh Rajenahally	Kat. f. nachhaltige Synthesen Jagedeesh Rajenahally	Sel. Kat. Synthesemethoden Eszter Baráth Kat. m. phosphorhaltigen Materialien Christian Hering-Junghans Kat. f. nachhaltige Synthesen Jagedeesh Rajenahally		Kat. f. nachhaltige Synthesen Jagedeesh Rajenahally	Sel. Kat. Synthesemethoden Eszter Baráth Kat. m. phosphorhaltigen Materialien Christian Hering-Junghans
Angewandte Homogenkatalyse Matthias Beller	Kat. f. Energietechnologien Henrik Junge Nachhal. Redoxreaktionen Kathrin Junge	Theorie der Katalyse Haijun Jiao	Homog. Kat. f. Life Sciences Helfried Neumann Angew. Carbonylierungen Ralf Jackstell Kat. f. Energietechnologien Henrik Junge	Nachhal. Redoxreaktionen Kathrin Junge	Kat. f. Energietechnologien Henrik Junge	Nachhal. Redoxreaktionen Kathrin Junge Homog. Kat. f. Life Sciences Helfried Neumann Angew. Carbonylierungen Ralf Jackstell	Nachhal. Redoxreaktionen Kathrin Junge Homog. Kat. f. Life Sciences Helfried Neumann
Moderne Konzepte der molekularen Katalyse Torsten Beweries	Kat. früher Übergangsmetalle Fabian Reiß Kat. später Übergangsmetalle Torsten Beweries Kat. Funktionalisierungen Jola Pospedh	Kat. früher Übergangsmetalle Fabian Reiß Mech. d. homog. Katalyse Hans-Joachim Drexler					Kat. früher Übergangsmetalle Fabian Reiß Kat. später Übergangsmetalle Torsten Beweries Kat. Funktionalisierungen Jola Pospedh
Hydrierungen & Hydroformylierungen Armin Börner				Katalyse zu Heterocyclen Xiao-Feng Wu		Hydrier. & Hydroformyl. Jens Holz	Katalyse zu Heterocyclen Xiao-Feng Wu Hydrier. & Hydroformyl. Jens Holz
Elektrochemie & Katalyse Robert Francke					Molekulare Elektrochemie Robert Francke	Molekulare Elektrochemie Robert Francke Kat. design f. Elektrosynthese Bernd Müller	Molekulare Elektrochemie Robert Francke Kat. design f. Elektrosynthese Bernd Müller
Methoden für die angew. Katalyse Evgenii Kondratenko	Magn. Res. & Röntgenmeth. Jabor Rabeah Opt. Spektroskopie Christoph Kubis Reaktionsmechanismen Evgenii Kondratenko	Magn. Res. & Röntgenmeth. Jabor Rabeah Opt. Spektroskopie Christoph Kubis Reaktionsmechanismen Evgenii Kondratenko			Magn. Res. & Röntgenmeth. Jabor Rabeah Opt. Spektroskopie Christoph Kubis Reaktionsmechanismen Evgenii Kondratenko	Reaktionsmechanismen Evgenii Kondratenko	Reaktionsmechanismen Evgenii Kondratenko
Biokatalyse & Polymerchemie Udo Kragl			Polymerchemie & Katalyse Esteban Mejia Biokatalyse Udo Kragl	Polymerchemie & Katalyse Esteban Mejia Homogene Kat. mit Erneuerbaren Rohstoffen Sergey Tin			Polymerchemie & Katalyse Esteban Mejia Biokatalyse Udo Kragl
Katalysatorentwicklung & Reaktionstechnik David Linke			Hochdurchsatz-Technologie Uwe Rodemerk Reaktionstechnik David Linke		Reaktionstechnik David Linke	Hochdurchsatz-Technologie Uwe Rodemerk Reaktionstechnik David Linke	Hochdurchsatz-Technologie Uwe Rodemerk Reaktionstechnik David Linke
Heterogene Photokatalyse Jennifer Strunk					Photokat. CO ₂ -Reduktion Tim Peppel Mikroverfahrenstechnik Norbert Steinfeldt	Mikroverfahrenstechnik Norbert Steinfeldt	
Heterogenkatalytische Verfahren Sebastian Wohlrab	Oberflächench. d. angew. Kat. Ali Abdel-Mageed Anorg. Funktionsmaterialien Sebastian Wohlrab		Technologieorient. Verf. Udo Armbruster Oberflächench. d. angew. Kat. Ali Abdel-Mageed Anorg. Funktionsmaterialien Sebastian Wohlrab	Oberflächench. d. angew. Kat. Ali Abdel-Mageed Anorg. Funktionsmaterialien Sebastian Wohlrab	Technologieorient. Verf. Udo Armbruster	Technologieorient. Verf. Udo Armbruster Anorg. Funktionsmaterialien Sebastian Wohlrab	Technologieorient. Verf. Udo Armbruster Anorg. Funktionsmaterialien Sebastian Wohlrab
Nachwuchsgruppen	Moderne organische Chemie Osama El-Sepelgy Theorie d. homog. & Biokat. Milica Feldt	Theorie d. homog. & Biokat. Milica Feldt		Moderne organische Chemie Osama El-Sepelgy Theorie d. homog. & Biokat. Milica Feldt			Theorie d. homog. & Biokat. Milica Feldt
Uni in Leibniz Assoziierte Gruppen	Björn Corzilius · Marko Hapke · Axel Schulz	Ralf Ludwig · Klaus Neymeyr		Thomas Werner	Malte Brasholz · Klaus Neymeyr · Wolfram Seidel	Thomas Werner	Marko Hapke · Axel Schulz · Thomas Werner
Analytik Wolfgang Baumann							Analytik

Als Mitglied der Leibniz-Gemeinschaft steht die Beantwortung gesellschaftsrelevanter Forschungsfragen im Vordergrund unseres Forschungsansatzes. Dieser Ansatz bedarf einer ganzheitlichen und interdisziplinären Herangehensweise. Konsequenterweise werden die operativen Forschungsarbeiten am LIKAT bereichsübergreifend Themenfeldern (TF) zuordnet und spezifische Kompetenzen des gesamten Instituts gebündelt.

Die Neuorganisation der einzelnen Themengruppen zu forschungsbereichsübergreifenden Themenfeldern fördert Transparenz und intensive Kommunikation zwischen allen Forschungsbereichen und Themengruppen. Ziel ist es, eine Informationskultur zu entwickeln, die einen effektiven Informationsaustausch auf allen Ebenen fördert: fachlich, organisatorisch, bei gemeinsamen Projekten und neuen gemeinsamen Antragsstellungen.



PUBLIKATIONEN

2021 | 2022

PUBLIKATIONEN 2021

- [1] S. Abbas, F. Rashid, E. Ulker, S. Zaib, K. Ayub, S. Ullah, M. A. Nadeem, S. Yousuf, R. Ludwig, S. Ali, J. Iqbal, *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics* **2021**, *39*, 1068-1081, Anticancer evaluation of a manganese complex on HeLa and MCF-7 cancer cells: design, deterministic solvothermal synthesis approach, Hirshfeld analysis, DNA binding, intracellular reactive oxygen species production, electrochemical characterization and density functional theory.
- [2] A. M. AbdelMageed, K. Wiese, A. Hauble, J. Bansmann, J. Rabeah, M. Parlinska-Wojtan, A. Brueckner, R. J. Behm, *J. Catal.* **2021**, *401*, 160-173, Steering the selectivity in CO₂ reduction on highly active Ru/TiO₂ catalysts: Support particle size effects.
- [3] S. Adak, J. Rabeah, R. Ranjan, T. S. Khan, M. K. Poddar, R. K. Gupta, T. Sasaki, S. Kumar, A. Bordoloi, C. S. Gopinath, A. Brueckner, R. Bal, *Applied Catalysis A: General* **2021**, *624*, 118305, *In-situ* experimental and computational approach to investigate the nature of active site in low-temperature CO-PROX over CuO_x-CeO₂ catalyst.
- [4] H.-J. Ai, W. Lu, X.-F. Wu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 17178-17184, Ligand-Controlled Regiodivergent Thiocarbonylation of Alkynes toward Linear and Branched α,β -Unsaturated Thioesters.
- [5] H.-J. Ai, X. Ma, Q. Song, X.-F. Wu, *Science China Chemistry* **2021**, *64*, 1630-1659, C-F bond activation under transition-metal-free conditions.
- [6] H.-J. Ai, J. Rabeah, A. Brueckner, X.-F. Wu, *Chemical Communications* **2021**, *57*, 1466-1469, Rhodium-catalyzed carbonylative coupling of alkyl halides with thiols: a radical process faster than easier nucleophilic substitution.
- [7] H.-J. Ai, F. Zhao, H.-Q. Geng, X.-F. Wu, *ACS Catalysis* **2021**, *11*, 3614-3619, Palladium-Catalyzed Thiocarbonylation of Alkenes toward Linear Thioesters.
- [8] L. Al Sheakh, T. Niemann, A. Villinger, P. Stange, D. H. Zaitsau, A. Strate, R. Ludwig, *ChemPhysChem* **2021**, *22*, 1850-1856, Three in One: The Versatility of Hydrogen Bonding Interaction in Halide Salts with Hydroxy-Functionalized Pyridinium Cations.

[9] E. Alberico, T. Leischner, H. Junge, A. Kammer, R. Sang, J. Seifert, W. Baumann, A. Spannenberg, K. Junge, M. Beller, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 13101-13119, HCOOH disproportionation to MeOH promoted by molybdenum PNP complexes.

[10] S. Arlt, K. Blaesing, J. Harloff, K. C. Laatz, D. Michalik, S. Nier, A. Schulz, P. Stoer, A. Stoffers, A. Villinger, *ChemistryOpen* **2021**, *10*, 62-71, Pseudohalogen Chemistry in Ionic Liquids with Non-innocent Cations and Anions.

[11] Z. Aydin, A. Zanina, V. A. Kondratenko, R. Eckelt, S. Bartling, H. Lund, N. Rockstroh, C. R. Kreyenschulte, D. Linke, E. V. Kondratenko, *Catalysis Science & Technology* **2021**, Elucidating the effects of individual components in K₂MnO₄/SiO₂ and water on selectivity enhancement in the oxidative coupling of methane.

[12] S.-T. Bai, G. De Smet, Y. Liao, R. Sun, C. Zhou, M. Beller, B. U. W. Maes, B. F. Sels, *Chem. Soc. Rev.* **2021**, *50*, 4259-4298, Homogeneous and heterogeneous catalysts for hydrogenation of CO₂ to methanol under mild conditions.

[13] Z.-P. Bao, R.-G. Miao, X. Qi, X.-F. Wu, *Chemical Communications* **2021**, *57*, 1955-1958, A novel construction of acetamides from rhodium-catalyzed aminocarbonylation of DMC with nitro compounds.

[14] A. Bara-Estaún, C. L. Lyall, J. P. Lowe, P. G. Pringle, P. C. J. Kamer, R. Franke, U. Hintermair, *Faraday Discussions* **2021**, *229*, 422-442, Multi-nuclear, high-pressure, operando FlowNMR spectroscopic study of Rh/PPH₃-catalyzed hydroformylation of 1-hexene.

[15] S. Barroso, M. Joksich, P. Puylaert, S. Tin, S. J. Bell, L. Donnellan, S. Duguid, C. Muir, P. Zhao, V. Farina, D. N. Tran, J. G. de Vries, *J. Org. Chem.* **2021**, *86*, 103-109, Improvement in the Palladium-Catalyzed Miyaura Borylation Reaction by Optimization of the Base: Scope and Mechanistic Study.

[16] R. Bassi, P. Baeza, C. Sepulveda, I. T. Ghampson, E. Camu, A. Brueckner, U. Bentrup, J. L. G. Fierro, N. Escalona, *Applied Catalysis A: General* **2021**, *625*, 118328, Conversion of levulinic acid over rhenium oxide catalysts: Effect of metal content.

[17] M. Beller, F. Fischer, A. Locher,

H. Neumann, C. Taeschler, F. Ye, S. Zhang, *CHIMIA International Journal for Chemistry* **2021**, *75*, 923-935, Recent Developments and Aspects of Industrial Fluoroalkylation.

[18] F. Bendrath, P. Langer, *Chemistry of Heterocyclic Compounds* **2021**, *57*, 1146-1148, Synthesis and permethylation of methyl 5-(2-chloropyridin-3-yl)pentanoates.

[19] U. Bentrup, C. Kubis, J. Weiß, *Wiley Analytical Science* **2021**, Monitoring of heterogeneous catalyst action by infrared spectroscopy.

[20] K. Blaesing, J. Bresien, S. Maurer, A. Schulz, A. Villinger, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2021**, *2021*, 1913-1920, Trimethylsilyl Pseudohalide Adducts of GaCl₃ and B(C₆F₅)₃.

[21] K. Blaesing, R. Labbow, A. Schulz, A. Villinger, *Angewandte Chemie International Edition* **2021**, *60*, 13798-13802, Silylated Sulfuric Acid: Preparation of a Tris(trimethylsilyl)oxosulfonium [(Me₃Si-O)₃SO]⁺ Salt.

[22] S. A. Bonke, T. Risse, A. Schnegg, A. Brueckner, *Nature Reviews Methods Primers* **2021**, *1*, 33, *In situ* electron paramagnetic resonance spectroscopy for catalysis.

[23] J. Bresien, K. Faust, A. Schulz, *REVIEWS IN INORGANIC CHEMISTRY* **2021**, Bicyclic and tricyclic phosphanes with p-block substituents.

[24] J. Bresien, D. Michalik, A. Schulz, A. Villinger, E. Zander, *Angewandte Chemie International Edition* **2021**, *60*, 1507-1512, Azadiphosphaindane-1,3-diyls: A Class of Resonance-Stabilized Biradicals.

[25] J. Bresien, A. Schulz, L. S. Szych, A. Villinger, R. Wustrack, *Inorg. Chem.* **2021**, *60*, 11591-11598, Insertion of CS₂ into a Phosphorus-Arsenic Single Bond and Investigations on Phosphane Arsanyldithiocarboxylates.

[26] A. Britz, S. I. Bokarev, T. A. Assefa, È. G. Bajnóczi, Z. Németh, G. Vankó, N. Rockstroh, H. Junge, M. Beller, G. Doumy, A. M. March, S. H. Southworth, S. Lochbrunner, O. Kuehn, C. Bressler, W. Gawelda, *ChemPhysChem* **2021**, *22*, 693-700, Site-Selective Real-Time Observation of Bimolecular Electron Transfer in a Photocatalytic System Using L-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy**.

[27] S. Chakraborty, A. A. Almasalma, J. G. de Vries, *Catalysis Science*

& Technology **2021**, *11*, 5388-5411, Recent developments in asymmetric hydroformylation.

[28] S. Chakraborty, N. Rockstroh, S. Bartling, H. Lund, B. H. Mueller, P. C. J. Kamer, J. G. de Vries, *Catalysis Science & Technology* **2021**, *11*, 7608-7616, The solvent determines the product in the hydrogenation of aromatic ketones using unligated RhCl₃ as catalyst precursor.

[29] B. Chen, X.-F. Wu, *Org. Biomol. Chem.* **2021**, *19*, 9654-9658, Manganese(III)-promoted thiocarbonylation of alkylborates with disulfides: synthesis of aliphatic thioesters.

[30] S. Chen, A. M. AbdelMageed, M. Li, S. Cisneros, J. Bansmann, J. Rabeah, A. Brueckner, A. Groß, R. J. Behm, *J. Catal.* **2021**, *400*, 407-420, Electronic metal-support interactions and their promotional effect on CO₂ methanation on Ru/ZrO₂ catalysts.

[31] S. Chen, A. M. AbdelMageed, C. Mochizuki, T. Ishida, T. Murayama, J. Rabeah, M. Parlinska-Wojtan, A. Brueckner, R. J. Behm, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 9022-9033, Controlling the O-Vacancy Formation and Performance of Au/ZnO Catalysts in CO₂ Reduction to Methanol by the ZnO Particle Size.

[32] L. Dai, C. Strelow, T. Kipp, A. Mews, I. Benkenstein, D. Eifler, T. H. Vuong, J. Rabeah, J. McGettrick, R. Lesyuk, C. Klinke, *Chemistry of Materials* **2021**, *33*, 275-284, Colloidal Manganese-Doped ZnS Nanoplatelets and Their Optical Properties.

[33] X. Dai, X. Wang, J. Rabeah, C. Kreyenschulte, A. Brueckner, F. Shi, *Chem. Europ. J.* **2021**, *27*, 16889-16895, Supported Cull Single-Ion Catalyst for Total Carbon Utilization of C₂ and C₃ Biomass-Based Platform Molecules in the N-Formylation of Amines.

[34] F. Dankert, C. von Hänisch, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2021**, *2021*, 2907-2927, Siloxane Coordination Revisited: Si-O Bond Character, Reactivity and Magnetic Molecular Shapes.

[35] L. D. de Almeida, H. Wang, K. Junge, X. Cui, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 550-565, Recent Advances in Catalytic Hydrosilylations: Developments beyond Traditional Platinum Catalysts.

[36] J. De Jesus Silva, N. Bartalucci, B. Jelier, S. Grosslight, T. Gensch, C.

Schunemann, B. Muller, P. C. J. Kamer, C. Coperet, M. S. Sigman, A. Togni, *ChemRxiv* **2021**, 1-15, Development and molecular understanding of a Pd-catalyzed cyanation of aryl boronic acids enabled by high-throughput experimentation and data analysis.

[37] J. G. de Vries, in *Organophosphorus Chemistry: Vol. 50*, The Royal Society of Chemistry, **2021**, pp. 243-270.

[38] A. Dell'Acqua, L. Wille, B. M. Stadler, S. Tin, J. G. de Vries, *Chem. Commun.* **2021**, *57*, 10524-10527, Ozonolysis of α -angelica lactone: a renewable route to malonates.

[39] F. G. Delolo, J. Yang, H. Neumann, E. N. dos Santos, E. V. Gusevs-kaya, M. Beller, *ACS Sust. Chem. Eng.* **2021**, *9*, 5148-5154, Cobalt-Catalyzed Hydroformylation under Mild Conditions in the Presence of Phosphine Oxides.

[40] H. N. Do, N. M. Quan, B. Van Phuc, D. Van Tinh, N. Q. Tien, T. T. Nga, V. T. Nguyen, T. Q. Hung, T. T. Dang, P. Langer, *Synlett* **2021**, *32*, 611-615, Efficient Copper-Catalysed Synthesis of Carbazoles by Double N-Arylation of Primary Amines with 2,2'-Dibromobiphenyl in the Presence of Air.

[41] T. Doan, A. Dang, D. Nguyen, T. Tran, T. H. Vuong, M. T. Le, T. H. Pham, *Viet. J. Chem.* **2021**, *59*, 935-942, The promotion effect of iron to Cu/ZSM-5 catalyst for NO_x removal by NH₃-SCR.

[42] M. V. Doble, L. Obrecht, H.-J. Joosten, M. Lee, H. J. Rozeboom, E. Branigan, J. H. Naismith, D. B. Janssen, A. G. Jarvis, P. C. J. Kamer, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 3620-3627, Engineering Thermostability in Artificial Metalloenzymes to Increase Catalytic Activity.

[43] N. Dropka, K. Boettcher, M. Holena, *Crystals* **2021**, *11*, 1218, Development and Optimization of VGF-GaAs Crystal Growth Process Using Data Mining and Machine Learning Techniques.

[44] N. Dropka, S. Ecklebe, M. Holena, *Crystals* **2021**, *11*, 138, Real Time Predictions of VGF-GaAs Growth Dynamics by LSTM Neural Networks.

[45] S. Du, W.-F. Wang, Y. Song, Z. Chen, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2021**, *23*, 974-978, Palladium-Catalyzed Cascade Carbonylative Synthesis of

1,2,4-Triazol-3-ones from Hydrazonoyl Chlorides and NaN₃.

[46] S. Du, Z. Yang, J. Tang, Z. Chen, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2021**, *23*, 2359-2363, Synthesis of 3H-1,2,4-Triazol-3-ones via NiCl₂-Promoted Cascade Annulation of Hydrazonoyl Chlorides and Sodium Cyanate.

[47] L. Duarte de Almeida, F. Bourriquet, K. Junge, M. Beller, *Adv. Synth. Catal.* **2021**, *363*, 4177-4181, Catalytic Formal Hydroamination of Allylic Alcohols Using Manganese PNP-Pincer Complexes.

[48] R. Duehren, P. Kucmierczyk, R. Jackstell, R. Franke, M. Beller, *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 2026-2030, Ruthenium-catalysed hydroxycarbonylation of olefins.

[49] R. Dühren, P. Kucmierczyk, C. Schneider, R. Jackstell, R. Franke, M. Beller, *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 5777-5780, Ruthenium-catalysed domino hydroformylation-hydrogenation-esterification of olefins.

[50] P. Enders, R. Francke, in *Electrochemistry in Organic Synthesis*, Vol. 2021/5, 1st edition ed. (Ed.: L. Ackermann), Georg Thieme Verlag KG, Stuttgart, **2021**.

[51] S. Espinoza, D. Linke, C. Wulf, S. Schimmler, S. A. Schunk, P. Benner, R. Kraehnert, U. Kragl, R. Palkovits, S. Palkovits, M. Oezaslan, R. Gläser, T. Bönisch, N. Bohmer, M. Resch, M. Beller, O. Deutschmann, U. Bornscheuer, M. Greiner, W. Leitner, W. Kurt, *Bausteine Forschungsdatenmanagement* **2021**, *57-71*, NFDI for Catalysis-Related Sciences: NFDI4Cat.

[52] C. Eyovge, C. S. Deenen, F. Ruiz-Zepeda, S. Bartling, Y. Smirnov, M. Morales-Masis, A. Susarrey-Arce, H. Gardeniers, *ACS Appl. Nano Mat.* **2021**, *4*, 8600-8610, Color Tuning of Electrochromic TiO₂ Nanofibrous Layers Loaded with Metal and Metal Oxide Nanoparticles for Smart Colored Windows.

[53] M. J. G. Fait, A. Spannenberg, E. V. K. D. Linke, *IUCrData* **2021**, *6*, x211332, 1,3-Thiazole-4-carbonitrile.

[54] A. Farhat, A. Yaqoob, R. A. Khera, M. U. Riaz, F. A. Anjum, P. Langer, J. Iqbal, *Optik* **2021**, *242*, 167098, Designing and theoretical characterization of benzodithiophene dione based donor molecules for small molecule organic solar cells.

- [55] F. Fischer, M. Eder, M. Hapke, *Catalysts* **2021**, *11*, 596, CpCo(III) Precatalysts for [2+2+2] Cycloadditions.
- [56] M. Fischer, C. Hering-Junghans, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 10279-10289, On 1,3-phosphaazaallenes and their diverse reactivity.
- [57] M. Fischer, S. Nees, T. Kupfer, J. T. Goettel, H. Braunschweig, C. Hering-Junghans, *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 4106-4111, Isolable Phospha- and Arsaaluminenes.
- [58] M. Fischer, F. Reiß, C. Hering-Junghans, *Chem. Commun.* **2021**, *57*, 5626-5629, Titanocene pnictinidene complexes.
- [59] P. A. Forero Cortés, M. Marx, M. Trose, M. Beller, *Chem Catalysis* **2021**, *1*, 298-338, Heteroleptic copper complexes with nitrogen and phosphorus ligands in photocatalysis: Overview and perspectives.
- [60] R. Francke, *Current Opinion in Electrochemistry* **2021**, *28*, 100719, Recent progress in the electrochemistry of hypervalent iodine compounds.
- [61] R. Francke, A. Prudlik, R. D. Little, in *Electrochemistry in Organic Synthesis*, Vol. 2021/5, 1st edition ed. (Ed.: L. Ackermann), Georg Thieme Verlag KG, Stuttgart, **2021**.
- [62] J. Gao, R. Ma, L. Feng, Y. Liu, R. Jackstell, R. V. Jagadeesh, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 18591-18598, Ambient Hydrogenation and Deuteration of Alkenes Using a Nanostructured Ni-Core-Shell Catalyst.
- [63] Q. Gao, J.-M. Lu, L. Yao, S. Wang, J. Ying, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2021**, *23*, 178-182, Cobalt-Catalyzed Direct C-H Carbonylative Synthesis of Free (NH)-Indolo[1,2-a]quinoxalin-6(5H)-ones.
- [64] Y. Ge, F. Ye, J. Yang, A. Spannenberg, R. Jackstell, M. Beller, *JACS Au* **2021**, *1*, 1257-1265, Palladium-Catalyzed Domino Aminocarbonylation of Alkynols: Direct and Selective Synthesis of Itaconimides.
- [65] Y. Ge, F. Ye, J. Yang, A. Spannenberg, H. Jiao, R. Jackstell, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 22393-22400, Palladium-Catalyzed Cascade Carbonylation to α,β -Unsaturated Piperidones via Selective Cleavage of Carbon-Carbon Triple Bonds.
- [66] H.-Q. Geng, T. Meyer, R. Franke, X.-F. Wu, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 14937-14943, Copper-catalyzed hydroformylation and hydroxymethylation of styrenes.
- [67] H.-Q. Geng, W. Wang, X.-F. Wu, *Catal. Commun.* **2021**, *148*, 106170, Nickel-catalyzed carbonylative synthesis of dihydrobenzofurans.
- [68] H.-Q. Geng, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2021**, *23*, 8062-8066, Copper-Catalyzed Alkoxy carbonylation of Alkyl Iodides for the Synthesis of Aliphatic Esters: Hydrogen Makes the Difference.
- [69] S. H. Gilbert, S. Tin, J. A. Fuentes, T. Fanjul, M. L. Clarke, *Tetrahedron* **2021**, *80*, 131863, Rhodium catalysts derived from a fluorinated phenylphosphine ligand are highly active catalysts for direct asymmetric reductive amination of secondary amines.
- [70] T. Gläsel, B. N. Baumann, M. Hapke, *Chem. Record* **2021**, *21*, 3727-3745, Cobalt Catalysts for [2+2+2] Cycloaddition Reactions: Isolated Precatalysts and in situ Generated Catalysts.
- [71] T. Gläsel, H. Jiao, M. Hapke, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 13434-13444, Synthesis of Phosphinines from Coll-Catalyzed [2+2+2] Cycloaddition Reactions.
- [72] B. Golub, K. Fumino, P. Stange, V. Fossog, R. Hempelmann, D. Ondo, D. Paschek, R. Ludwig, *J. Phys. Chem. B* **2021**, *125*, 4476-4488, Balance Between Contact and Solvent-Separated Ion Pairs in Mixtures of the Protic Ionic Liquid [Et₃NH][MeSO₃] with Water Controlled by Water Content and Temperature.
- [73] V. Goyal, G. Naik, A. Narani, K. Natte, R. V. Jagadeesh, *Tetrahedron* **2021**, *98*, 132414, Recent developments in reductive N-methylation with base-metal catalysts.
- [74] L. Grefe, E. Mejía, *Tetrahedron* **2021**, *98*, 132433, Earth-abundant bimetallic and multimetallic catalysts for Epoxide/CO₂ ring-opening copolymerization.
- [75] L. M. Gronbach, A. Voss, M. Frahm, A. Villinger, J. Bresien, D. Michalik, M. Brasholz, *Org. Lett.* **2021**, *23*, 7834-7838, Lewis Acid-Catalyzed Carbonylation of Uncommon C,N-Diacyliminium Ions: Controlling Regio- and Enantioselectivity.
- [76] J.-P. Guetlein, M. Lubbe, H. Feist, A. Villinger, P. Langer, *Zeitschr. f. Naturforschung B* **2021**, *76*, 1-26, Regioselective synthesis of salicylates and acetophenones by formal [3+3]-cyclocondensations of 3-oxoorthoesters with 1,3-bis(trimethylsilyloxy)-1,3-butadienes.
- [77] S. G. Guillet, G. Pisanò, S. Chakraborty, B. H. Müller, J. G. de Vries, P. C. J. Kamer, C. S. J. Cazin, S. P. Nolan, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2021**, *1*, 3506-3511, A Simple Synthetic Route to [Rh(acac)(CO)(NHC)] Complexes: Ligand Property Diagnostic Tools and Precatalysts.
- [78] B. Guo, E. Otten, J. G. de Vries, in *Metal-Ligand Co-operativity: Catalysis and the Pincer-Metal Platform* (Eds.: G. van Koten, K. Kirchner, M.-E. Moret), Springer International Publishing, Cham, **2021**, pp. 321-377.
- [79] C.-H. Guo, M. Liang, H. Jiao, *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 2529-2539, Cycloaddition mechanisms of CO₂ and epoxide catalyzed by salophen – an organocatalyst free from metals and halides.
- [80] X. Guo, J. Rabeah, R. Sun, D. Wang, E. Mejia, *ACS Appl. Mater. Interf.* **2021**, *13*, 42889-42897, Fluorescent Hybrid Porous Polymers as Sustainable Heterogeneous Photocatalysts for Cross-Dehydrogenative Coupling Reactions.
- [81] P. Gupta, J.-E. Siewert, T. Wellnitz, M. Fischer, W. Baumann, T. Beweries, C. Hering-Junghans, *Dalton Trans.* **2021**, *50*, 1838-1844, Reactivity of phospho-Wittig reagents towards NHCs and NHOs.
- [82] B. Han, J. Zhang, H. Jiao, L. Wu, *Chinese J. Catal.* **2021**, *42*, 2059-2067, Zirconium-hydride-catalyzed site-selective hydroboration of amides for the synthesis of amines: Mechanism, scope, and application.
- [83] P. Hasche, J. Haak, F. Anke, C. Kubis, W. Baumann, H.-J. Drexler, H. Jiao, T. Beweries, *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 3514-3526, Dehydropolymerisation of methylamine borane using highly active rhodium(III) bis(thiophosphinite) pincer complexes: catalytic and mechanistic insights.
- [84] D. He, T. Wang, T. Li, X. Wang, H. Wang, X. Dai, F. Shi, *J. Catal.* **2021**, *400*, 397-406, Efficient hydrogenation catalyst designing via preferential adsorption sites construction towards active copper.
- [85] Y. He, X. Qin, X. He, X.-F. Wu, Z. Yin, *Eur. J. Org. Chem.* **2021**, *2021*, 5831-5834, Practical Synthesis of Halogenated N-Heterocycles via Electrochemical Anodic Oxidation of Unactivated Alkenes.
- [86] Y. Himeda, M. Beller, in *CO₂ Hydrogenation Catalysis* (Ed.: Y. Himeda), WILEY-VCH GmbH, **2021**, pp. 1-12.
- [87] M. T. Hoang, T. D. Pham, T. T. Pham, M. K. Nguyen, D. T. T. Nu, T. H. Nguyen, S. Bartling, B. Van der Bruggen, *Environ. Sci. Poll. Research* **2021**, *28*, 11869-11881, Esterification of sugarcane bagasse by citric acid for Pb²⁺ adsorption: effect of different chemical pretreatment methods.
- [88] Y. Hu, Z. Wei, A. Frey, C. Kubis, C.-Y. Ren, A. Spannenberg, H. Jiao, T. Werner, *ChemSusChem* **2021**, *14*, 363-372, Catalytic, Kinetic, and Mechanistic Insights into the Fixation of CO₂ with Epoxides Catalyzed by Phenol-Functionalized Phosphonium Salts.
- [89] Y.-W. Huo, X. Qi, T. Xu, W. Lu, X.-F. Wu, *ChemistrySelect* **2021**, *6*, 7037-7039, Heterogeneous Carbonylative Sonogashira Reaction Based on Pd/g-C₃N₄ Catalyst by Using Formic Acid as the CO Source.
- [90] Y.-W. Huo, L. Yao, X. Qi, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2021**, *8*, 6974-6978, Nickel-catalyzed reductive aminocarbonylation of vinyl triflates with nitro compounds for the synthesis of α,β -unsaturated amides.
- [91] A. Indra, R. Beltrán-Suito, M. Mueller, R. P. Sivasankaran, M. Schwarze, A. Acharjya, B. Pradhan, J. Hofkens, A. Brueckner, A. Thomas, P. W. Menezes, M. Driess, *ChemSusChem* **2021**, *14*, 306-312, Promoting Photocatalytic Hydrogen Evolution Activity of Graphitic Carbon Nitride with Hole-Transfer Agents.
- [92] S. Iqbal, M. Sharif, P. Langer, *SYNLETT* **2021**, Suzuki-Miyaura Coupling Reactions of Fluorohalobenzenes.
- [93] S. Irshad, F. Ullah, S. Khan, R. Ludwig, T. Mahmood, K. Ayub, *Optics & Laser Technol.* **2021**, *134*, 106570, First row transition metals decorated boron phosphide nanoclusters as nonlinear optical materials with high thermodynamic stability and enhanced electronic properties; A detailed quantum chemical study.
- [94] C. Jacquot, V. Middelkoop, A. Koeckritz, A. Pohar, R. Bienert, S. Kellici, I.-A. Bărăgău, B. Venezia, A. Gavriilidis, B. Likozar, A. M. Beale, *Sustainable Mater. Technol.* **2021**, *30*, e00329, 3D printed catalytic reactors for aerobic selective oxidation of benzyl alcohol into benzaldehyde in continuous multiphase flow.
- [95] Y. Jiao, H. Ma, H. Wang, Y.-W. Li, X.-D. Wen, H. Jiao, *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 191-210, Interactive network of the dehydrogenation of alkanes, alkenes and alkynes – surface carbon hydrogenative coupling on Ru(111).
- [96] R. P. Kaiser, E. F. Krake, L. Backer, J. Urlaub, W. Baumann, N. Handler, H. Buschmann, T. Beweries, U. Holzgrabe, C. Bolm, *Chem. Commun.* **2021**, *57*, 11956-11959, Ball milling – a new concept for predicting degradation profiles in active pharmaceutical ingredients.
- [97] M. Kanai, M. Beller, *Org. Biomol. Chem.* **2021**, *19*, 702-704, Introduction to hybrid catalysis.
- [98] T. Kaper, M. Fischer, H. Thye, D. Geik, M. Schmidtman, R. Beckhaus, S. Doye, *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 6899-6903, Intermolecular Hydroaminoalkylation of Alkynes.
- [99] S. Keller, U. Bentrup, J. Rabeah, A. Brueckner, *J. Catal.* **2021**, Impact of dopants on catalysts containing Ce1-xM_xO_{2-δ} (M = Fe, Sb or Bi) in NH₃-SCR of NO_x – A multiple spectroscopic approach.
- [100] F. Khamespanah, M. Marx, D. B. Crochet, U. R. Pokharel, F. R. Fronczek, A. W. Maverick, M. Beller, *Nat. Commun.* **2021**, *12*, 1997, Oxalate production via oxidation of ascorbate rather than reduction of carbon dioxide.
- [101] S. Khan, M. A. Gilani, S. Munsif, S. Muhammad, R. Ludwig, K. Ayub, *J. Mol. Graph. Modelling* **2021**, *106*, 107935, Inorganic electrides of alkali metal doped Zn₁₂O₁₂ nanocage with excellent nonlinear optical response.
- [102] S. Kirchhecker, A. Dell'Acqua, A. Angenoot, A. Spannenberg, K. Ito, S. Tin, A. Taden, J. G. de Vries, *Green Chem.* **2021**, *23*, 957-965, HMF-glycerol acetals as additives for the debonding of polyurethane adhesives.
- [103] S. Kirchhecker, B. Spiegelberg, J. G. de Vries, in *Iridium Catalysts for Organic Reactions* (Eds.: L. A. Oro, C. Claver), Springer International Publishing, Cham, **2021**, pp. 341-395.
- [104] V. A. Kondratenko, U. Karimova, A. A. Kasimov, E. V. Kondratenko, *Appl. Catal. A* **2021**, *619*, 118143, Methane conversion into synthesis gas over supported well-defined Pt, Rh or Ru nanoparticles: Effects of metal and support.
- [105] S. Kopf, H. Neumann, M. Beller, *Chem. Commun.* **2021**, *57*, 1137-1140, Manganese-catalyzed selective C-H activation and deuteration by means of a catalytic transient directing group strategy.
- [106] S. Kopf, F. Ye, H. Neumann, M. Beller, *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 9768-9773, Ruthenium-Catalyzed Deuteration of Aromatic Carbonyl Compounds with a Catalytic Transient Directing Group.
- [107] B. Kortewille, A. Springer, J. Strunk, *Catal. Commun.* **2021**, *152*, 106286, Verification of impurity-related photocatalytic activity of insulating oxide supports.
- [108] H. Kosslick, Y. Wang, M. F. Ibad, X. Guo, M. Luetgens, S. Lochbrunner, M. Frank, N. Q. Liem, A. Schulz, *Adv. Chem. Eng. Sci.* **2021**, *11*, 290-315, High-performance room-light-driven β -AgVO₃/mpg-C₃N₄ core/shell photocatalyst prepared by mechanochemical method.
- [109] E. F. Krake, W. Baumann, *Molecules* **2021**, *26*, Selective Oxidation of Clopidogrel by Peroxymonosulfate (PMS) and Sodium Halide (NaX) System: An NMR Study.
- [110] B. Kunkel, S. Wohlrab, *Catal. Commun.* **2021**, *155*, 106317, Enhancement and limits of the selective oxidation of methane to formaldehyde over V-SBA-15: Influence of water cofeed and product decomposition.
- [111] A. Kutuzova, T. Dontsova, W. Kwapiński, *Catalysts* **2021**, *11*, 728, Application of TiO₂-based Photocatalysts to Antibiotics Degradation: Cases of Sulfamethoxazole, Trimethoprim and Ciprofloxacin.
- [112] T. Lange, S. Reichenberger, M. Rohe, M. Bartsch, L. Kampermann, J. Klein, J. Strunk, G. Bacher, R. Schloegl, S. Barcikowski, *Adv. Funct. Mater.* **2021**, *31*, 2009323, Alumina-Protected, Durable and Photostable Zinc Sulfide Particles from Scalable Atomic Layer Deposition.
- [113] P. Langer, *Synlett* **2021**, Synthe-

sis and Reactions of 1,3,5-Tri- and 1,3,5,7-Tetracarbonyl Compounds.

[114] P. Langer, *Synlett* **2021**, Domino Reactions of Chromones with Heterocyclic Enamines.

[115] P. Langer, *Synlett* **2021**, Synthesis of Purines and Related Molecules by Cyclization Reactions of Heterocyclic Enamines.

[116] P. Langer, *Synlett* **2021**, Adventures in 1,3-Selenazole Chemistry.

[117] M. T. Le, S. Singh, M. Nguyen-Quang, A. B. Ngo, A. Brueckner, U. Armbruster, *Sci. Total Environ.* **2021**, *784*, 147394, Insight into the properties of MnO₂-Co₃O₄-CeO₂ catalyst series for the selective catalytic reduction of NO_x by C₃H₆ and NH₃.

[118] Z. Le, Y. Zhu, Z.-P. Bao, J. Ying, X.-F. Wu, *Adv. Synth. Catal.* **2021**, *363*, 1878-1881, Palladium-Catalyzed Carbonylative Synthesis of 1,5-Dihydro-2H-pyrrol-2-ones from Propargyl Amines and Benzyl Chlorides.

[119] D. K. Leonard, W. Li, N. Rockstroh, K. Junge, M. Beller, *Catal. Commun.* **2021**, *157*, 106333, Aerobic iron-catalyzed site-selective C(sp³)-C(sp³) bond cleavage in N-heterocycles.

[120] C. Li, C. F. R. Mackenzie, S. A. Said, A. K. Pal, M. A. Haghghatbin, A. Babaei, M. Sessolo, D. B. Cordes, A. M. Z. Slawin, P. C. J. Kamer, H. J. Bolland, C. F. Hogan, E. Zysman-Colman, *Inorg. Chem.* **2021**, *60*, 10323-10339, Wide-Bite-Angle Diphosphine Ligands in Thermally Activated Delayed Fluorescent Copper(I) Complexes: Impact on the Performance of Electroluminescence Applications.

[121] C.-L. Li, H. Wang, X.-F. Wu, in *Carbon Monoxide in Organic Synthesis* (Ed.: B. Gabriele), Wiley VCH, **2021**, pp. 83-112.

[122] W. Li, R. Qu, W. Liu, F. Bourriquen, S. Bartling, N. Rockstroh, K. Junge, M. Beller, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 14033-14038, Copper-catalysed low-temperature water-gas shift reaction for selective deuteration of aryl halides.

[123] Y. Li, C.-L. Zhang, W.-H. Huang, N. Sun, M. Hao, H. Neumann, M. Beller, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 10467-10473, A general strategy for the synthesis of α -trifluoromethyl- and α -perfluoroalkyl- β -lactams via palladium-catalyzed carbonylation.

[124] K. Lindenau, N. Janssen, M. Rippke, H. Al Hamwi, C. Selle, H.-J. Drexler, A. Spannenberg, M. Sawall, K. Neymeyr, D. Heller, F. Reiß, T. Beveries, *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 4034-4050, Mechanistic insights into dehydrocoupling of amine boranes using dinuclear zirconocene complexes.

[125] K. Lindenau, E. Zander, C. Schuenemann, A. Spannenberg, M. V. Andreev, V. V. Burlakov, F. Reiß, T. Beveries, *Organometallics* **2021**, *40*, 3177-3184, Synthesis and Characterization of Dinuclear Allenediide Bridged Hafnocene(IV) Complexes.

[126] C. Liu, X. Wen, Y. Yang, Y.-W. Li, H. Jiao, *J. Phys. Chem. C* **2021**, *125*, 5602-5615, Nonoxidative Conversion of Methane, Ethane, and Ethylene on Flat Ir(111) and Stepped Ir(211) Surfaces.

[127] J. Liu, C. Schneider, J. Yang, Z. Wei, H. Jiao, R. Franke, R. Jackstell, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 371-379, A General and Highly Selective Palladium-Catalyzed Hydroamidation of 1,3-Dienes.

[128] J. Liu, Z. Wei, H. Jiao, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 4593-4605, Catalytic Activity of Aliphatic PNP Ligated Co(III)/I Amine and Amido Complexes in Hydrogenation Reaction—Structure, Stability, and Substrate Dependence.

[129] J.-L. Liu, C.-Y. Hou, X. Qi, X.-F. Wu, *Mol. Catal.* **2021**, *514*, 111842, Palladium-catalyzed carbonylative synthesis of 3-arylquinolin-2(1H)-ones from benzyl chlorides and o-nitrobenzaldehydes.

[130] J.-L. Liu, R.-R. Xu, W. Wang, X. Qi, X.-F. Wu, *Org. Biomol. Chem.* **2021**, *19*, 3584-3588, Palladium-catalyzed carbonylative cyclization of benzyl chlorides with anthranils for the synthesis of 3-arylquinolin-2(1H)-ones.

[131] X. Liu, T. Werner, *Adv. Synth. Catal.* **2021**, *363*, 1096-1104, Selective Construction of C-C and C=C Bonds by Manganese Catalyzed Coupling of Alcohols with Phosphorus Ylides.

[132] X. Liu, T. Werner, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 10590-10597, Indirect reduction of CO₂ and recycling of polymers by manganese-catalyzed transfer hydrogenation of amides, carbamates, urea derivatives, and polyurethanes.

[133] Y. Liu, X. Qi, X.-F. Wu, *J. Org. Chem.* **2021**, *86*, 13824-13832, Palla-

dium-Catalyzed Reductive Aminocarbonylation of Benzylammonium Triflates with o-Nitrobenzaldehydes for the Synthesis of 3-Arylquinolin-2(1H)-ones.

[134] J.-M. Lu, Y.-W. Huo, X. Qi, X.-F. Wu, *Mol. Catal.* **2021**, *509*, 111627, Palladium-catalyzed carbonylative synthesis of quinazolines: Silane act as better nucleophile than amidine.

[135] S.-N. Lu, H. Yang, J. Zhang, Z. Chen, X.-F. Wu, *Adv. Synth. Catal.* **2021**, *363*, 4982-4987, Oxidative Cyclization of Trifluoroacetimidohydrazides with D-Glucose for the Metal-Free Synthesis of 3-Trifluoromethyl-1,2,4-Triazoles.

[136] R. Ludwig, *J. Mol. Liq.* **2021**, *340*, 116882, Towards thermodynamically stable anionic dimers with "anti-electrostatic" hydrogen bonds overcoming like-charge repulsion.

[137] D. Luo, Y. He, X. Yu, F. Wang, J. Zhao, W. Zheng, H. Jiao, Y. Yang, Y. Li, X. Wen, *J. Catal.* **2021**, *395*, 293-301, Intrinsic mechanism of active metal dependent primary amine selectivity in the reductive amination of carbonyl compounds.

[138] C. Medwed, A. Holzinger, S. Hofer, A. Hartmann, D. Michalik, K. Glaser, U. Karsten, *Protoplasma* **2021**, Ecophysiological, morphological, and biochemical traits of free-living *Diplosphaera chodatii* (Trebouxio-phyceae) reveal adaptation to harsh environmental conditions.

[139] T. Meyer, R. Konrath, P. C. J. Kamer, X.-F. Wu, *Asian J. Org. Chem.* **2021**, *10*, 245-250, Pincer Ligand Enhanced Rhodium-Catalyzed Carbonylation of Formaldehyde: Direct Ethylene Glycol Production.

[140] T. Meyer, J. Rabeah, A. Brueckner, X.-F. Wu, *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 5642-5647, Visible-Light-Induced Palladium-Catalyzed Dehydrogenative Carbonylation of Amines to Oxalamides.

[141] R.-G. Miao, X. Qi, X.-F. Wu, *Eur. J. Org. Chem.* **2021**, *2021*, 5219-5221, Synthesis of Aryl Methyl Sulfides from Arylsulfonyl Chlorides with Dimethyl Carbonate as the Solvent and C1 Source.

[142] M. Miola, S. Li, X.-M. Hu, M. Ceccato, A.-E. Surkus, E. Welter, S. U. Pedersen, H. Junge, T. Skrydstrup, M. Beller, K. Daasbjerg, *Adv. Mater. Interf. B*, *8*, 2100067, Highly Scalable

Conversion of Blood Protoporphyrin to Efficient Electrocatalyst for CO₂-to-CO Conversion.

[143] N. Mohebbati, A. Prudlik, A. Scherkus, A. Gudkova, R. Francke, *ChemElectroChem* **2021**, *8*, 3837-3843, TEMPO-Modified Polymethacrylates as Mediators in Electrosynthesis – Redox Behavior and Electrocatalytic Activity toward Alcohol Substrates.

[144] S. Möller, N. Janssen, J. Rüger, H.-J. Drexler, M. Horstmann, F. Bauer, B. Breit, D. Heller, *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 14034-14041, Catalyst Deactivation During Rhodium Complex-Catalyzed Propargylic C-H Activation.

[145] J. Mosrati, A. M. AbdelMageed, T. H. Vuong, R. Grauke, S. Bartling, N. Rockstroh, H. Atia, U. Armbruster, S. Wohlrab, J. Rabeah, A. Brueckner, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 10933-10949, Tiny Species with Big Impact: High Activity of Cu Single Atoms on CeO₂-TiO₂ Deciphered by Operando Spectroscopy.

[146] J. Mosrati, H. Atia, R. Eckelt, T. Huyen Vuong, J. Rabeah, M. Mhamdi, U. Armbruster, *J. Catal.* **2021**, *395*, 325-339, Ta and Mo oxides supported on CeO₂-TiO₂ for the selective catalytic reduction of NO_x with NH₃ at low temperature.

[147] S. Mostafapour, H. Schroeder, C. Kubis, M. Sawall, B. Hemmateenejad, K. Neymeyr, *Chemom. Intell. Lab. Sys.* **2021**, *210*, 104228, A comparative study of MCR-based kinetic analyses for chemical reaction systems with rate constant ambiguities.

[148] N. G. Moustakas, in *Materials Science in Photocatalysis* (Eds.: E. I. García-López, L. Palmisano), *Elsevier*, **2021**, pp. 255-265.

[149] N. G. Moustakas, F. Lorenz, M. Dilla, T. Poppel, J. Strunk, *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 17213-17219, Pivotal Role of Holes in Photocatalytic CO₂ Reduction on TiO₂.

[150] A. Mueller, T. Krahl, J. Radnik, A. Wagner, C. Kreyenschulte, W. S. M. Werner, B. Ritter, E. Kemnitz, W. E. S. Unger, *Surf. Interf. Anal.* **2021**, *53*, 494-508, Chemical in-depth analysis of (Ca/Sr)F₂ core-shell like nanoparticles by X-ray photoelectron spectroscopy with tunable excitation energy.

[151] R. Muhammad, Y. Ali, Y. Messaddeq, H. ur Rashid, M. Antonio Utrera Martines, M. Naveed Umar, S. W.

Khan, A. Riaz, *Catalysts* **2021**, *11*, 357, Conditions Optimization and Physicochemical Analysis of Oil Obtained by Catalytic Pyrolysis of Scrap Tube Rubber Using MgO as Catalyst.

[152] K. Murugesan, A. M. Alenad, A. S. Alshammari, M. Sohail, R. V. Jagadeesh, *Tetrahedron* **2021**, *102*, 132526, Reductive N-alkylation of primary amides using nickel-nanoparticles.

[153] F. Nadolny, U. Bentrup, N. Rockstroh, F. Alschner, W. Reschetilowski, S. Peitz, R. Franke, A. Brueckner, *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 4732-4740, Oligomerization of n-butenes over Ni/SiO₂-Al₂O₃: influence of support modification by steam-treating.

[154] P. Naliwajko, J. Strunk, in *Heterogeneous Photocatalysis* (Ed.: J. Strunk), **2021**, pp. 101-126.

[155] M. Namayandeh Jorabchi, R. Ludwig, D. Paschek, *J. Phys. Chem. B* **2021**, *125*, 1647-1659, Quasi-Universal Solubility Behavior of Light Gases in Imidazolium-Based Ionic Liquids with Varying Anions: A Molecular Dynamics Simulation Study.

[156] E. G. Narváez O, P. M. Bonilla V, D. A. Zurita, C. D. Alcívar L, J. Heredia-Moya, S. E. Ulic, J. L. Jios, O. E. Piro, G. A. Echeverría, P. Langer, *J. Fluorine Chem.* **2021**, *242*, 109717, Synthesis, experimental and theoretical study of novel 2-haloalkyl (-CF₂H, -CCl₂H, -CF₂CF₃)-, 3-bromo and bromomethyl substituted chromones.

[157] K. Natte, R. V. Jagadeesh, in *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*, **2021**, pp. 1-34.

[158] S. Nees, F. Fantuzzi, T. Wellnitz, M. Fischer, J.-E. Siewert, J. T. Goettel, A. Hofmann, M. Härterich, H. Braunschweig, C. Hering-Junghans, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 24318-24325, Cyclo-Dipnictadialanes.

[159] H. Neumann, R. V. Jagadeesh, in *Carbon Monoxide in Organic Synthesis* (Ed.: B. Gabriele), Wiley VCH, **2021**, pp. 113-148.

[160] J. Neumann, R. Ludwig, D. Paschek, *J. Phys. Chem. B* **2021**, *125*, 5132-5144, Hydrogen Bonds between Ions of Opposite and Like Charge in Hydroxyl-Functionalized Ionic Liquids: an Exhaustive Examination of the Interplay between Global and Local Motions and Intermolecular Hydrogen Bond Lifetimes and Kinetics.

[161] J. Neumann, D. Paschek, A. Strate, R. Ludwig, *J. Phys. Chem. B* **2021**, *125*, 281-286, Kinetics of Hydrogen Bonding between Ions with Opposite and Like Charges in Hydroxyl-Functionalized Ionic Liquids.

[162] K. Neymeyr, M. Beese, M. Sawall, *J. Chemom.* **2021**, *35*, e3381, On properties of EFA plots.

[163] K. Neymeyr, M. Sawall, A. C. Olivieri, *J. Chemom.* **2021**, *35*, e3363, On the signal contribution function with respect to different norms.

[164] N.-K. Nguyen, D. L. Tran, T. Q. Hung, T. M. Le, N. T. Son, Q. T. Trinh, T. T. Dang, P. Langer, *Tetrahedron Lett.* **2021**, *68*, 152936, Facile access to bis(indolyl)methanes by copper-catalysed alkylation of indoles using alcohols under air.

[165] N. Ortner, H. Lund, U. Armbruster, S. Wohlrab, E. V. Kondratenko, *Catal. Today* **2021**, Factors affecting primary and secondary pathways in CO₂ hydrogenation to methanol over CuZnIn/MZrO_x (La, Ti or Y).

[166] T. Otroshchenko, G. Jiang, V. A. Kondratenko, U. Rodemerck, E. V. Kondratenko, *Chem. Soc. Rev.* **2021**, *50*, 473-527, Current status and perspectives in oxidative, non-oxidative and CO₂-mediated dehydrogenation of propane and isobutane over metal oxide catalysts.

[167] T. Otroshchenko, Q. Zhang, E. V. Kondratenko, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 14159-14167, Enhancing Propene Formation in the Metathesis of Ethylene with 2-Butene at Close to Room Temperature over MoO_x/SiO₂ through Support Promotion with P, Cl, or S.

[168] T. Otroshchenko, Q. Zhang, E. V. Kondratenko, *Catal. Lett.* **2021**, Room-Temperature Metathesis of Ethylene with 2-Butene to Propene Over MoO_x-Based Catalysts: Mixed Oxides as Perspective Support Materials.

[169] V. Overbeck, A. Appelhagen, R. Roebler, T. Niemann, R. Ludwig, *J. Mol. Liq.* **2021**, *322*, 114983, Rotational correlation times, diffusion coefficients and quadrupolar peaks of the protic ionic liquid ethylammonium nitrate by means of ¹H fast field cycling NMR relaxometry.

[170] V. Overbeck, H. Schroeder, A.-M. Bansa, K. Neymeyr, R. Ludwig, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, *23*, 2663-2675, Insights into the trans-

lational and rotational dynamics of cations and anions in protic ionic liquids by means of NMR fast-field-cycling relaxometry.

[171] R. Paul, S. Chandra Shit, H. Mandal, J. Rabeah, S. S. Kashyap, Y. Nailwal, D. B. Shinde, Z. Lai, J. Mondal, *ACS Appl. Nano Mater.* **2021**, *4*, 11732-11742, Benzothiazole-Linked Metal-Free Covalent Organic Framework Nanostructures for Visible-Light-Driven Photocatalytic Conversion of Phenylboronic Acids to Phenols.

[172] G. B. Peddakasu, V. K. Velisoju, N. Gutta, S. Medak, M. Dumpalappally, V. Akula, *Catal. Today* **2021**, *375*, 112-119, Elucidation of surface active sites by formic acid adsorbed IR studies in the hydrogenation of levulinic acid to valeric acid over rare earth metal doped titania supported nickel catalysts.

[173] T. Peppel, M. Köckerling, *Materials* **2021**, *14*, 2676, New Low-Melting Triply Charged Homoleptic Cr(III)-Based Ionic Liquids in Comparison to Their Singly Charged Heteroleptic Analogues.

[174] T. Peppel, M. Koeckerling, *IUCrData* **2021**, *6*, x210818, 1-Butyl-3-methylimidazolium tribromido(triphenylphosphane-κP)nickelate(II) butan-1-ol hemisolvate.

[175] T. Peppel, M. Koeckerling, *IUCrData* **2021**, *6*, x210562, (S)-Alanine ethyl ester tetracyanidoborate, (C₅H₁₂NO)[B(CN)₄].

[176] P. Piehl, R. Amuso, A. Spannenberg, B. Gabriele, H. Neumann, M. Beller, *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 2512-2517, Efficient methylation of anilines with methanol catalysed by cyclometalated ruthenium complexes.

[177] I. S. Pieta, A. Michalik, E. Kraleva, D. Mrdenovic, A. Sek, E. Wahaczyk, A. Lewalska-Graczyk, M. Krysa, A. Sroka-Bartnicka, P. Pieta, R. Nowakowski, A. Lew, E. M. Serwicka, *Catalysts* **2021**, *11*, 660, Bio-DEE Synthesis and Dehydrogenation Coupling of Bio-Ethanol to Bio-Butanol over Multicomponent Mixed Metal Oxide Catalysts.

[178] M. B. Ponce, S. Parpart, A. Villinger, E. T. Rodríguez, P. Ehlers, P. Langer, *Synthesis* **2021**, *53*, 1237-1246, Synthesis of Pyrrolo[1,2-a][1,6]- and [1,8]naphthyridines by Alkyne-Carbonyl Metathesis.

[179] L. Pudnika, I. Domracheva, T. Werner, R. Zalubovskis, A. Grandane, *Synthesis* **2021**, Base-Free Catalytic Wittig-/Cross-Coupling Reaction Sequence as Short Synthetic Strategy for the Preparation of Highly Functionalized Arylbenzoxepinones.

[180] F. A. Qaraah, S. A. Mahyoub, A. Hezam, Q. A. Drmosh, J. Munyaneza, Q. Yu, G. Xiu, *J. Environm. Chem. Eng.* **2021**, *9*, 106587, One step-polymerization for constructing 1D/2D oxygen doped g-C₃N₄ isotype heterojunctions with highly improved visible-light-driven photocatalytic activity.

[181] J. Radolko, P. Ehlers, P. Langer, *Adv. Synth. Catal.* **2021**, *363*, 3616-3654, Recent Advances in Transition-Metal-Catalyzed Reactions of N-Tosylhydrazones.

[182] S. U. Rahman, H. S. Ali, B. Jafari, S. Zaib, A. Hameed, Y. M. S. A. Al-Kahraman, P. Langer, J. Iqbal, *Computational Biol. Chem.* **2021**, *91*, 107326, Structure-based virtual screening of dipeptidyl peptidase 4 inhibitors and their in vitro analysis.

[183] T. Rahn, P. Langer, *Vietnam J. Chem.* **2021**, *59*, 87-89, Synthesis and Reactions of 1-cyclopropyl-1,3-bis(trimethylsilyloxy)-1,3-butadiene.

[184] Y. Ren, T. Dong, S. Ding, X. Liu, H. Zheng, L. Gao, J. Hu, *ACS Appl. Nano Mater.* **2021**, *4*, 9274-9282, AgBr Nanoparticles Anchored on CdS Nanorods as Photocatalysts for H₂ Evolution.

[185] N. U. D. Reshi, V. B. Saptal, M. Beller, J. K. Bera, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 13809-13837, Recent Progress in Transition-Metal-Catalyzed Asymmetric Reductive Amination.

[186] V. Ritleng, J. G. de Vries, *Molecules* **2021**, *26*, 4076, Ruthenacycles and Iridacycles as Transfer Hydrogenation Catalysts.

[187] U. Rosenthal, *Zeitschr. f. anorg. Allgem. Chem.* **2021**, *647*, 1246-1249, Influence of Impurities on the Productivity in Homogeneous Catalytic Reactions: Trimerization of 1,4-Dimethoxy-but-2-yne and Tetramerization of Propargyl Alcohol.

[188] U. Rosenthal, *ChemistryOpen* **2021**, *10*, 1234-1243, Latest News: Reactions of Group 4 Bis(trimethylsilyl)acetylene Metallocene Complexes and Applications of the Obtained Products.

[189] U. Rosenthal, *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 17751-17760, Take a "Snapshot" of New Syntheses, Reactions, and Characterizations from Unusual Unsaturated Ring Strained Group 4 Metallacycles.

[190] P. Ryabchuk, M. Anwar, S. Dastgir, K. Junge, M. Beller, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2021**, *9*, 10062-10072, From Mobile Phones to Catalysts: E-Waste-Derived Heterogeneous Copper Catalysts for Hydrogenation Reactions.

[191] R. Saleem, A. Farhat, R. A. Khera, P. Langer, J. Iqbal, *Computational Theoret. Chem.* **2021**, *1197*, 113154, Designing of small molecule non-fullerene acceptors with cyanobenzene core for photovoltaic application.

[192] R. Sang, Y. Hu, R. Razaq, R. Jackstell, R. Franke, M. Beller, *Org. Chem. Front.* **2021**, *8*, 799-811, State-of-the-art palladium-catalyzed alkoxy-carboxylations.

[193] N. Sarki, V. Goyal, K. Natte, R. V. Jagadeesh, *Adv. Synth. Catal.* **2021**, *363*, 5028-5046, Base Metal-Catalyzed C-Methylation Reactions Using Methanol.

[194] M. Sawall, C. Fischer, B. J. Elvers, S. Pätsch, K. Neymeyr, *Anal. Chim. Acta* **2021**, *1185*, 339065, A multi-method chemometric analysis in spectroelectrochemistry: Case study on molybdenum mono-dithiolene complexes.

[195] M. Sawall, K. Neymeyr, *J. Chemom.* **2021**, *35*, e3316, On the area of feasible solutions for rank-deficient problems: I. Introduction of a generalized concept.

[196] J. T. Schille, I. Nolte, J. Beck, D. Jilani, C. Roolf, A. Pews-Davtyan, A. Rolfs, L. Henze, M. Beller, B. Brenig, C. Junghanss, E. Schuetz, H. Murua Escobar, *Front. Veterinary Sci.* **2021**, *7*, PDA Indolylmaleimides Induce Anti-Tumor Effects in Prostate Carcinoma Cell Lines Through Mitotic Death.

[197] C. Schneider, R. Franke, R. Jackstell, M. Beller, *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 2703-2707, A direct synthesis of carboxylic acids via platinum-catalysed hydroxycarbonylation of olefins.

[198] C. Schneider, T. Leischner, P. Ryabchuk, R. Jackstell, K. Junge, M. Beller, *CCS Chem.* **2021**, *3*, 512-530, Development of bulk organic chemical processes-history, status, and

opportunities for academic research.

[199] J. Schneidewind, M. A. Argüello Cordero, H. Junge, S. Lochbrunner, M. Beller, *Energy & Environm. Sci.* **2021**, *14*, 4427-4436, Two-photon, visible light water splitting at a molecular ruthenium complex.

[200] J. Schneidewind, H. Olickel, *Chem.-Methods* **2021**, *1*, 87-88, Improving Data Analysis in Chemistry and Biology Through Versatile Baseline Correction.

[201] G. Schnell, H. Lund, S. Bartling, C. Polley, A. Riaz, V. Senz, A. Springer, H. Seitz, *Appl. Surf. Sci.* **2021**, *570*, 151115, Heat accumulation during femtosecond laser treatment at high repetition rate – A morphological, chemical and crystallographic characterization of self-organized structures on Ti₆Al₄V.

[202] M. Schröder, D. Rauber, C. Matt, C. W. M. Kay, *Appl. Mag. Reason.* **2021**, Pentacene in 1,3,5-Tri(1-naphthyl)benzene: A Novel Standard for Transient EPR Spectroscopy at Room Temperature.

[203] A. Schulz, A. Hinz, A. Roelke, A. Villinger, R. Wustrack, *Zeitschr. f. anorg. Allgem. Chem.* **2021**, *647*, 245-257, On New Staudinger Type Reactions of Phosphorus Centered Biradicaloids, [P(μ-NR)]₂ (R = Ter, Hyp), with Ionic and Covalent Azides.

[204] A. Schumann, J. Bresien, M. Fischer, C. Hering-Junghans, *Chem. Commun.* **2021**, *57*, 1014-1017, Aryl-substituted triarsiranes: synthesis and reactivity.

[205] C. H. Schwarz, D. Kraus, E. Alberico, H. Junge, M. Haumann, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2021**, *2021*, 1745-1751, Immobilized Ru-Pincer Complexes for Continuous Gas-Phase Low-Temperature Methanol Reforming-Improving the Activity by a Second Ru-Complex and Variation of Hydroxide Additives.

[206] M. Sebek, H. Atia, N. Steinfeldt, *J. Flow Chem.* **2021**, Synthesis of flow-compatible Ru-Me/Al₂O₃ catalysts and their application in hydrogenation of 1-iodo-4-nitrobenzene.

[207] M. Sebek, T. Peppel, H. Lund, I. Medic, A. Springer, P. Mazierski, A. Zaleska-Medynska, J. Strunk, N. Steinfeldt, *Chem. Eng. J.* **2021**, *425*, 130619, Thermal annealing of ordered TiO₂ nanotube arrays with water vapor-assisted crystallization under a continuous gas flow for superior

photocatalytic performance.

[208] P. Seefeldt, R. Dasi, A. Villinger, M. Brasholz, *ChemPhotoChem* **2021**, *5*, 979-983, Photoredox-Induced Deaminative Radical-Cationic Three-Component Couplings with N-Alkylpyridinium Salts and Alkenes.

[209] Y. Shang, J.-S. Wang, J. Ying, X.-F. Wu, *ChemistrySelect* **2021**, *6*, 12220-12223, Palladium-Catalyzed Carbonylative Synthesis of 1-Acyl-1,5-dihydro-2H-pyrrol-2-ones from Propargyl Amines and Acid Chlorides.

[210] E. A. Shelepova, R. Ludwig, D. Paschek, N. N. Medvedev, *J. Mol. Liq.* **2021**, *329*, 115589, Structural similarity of an ionic liquid and the mixture of the neutral molecules.

[211] H. Shen, M. Yang, L. Hao, J. Wang, J. Strunk, Z. Sun, *Nano Research* **2021**, Photocatalytic nitrogen reduction to ammonia: Insights into the role of defect engineering in photocatalysts.

[212] X. Shi, S. Li, M. Reiß, A. Spannenberg, T. Holtrichter-Roeßmann, F. Reiß, T. Beveries, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 16074-16084, 1-Zirconacyclobuta-2,3-dienes: synthesis of organometallic analogs of elusive 1,2-cyclobutadiene, unprecedented intramolecular C-H activation, and reactivity studies.

[213] J.-E. Siewert, A. Schumann, C. Hering-Junghans, *Dalton Trans.* **2021**, 15111-15117, Phosphine-catalysed reductive coupling of dihalophosphanes.

[214] R. Siewert, R. Ludwig, S. P. Verevkin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, *23*, 25226-25238, Non-covalent interactions in molecular systems: thermodynamic evaluation of the hydrogen bond strength in aminoalcohols.

[215] R. Sikandar, A. Farhat, R. A. Khera, S. Jabeen, A. R. Ayub, P. Langer, J. Iqbal, *J. Mol. Graph. Model.* **2021**, *106*, 107918, Tuning the optoelectronic properties of oligoethynyl silane derivatives and their photovoltaic properties.

[216] C. Sindlinger, C. Hering-Junghans, *Nachr. Chem.* **2021**, *69*, 52-66, Trend report inorganic chemistry: main groups.

[217] B. Singh, M. B. Gawande, A. D. Kute, R. S. Varma, P. Fornasiero, P. McNeice, R. V. Jagadeesh, M. Bel-

ler, R. Zbořil, *Chem. Rev.* **2021**, *121*, 13620-13697, Single-Atom (Iron-Based) Catalysts: Synthesis and Applications.

[218] A. S. Skrypnik, Q. Yang, A. A. Matvienko, V. Y. Bychkov, Y. P. Tulenin, H. Lund, S. A. Petrov, R. Kraehnert, A. Arinchtein, J. Weiss, A. Brueckner, E. V. Kondratenko, *Appl. Catal. B* **2021**, *291*, 120121, Understanding reaction-induced restructuring of well-defined Fe_xO_yC_z compositions and its effect on CO₂ hydrogenation.

[219] M. Sobhani, A. Frey, A. Rettmann, R. Thom, A. Villinger, P. Ehlers, P. Langer, *J. Org. Chem.* **2021**, *86*, 14420-14432, Synthesis of Dibenzotropones by Alkyne-Carbonyl Metathesis.

[220] I. Sokolovs, N. Mohebbati, R. Francke, E. Suna, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 15832-15837, Electrochemical Generation of Hypervalent Bromine(III) Compounds.

[221] Y. Song, L.-C. Wang, S. Du, Z. Chen, X.-F. Wu, *Org. Biomol. Chem.* **2021**, *19*, 6115-6119, The cascade coupling/iodoaminocyclization reaction of trifluoroacetimidoyl chlorides and allylamines: metal-free access to 2-trifluoromethyl-imidazolines.

[222] P. Sprenger, M. Stehle, A. Gaur, J. Weiß, D. Brueckner, Y. Zhang, J. Garrevoet, J.-P. Suuronen, M. Thomann, A. Fischer, J.-D. Grunwaldt, T. L. Sheppard, *ChemCatChem* **2021**, *13*, 2483-2493, Chemical Imaging of Mixed Metal Oxide Catalysts for Propylene Oxidation: From Model Binary Systems to Complex Multicomponent Systems.

[223] B. M. Stadler, J. G. de Vries, *Philos. Trans. Royal Soc. A* **2021**, *379*, 20200341, Chemical upcycling of polymers.

[224] A.-E. Stamate, O. D. Pavel, R. Zăvoianu, I. Brezeştean, A. Ciorîţă, R. Bîrjega, K. Neubauer, A. Koeckritz, I.-C. Marcu, *Materials* **2021**, *14*, 7457, Ce-Containing MgAl-Layered Double Hydroxide-Graphene Oxide Hybrid Materials as Multifunctional Catalysts for Organic Transformations.

[225] V. Stefanow, A. Grandane, M. Eh, J. Panten, A. Spannenberg, T. Werner, *Org. Process Res. Dev.* **2021**, *25*, 89-97, Stereoselective Synthesis of a cis-Cedrane-8,9-diol as a Key Intermediate for an Amber Odorant.

- [226] J. Strunk, Heterogeneous Photocatalysis: From Fundamentals to Applications in Energy Conversion and Depollution, Royal Society of Chemistry, 2021.
- [227] J. Strunk, *Bunsenmagazin* **2021**, 235-237, Saving the world with CO₂ !
- [228] P. Sudarsanam, A. Koeckritz, H. Atia, M. H. Amin, A. Brueckner, *ChemCatChem* **2021**, *13*, 1990-1997, Synergistic Nanostructured MnO_x/TiO₂ Catalyst for Highly Selective Synthesis of Aromatic Imines.
- [229] K. Sun, H. Shan, G.-P. Lu, C. Cai, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *1*, 25188-25202, Synthesis of N-Heterocycles via Oxidant-Free Dehydrocyclization of Alcohols Using Heterogeneous Catalysts.
- [230] Y. Sun, Y. Chen, X. Zhang, Y. He, Z. Qiu, W. Zheng, F. Wang, H. Jiao, Y. Yang, Y. Li, X. Wen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 25538-25545, The Facile Dissociation of Carbon–Oxygen Bonds in CO₂ and CO on the Surface of LaCoSiHx Intermetallic Compound.
- [231] L. S. Szych, K. P. Lüdtke, Y. Pilopp, J. Bresien, A. Villinger, A. Schulz, *Dalton Trans.* **2021**, *50*, 16568-16577, Reaction of potassium phosphide KP(iPr)Ter with chalcogens, heteroalenes and an acyl chloride.
- [232] T. Tauerfer, M. A. Argüello Cordero, A. Petrosyan, A.-E. Surkus, S. Lochbrunner, J. Pospech, *ChemPhotoChem* **2021**, *5*, 999-1003, Photophysical and Electrochemical Properties of Pyrimidopteridine-Based Organic Photoredox Catalysts.
- [233] T. Tauerfer, R. Hauptmann, F. El-Hage, T. S. Mayer, H. Jiao, J. Rabeah, J. Pospech, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 4862-4869, Pyrimidopteridine-Catalyzed Hydroamination of Stilbenes with Primary Amines: A Dual Photoredox and Hydrogen Atom Transfer Catalyst.
- [234] T. Tauerfer, A. Spannenberg, J. Pospech, *IUCrData* **2021**, *6*, x211026, 1-[(Methylsulfonyl)oxy]pyridin-1-ium methanesulfonate.
- [235] J. Tang, J. Zhang, Y. Zhang, Z. Chen, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2021**, Palladium-catalyzed carbonylative synthesis of 5-trifluoromethyl-1,2,4-triazoles from trifluoroacetimidohydrazides and aryl iodides.
- [236] N. Tka, M. A. H. Ayed, M. B. Braiek, M. Jabli, N. Chaaben, K. Alimi, S. Jopp, P. Langer, *Beilstein J. Org. Chem.* **2021**, *17*, 1629-1640, 2,4-Bis(arylethynyl)-9-chloro-5,6,7,8-tetrahydroacridines: synthesis and photophysical properties.
- [237] N. Tka, M. A. H. Ayed, M. B. Braiek, M. Jabli, P. Langer, *Beilstein J. Org. Chem.* **2021**, *17*, 2450–2461, Synthesis and investigation on optical and electrochemical properties of 2,4-diaryl-9-chloro-5,6,7,8-tetrahydroacridines.
- [238] J. Tönjes, L. Longwitz, T. Werner, *Green Chem.* **2021**, *23*, 4852-4857, Poly(methylhydrosiloxane) as a reductant in the catalytic base-free Wittig reaction.
- [239] D. Tuan, A. Dang, D. Nguyen, K. Dinh, P. Dam, T. H. Vuong, M. T. Le, P. T. Huyen, *Catal. Industry* **2021**, *13*, 27-37, Influence of Aluminum Sources on Synthesis of SAPO-34 and NH₃-SCR of NO_x by as-Prepared Cu/SAPO-34 Catalysts.
- [240] F. Ullah, S. Irshad, S. Khan, M. A. Hashmi, R. Ludwig, T. Mahmood, K. Ayub, *J. Phys. Chem. Solids* **2021**, *151*, 109914, Nonlinear optical response of first-row transition metal doped Al₁₂P₁₂ nanoclusters; a first-principles study.
- [241] F. Unglaube, C. R. Kreyenschulte, E. Mejía, *ChemCatChem* **2021**, *13*, 2583-2591, Development and Application of Efficient Ag-based Hydrogenation Catalysts Prepared from Rice Husk Waste.
- [242] F. Unglaube, A. Lammers, C. R. Kreyenschulte, M. Lalk, E. Mejía, *ChemistryOpen* **2021**, *10*, 1244-1250, Preparation, Characterization and Antimicrobial Properties of Nanosized Silver-Containing Carbon/Silica Composites from Rice Husk Waste.
- [243] S. Vali Zade, K. Neymeyr, H. Abdollahi, M. Sawall, *Microchem. J.* **2021**, *160*, 105615, Characterization of the unimodality constraint as an effective chemistry-based condition in resolving of chemical processes data.
- [244] B. Van Phuc, H. N. Do, N. M. Quan, N. N. Tuan, N. Q. An, N. Van Tuyen, H. L. T. Anh, T. Q. Hung, T. T. Dang, P. Langer, *Synlett* **2021**, *32*, 1004-1008, Copper-Catalyzed Synthesis of β- and δ-Carbolines by Double N-Arylation of Primary Amines.
- [245] S. P. Verevkin, S. O. Kondratyev, D. H. Zaitsau, K. V. Zherikova, R. Ludwig, *J. Mol. Liq.* **2021**, *343*, 117547, Quantification and understanding of non-covalent interactions in molecular and ionic systems: Dispersion interactions and hydrogen bonding analysed by thermodynamic methods.
- [246] X. H. Vu, U. Armbruster, *Biomass Conv. Biorefinery* **2021**, Engineering of zeolite crystals for catalytic cracking of triglycerides to renewable hydrocarbon fuels and chemicals: a review.
- [247] X. H. Vu, S. Nguyen, T. T. Dang, U. Armbruster, *Biomass Conv. Biorefinery* **2021**, *11*, 755-766, Improved biofuel quality in catalytic cracking of triglyceride-rich biomass over nanocrystalline and hierarchical ZSM-5 catalysts.
- [248] T. H. Vuong, N. Rockstroh, U. Bentrup, J. Rabeah, J. Knossalla, S. Peitz, R. Franke, A. Brueckner, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 3541-3552, Role of Surface Acidity in Formation and Performance of Active Ni Single Sites in Supported Catalysts for Butene Dimerization: A View inside by Operando EPR and In Situ FTIR Spectroscopy.
- [249] C. Wang, O. El-Sepelgy, *Curr. Opinion Green and Sustainable Chem.* **2021**, *32*, 100547, Reductive depolymerization of plastics catalyzed with transition metal complexes.
- [250] F. Wang, X. Tian, H. Jiao, *J. Phys. Chem. C* **2021**, *125*, 11419-11431, Adsorption of CO, H₂, H₂O, and CO₂ on Fe-, Co-, Ni-, Cu-, Pd-, and Pt-Doped Mo₂C(101) Surfaces.
- [251] J. Wang, X. Dai, H. Wang, H. Liu, J. Rabeah, A. Brueckner, F. Shi, M. Gong, X. Yang, *Nat. Commun.* **2021**, *12*, 6840, Dihydroxyacetone valorization with high atom efficiency via controlling radical oxidation pathways over natural mineral-inspired catalyst.
- [252] J.-S. Wang, Y. Na, J. Ying, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2021**, *8*, 2429-2433, Palladium-catalyzed 1,2-amino carbonylation of 1,3-dienes with (N-SO₂Py)-2-iodoanilines: 2,3-dihydroquinolin-4(1H)-ones synthesis.
- [253] J.-S. Wang, Y. Na, J. Ying, X.-F. Wu, *Mol. Catal.* **2021**, *516*, 111989, Cobalt-catalyzed regiodivergent synthesis of 5- and 6-substituted 1,3-dihydroisobenzofurans via cycloaddition of diynes and alkynes.
- [254] J.-S. Wang, Q. Wang, Y. Zhu, Q. Gao, J. Ying, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2021**, *8*, 4188-4191, Cobalt-catalyzed carbonylative cycloaddition of substituted diynes to access complexed polycyclic compounds.
- [255] J.-S. Wang, J. Ying, X.-F. Wu, *Mol. Catal.* **2021**, *516*, 111956, Cobalt-catalyzed regioselective cycloaddition of unsymmetric diynes and nitriles to form substituted pyridines.
- [256] J. S. Wang, L. Y. Yao, J. Ying, X. L. Luo, X. F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2021**, *8*, 792-798, Palladium-catalyzed directing group assisted and regioselectivity reversed cyclocarbonylation of arylallenes with 2-iodoanilines.
- [257] L.-C. Wang, Y. Zhang, Z. Chen, X.-F. Wu, *Adv. Synth. Catal.* **2021**, *363*, 1417-1426, Palladium-Catalyzed Carbonylative Synthesis of 2-(Trifluoromethyl)quinazolin-4(3H)-ones from Trifluoroacetimidoyl Chlorides and Nitro Compounds.
- [258] S. Wang, J.-S. Wang, Z. Le, J. Ying, X.-F. Wu, *Org. Biomol. Chem.* **2021**, *19*, 7353-7356, Palladium-catalyzed carbonylative synthesis of aryl esters from p-benzoquinones and aryl triflates.
- [259] S. Wang, L. Yao, J. Ying, X.-F. Wu, *Org. Biomol. Chem.* **2021**, *19*, 8246-8249, Palladium-catalyzed carbonylation of iminoquinones and aryl iodides to access aryl p-amino benzoates.
- [260] W. Wang, Z.-P. Bao, X. Qi, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2021**, *23*, 6589-6593, Nickel-Catalyzed One-Pot Carbonylative Synthesis of 2-Mono- and 2,3-Disubstituted Thiochromenones from 2-Bromobenzenesulfonyl Chlorides and Alkynes.
- [261] W. Wang, X. Qi, X.-F. Wu, *Adv. Synth. Catal.* **2021**, *363*, 2541-2545, Palladium-Catalyzed Thiocarbonylation of Benzyl Chlorides with Sulfonyl Chlorides for the Synthesis of Arylacetylethyl Thioesters.
- [262] S. Weber, S. Schäfer, M. Saccocio, N. Ortner, M. Bertmer, K. Seidel, S. Berendts, M. Lerch, R. Gläser, H. Kohlmann, S. A. Schunk, *Catalysts* **2021**, *11*, 334, Mayenite-Based Electride C₁₂A₇e₋: A Reactivity and Stability Study.
- [263] D. Wei, H. Junge, M. Beller, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 6020-6024, An amino acid based system for CO₂ capture and catalytic utilization to produce formates.
- [264] Z. Wei, X. Tian, M. Beller, M. Beller, H. Jiao, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 6908-6919, Mechanisms of Coll and Acid Jointly Catalyzed Domino Conversion of CO₂, H₂, and CH₃OH to Dialkoxymethane: A DFT Study.
- [265] F. Weiner, J. T. Schille, J. I. Hein, X. F. Wu, M. Beller, C. Junghanß, H. Murua Escobar, I. Nolte, *PLoS One* **2021**, *16*, e0256468, Evaluation of combination protocols of the chemotherapeutic agent FX-9 with azacitidine, dichloroacetic acid, doxorubicin or carboplatin on prostate carcinoma cell lines.
- [266] F. Weiner, J. T. Schille, D. Koczan, X. F. Wu, M. Beller, C. Junghanss, M. Hewicker-Trautwein, H. Murua Escobar, I. Nolte, *BMC Cancer* **2021**, *21*, 1088, Novel chemotherapeutic agent FX-9 activates NF-κB signaling and induces G1 phase arrest by activating CDKN1A in a human prostate cancer cell line.
- [267] J. Weiß, C. Rautenberg, T. Rall, C. Kubis, E. Kondratenko, U. Bentrup, A. Brueckner, *Chem. Methods* **2021**, *1*, 307-307, A Versatile Ambient-to-High-Pressure Reaction Transmission Cell for in situ/operando Infrared Spectroscopic Investigations.
- [268] T. Wellnitz, C. Hering-Junghans, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2021**, *2021*, 8-21, Synthesis and Reactivity of Monocyclic Homoleptic Oligophosphanes.
- [269] M. A. Wirth, L. Longwitz, M. Kanwischer, P. Gros, P. Leinweber, T. Werner, *Ecotoxicol. Environm. Safety* **2021**, *225*, 112768, AMPA-¹⁵N – Synthesis and application as standard compound in traceable degradation studies of glyphosate.
- [270] S. Woellner, T. Nowak, G.-R. Zhang, N. Rockstroh, H. Ghanem, S. Rosiwal, A. Brueckner, B. J. M. Etzold, *ChemistryOpen* **2021**, *10*, 600-606, Avoiding Pitfalls in Comparison of Activity and Selectivity of Solid Catalysts for Electrochemical HMF Oxidation.
- [271] S. Wohlrab, E. V. Kondratenko, *Catalysts* **2021**, *11*, 475, Catalytic Concepts for Methane Combustion.
- [272] A. Wotzka, M. Namayandeh Jorabchi, S. Wohlrab, *Membranes* **2021**, *11*, 439, Separation of H₂O/CO₂ Mixtures by MFI Membranes: Experiment and Monte Carlo Study.
- [273] F.-P. Wu, J. Holz, Y. Yuan, X.-F. Wu, *CCS Chem.* **2021**, *3*, 2643-2654, Copper-Catalyzed Carbonylative Synthesis of β-Boryl Amides via Boroamidation of Alkenes.
- [274] F.-P. Wu, X.-F. Wu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 695-700, Ligand-Controlled Copper-Catalyzed Regiodivergent Carbonylative Synthesis of α-Amino Ketones and α-Boryl Amides from Imines and Alkyl Iodides.
- [275] F.-P. Wu, X.-F. Wu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 11730-11734, Copper-Catalyzed Borylative Methylation of Alkyl Iodides with CO as the C1 Source: Advantaged by Faster Reaction of CuH over CuBpin.
- [276] F.-P. Wu, X.-F. Wu, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 10341-10346, Pd/Cu-Catalyzed amide-enabled selectivity-reversed borocarbonylation of unactivated alkenes.
- [277] F.-P. Wu, Y. Yuan, J. Liu, X.-F. Wu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 8818-8822, Pd/Cu-Catalyzed Defluorinative Carbonylative Coupling of Aryl Iodides and gem-Difluoroalkenes: Efficient Synthesis of α-Fluoroalcohols.
- [278] F.-P. Wu, Y. Yuan, X.-F. Wu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 25787-25792, Copper-Catalyzed 1,2-Trifluoromethylation Carbonylation of Unactivated Alkenes: Efficient Access to β-Trifluoromethylated Aliphatic Carboxylic Acid Derivatives.
- [279] C. Wulf, M. Beller, T. Boenisch, O. Deutschmann, S. Hanf, N. Kockmann, R. Kraehnert, M. Oezaslan, S. Palkovits, S. Schimmler, S. A. Schunk, K. Wagemann, D. Linke, *ChemCatChem* **2021**, *13*, 3223-3236, A Unified Research Data Infrastructure for Catalysis Research – Challenges and Concepts.
- [280] J. Xiao, J. J. M. Vequizo, T. Hisatomi, J. Rabeah, M. Nakabayashi, Z. Wang, Q. Xiao, H. Li, Z. Pan, M. Krause, N. Yin, G. Smith, N. Shibata, A. Brueckner, A. Yamakata, T. Takata, K. Domen, *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 10059-10064, Simultaneously Tuning the Defects and Surface Properties of Ta₃N₅ Nanoparticles by Mg–Zr Codoping for Significantly Accelerated Photocatalytic H₂ Evolution.
- [281] J.-X. Xu, F.-P. Wu, X.-F. Wu, *Catal. Commun.* **2021**, *149*, 106205, Rhodium-catalyzed borylative carbon monoxide reduction to gem-diboryl-methane.

[282] T. Xu, P. Lu, S. Wohlrab, W. Chen, A. Springer, X.-F. Wu, W. Lu, *Catal. Commun.* **2021**, *157*, 106328, In situ grown palladium nanoparticles on polyester fabric as easy-separable and recyclable catalyst for Suzuki-Miyaura reaction.

[283] T. Xu, Q. Wang, Z. Yang, L. Yi, J.-S. Wang, W. Lu, J. Ying, X.-F. Wu, *Chem. Asian J.* **2021**, *16*, 2027-2030, Supported Palladium-Catalyzed Carbonylative Synthesis of Diaryl Ketones from Aryl Bromides and Arylboronic Acids.

[284] T. Xu, Y. Zhang, L. Yi, W. Lu, Z. Chen, X.-F. Wu, *Mol. Catal.* **2021**, *513*, 111767, Efficient synthesis of 2-trifluoromethyl-benzimidazoles via cascade annulation of trifluoroacetimidoyl chlorides and amines based on a heterogeneous copper doped g-C₃N₄ catalyst.

[285] H. Yang, S.-N. Lu, Z. Chen, X.-F. Wu, *J. Org. Chem.* **2021**, *86*, 4361-4370, Silver-Mediated [3 + 2] Cycloaddition of Azomethine Ylides with Trifluoroacetimidoyl Chlorides for the Synthesis of 5-(Trifluoromethyl)imidazoles.

[286] H. Yang, S.-N. Lu, Y. Song, Z. Chen, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2021**, Copper-mediated [3 + 2] cycloaddition of trifluoroacetimidoyl chlorides and N-isocyanoinotriphenylphosphorane for the synthesis of 3-trifluoromethyl-1,2,4-triazoles.

[287] H. Yang, H. Wang, L. Wei, Y. Yang, Y.-W. Li, X.-d. Wen, H. Jiao, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, *23*, 26392-26400, Simple mechanisms of CH₄ reforming with CO₂ and H₂O on a supported Ni/ZrO₂ catalyst.

[288] H. Yang, T.-H. Xu, S.-N. Lu, Z. Chen, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2021**, *8*, 3440-3445, Synthesis of 5-trifluoromethyl-1,2,3-triazoles via base-mediated cascade annulation of diazo compounds with trifluoroacetimidoyl chlorides.

[289] J. Yang, A. Acharjya, M.-Y. Ye, J. Rabeah, S. Li, Z. Kochovski, S. Youk, J. Roeser, J. Grüneberg, C. Penschke, M. Schwarze, T. Wang, Y. Lu, R. van de Krol, M. Oschatz, R. Schomäcker, P. Saalfrank, A. Thomas, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 19797-19803, Prototated Imine-Linked Covalent Organic Frameworks for Photocatalytic Hydrogen Evolution.

[290] J. Yang, J. Liu, Y. Ge, W. Huang,

F. Ferretti, H. Neumann, H. Jiao, R. Franke, R. Jackstell, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 9527-9533, Efficient Palladium-Catalyzed Carbonylation of 1,3-Dienes: Selective Synthesis of Adipates and Other Aliphatic Diesters.

[291] J. Yang, S. Ren, B. Su, Y. Zhou, G. Hu, L. Jiang, J. Cao, W. Liu, L. Yao, M. Kong, J. Yang, Q. Liu, *Catal. Lett.* **2021**, *151*, 2964-2971, Insight into N₂O Formation Over Different Crystal Phases of MnO₂ During Low-Temperature NH₃-SCR of NO.

[292] Q. Yang, A. Skrypnik, A. Matvienko, H. Lund, M. Holena, E. V. Kondratenko, *Appl. Catal. B* **2021**, *282*, 119554, Revealing property-performance relationships for efficient CO₂ hydrogenation to higher hydrocarbons over Fe-based catalysts: Statistical analysis of literature data and its experimental validation.

[293] L. Yao, Y. Shang, J.-S. Wang, A. Pan, J. Ying, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2021**, *8*, 1926-1929, Palladium-catalyzed carbonylative cyclization of 2-alkynylanilines and aryl iodides to access N-acyl indoles.

[294] L. Yao, J. Ying, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2021**, *8*, 6541-6545, Nickel-catalyzed cascade carbonylative synthesis of N-benzoyl indoles from 2-nitroalkynes and aryl iodides.

[295] F. Ye, Y. Ge, A. Spannenberg, H. Neumann, L.-W. Xu, M. Beller, *Nat. Commun.* **2021**, *12*, 3257, 3,3-Difluoroallyl ammonium salts: highly versatile, stable and selective gem-difluoroallylation reagents.

[296] Y. Yuan, F.-P. Wu, A. Spannenberg, X.-F. Wu, *Sci. China Chem.* **2021**, *64*, 2142-2153, Cu/Pd-catalyzed borocarbonylative trifunctionalization of alkynes and allenes: synthesis of β -geminal-diboryl ketones.

[297] Y. Yuan, F.-P. Wu, X.-F. Wu, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 13777-13781, Copper-catalyzed borofunctionalization of styrenes with B₂pin₂ and CO.

[298] Y. Yuan, F. Zhao, X.-F. Wu, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 12676-12681, Copper-catalyzed enantioselective carbonylation toward α -chiral secondary amides.

[299] D. H. Zaitsau, R. Ludwig, S. P. Verevkin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, *23*, 7398-7406, Determination of the dispersion forces in the gas phase structures of ionic liquids using

exclusively thermodynamic methods.

[300] B. Zhang, D. Peña Fuentes, A. Boerner, *ChemTexts* **2021**, *8*, 2, Hydroformylation.

[301] G. Zhang, Y. Cheng, M. Beller, F. Chen, *Adv. Synth. Catal.* **2021**, *363*, 1583-1596, Direct Carboxylation with Carbon Dioxide via Cooperative Photoredox and Transition-Metal Dual Catalysis.

[302] J. Zhang, J. Tang, Z. Chen, X.-F. Wu, *Adv. Synth. Catal.* **2021**, *363*, 3060-3069, Synthesis of 5-Trifluoromethyl-1,2,4-Triazoles via Metal-Free Annulation of Trifluoroacetimidohydrazides and Methyl Ketones.

[303] J. Zhang, J. Tang, Z. Chen, X.-F. Wu, *Chinese J. Chem.* **2021**, *39*, 3443-3447, Elemental Sulfur and Dimethyl Sulfoxide-Promoted Oxidative Cyclization of Trifluoroacetimidohydrazides with Methylhetarenes for the Synthesis of 3-Hetaryl-5-trifluoromethyl-1,2,4-triazoles.

[304] J. Zhang, T.-H. Xu, Z. Chen, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2021**, *8*, 4490-4495, Metal-free oxidative cyclization of trifluoroacetimidohydrazides with methylhetarenes: a facile access to 3-hetaryl-5-trifluoromethyl-1,2,4-triazoles.

[305] Y. Zhang, H.-Q. Geng, X.-F. Wu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 24292-24298, Palladium-Catalyzed Perfluoroalkylative Carbonylation of Unactivated Alkenes: Access to β -Perfluoroalkyl Esters.

[306] Y. Zhang, H.-Q. Geng, X.-F. Wu, *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 17682-17687, Palladium-Catalyzed Carbonylative Four-Component Synthesis of β -Perfluoroalkyl Amides.

[307] D. Zhao, H. Lund, U. Rodemerck, D. Linke, G. Jiang, E. V. Kondratenko, *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 1386-1394, Revealing fundamentals affecting activity and product selectivity in non-oxidative propane dehydrogenation over bare Al₂O₃.

[308] D. Zhao, X. Tian, D. E. Doronkin, S. Han, V. A. Kondratenko, J.-D. Grunwaldt, A. Perechodjuk, T. H. Vuong, J. Rabeah, R. Eckelt, U. Rodemerck, D. Linke, G. Jiang, H. Jiao, E. V. Kondratenko, *Nature* **2021**, *599*, 234-238, In situ formation of ZnO_x species for efficient propane dehydrogenation.

[309] F. Zhao, H.-J. Ai, X.-F. Wu, *Chinese J. Chem.* **2021**, *39*, 927-932,

Radical Carbonylation under Low CO Pressure: Synthesis of Esters from Activated Alkylamines at Transition Metal-Free Conditions.

[310] F. Zhao, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2021**, *8*, 670-675, Deaminative carbonylative thioesterification of activated alkylamines with thiophenols under transition-metal-free conditions.

[311] F. Zhao, X.-F. Wu, *J. Catal.* **2021**, *397*, 201-204, The first bismuth self-mediated oxidative carbonylative coupling reaction via BiIII/BiV redox intermediates.

[312] F. Zhao, X.-F. Wu, *Organometallics* **2021**, *40*, 2400-2404, Sulfonylation of Bismuth Reagents with Sulfinates or SO₂ through BiIII/BiV Intermediates.

[313] J. Zhao, Y. He, F. Wang, Y. Yang, W. Zheng, C. Huo, H. Jiao, Y. Yang, Y. Li, X. Wen, *J. Catal.* **2021**, *404*, 244-249, A recyclable CoGa intermetallic compound catalyst for the hydroformylation reaction.

[314] Y. Zheng, M. Dong, E. Qu, J. Bai, X.-F. Wu, W. Li, *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 16219-16224, Pd-Catalyzed Carbonylative Synthesis of 4H-Benzo[d][1,3]Oxazin-4-Ones Using Benzene-1,3,5-Triyl Triformate as the CO Source.

[315] V. V. Zhivonitko, H. Beer, D. O. Zakharov, J. Bresien, A. Schulz, *ChemPhysChem* **2021**, *22*, 813-817, Hyperpolarization Effects in Parahydrogen Activation with Pnictogen Biradicaloids: Metal-free PHIP and SABRE.

[316] J. Zhu, F. Cannizzaro, L. Liu, H. Zhang, N. Kosinov, I. A. W. Filot, J. Rabeah, A. Brueckner, E. J. M. Hensen, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 11371-11384, Ni-In Synergy in CO₂ Hydrogenation to Methanol.

[317] J. Zhu, P. Langer, C. Ulrich, J. Eberle, *Antioxidants* **2021**, *10*, 1514, Crucial Role of Reactive Oxygen Species (ROS) for the Proapoptotic Effects of Indirubin Derivatives in Cutaneous SCC Cells.

[318] Y. Zhu, Z. Le, J. Ying, X.-F. Wu, *J. Organomet. Chem.* **2021**, *956*, 122115, Palladium-catalyzed carbonylation of propargyl diols with primary amines for the synthesis of functionalized acids.

Publikationen 2021 | 2022

PUBLIKATIONEN 2022

[1] S. Abbas, S. Afzal, H. Nadeem, D. Hussain, P. Langer, J. Sévigny, Z. Ashraf, J. Iqbal, *Bioorg. Chem.* **2022**, *118*, 105456, Synthesis, characterization and biological evaluation of thiadiazole amide derivatives as nucleoside triphosphate diphosphohydrolases (NTPDases) inhibitors.

[2] A. M. Abdel-Mageed, S. Wohlrab, *Catalysts* **2022**, *12*, 16, Review of CO₂ Reduction on Supported Metals (Alloys) and Single-Atom Catalysts (SACs) for the Use of Green Hydrogen in Power-to-Gas Concepts.

[3] H. Abed, J. Mosrati, A. M. Abdel-Mageed, S. Cisneros, T. Huyen Vuong, N. Rockstroh, S. Bartling, S. Wohlrab, A. Brueckner, J. Rabeah, *ChemCatChem* **2022**, *14*, e202200923, Preferential CO Oxidation on a Highly Active Cu Single Atom Catalyst Supported by Ce-TiO_x.

[4] H.-J. Ai, M. Beller, X.-F. Wu, *Nat. Sci. Rev.* **2022**, *9*, Palladium-catalysed efficient synthesis of primary alkyl halides from terminal and internal alkenes.

[5] H.-J. Ai, B. N. Leidecker, P. Dam, C. Kubis, J. Rabeah, X.-F. Wu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202211939, Iron-Catalyzed Alkoxy carbonylation of Alkyl Bromides via a Two-Electron Transfer Process.

[6] H.-J. Ai, Y. Yuan, X.-F. Wu, *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 2481-2486, Ruthenium pincer complex-catalyzed heterocycle compatible alkoxy carbonylation of alkyl iodides: substrate keeps the catalyst active.

[7] A. S. H. Kumar, S. K. Al-Dawery, D. S. M. Vishnu, V. N. Kalevaru, P. S. S. Prasad, *Eng. Sci.* **2022**, *20*, 209-217, Low Temperature Conversion of Ethane to Ethylene Using Zirconia Supported Molybdenum Oxide Catalysts.

[8] A. S. Al-Fatesh, S. O. Kasim, A. A. Ibrahim, A. I. Osman, A. E. Abasaheed, H. Atia, U. Armbruster, L. Frusteri, A. bin Jumah, Y. Mohammed Alanazi, A. H. Fakeeha, *Fuel* **2022**, *330*, 125523, Greenhouse gases utilization via catalytic reforming with Sc promoted Ni/SBA-15.

[9] A. S. Al-Fatesh, R. Kumar, S. O. Kasim, A. A. Ibrahim, A. H. Fakeeha, A. E. Abasaheed, H. Atia, U. Armbruster, C. Kreyenschulte, H. Lund, S. Bartling, Y. Ahmed Mohammed, Y. A. Albaq-maa, M. S. Lanre, M. L. Chaudhary,

F. Almubaddel, B. Chowdhury, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2022**, *61*, 164-174, Effect of Cerium Promoters on an MCM-41-Supported Nickel Catalyst in Dry Reforming of Methane.

[10] L. Al-Sheakh, S. Fritsch, A. Appelhagen, A. Villinger, R. Ludwig, *Molecules* **2022**, *27*, 366, Thermodynamically Stable Cationic Dimers in Carboxyl-Functionalized Ionic Liquids: The Paradoxical Case of „Anti-Electrostatic“ Hydrogen Bonding.

[11] M. Al-Yusufi, N. Steinfeldt, R. Eckelt, H. Atia, H. Lund, S. Bartling, N. Rockstroh, A. Koeckritz, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2022**, *10*, 4954-4968, Efficient Base Nickel-Catalyzed Hydrogenolysis of Furfural-Derived Tetrahydrofurfuryl Alcohol to 1,5-Pentanediol.

[12] K. Alkanad, A. Hezam, N. Al-Zaqri, M. A. Bajiri, G. Alnaggar, Q. A. Drmish, H. A. Almkhlifi, L. Neratur Krishnappagowda, *ACS Omega* **2022**, *7*, 38686-38699, One-Step Hydrothermal Synthesis of Anatase TiO₂ Nanotubes for Efficient Photocatalytic CO₂ Reduction.

[13] G. Alnaggar, A. Hezam, M. A. Bajiri, Q. A. Drmish, S. Ananda, *Chemosphere* **2022**, *303*, 134562, Sulfate radicals induced from peroxy monosulfate on electrochemically synthesized TiO₂-MoO₃ heterostructure with Ti-O-Mo bond charge transfer pathway for potential organic pollutant removal under solar light irradiation.

[14] E. Ammon, A. Villinger, P. Ehlers, P. Langer, *Synlett* **2022**, *33*, 1633-1636, Synthesis of Spirocyclic Diindenol[1,2-b:2',1'-d]thiophenes.

[15] T. An, C. Liu, Y. Yin, X.-F. Wu, Z. Yin, *Organometallics* **2022**, *41*, 1731-1737, Palladium-Catalyzed Denitrogenative Carbonylation of Benzotriazoles with Cr(CO)₆ as the Carbonyl Source.

[16] T. Andersons, M. Sawall, K. Neymeyr, *J. Mathematical Chem.* **2022**, *60*, 1750-1780, Analytical enclosure of the set of solutions of the three-species multivariate curve resolution problem.

[17] A. Arinchtein, M.-Y. Ye, Q. Yang, C. Kreyenschulte, A. Wagner, M. Frisch, A. Brueckner, E. Kondratenko, R. Kraehnert, *ChemCatChem* **2022**, *14*, e202200240, Dynamics of Reaction-Induced Changes of Model-Type Iron Oxide Phases in the CO₂-Fi-

scher-Tropsch-Synthesis.

[18] Z. Aydin, A. Zanina, V. A. Kondratenko, J. Rabeah, J. Li, J. Chen, Y. Li, G. Jiang, H. Lund, S. Bartling, D. Linke, E. V. Kondratenko, *ACS Catal.* **2022**, *12*, 1298-1309, Effects of N₂O and Water on Activity and Selectivity in the Oxidative Coupling of Methane over Mn–Na₂WO₄/SiO₂: Role of Oxygen Species.

[19] Z.-P. Bao, Y. Zhang, X.-F. Wu, *J. Catal.* **2022**, *413*, 163-167, Palladium-catalyzed four-component difluoroalkylative carbonylation of aryl olefins and ethylene.

[20] Z.-P. Bao, Y. Zhang, X.-F. Wu, *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 9387-9391, Palladium-catalyzed difluoroalkylative carbonylation of styrenes toward difluoropentanedioates.

[21] A. Bara-Estaún, C. L. Lyall, J. P. Lowe, P. G. Pringle, P. C. J. Kamer, R. Franke, U. Hintermair, *Catal. Sci. Technol.* **2022**, *12*, 5501-5516, Mapping catalyst activation, turnover speciation and deactivation in Rh/PPh₃-catalysed olefin hydroformylation.

[22] H. Beer, A. Linke, J. Bresien, G. Mlostoń, M. Celeda, A. Villinger, A. Schulz, *Inorg. Chem.* **2022**, *61*, 2031-2038, Synthesis of Bicyclic P,S-Heterocycles via the Addition of Thio-ketones to a Phosphorus-Centered Open-Shell Singlet Biradical.

[23] H. Beer, A. Linke, J. Bresien, A. Villinger, A. Schulz, *Inorg. Chem. Front.* **2022**, *9*, 2659-2667, A cyclic thioketone as biradical heterocyclopentane-1,3-diyl: synthesis, structure and activation chemistry.

[24] M. Beller, M. Bender, U. T. Bornscheuer, S. Schunk, *Chem. Ing. Tech.* **2022**, *94*, 1559-1559, Catalysis – Far from Being a Mature Technology.

[25] A. Binh Ngo, T. Huyen Vuong, H. Atia, J. Weiß, J. Rabeah, U. Armbruster, A. Brueckner, *ChemCatChem* **2022**, n/a, e202200175, Role of V and W Sites in V₂O₅–WO₃/TiO₂ Catalysts and Effect of Formaldehyde during NH₃–SCR of NO_x.

[26] M. Blanco Ponce, M. I. Mangione, R. Hermosilla Espinosa, E. Torres Rodríguez, P. Ehlers, P. Langer, *Eur. J. Org. Chem.* **2022**, *2022*, e202101306, Synthesis and Properties of Thieno[3,2-f]isoquinolines and Benzothieno[3,2-f]isoquinolines.

[27] G. Boeck, H. Christen, T. Peppel

in Genealogy and Social History: Understanding the Global Past through Family Case Studies (Ed.: E. Martone), Cambridge Scholars Publishing **2022**, pp. 289-320.

[28] A. Boerner, J. Zeidler, *Chemie der Biologie*, Springer Spektrum Berlin, Heidelberg, **2022**.

[29] B. Boga, N. Steinfeldt, N. G. Moustakas, T. Peppel, H. Lund, J. Rabeah, Z. Pap, V.-M. Cristea, J. Strunk, *Catalysts* **2022**, *12*, 978, Role of SrCO₃ on Photocatalytic Performance of SrTiO₃-SrCO₃ Composites.

[30] N. F. Both, A. Spannenberg, K. Junge, M. Beller, *Organometallics* **2022**, *41*, 1797-1805, Low-Valent Molybdenum PNP Pincer Complexes as Catalysts for the Semihydrogenation of Alkynes.

[31] F. Bourriquen, J. Hervochon, R. Qu, S. Bartling, N. Rockstroh, K. Junge, C. Fischmeister, M. Beller, *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 8842-8845, Diastereoselective hydrogenation of arenes and pyridines using supported ruthenium nanoparticles under mild conditions.

[32] F. Bourriquen, N. Rockstroh, S. Bartling, K. Junge, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202202423, Manganese-Catalysed Deuterium Labelling of Anilines and Electron-Rich (Hetero)Arenes.

[33] J. Bresien, K. Faust, A. Schulz, *Rev. Inorg. Chem.* **2022**, *42*, 1-20, Bicyclic and tricyclic phosphanes with p-block substituents.

[34] X. Cao, C. Liu, T. Zhang, Q. Xu, D. Zhang, X. Liu, H. Jiao, X. Wen, Y. Yang, Y. Li, J. W. Niemantsverdriet, J. Zhu, *J. Phys. Chem. C* **2022**, *126*, 10035-10044, Revisiting Oxygen Adsorption on Ir(100).

[35] J. H. Carter, A. M. Abdel-Mageed, D. Zhou, D. J. Morgan, X. Liu, J. Bansmann, S. Chen, R. J. Behm, G. J. Hutchings, *ACS Nano* **2022**, *16*, 15197-15205, Reversible Growth of Gold Nanoparticles in the Low-Temperature Water–Gas Shift Reaction.

[36] S. Chakraborty, K. Konieczny, B. H. Mueller, A. Spannenberg, P. C. J. Kamer, J. G. de Vries, *Catal. Sci. Technol.* **2022**, *12*, 1392-1399, Betti base derived P-stereogenic phosphine-diamidophosphite ligands with a single atom spacer and their application in asymmetric catalysis.

[37] V. G. Chandrashekar, W. Baumann, M. Beller, R. V. Jagadeesh, *Science* **2022**, *376*, 1433-1441, Nickel-catalyzed hydrogenative coupling of nitriles and amines for general amine synthesis.

[38] V. G. Chandrashekar, K. Natte, A. M. Alenad, A. S. Alshammari, C. Kreyenschulte, R. V. Jagadeesh, *ChemCatChem* **2022**, *14*, e202101234, Reductive Amination, Hydrogenation and Hydrodeoxygenation of 5-Hydroxymethylfurfural using Silica-supported Cobalt- Nanoparticles.

[39] V. G. Chandrashekar, T. Senthamarai, R. G. Kadam, O. Malina, J. Kašlík, R. Zbořil, M. B. Gawande, R. V. Jagadeesh, M. Beller, *Nat. Catal.* **2022**, *5*, 20-29, Silica-supported Fe/Fe–O nanoparticles for the catalytic hydrogenation of nitriles to amines in the presence of aluminium additives.

[40] B. Chen, C.-S. Kuai, J.-X. Xu, X.-F. Wu, *Adv. Synth. Catal.* **2022**, *364*, 487-492, Manganese(III)-Promoted Double Carbonylation of Anilines Toward α -Ketoamides Synthesis.

[41] B. Chen, H. Yin, Z.-P. Bao, C.-S. Kuai, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2022**, *9*, 5631-5636, Direct difunctional carbonylation of terminal alkynes with sodium sulfinates to access olefin sulfonyl methyl esters under metal-free conditions.

[42] B. Chen, K. Yu, X.-F. Wu, *Org. Biomol. Chem.* **2022**, *20*, 5264-5269, Visible-light-induced defluorinative carbonylative coupling of alkyl iodides with α -trifluoromethyl substituted styrenes.

[43] Z. Chen, H. Junge, M. Beller, *Front. Energy* **2022**, *16*, 697-699, Amino acid promoted hydrogen battery system using Mn-pincer complex for reversible CO₂ hydrogenation to formic acid.

[44] Z. Chen, X.-F. Wu, in *The Chemical Transformations of C1 Compounds*, **2022**, pp. 31-70.

[45] A. Cheruvathoor Poulouse, G. Zoppellaro, I. Konidakis, E. Serpetzoglou, E. Stratakis, O. Tomanec, M. Beller, A. Bakandritsos, R. Zbořil, *Nat. Nanotechnol.* **2022**, *17*, 485-492, Fast and selective reduction of nitroarenes under visible light with an earth-abundant plasmonic photocatalyst.

[46] S. Cisneros, A. Abdel-Mageed, J. Mosrati, S. Bartling, N. Rockstroh, H.

Atia, H. Abed, J. Rabeah, A. Brueckner, *iScience* **2022**, *25*, 103886, Oxygen vacancies in Ru/TiO₂ - drivers of low-temperature CO₂ methanation assessed by multimodal operando spectroscopy.

[47] S. Cisneros, S. Chen, C. Fauth, A. M. Abdel-Mageed, S. Pollastri, J. Bansmann, L. Olivi, G. Aquilanti, H. Atia, J. Rabeah, M. Parlinska-Wojtan, A. Brueckner, R. J. Behm, *Appl. Catal. B* **2022**, *317*, 121748, Controlling the selectivity of high-surface-area Ru/TiO₂ catalysts in CO₂ reduction - modifying the reaction properties by Si doping of the support.

[48] L. Dai, A. Torche, C. Strelow, T. Kipp, T. H. Vuong, J. Rabeah, K. Oldenburg, G. Bester, A. Mews, C. Klinke, R. Lesyuk, *ACS Appl. Mater. Interf.* **2022**, *14*, 18806-18815, Role of Magnetic Coupling in Photoluminescence Kinetics of Mn²⁺-Doped ZnS Nanoplatelets.

[49] W. Dai, R.-G. Miao, R. Zhao, X. Qi, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2022**, *9*, 6223-6228, Palladium-catalyzed desulfonylative aminocarbonylation of benzylsulfonfyl chlorides with o-aminobenzaldehydes/o-aminoacetophenones for the synthesis of quinoine-2(1H)-ones.

[50] F. Dankert, M. Fischer, C. Hering-Junghans, *ChemRxiv* **2022**, *1-25*, On the ambiphilic character of phosphanylidenephosphoranes and manipulation of phosphinidenoid reactivity with Lewis acids.

[51] F. Dankert, M. Fischer, C. Hering-Junghans, *Dalton Trans.* **2022**, *51*, 11267-11276, Modulating the reactivity of phosphanylidenephosphoranes towards water with Lewis acids.

[52] F. Dankert, P. Gupta, T. Wellnitz, W. Baumann, C. Hering-Junghans, *Dalton Trans.* **2022**, *51*, 18642-18651, Deoxygenation of chalcogen oxides EO₂ (E = S, Se) with phospho-Wittig reagents.

[53] F. Dankert, C. Hering-Junghans, *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 1242-1262, Heavier group 13/15 multiple bond systems: synthesis, structure and chemical bond activation.

[54] F. Dankert, J.-E. Siewert, P. Gupta, F. Weigend, C. Hering-Junghans, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, n/a, e202207064, Metal-Free N–H Bond Activation by Phospho-Wittig Re-

agents**.

[55] R. Dasi, A. Villinger, M. Brasholz, *Org. Lett.* **2022**, *24*, 8041-8046, Photocatalytic Azetidine Synthesis by Aerobic Dehydrogenative [2 + 2] Cycloadditions of Amines with Alkenes.

[56] D. Decker, H.-J. Drexler, W. Baumann, F. Reiß, T. Beweries, *New J. Chem.* **2022**, *46*, 22314-22321, Catalytic dehydrocoupling of methylamine borane using Yamashita's [Ir(PBP)] boryl complex – characterisation of a novel highly fluxional Ir tetrahydride.

[57] D. Decker, Z. Wei, J. Rabeah, H.-J. Drexler, A. Brueckner, H. Jiao, T. Beweries, *Inorg. Chem. Front.* **2022**, *9*, 761-770, Catalytic and mechanistic studies of a highly active and E-selective Co(II) PNNH pincer catalyst system for transfer-semihydrogenation of internal alkynes.

[58] A. Dell'Acqua, C. Schünemann, E. Baráth, S. Tin, J. G. de Vries, *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 13091-13094, New bifunctional monomers from methyl vinyl glycolate.

[59] F. G. Delolo, J. Fessler, H. Neumann, K. Junge, E. N. dos Santos, E. V. Gusevskaya, M. Beller, *Chem. Eur. J.* **2022**, *28*, e202103903, Cobalt-Catalysed Reductive Etherification Using Phosphine Oxide Promoters under Hydroformylation Conditions.

[60] F. G. Delolo, J. Fessler, H. Neumann, K. Junge, E. N. dos Santos, E. V. Gusevskaya, M. Beller, *Mol. Catal.* **2022**, *530*, 112621, Cobalt-catalyzed ring expansion/ring opening of oxetanes using phosphine oxides as promoters under hydroformylation conditions.

[61] K. Ding, X.-F. Wu, B. Han, Z. Liu, *The Chemical Transformations of C1 Compounds*, Volume 2, Wiley-VCH GmbH, **2022**.

[62] S. Ding, T. Dong, T. Peppel, N. Steinfeldt, J. Hu, J. Strunk, *J. Colloid Interface Sci.* **2022**, *607*, 1717-1729, Construction of amorphous SiO₂ modified β -Bi₂O₃ porous hierarchical microspheres for photocatalytic antibiotics degradation.

[63] N. Dropka, X. Tang, G. K. Chappa, M. Holena, *Crystals* **2022**, *12*, 1764, Smart Design of Cz-Ge Crystal Growth Furnace and Process.

[64] R. Duehren, P. Kucmierczyk, R. Jackstell, R. Franke, M. Beller, *Chem. Ing. Tech.* **2022**, *94*, 1688-1694,

Palladium-Catalyzed Hydroxycarbonylation of Diisobutene: Systematic Optimization by Central Composite Design.

[65] A. Eichhorst, M. Gallhof, A. Voss, A. Sekora, L. Eggers, L. T. Huyen, C. Junghanss, H. Murua Escobar, M. Brasholz, *ChemMedChem* **2022**, *17*, e202200162, Spirooxindol-1,3-oxazine Alkaloids: Highly Potent and Selective Antitumor Agents Evolved from Iterative Structure Optimization.

[66] L. Eickhoff, L. Ohms, J. Bresien, A. Villinger, D. Michalik, A. Schulz, *Chem. Eur. J.* **2022**, *28*, e202103983, A Phosphorus-Based Pacman Dication Generated by Cooperative Self-Activation of a Pacman Phosphane.

[67] F. El Ouahabi, W. Smit, C. Angelici, M. Polyakov, U. Rodemerck, C. Fischer, V. N. Kalevaru, S. Wohlrab, S. Tin, G. P. M. van Klink, J. C. van der Waal, F. Orange, J. G. de Vries, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2022**, *10*, 766-775, Conversion of Biomass-Derived Methyl Levulinate to Methyl Vinyl Ketone.

[68] A. Fedorov, D. Linke, *J. CO₂ Utilization* **2022**, *61*, 102034, Data analysis of CO₂ hydrogenation catalysts for hydrocarbon production.

[69] M. Feldt, Q. M. Phung, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2022**, n/a, e202200014, Ab Initio Methods in First-Row Transition Metal Chemistry.

[70] M. T. Flynn, X. Liu, A. Dell'Acqua, J. Rabeah, A. Brueckner, E. Baráth, S. Tin, J. G. de Vries, *ChemSusChem* **2022**, n/a, e202201264, Glycolaldehyde as a Bio-Based C1 Building Block for Selective N-Formylation of Secondary Amines.

[71] M. Frahm, A. Voss, M. Brasholz, *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 5467-5469, A short total synthesis of (\pm)-mersicarpine via visible light-induced cascade photooxygenation.

[72] R. Francke, in *Nature (London, U. K.)*, Vol. 603, Nature Portfolio, **2022**, pp. 229-230.

[73] R. Francke, *Curr. Opinion Electrochem.* **2022**, *36*, 101111, Concepts for sustainable organic electrochemistry.

[74] R. Francke, M. Májek, in *Sustainable and Functional Redox Chemistry (Ed.: S. Inagi)*, The Royal Society of Chemistry, **2022**, pp. 119-153.

[75] F. Gai, X. Guo, G. Ding, K. Zhang, Y. Zhang, Y. Zuo, *New J. Chem.* **2022**,

46, 10213-10218, Turn-on silicon-based fluorescent probe for visualizing endogenous CO during hypoxia.

[76] J. Gao, L. Feng, R. Ma, B.-J. Su, A. M. Alenad, Y. Liu, M. Beller, R. V. Jagadeesh, *Chem. Catal.* **2022**, *2*, 178-194, Cobalt single-atom catalysts for domino reductive amination and amidation of levulinic acid and related molecules to N-heterocycles.

[77] L. Gausas, R. Jackstell, T. Skrydstrup, M. Beller, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2022**, *10*, 16046-16054, Toward a Practical Catalyst for Convenient Deaminative Hydrogenation of Amides under Mild Conditions.

[78] H.-Q. Geng, R. Franke, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2022**, *24*, 7993-7996, Copper-Catalyzed Synthesis of Multideuterium-Labeled Alcohols from Styrenes with CO and D₂ as the Source of the Hydroxymethyl Group.

[79] H.-Q. Geng, W. Li, Y. Zhao, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2022**, *9*, 4943-4948, Copper-catalyzed synthesis of cyclopropyl bis(boronates) from aryl olefins and carbon monoxide.

[80] H.-Q. Geng, X.-F. Wu, *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 6534-6537, Copper-catalyzed hydroaminocarbonylation of benzylidenecyclopropanes: synthesis of γ,δ -unsaturated amides.

[81] S. Ghimire, K. Oldenburg, S. Bartling, R. Lesyuk, C. Klinke, *ACS Energy Lett.* **2022**, *7*, 975-983, Structural Reconstruction in Lead-Free Two-Dimensional Tin Iodide Perovskites Leading to High Quantum Yield Emission.

[82] Y. R. Girish, Udayabhanu, G. Alnagar, A. Hezam, M. B. Nayan, G. Nagaraju, K. Byrappa, *J. Sci.: Adv. Mater. Devices* **2022**, *7*, 100419, Facile and rapid synthesis of solar-driven TiO₂/g-C₃N₄ heterostructure photocatalysts for enhanced photocatalytic activity.

[83] B. Golub, D. Ondo, R. Ludwig, D. Paschek, *J. Phys. Chem. Lett.* **2022**, *13*, 3556-3561, Why Do Liquids Mix? The Mixing of Protic Ionic Liquids Sharing the Same Cation Is Apparently Driven by Enthalpy, Not Entropy.

[84] B. Golub, D. Ondo, V. Overbeck, R. Ludwig, D. Paschek, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2022**, *24*, 14740-14750, Hydrogen bond redistribution effects in mixtures of protic ionic liquids sharing the same cation: non-ideal mixing with large negative mixing

enthalpies.

[85] B. Guo, J. G. de Vries, E. Otten, *Adv. Synth. Catal.* **2022**, *364*, 179-186, Selective α -Deuteration of Cinnamitriles using D₂O as Deuterium Source.

[86] X. Guo, F. Unglaube, U. Kragl, E. Mejía, *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 6144-6147, B(C₆F₅)₃-Catalyzed transfer hydrogenation of esters and organic carbonates towards alcohols with ammonia borane.

[87] P. Gupta, T. Taeufer, J.-E. Sievert, F. Reiß, H.-J. Drexler, J. Pospech, T. Beweries, C. Hering-Junghans, *Inorg. Chem.* **2022**, *61*, 11639-11650, Synthesis, Coordination Chemistry, and Mechanistic Studies of P,N-Type Phosphaalkene-Based Rh(I) Complexes.

[88] Q. L. M. Ha, H. Atia, C. Kreyenschulte, H. Lund, S. Bartling, G. Lisak, S. Wohlrab, U. Armbruster, *Fuel* **2022**, *312*, 122823, Effects of modifier (Gd, Sc, La) addition on the stability of low Ni content catalyst for dry reforming of model biogas.

[89] A. Hamza, D. Mook, C. Schlepphorst, J. Schneidewind, W. Baumann, F. Glorius, *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 985-995, Unveiling a key catalytic pocket for the ruthenium NHC-catalysed asymmetric heteroarene hydrogenation.

[90] F. He, E. Klein, S. Bartling, S. Saeidpour, B. Corzilius, R. Lesyuk, C. Klinke, *J. Phys. Chem. C* **2022**, *126*, 20498-20504, Template-Mediated Formation of Colloidal Two-Dimensional Tin Telluride Nanosheets and the Role of the Ligands.

[91] Y. He, Y. Yin, C. Liu, X.-F. Wu, Z. Yin, *New J. Chem.* **2022**, *46*, 663-667, Electrochemical oxidative cyclization of N-allylcarboxamides: efficient synthesis of halogenated oxazolines.

[92] M. Heilmann, C. Prinz, R. Biebert, R. Wendt, B. Kunkel, J. Radnik, A. Hoell, S. Wohlrab, A. Guilherme Buzanich, F. Emmerling, *Adv. Eng. Mater.* **2022**, *24*, 2101308, Size-Tunable Ni-Cu Core-Shell Nanoparticles—Structure, Composition, and Catalytic Activity for the Reverse Water-Gas Shift Reaction.

[93] A. Hezam, Q. A. Drmsh, D. Ponnamma, M. A. Bajiri, M. Qamar, K. Namratha, M. Zare, M. B. Nayan, S. A. Onaizi, K. Byrappa, *Chem. Record* **2022**, *22*, e202100299, Strategies to

Enhance ZnO Photocatalyst's Performance for Water Treatment: A Comprehensive Review.

[94] D. T. Hieu, H. Kosslick, M. Riaz, A. Schulz, A. Springer, M. Frank, C. Jaeger, N. T. M. Thu, L. T. Son, *Catalysts* **2022**, *12*, 253, Acidity and Stability of Brønsted Acid Sites in Green Clinoptilolite Catalysts and Catalytic Performance in the Etherification of Glycerol.

[95] Y. Hu, R. Sang, R. Vroemans, G. Mollaert, R. Razaq, H. Neumann, H. Junge, R. Franke, R. Jackstell, B. U. W. Maes, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, n/a, e202214706, Efficient Synthesis of Novel Plasticizers by Direct Palladium-Catalyzed Di- or Multi-carbonylations.

[96] W. Huang, X. Tian, H. Jiao, R. Jackstell, M. Beller, *Chem. Eur. J.* **2022**, *28*, e202104012, Iridium-Catalyzed Domino Hydroformylation/Hydrogenation of Olefins to Alcohols: Synergy of Two Ligands.

[97] M. Huettenschmidt, H. Lange, M. A. A. Cordero, A. Villinger, S. Lochbrunner, W. W. Seidel, *Dalton Trans.* **2022**, *51*, 852-856, Development and application of redox-active cyclo-metallating ligands based on W(ii) alkyne complexes.

[98] L. Hunger, L. Al-Sheakh, D. H. Zaitsau, S. P. Verevkin, A. Appenhagen, A. Villinger, R. Ludwig, *Chem. Eur. J.* **2022**, *28*, e202200949, Dissecting Noncovalent Interactions in Carboxyl-Functionalized Ionic Liquids Exhibiting Double and Single Hydrogen Bonds Between Ions of Like Charge.

[99] Y.-W. Huo, X. Qi, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2022**, *24*, 4009-4013, Nickel-Catalyzed Carbonylative Synthesis of α,β -Unsaturated Thioesters from Vinyl Triflates and Arylsulfonyl Chlorides.

[100] N. Jannsen, C. Fischer, C. Selle, C. Pribbenow, H.-J. Drexler, F. Reiß, T. Beweries, D. Heller, *Dalton Trans.* **2022**, *51*, 18068-18076, How solvents affect the stability of cationic Rh(i) diphosphine complexes: a case study of MeCN coordination.

[101] J. Jašík, S. Valtera, M. Vaidulych, M. Bunian, Y. Lei, A. Halder, H. Tarábková, M. Jindra, L. Kavan, O. Frank, S. Bartling, Š. Vajda, *Faraday Disc.* **2022**, Oxidative dehydrogenation of cyclohexene on atomically precise

subnanometer Cu₄-nPd_n (0 ≤ n ≤ 4) tetramer clusters: the effect of cluster composition and support on performance.

[102] Y. Jin, H. Yang, X. Yu, P. Ren, Y. Yang, H. Xiang, Y.-W. Li, H. Jiao, X. Wen, *J. Phys. Chem. C* **2022**, *126*, 6241-6248, Unraveling the Synergetic Effect of the FeO_x-Cu Model System in Catalyzing the Water-Gas Shift Reaction.

[103] M. N. Jorabchi, M. Abbaspour, E. K. Goharshadi, S. Wohlrab, *J. Mol. Liq.* **2022**, *360*, 119447, Ag, Au, Pt, and Au-Pt nanoclusters in [N₁₁₁₄][C₁SO₃] ionic liquid: A molecular dynamics study.

[104] S. K. Kaiser, E. Fako, I. Surin, F. Krumeich, V. A. Kondratenko, E. V. Kondratenko, A. H. Clark, N. López, J. Pérez-Ramírez, *Nat. Nanotechnol.* **2022**, *17*, 606-612, Performance descriptors of nanostructured metal catalysts for acetylene hydrochlorination.

[105] S. Keller, U. Bentrup, J. Rabeah, A. Brueckner, *J. Catal.* **2022**, *408*, 453-464, Impact of dopants on catalysts containing Ce_{1-x}M_xO_{2-δ} (M = Fe, Sb or Bi) in NH₃-SCR of NO_x – A multiple spectroscopic approach.

[106] A. E. Khudozhnikov, M. Donoshita, A. G. Stepanov, F. Philippi, D. Rauber, R. Hempelmann, H. Kitagawa, D. I. Kolokolov, R. Ludwig, *Chem. Eur. J.* **2022**, *28*, e202200257, High-Temperature Quantum Tunneling and Hydrogen Bonding Rearrangements Characterize the Solid-Solid Phase Transitions in a Phosphonium-Based Protic Ionic Liquid.

[107] A. E. Khudozhnikov, P. Stange, D. Paschek, A. G. Stepanov, D. I. Kolokolov, R. Ludwig, *ChemPhysChem* **2022**, *23*, e202200557, The Influence of Deuterium Isotope Effects on Structural Rearrangements, Ensemble Equilibria, and Hydrogen Bonding in Protic Ionic Liquids.

[108] A. E. Khudozhnikov, P. Stange, A. G. Stepanov, D. I. Kolokolov, R. Ludwig, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2022**, *24*, 6064-6071, Structure, hydrogen bond dynamics and phase transition in a model ionic liquid electrolyte.

[109] S. Kopf, F. Bourriquen, W. Li, H. Neumann, K. Junge, M. Beller, *Chem. Rev.* **2022**, *122*, 6634-6718, Recent Developments for the Deuterium and Tritium Labeling of Organic Molecu-

les.

[110] S. Kopf, J. Liu, R. Franke, H. Jiao, H. Neumann, M. Beller, *Eur. J. Org. Chem.* **2022**, *2022*, e202200204, Base-Mediated Remote Deuteration of N-Heteroarenes – Broad Scope and Mechanism.

[111] L. Korel, A. S. Behr, N. Kockmann, M. Holeňa, **2022**, Using Artificial Neural Networks to Determine Ontologies Most Relevant to Scientific Texts.

[112] B. Kortewille, O. Pflingsten, G. Bacher, J. Strunk, *ChemPhotoChem* **2022**, *6*, e202100120, Supported Vanadium Oxide as a Photocatalyst in the Liquid Phase: Dissolution Studies and Selective Laser Excitation.

[113] E. F. Krake, H. Jiao, W. Baumann, *J. Mol. Struct.* **2022**, *1247*, 131309, NMR and DFT analysis of the major diastereomeric degradation product of clopidogrel under oxidative stress conditions.

[114] C.-S. Kuai, L.-C. Wang, J.-X. Xu, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2022**, *24*, 451-456, Palladium-Catalyzed Direct Dicarbonylation of Amines with Ethylene to Imides.

[115] C.-S. Kuai, J.-X. Xu, B. Chen, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2022**, *24*, 4464-4469, Palladium-Catalyzed Regio- and Stereoselective Hydroaminocarbonylation of Unsymmetrical Internal Alkynes toward α,β -Unsaturated Amides.

[116] P. Kucmierczyk, S. Behrens, C. Kubis, W. Baumann, Z. Wei, H. Jiao, K. Dong, A. Spannenberg, H. Neumann, R. Jackstell, A. Boerner, R. Franke, M. Beller, *Catal. Sci. Technol.* **2022**, *12*, 3175-3189, *In situ* spectroscopic studies on state-of-the-art Pd(II) catalysts in solution for the alkoxy-carbonylation of alkenes.

[117] P. Kucmierczyk, R. Duehren, R. Sang, R. Jackstell, M. Beller, R. Franke, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2022**, *10*, 4822-4830, Palladium-Catalyzed Methoxycarbonylation Investigated by Design of Experiments.

[118] A. Kutuzova, T. Dontsova, W. Kwapinski, J. J. Leahy, J. Strunk, *Mol. Crystals Liq. Crystals* **2022**, *1-13*, Photocatalytic activity to ciprofloxacin and physico-chemical properties of TiO₂ synthesized by different methods.

[119] T. Lange, S. Reichenberger, S. Ristig, M. Rohe, J. Strunk, S. Barcikow-

ski, R. Schloegl, *Progress in Mater. Sci.* **2022**, *124*, 100865, Zinc sulfide for photocatalysis: White angel or black sheep?

[120] P. Langer, *Synlett* **2022**, *33*, 207-223, Domino Reactions of Chromones with Heterocyclic Enamines.

[121] P. Langer, *Synlett* **2022**, *33*, 440-457, Synthesis of Purines and Related Molecules by Cyclization Reactions of Heterocyclic Enamines.

[122] P. Langer, *Synlett* **2022**, *33*, 728-736, Adventures in 1,3-Selenazole Chemistry.

[123] P. Langer, *Synlett* **2022**, *33*, 1029-1051, Cross-Coupling Reactions of Polyhalogenated Heterocycles.

[124] P. Langer, *Synlett* **2022**, *33*, 1215-1226, Palladium-Catalyzed Synthesis of Heterocyclic Ring Systems by Combination of Regioselective C-C with Twofold C-N Couplings.

[125] P. Langer, *Synlett* **2022**, *33*, 1707-1715, Synthesis of Nitrogen Heterocycles by a C-C Cross-Coupling/Cycloisomerization Strategy.

[126] P. Langer, *Synlett* **2022**, *33*, 1596-1606, Synthesis of Nitrogen Heterocycles by Domino C-N Coupling/Hydroamination Reactions.

[127] D. K. Leonard, P. Ryabchuk, M. Anwar, S. Dastgir, K. Junge, M. Beller, *ChemSusChem* **2022**, *15*, e202102315, A Convenient and Stable Heterogeneous Nickel Catalyst for Hydrodehalogenation of Aryl Halides Using Molecular Hydrogen.

[128] C.-L. Li, X.-F. Wu, in *The Chemical Transformations of C1 Compounds*, **2022**, pp. 1647-1665.

[129] W. Li, J. Rabeah, F. Bourriquen, D. Yang, C. Kreyenschulte, N. Rockstroh, H. Lund, S. Bartling, A.-E. Surkus, K. Junge, A. Brueckner, A. Lei, M. Beller, *Nat. Chem.* **2022**, Scalable and selective deuteration of (hetero) arenes.

[130] W. Li, X.-F. Wu, in *The Chemical Transformations of C1 Compounds*, **2022**, pp. 157-247.

[131] Y. Li, X. Yu, Q. Zhang, V. A. Kondratenko, Y. Wang, G. Cui, M. Zhou, C. Xu, E. V. Kondratenko, G. Jiang, *J. Catal.* **2022**, *413*, 658-667, The nature of VO_x structures in HMS supported vanadium catalysts for non-oxidative propane dehydrogenation.

- [132] H.-Q. Liang, T. Beweries, R. Francke, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202200723, Molecular Catalysts for the Reductive Homocoupling of CO₂ towards C₂₊ Compounds.
- [133] K. Lindenau, A. Spannenberg, F. Reiß, T. Beweries, *RSC Adv.* **2022**, *12*, 26277-26283, Mono- and dinuclear zirconocene(IV) amide complexes for the catalytic dehydropolymerisation of phenylsilane.
- [134] A. Linke, D. Decker, H.-J. Drexler, T. Beweries, *Dalton Trans.* **2022**, *51*, 10266-10271, Iridium(III) bis(thiophosphinite) pincer complexes: synthesis, ligand activation and applications in catalysis.
- [135] J.-L. Liu, W. Wang, X. Qi, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2022**, *24*, 2248-2252, Palladium-Catalyzed Reductive Aminocarbonylation of o-Iodophenol-Derived Allyl Ethers with o-Nitrobenzaldehydes to 3-Alkenylquinolin-2(1H)-ones.
- [136] X. Liu, Y. Zuo, F. Kallmeier, E. Mejía, S. Tin, J. G. de Vries, E. Baráth, *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 5415-5418, Hydrogenative depolymerization of silicon-modified polyureas.
- [137] Y. Liu, Z.-P. Bao, X. Qi, X. F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2022**, *9*, 2079-2083, Palladium-catalyzed reductive desulfonative aminocarbonylation of benzylsulfonyl chlorides with nitroarenes towards arylacetamides.
- [138] F. Lorenz, N. G. Moustakas, T. Peppel, J. Strunk, *Chem. Ing. Tech.* **2022**, *94*, 1776-1783, Comparative Studies of Oxygen-Free Semiconductors in Photocatalytic CO₂ Reduction and Alcohol Degradation.
- [139] S.-N. Lu, Y. Sun, J. Zhang, Z. Chen, X.-F. Wu, *Mol. Catal.* **2022**, *524*, 112336, Metal-free Synthesis of 5-Trifluoromethyl-1,2,4-triazoles via elemental sulfur promoted oxidative cyclization of trifluoroacetimidohydrazides with benzylic and aliphatic amines.
- [140] S.-N. Lu, J. Zhang, J. Li, Z. Chen, X. F. Wu, *Green Synth. Catal.* **2022**, *3*, 385-388, Metal-free synthesis of 3-trifluoromethyl-1,2,4-triazoles via oxidative cyclization of trifluoroacetimidohydrazides with N,N-dimethylformamide as carbon synthons.
- [141] Z. Ma, V. G. Chandrashekar, B. Zhou, A. M. Alenad, N. Rockstroh, S. Bartling, M. Beller, R. V. Jagadeesh, *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 10914-10922, Stable and reusable Ni-based nanoparticles for general and selective hydrogenation of nitriles to amines.
- [142] Z. Ma, B. Zhou, X. Li, R. G. Kadam, M. B. Gawande, M. Petr, R. Zbořil, M. Beller, R. V. Jagadeesh, *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 111-117, Reusable Co-nanoparticles for general and selective N-alkylation of amines and ammonia with alcohols.
- [143] M. S. Macedo, E. Kraveva, H. Ehrich, M. A. Soria, L. M. Madeira, *Int. J. Hydrogen Energy* **2022**, *47*, 33239-33258, Hydrogen production from glycerol steam reforming over Co-based catalysts supported on La₂O₃, AlZnO_x and AlLaO_x.
- [144] S. A. Mahyoub, F. A. Qaraah, S. Yan, A. Hezam, C. Chen, J. Zhong, Z. Cheng, *J. CO₂ Utilization* **2022**, *61*, 102033, 3D Cu/In nanocones by morphological and interface engineering design in achieving a high current density for electroreduction of CO₂ to syngas under elevated pressure.
- [145] S. A. Mahyoub, F. A. Qaraah, S. Yan, A. Hezam, J. Zhong, Z. Cheng, *Mater. Today Energy* **2022**, *24*, 100923, Rational design of low loading Pd-allyloyed Ag nanocorals for high current density CO₂-to-CO electroreduction at elevated pressure.
- [146] S. Mao, S. Budweg, A. Spannenberg, X. Wen, Y. Yang, Y.-W. Li, K. Junge, M. Beller, *ChemCatChem* **2022**, *14*, e202101668, Iron-Catalyzed Epoxidation of Linear α -Olefins with Hydrogen Peroxide.
- [147] S. Mao, P. Ryabchuk, S. Dastgir, M. Anwar, K. Junge, M. Beller, *ACS Appl. Nano Mater.* **2022**, *5*, 5625-5630, Silicon-Enriched Nickel Nanoparticles for Hydrogenation of N-Heterocycles in Aqueous Media.
- [148] I. C. B. Martins, D. Al-Sabbagh, U. Bentrup, J. Marquardt, T. Schmid, E. Scoppola, W. Kraus, T. M. Stawski, A. Guilherme Buzanich, K. V. Yusenko, S. Weidner, F. Emmerling, *Chem. Eur. J.* **2022**, *28*, e202200079, Formation Mechanism of a Nano-Ring of Bismuth Cations and Mono-Lacunary Keggin-Type Phosphomolybdate.
- [149] M. Marx, H. Frauendorf, A. Spannenberg, H. Neumann, M. Beller, *JACS Au* **2022**, *2*, 731-744, Revisiting Reduction of CO₂ to Oxalate with First-Row Transition Metals: Irrepro-
- ducibility, Ambiguous Analysis, and Conflicting Reactivity.
- [150] P. McNeice, M.-A. Mueller, J. Medlock, W. Bonrath, N. Rockstroh, S. Bartling, H. Lund, K. Junge, M. Beller, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2022**, *10*, 9787-9797, Designing a Green Replacement for the Lindlar Catalyst for Alkyne Semi-hydrogenation Using Silica-Supported Nickel Nanoparticles Modified by N-Doped Carbon.
- [151] P. McNeice, M.-A. Mueller, J. Medlock, W. Bonrath, N. Rockstroh, S. Bartling, H. Lund, K. Junge, M. Beller, *Green Chem.* **2022**, *24*, 6912-6922, The development of a lead-free replacement for the Lindlar catalyst for alkyne semi-hydrogenation using silica supported, N-doped carbon modified cobalt nanoparticles.
- [152] D. Meinhardt, H. Schröder, J. Hellwig, E. Steimers, A. Friebel, T. Beweries, M. Sawall, E. von Harbou, K. Neymeyr, *J. Magn. Res.* **2022**, *339*, 107212, Model-based signal tracking in the quantitative analysis of time series of NMR spectra.
- [153] K. Melin, J. O. Strueven, P. Eidam, J. Appelt, C. Hummel, U. Armbruster, Y. Chapellière, C. Mirodatos, Y. Schuurman, A. Oasmaa, *Energy & Fuels* **2022**, *36*, 12004-12009, Hybrid Gasoline Production from Black Liquor through Coprocessing.
- [154] M. J. Menke, A. S. Behr, K. Rosenthal, D. Linke, N. Kockmann, U. T. Bornscheuer, M. Doerr, *Chem. Ing. Tech.* **2022**, *94*, 1827-1835, Development of an Ontology for Biocatalysis.
- [155] D. Michalik, H. Jiao, P. Langer, *Mag. Reason. Chem.* **2022**, *60*, 845-856, NMR spectroscopic and theoretical study on the isomerism of dimethyl benzodiazepine(diylidene) diacetates.
- [156] J. Michalke, K. Faust, T. Boegl, S. Bartling, N. Rockstroh, C. Topf, *Int. J. Mol. Sci.* **2022**, *23*, 8742, Mild and Efficient Heterogeneous Hydrogenation of Nitroarenes Facilitated by a Pyrolytically Activated Dinuclear Ni(II)-Ce(III) Diimine Complex.
- [157] J. Michalke, M. Haas, D. Krisch, T. Boegl, S. Bartling, N. Rockstroh, W. Schoefberger, C. Topf, *Catalysts* **2022**, *12*, 11, Generation of Cobalt-Containing Nanoparticles on Carbon via Pyrolysis of a Cobalt Corrole and Its Application in the Hydrogenation of Nitroarenes.
- [158] L. Milaković, Y. Liu, E. Baráth, J. A. Lercher, *Catal. Sci. Technol.* **2022**, *12*, 6084-6091, Dehydration of fatty alcohols on zirconia supported tungstate catalysts.
- [159] A. Moazezbarabadi, D. Wei, H. Junge, M. Beller, *ChemSusChem* **2022**, *15*, e202201502, Improved CO₂ Capture and Catalytic Hydrogenation Using Amino Acid Based Ionic Liquids.
- [160] N. Mohebbati, I. Sokolovs, P. Woite, M. Lökov, E. Parman, M. Ugandi, I. Leito, M. Roemelt, E. Suna, R. Francke, *Chem. Eur. J.* **2022**, n/a, e202200974, Electrochemistry and Reactivity of Chelation-stabilized Hypervalent Bromine(III) Compounds.
- [161] P. Naliwajko, T. Peppel, J. Strunk, *Reac. Kinetics, Mechan. Catal.* **2022**, *135*, 2291-2305, Thermal and light induced infrared blackening of ZnO revisited: rediscovery of fundamental scientific knowledge.
- [162] E. G. Narváez-Ordoñez, K. A. Pabón-Carcelén, D. A. Zurita-Saltos, P. M. Bonilla-Valladares, T. G. Yáñez-Darquea, L. A. Ramos-Guerrero, S. E. Ulic, J. L. Jios, G. A. Echeverría, O. E. Piro, P. Langer, C. D. Alcívar-León, J. Heredia-Moya, *Molecules* **2022**, *27*, 2636, Synthesis, Experimental and Theoretical Study of Azidochromones.
- [163] K. Natte, R. V. Jagadeesh, in *Surface Modified Nanomaterials for Applications in Catalysis* (Eds.: M. B. Gawande, C. Mustansar Hussain, Y. Yamauchi), *Elsevier*, **2022**, pp. 251-266.
- [164] H. Neumann, R. Jackstell, in *Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis*, **2022**, pp. 1-4.
- [165] T. A. Nguyen Tien, M. Miliutina, J. Radolko, R. Thom, T. T. Dang, P. Ehlers, P. Langer, *Tetrahedron* **2022**, *104*, 132608, Synthesis of chromeno[2,3-c]pyrrol-9(2H)-ones by domino Michael-Claisen-SNAr reactions of amino acid esters with 2-chlorophenylpropynones.
- [166] S. Nieß, U. Armbruster, S. Dietrich, M. Klemm, *Catalysts* **2022**, *12*, 374, Recent Advances in Catalysis for Methanation of CO₂ from Biogas.
- [167] A. C. Olivieri, K. Neymeyr, M. Sawall, R. Tauler, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2022**, *220*, 104472, How noise affects the band boundaries in multivariate curve resolution.
- [168] A. C. Olivieri, M. Sawall, K. Neymeyr, R. Tauler, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2022**, *228*, 104636, Noise effects on band boundaries in multivariate curve resolution of three-component systems.
- [169] N. Ortner, H. Lund, U. Armbruster, S. Wohlrab, E. V. Kondratenko, *Catal. Today* **2022**, *387*, 47-53, Factors affecting primary and secondary pathways in CO₂ hydrogenation to methanol over CuZnIn/MZrO_x (La, Ti or Y).
- [170] A. G. Oshchepkov, P. A. Simonov, A. N. Kuznetsov, S. A. Shermukhamedov, R. R. Nazmutdinov, R. I. Kvon, V. I. Zaikovskii, T. Y. Kardash, E. A. Fedorova, O. V. Cherstiouk, A. Bonnefont, E. R. Savinova, *ACS Catal.* **2022**, *12*, 15341-15351, Bimetallic NiM/C (M = Cu and Mo) Catalysts for the Hydrogen Oxidation Reaction: Deciphering the Role of Unintentional Surface Oxides in the Activity Enhancement.
- [171] J. Oswald, M. T. Scharnhölz, P. Coburger, H. Beer, J. Bresien, A. Schulz, H. Gruetzmacher, *Zeitschr. f. anorg. und allgem. Chem.* **2022**, *648*, e202200093, Insertion of Ruthenium into an inorganic, cyclic biradicaloid.
- [172] T. Otroshchenko, Q. Zhang, E. V. Kondratenko, *Catal. Lett.* **2022**, *152*, 2366-2374, Room-Temperature Methathesis of Ethylene with 2-Butene to Propene Over MoO_x-Based Catalysts: Mixed Oxides as Perspective Support Materials.
- [173] S. Pantoom, L. Hules, C. Schoell, A. Petrosyan, M. Monticelli, J. Pospech, M. V. Cubellis, A. Hermann, J. Lukas, *Int. J. Mol. Sci.* **2022**, *23*, 3536, Mechanistic Insight into the Mode of Action of Acid β -Glucosidase Enhancer Ambroxol.
- [174] J.-B. Peng, X.-L. Liu, L. Li, X.-F. Wu, *Sci. China Chem.* **2022**, Palladium-catalyzed enantioselective carbonylation reactions.
- [175] M. Peng, L. Wang, L. Guo, J. Guo, L. Zheng, F. Yang, Z. Ma, X. Zhao, *Coatings* **2022**, *12*, 1397, A Durable Nano-SiO₂-TiO₂/Dodecyltrimethoxysilane Superhydrophobic Coating for Stone Protection.
- [176] A. Petrosyan, L. Zach, T. Taeufer, T. S. Mayer, J. Rabeah, J. Pospech, *Chem. Eur. J.* **2022**, *28*, e202201761, Pyrimidopteridine-catalyzed Photo-mediated Hydroacetylation.
- [177] F. Poovan, V. G. Chandrashekar, K. Natte, R. V. Jagadeesh, *Catal. Sci. Technol.* **2022**, *12*, 6623-6649, Synergy between homogeneous and heterogeneous catalysis.
- [178] J. Pospech, in *Nachr. Chem.*, Vol. 70, **2022**, pp. 76-80.
- [179] J. Pospech, T. S. Mayer, in *Nachr. Chem.*, Vol. 70, **2022**, pp. 81-85.
- [180] R. Puchta, S. Đorđević, S. Radenković, H. Jiao, N. Van Eikema Hommes, *J. Serbian Chem. Soc.* **2022**, *87*, 1439-1446, 25 years of NICS – much more than nothing! Letter to the Editor.
- [181] F. A. Qaraah, S. A. Mahyoub, A. Hezam, A. Qaraah, Q. A. Drmash, G. Xiu, *Chinese J. Catal.* **2022**, *43*, 2637-2651, Construction of 3D flowers-like O-doped g-C₃N₄-[N-doped Nb₂O₅/C] heterostructure with direct S-scheme charge transport and highly improved visible-light-driven photocatalytic efficiency.
- [182] F. A. Qaraah, S. A. Mahyoub, A. Hezam, A. Qaraah, F. Xin, G. Xiu, *Appl. Catal. B* **2022**, *315*, 121585, Synergistic effect of hierarchical structure and S-scheme heterojunction over O-doped g-C₃N₄/N-doped Nb₂O₅ for highly efficient photocatalytic CO₂ reduction.
- [183] F. Reiß, A. Villinger, H. Brand, W. Baumann, D. Hollmann, A. Schulz, *Chem. Eur. J.* **2022**, *28*, e202200854, Low-Temperature Isolation of a Labile Silylated Hydrazinium-yl Radical Cation, [(Me₃Si)₂N-N(H)SiMe₃]⁺.
- [184] C. Ren, A. Spannenberg, T. Werner, *Asian J. Org. Chem.* **2022**, *11*, e202200156, Synthesis of Bifunctional Phosphonium Salts Bearing Perfluorinated Side Chains and Their Application in the Synthesis of Cyclic Carbonates from Epoxides and CO₂.
- [185] C. Rieg, D. Dittmann, Z. Li, A. Kurtz, E. Kaya, S. Peters, B. Kunkel, M. Parlinska-Wojtan, S. Wohlrab, A. M. Abdel-Mageed, M. Dybala, *J. Phys. Chem. C* **2022**, *126*, 13213-13223, Introducing a Novel Method for Probing Accessibility, Local Environment, and Spatial Distribution of Oxidative Sites on Solid Catalysts Using Trimethylphosphine.
- [186] M. A. Rodriguez-Olguin, H. Atia, M. Bosco, A. Aguirre, R. Eckelt, E. D. Asuquo, M. Vandichel, J. G. E. Gardiniers, A. Susarrey-Arce, *J. Catal.* **2022**, *405*, 520-533, Al₂O₃ nanofibers pre-

pared from aluminum Di(sec-butoxi-
de)acetoacetic ester chelate exhibits
high surface area and acidity.

[187] M. A. Rodriguez-Olguin, R. N. Cruz-Herbert, H. Atia, M. Bosco, E. L. Fornero, R. Eckelt, D. A. De Haro Del Río, A. Aguirre, J. G. E. Gardeniers, A. Susarrey-Arce, *Catal. Sci. Technol.* **2022**, *12*, 4243-4254, Tuning the catalytic acidity in Al₂O₃ nanofibers with mordenite nanocrystals for dehydration reactions.

[188] J. Rosenboom, L. Chojetzki, T. Suhrbier, J. Rabeah, A. Villinger, R. Wustrack, J. Bresien, A. Schulz, *Chem. Eur. J.* **2022**, *28*, e202200624, Radical Reactivity of the Biradical [P(μ -N Ter)₂P⁻] and Isolation of a Persistent Phosphorus-Centered Monoradical [P(μ -N Ter)₂P-Et].

[189] J. Rosenboom, A. Villinger, A. Schulz, J. Bresien, *Dalton Trans.* **2022**, *51*, 13479-13487, Concerted addition of aldehydes to the singlet biradical [P(μ -N Ter)₂]₂.

[190] U. Rosenthal, *Organometallics* **2022**, *41*, 3478-3492, How Serendipity and Chance Can Be Transformed into Knowledge: Examples from 50 Years of Research in Organometallic Chemistry and Homogeneous Catalysis.

[191] U. Rosenthal, A. Schulz, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2022**, *2022*, e202100749, Contributions of Erhard Kurras to Organochromium Chemistry – From a Historical Perspective.

[192] J. Rothe, J. Bresien, F. Reiß, A. Villinger, T. Beweries, A. Schulz, *Zeitschr. anorg. allgem. Chem.* **2022**, n/a, e202200174, A 2-Aza-3,4-Diphosphat-1-Bora-Butadiene.

[193] I. Salahshoori, M. Namayandeh Jorabchi, K. Valizadeh, A. Yazdanbakhsh, A. Bateni, S. Wohlrab, *J. Mol. Liq.* **2022**, *363*, 119793, A deep insight of solubility behavior, mechanical quantum, thermodynamic, and mechanical properties of Pebax-1657 polymer blends with various types of vinyl polymers: A mechanical quantum and molecular dynamics simulation study.

[194] E. Salaya-Gerónimo, D. S. García-Zaleta, G. Jácome-Acatitla, E. Huerta-García, R. López-González, A. Reyes-Montero, A. M. Abdel-Mageed, *J. Chem. Technol. Biotechnol.* **2022**, *97*, 2970-2983, Structural, optical and photocatalytic properties of Sr-doped

and Ca-doped BiFeO₃ compounds prepared by Pechini method.

[195] R. Sang, Y. Hu, R. Razzaq, G. Mollaert, H. Atia, U. Benstrup, M. Sharif, H. Neumann, H. Junge, R. Jackstell, B. U. W. Maes, M. Beller, *Nat. Commun.* **2022**, *13*, 4432, A practical concept for catalytic carbonylations using carbon dioxide.

[196] S. Sarfaraz, M. Yar, M. Ans, M. A. Gilani, R. Ludwig, M. A. Hashmi, M. Hussain, S. Muhammad, K. Ayub, *RSC Adv.* **2022**, *12*, 3909-3923, Computational investigation of a covalent triazine framework (CTF-0) as an efficient electrochemical sensor.

[197] N. Sarki, V. Goyal, A. Narani, R. V. Jagadeesh, K. Natte, in *Biomass, Biofuels, Biochemicals* (Eds.: H. Li, S. Saravanamurugan, A. Pandey, S. Elumalai), Elsevier, **2022**, pp. 593-612.

[198] M. Sawall, T. Andersons, H. Abdollahi, S. K. Karimvand, B. Hemmateenejad, K. Neymeyr, *Chemom. Intell. Lab. Sys.* **2022**, *226*, 104577, Calculation of lower and upper band boundaries for the feasible solutions of rank-deficient multivariate curve resolution problems.

[199] M. Sawall, C. Ruckebusch, M. Beese, R. Francke, A. Prudlik, K. Neymeyr, *Anal. Chim. Acta* **2022**, *1233*, 340448, An active constraint approach to identify essential spectral information in noisy data.

[200] D. Schallenberg, N. Pardemann, A. Villinger, W. W. Seidel, *Dalton Trans.* **2022**, *51*, 13681-13691, Synthesis and coordination behaviour of 1H-1,2,3-triazole-4,5-dithiolates.

[201] S. Schimmler, T. Bönisch, M. Horsch, T. Petrenko, B. Schembera, V. Kushnarenko, B. Wentzel, F. Kirstein, H. Viemann, M. Holeňa, D. Linke, **2022**, NFDI4Cat: Local and overarching data infrastructures.

[202] J. Schneidewind, *Adv. Energy Mater.* **2022**, *12*, 2200342, How Much Technological Progress is Needed to Make Solar Hydrogen Cost-Competitive?

[203] M. Schroeder, D. Rauber, C. Matt, C. W. M. Kay, *Appl. Mag. Reson.* **2022**, *53*, 1043-1052, Pentacene in 1,3,5-Tri(1-naphthyl)benzene: A Novel Standard for Transient EPR Spectroscopy at Room Temperature.

[204] R. Schwarz, E. R. D. Seiler, S. Sender, A. Pews-Davtyan, H. Murua

Escobar, D. Zechner, M. Beller, C. Junghanß, B. Hinz, *Molecules* **2022**, *27*, 974, A Simple LC-MS/MS Method for the Quantification of PDA-66 in Human Plasma.

[205] M. Schwarze, T. A. Thiel, A. G. Rana, J. Yang, A. Acharjya, A. D. Nguyen, S. Tameu Djoko, E. M. Kutorglo, M. Tasbihi, M. Minceva, S. Huseynova, P. Menezes, C. Walter, M. Driess, R. Schomäcker, A. Thomas, *Chem. Ing. Tech.* **2022**, *94*, 1739-1746, Screening of Heterogeneous Photocatalysts for Water Splitting.

[206] T. Senthamarai, V. G. Chandrasekhar, N. Rockstroh, J. Rabeah, S. Bartling, R. V. Jagadeesh, M. Beller, *Chem* **2022**, *8*, 508-531, A "universal" catalyst for aerobic oxidations to synthesize (hetero)aromatic aldehydes, ketones, esters, acids, nitriles, and amides.

[207] T. Senthamarai, F. Poovan, A. M. Alenad, N. Rockstroh, J. Rabeah, S. Bartling, E. Baráth, K. Natte, R. V. Jagadeesh, *Adv. Sustainable Sys.* **2022**, n/a, 2200263, Cu-Oxide Nanoparticles Catalyzed Synthesis of Nitriles and Amides from Alcohols and Ammonia in Presence of Air.

[208] I. Y. Shchapin, A. I. Nekhaev, D. N. Ramazanov, M. Al-Yusufi, V. O. Samoilov, A. L. Maximov, *Catalysts* **2022**, *12*, 409, Hydrocarbon Oxidation Depth: H₂O₂/Cu₂Cl₄·2DMG/CH₃CN System.

[209] H. Shen, M. Yang, L. Hao, J. Wang, J. Strunk, Z. Sun, *Nano Research* **2022**, *15*, 2773-2809, Photocatalytic nitrogen reduction to ammonia: Insights into the role of defect engineering in photocatalysts.

[210] G. Sieg, M. Fischer, F. Dankert, J.-E. Siewert, C. Hering-Junghans, C. G. Werncke, *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 9786-9789, A diarsene radical anion.

[211] A. S. Skrypnik, S. A. Petrov, V. A. Kondratenko, Q. Yang, H. Lund, A. A. Matvienko, E. V. Kondratenko, *ACS Catal.* **2022**, *12*, 11355-11368, Descriptors Affecting Methane Selectivity in CO₂ Hydrogenation over Unpromoted Bulk Iron(III)-Based Catalysts.

[212] M. Sobhani, R. M. Figueira de Abreu, A. Villinger, P. Ehlers, P. Langer, *Org. Biomol. Chem.* **2022**, *20*, 9207-9216, Synthesis of imidazo[1,2-a]benzoazepines by alkyne-carbonyl-metathesis.

[213] M. Sobhani, A. Villinger, P. Ehlers, P. Langer, *J. Org. Chem.* **2022**, *87*, 4560-4568, Regioselective Synthesis of Naphthothiophenes by Pd Catalyzed Cross-Coupling Reactions and Alkyne-Carbonyl Metathesis.

[214] Y. Song, Y. Zhang, Z. Chen, X.-F. Wu, *Asian J. Org. Chem.* **2022**, *11*, e202200237, Recent Advances in Copper-Catalyzed Carboxylation Reactions with CO₂.

[215] A. A. Sosa, V. Palermo, P. Langer, R. Luque, G. P. Romanelli, L. R. Pizzio, *Mol. Catal.* **2022**, *517*, 112046, Tungstophosphoric acid/mesoporous silicas as suitable catalysts in quinoxaline synthesis.

[216] B. Spiegelberg, H. Jiao, R. Grauke, C. Kubis, A. Spannenberg, A. Brandt, A. Taden, H. Beck, S. Tin, J. G. de Vries, *Adv. Synth. Catal.* **2022**, *364*, 1251-1263, Use of Iridium-Catalyzed Transfer Vinylation for the Synthesis of Bio-Based (bis)-Vinyl Ethers.

[217] J. Strunk, *Nachr. Chem.* **2022**, *70*, 8-10, Kommunikation: Fremdsprache für die Führungsposition.

[218] P. Sudarsanam, A. Brueckner, *Catal. Commun.* **2022**, *170*, 106489, Preface to the special issue on "Analysis of solid-liquid interfaces in heterogeneous catalysis".

[219] T. Suhrbier, J. Bresien, A. Villinger, A. Schulz, *Cell Reports Phys. Sci.* **2022**, *3*, 100777, A four-membered heterocyclic prevented biradical that can be described as a zwitterion or masked N-heterocyclic phosphinide-ne.

[220] K. Sun, H. Shan, R. Ma, P. Wang, H. Neumann, G.-P. Lu, M. Beller, *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 6865-6872, Catalytic oxidative dehydrogenation of N-heterocycles with nitrogen/phosphorus co-doped porous carbon materials.

[221] K. Sun, H. Shan, H. Neumann, G.-P. Lu, M. Beller, *Nat. Commun.* **2022**, *13*, 1848, Efficient iron single-atom catalysts for selective ammoxidation of alcohols to nitriles.

[222] Y. Sun, J. Harloff, H. Kosslick, A. Schulz, C. Fischer, S. Bartling, M. Frank, A. Springer, *Mol. Catal.* **2022**, *517*, 112005, Influence of the framework on the catalytic performance of Rh-supported Zr-MOFs in the hydroformylation of n-alkenes.

[223] Y. Sun, Z. Yang, S.-N. Lu, Z.

Chen, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2022**, *24*, 6822-6827, Formal [4+1] Annulation of Azoalkenes with CF₃-Imidoyl Sulfoxonium Ylides and Dual Double Bond Isomerization Cascade: Synthesis of Trifluoromethyl-Containing Pyrazole Derivatives.

[224] J. Surkau, K. Blaesing, J. Bresien, D. Michalik, A. Villinger, A. Schulz, *Chem. Eur. J.* **2022**, n/a, e202201905, A Lewis Acid Stabilized Ketenimine in an Unusual Variant of the Electrophilic Aromatic Substitution.

[225] L. S. Szych, Y. Pilopp, J. Bresien, A. Villinger, J. Rabeah, A. Schulz, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202114792, A Persistent Phosphanyl-Substituted Thioketyl Radical Anion.

[226] L. Tadiello, H.-J. Drexler, T. Beweries, *Organometallics* **2022**, *41*, 2833-2843, Low-Field Flow ³¹P NMR Spectroscopy for Organometallic Chemistry: On-Line Analysis of Highly Air-Sensitive Rhodium Diphosphine Complexes.

[227] L. Tadiello, T. Gandini, B. M. Stadler, S. Tin, H. Jiao, J. G. de Vries, L. Pignataro, C. Gennari, *ACS Catal.* **2022**, *12*, 235-246, Regiodivergent Reductive Opening of Epoxides by Catalytic Hydrogenation Promoted by a (Cyclopentadienone)iron Complex.

[228] T. Taeufer, M. Quasdorf, P. Ehlers, P. Langer, *Tetrahedron* **2022**, *103*, 132537, Synthesis and properties of Tetraaryl-1,8-naphthyridines.

[229] J. Tang, Z. Yang, Y. Song, Z. Chen, X.-F. Wu, *Mol. Catal.* **2022**, *524*, 112320, Palladium-catalyzed norbornene-mediated dehydrogenative annulation of 3-iodochromones with trifluoroacetimidoyl chlorides for the construction of trifluoromethyl-substituted chromeno[2,3-c]quinolin-12-ones.

[230] Z. Tang, I. Surin, A. Rasmussen, F. Krumeich, E. V. Kondratenko, V. A. Kondratenko, J. Pérez-Ramírez, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202200772, Ceria-Supported Gold Nanoparticles as a Superior Catalyst for Nitrous Oxide Production via Ammonia Oxidation.

[231] C. Terazzi, K. Laatz, J. von Langemann, T. Werner, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2022**, *10*, 13335-13342, Synthesis of Cyclic Carbonates Catalyzed by Ca₂-Et₃N and Studies on Their Biocatalytic Kinetic Resolution.

[232] T. A. Thiel, X. Zhang, B. Radhakrishnan, R. van de Krol, F. F. Abdi, M. Schroeter, R. Schomäcker, M. Schwarze, *RSC Adv.* **2022**, *12*, 30860-30870, Kinetic investigation of para-nitrophenol reduction with photodeposited platinum nanoparticles onto tunicate cellulose.

[233] P. Thiem, S. Ludwig, A. Villinger, W. W. Seidel, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2022**, *2022*, e202200552, Boosting the Donor Effect of Side-On W(II) Alkyne Complex Based Diphosphines.

[234] C. Timmermann, P. Thiem, D. Wanitschke, M. Hüttenschmidt, J. Romischke, A. Villinger, W. W. Seidel, *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 123-132, Migratory insertion of isocyanide into a ketenyl-tungsten bond as key step in cyclization reactions.

[235] M. Traxler, S. Gisbertz, P. Pachfule, J. Schmidt, J. Roeser, S. Reischauer, J. Rabeah, B. Pieber, A. Thomas, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202117738, Acridine-Functionalized Covalent Organic Frameworks (COFs) as Photocatalysts for Metallaphotocatalytic C-N Cross-Coupling.

[236] M. Traxler, S. Reischauer, S. Vogl, J. Roeser, J. Rabeah, C. Penschke, P. Saalfrank, B. Pieber, A. Thomas, *Chem. Eur. J.* **2022**, n/a, e202202967, Programmable Photocatalytic Activity of Multicomponent Covalent Organic Frameworks Used as Metallaphotocatalysts.

[237] D. D. Truong, P. T. M. Pham, E. V. Kondratenko, M. T. Le, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2022**, *10*, 16548-16554, Au/SiO₂-Based Catalysts for Propanol/Propanal Synthesis from CO₂, C₂H₄, and H₂ in a Dual-reactor System.

[238] F. Unglaube, J. Schlapp, A. Quade, J. Schaefer, E. Mejía, *Catal. Sci. Technol.* **2022**, *12*, 3123-3136, Highly active heterogeneous hydrogenation catalysts prepared from cobalt complexes and rice husk waste.

[239] A. Vardanyan, S. Boldt, A. Villinger, P. Ehlers, P. Langer, *J. Org. Chem.* **2022**, *87*, 11296-11308, Synthesis and Properties of 1-Azapyrenes.

[240] S. P. Verevkin, D. H. Zaitsau, R. Ludwig, *Molecules* **2022**, *27*, 2321, Aprotic Ionic Liquids: A Framework for Predicting Vaporization Thermodynamics.

[241] D. Verspeek, S. Ahrens, A. Spannenberg, X. Wen, Y. Yang, Y.-W. Li, K.

- Junge, M. Beller, *Catal. Sci. Technol.* **2022**, *12*, 7341-7348, Manganese N,N,N-pincer complex-catalyzed epoxidation of unactivated aliphatic olefins.
- [242] P. N. X. Vo, N. H. A. Thu, M. Stoehr, M. N. Jorabchi, S. Wohlrab, *Chem. Ing. Tech.* **2022**, *94*, 157-165, Condensation-Assisted Separation of Alkanes by Silica Membranes with Wide Pore Size Distribution
- [243] B. Wang, Y. Sun, A. Cheng, Y. Zhu, J. Wang, Z. Chen, X.-F. Wu, *Front. in Chem.* **2022**, *10*, Metal-free synthesis of 3-trifluoromethyl-1,2,4-triazoles via multi-component reaction of trifluoroacetimidoyl chlorides, hydrazine hydrate and benzene-1,3,5-triyl triformate.
- [244] C. Wang, L. M. Azofra, P. Dam, M. Sebek, N. Steinfeldt, J. Rabeah, O. El-Sepelgy, *ACS Catal.* **2022**, *12*, 8868-8876, Catalytic Desaturation of Aliphatic Amides and Imides Enabled by Excited-State Base-Metal Catalysis.
- [245] E. Wang, A. Mahmood, S.-G. Chen, W. Sun, T. Muhmood, X. Yang, Z. Chen, *ACS Catal.* **2022**, *12*, 11206-11215, Solar-Driven Photocatalytic Reforming of Lignocellulose into H₂ and Value-Added Biochemicals.
- [246] H. Wang, R. Schmack, S. Sokolov, E. V. Kondratenko, A. Mazheika, R. Kraehnert, *ACS Catal.* **2022**, *12*, 9325-9338, Oxide-Supported Carbonates Reveal a Unique Descriptor for Catalytic Performance in the Oxidative Coupling of Methane (OCM).
- [247] H. Wang, H. Yang, Y. Jiao, X. Wen, H. Jiao, *Appl. Surface Sci.* **2022**, *593*, 153396, Surface hydroxyl dependent adsorption of ruthenium on SiO₂(001) – Understanding metal-support interaction.
- [248] J.-S. Wang, C. Li, J. Ying, T. Xu, W. Lu, C.-Y. Li, X.-F. Wu, *J. Catal.* **2022**, *408*, 81-87, Supported palladium-catalyzed carbonylative cyclization of 2-bromonitrobenzenes and alkynes to access quinolin-4(1H)-ones.
- [249] J.-S. Wang, C. Li, J. Ying, T. Xu, W. Lu, C.-Y. Li, X.-F. Wu, *J. Catal.* **2022**, *413*, 713-719, Activated carbon fibers supported palladium as efficient and easy-separable catalyst for carbonylative cyclization of o-alkynylphenols with nitroarenes: Facile construction of benzofuran-3-carboxamides.
- [250] J.-S. Wang, J. Zhang, S. Wang, J. Ying, C.-Y. Li, X.-F. Wu, *J. Catal.* **2022**, *414*, 313-318, Palladium-catalyzed domino carbonylative cyclization to access functionalized heterocycles.
- [251] L.-C. Wang, B. Chen, X.-F. Wu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202203797, Cobalt-Catalyzed Direct Aminocarbonylation of Ethers: Efficient Access to α -Amide Substituted Ether Derivatives.
- [252] L.-C. Wang, B. Chen, Y. Zhang, X.-F. Wu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202207970, Nickel-Catalyzed Four-Component Carbonylation of Ethers and Olefins: Direct Access to γ -Oxy Esters and Amides.
- [253] L.-C. Wang, J.-X. Xu, X.-F. Wu, *J. Catal.* **2022**, *414*, 84-89, Cobalt-catalyzed alkoxy-carbonylation of ethers: Direct synthesis of α -oxy esters from phenols and alcohols.
- [254] P. Wang, Z. Cao, Y. X. Wang, H. Neumann, M. Beller, *Eur. J. Org. Chem.* **2022**, *2022*, e202200663, Palladium-Catalyzed Carbonylation of Allylic Chlorides to β,γ -Unsaturated Esters/Amides under Mild Conditions.
- [255] P. Wang, Y. Wang, H. Neumann, M. Beller, *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 13459-13465, Rh-catalyzed alkoxy-carbonylation of unactivated alkyl chlorides.
- [256] P. Wang, Y. Wang, H. Neumann, M. Beller, *Chem. Eur. J.* **2022**, n/a, e202203342, Rhodium-Catalyzed Formylation of Unactivated Alkyl Chlorides to Aldehydes.
- [257] P. Wang, J. Yang, K. Sun, H. Neumann, M. Beller, *Org. Chem. Front.* **2022**, *9*, 2491-2497, A general synthesis of aromatic amides via palladium-catalyzed direct aminocarbonylation of aryl chlorides.
- [258] Q. Wang, L. Yao, J.-S. Wang, J. Ying, X.-F. Wu, *Mol. Catal.* **2022**, *524*, 112302, Palladium-catalyzed aminocarbonylative cyclization of benzyl chlorides with 2-nitroaryl alkyne to construct indole derivatives.
- [259] Q. Wang, L. Yao, J.-S. Wang, J. Ying, X.-F. Wu, *J. Org. Chem.* **2022**, *87*, 3874-3882, Additive-Controlled Divergent Synthesis of Indole and 4H-Benzo[d][1,3]oxazine Derivatives: Palladium-Catalyzed Carbonylative Cyclization of 2-Alkynylanilines and Benzyl Chlorides.
- [260] S. Wang, L. Yao, J.-S. Wang, J. Ying, X.-F. Wu, *Mol. Catal.* **2022**, *524*, 112303, Cobalt-catalyzed C-H annulation of N-arylpicolinamides with alkynes for (NH)-isoquinolones synthesis.
- [261] S. Wang, J. Zhang, J.-S. Wang, J. Ying, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2022**, *24*, 8843-8847, Palladium-Catalyzed Cascade Carbonylative Synthesis of Perfluoroalkyl and Carbonyl-Containing 3,4-Dihydroquinolin-2(1H)-one Derivatives.
- [262] Y. Wang, Q. He, Z. Cao, P. Wang, G. Chen, M. Beller, *Org. Chem. Front.* **2022**, *9*, 5592-5598, Hypervalent-iodine promoted selective cleavage of C(sp³)-C(sp³) bonds in ethers.
- [263] Z. Wang, X.-F. Wu, in *The Chemical Transformations of C1 Compounds*, **2022**, pp. 1439-1474.
- [264] S. Weber, R. T. Zimmermann, J. Bremer, K. L. Abel, D. Poppitz, N. Prinz, J. Ilsemann, S. Wendholt, Q. Yang, R. Pashminehazar, F. Monaco, P. Cloetens, X. Huang, C. Kübel, E. Kondratenko, M. Bauer, M. Bäumer, M. Zobel, R. Gläser, K. Sundmacher, T. L. Sheppard, *ChemCatChem* **2022**, *14*, e202101878, Digitization in Catalysis Research: Towards a Holistic Description of a Ni/Al₂O₃ Reference Catalyst for CO₂ Methanation.
- [265] D. Wei, R. Sang, A. Moazezbarabadi, H. Junge, M. Beller, *JACS Au* **2022**, *2*, 1020-1031, Homogeneous Carbon Capture and Catalytic Hydrogenation: Toward a Chemical Hydrogen Battery System.
- [266] D. Wei, R. Sang, P. Sponholz, H. Junge, M. Beller, *Nat. Energy* **2022**, *7*, 438-447, Reversible hydrogenation of carbon dioxide to formic acid using a Mn-pincer complex in the presence of lysine.
- [267] D. Wei, X. Shi, R. Qu, K. Junge, H. Junge, M. Beller, *ACS Energy Lett.* **2022**, *7*, 3734-3752, Toward a Hydrogen Economy: Development of Heterogeneous Catalysts for Chemical Hydrogen Storage and Release Reactions.
- [268] D. Wei, X. Shi, P. Sponholz, H. Junge, M. Beller, *ACS Centr. Sci.* **2022**, *8*, 1457-1463, Manganese Promoted (Bi)carbonate Hydrogenation and Formate Dehydrogenation: Toward a Circular Carbon and Hydrogen Economy.
- [269] L. Wei, H. Yang, P. Ren, Y. Yang, Y.-W. Li, R. Li, X.-D. Wen, H. Jiao, *Microporous Mesoporous Mater.* **2022**, *344*, 112184, Distribution of multiple Al substitution in HY zeolite and Brønsted acid strength - A periodic DFT study.
- [270] P. Wei, Y. Zhu, J. Zhang, J. Ying, X.-F. Wu, *J. Catal.* **2022**, *414*, 349-355, Cobalt-catalyzed direct functionalization of indoles with isocyanides.
- [271] J. Weiß, Q. Yang, U. Bentrup, E. V. Kondratenko, A. Brueckner, C. Kubis, *ChemCatChem* **2022**, *14*, e202200577, Operando DRIFT and In situ Raman Spectroscopic Studies on Aspects of CO₂ Fischer-Tropsch Synthesis Catalyzed by Bulk Iron Oxide-Based Catalysts.
- [272] D. Wen, Z. Shen, X. Qi, X.-F. Wu, *Eur. J. Org. Chem.* **2022**, *2022*, e202200971, Palladium-Catalyzed Cascade Carbonylative Synthesis of Functionalized Isoquinoline-1,3-diones and Oxindoles Using Dimethyl Carbonate as both Solvent and Reactant.
- [273] F.-P. Wu, H.-Q. Geng, X.-F. Wu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202211455, Copper-Catalyzed Boroaminomethylation of Olefins to γ -Boryl Amines with CO as C1 Source.
- [274] F.-P. Wu, X.-F. Wu, *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 4321-4326, Catalyst-controlled selective borocarbonylation of benzylidenecyclopropanes: regio-divergent synthesis of γ -vinylboryl ketones and β -cyclopropylboryl ketones.
- [275] F.-P. Wu, Y. Yang, D. P. Fuentes, X.-F. Wu, *Chem* **2022**, *8*, 1982-1992, Copper-catalyzed carbonylative cationation of olefins: Direct synthesis of γ -boryl esters.
- [276] S.-M. Wu, M. Beller, X.-Y. Yang, *Matter* **2022**, *5*, 3104-3107, A clear view of zeolite-catalyzed processes.
- [277] J.-X. Xu, Z.-P. Bao, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2022**, *24*, 1848-1852, Palladium-Catalyzed Carbonylation of Disulfides and Ethylene: Synthesis of β -Thiopropionate Thioesters.
- [278] J.-X. Xu, C.-S. Kuai, B. Chen, X.-F. Wu, *Chem Catal.* **2022**, *2*, 477-498, Transition-metal-catalyzed carbonylative cross-coupling with alkyl carbon nucleophiles.
- [279] J.-X. Xu, C.-S. Kuai, X.-F. Wu, *J. Org. Chem.* **2022**, *87*, 6371-6377, Cobalt-Catalyzed Four-Component Carbonylation of Methylarenes with Ethylene and Alcohols.
- [280] J.-X. Xu, L.-C. Wang, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2022**, *24*, 4820-4824, Palladium-Catalyzed Desulfonative Carbonylation of Thiosulfonates: Elimination of SO₂ and Insertion of CO.
- [281] J.-X. Xu, L.-C. Wang, X.-F. Wu, *Chem. Asian J.* **2022**, *17*, e202200928, Non-Noble Metal-Catalyzed Carbonylative Multi-Component Reactions.
- [282] R.-R. Xu, X. Bao, Y.-W. Huo, R.-G. Miao, D. Wen, W. Dai, X. Qi, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2022**, *24*, 6477-6482, Palladium-Catalyzed Domino Carbopalladation/Carbonylative Cyclization: Synthesis of Heterocycles bearing Oxindoles and 3-Acylbenzofuran/3-Acylindole Moieties.
- [283] R.-R. Xu, W. Wang, X. Qi, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2022**, *9*, 1417-1421, Palladium-catalyzed cascade Heck-type thiocarbonylation for the synthesis of functionalized thioesters.
- [284] R.-R. Xu, D. Wen, X. Qi, X.-F. Wu, *Org. Biomol. Chem.* **2022**, *20*, 2605-2608, Palladium-catalyzed cascade Heck-type cyclization and reductive aminocarbonylation for the synthesis of functionalized amides.
- [285] H. Yang, X. Geng, Y. Yang, Y.-W. Li, X.-D. Wen, H. Jiao, *Appl. Surf. Sci.* **2022**, *600*, 154151, Mechanisms of CO₂ hydrogenative conversion on supported Ni/ZrO₂ catalyst.
- [286] H. Yang, L.-C. Wang, Y. Zhang, D. Zheng, Z. Chen, X.-F. Wu, *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 3526-3532, Controllable access to trifluoromethyl-containing indoles and indolines: palladium-catalyzed regioselective functionalization of unactivated alkenes with trifluoroacetimidoyl chlorides.
- [287] H. Yang, J. Zhang, Z. Chen, X.-F. Wu, *Chem. Record* **2022**, *22*, e202100220, TFBen (Benzene-1,3,5-triyl triformate): A Powerful and Versatile CO Surrogate.
- [288] J. Yang, F. G. Delolo, A. Spannenberg, R. Jackstell, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202112597, A Selective and General Cobalt-Catalyzed Hydroaminomethylation of Olefins to Amines.
- [289] J. Yang, S. Ghosh, J. Roeser, A. Acharjya, C. Penschke, Y. Tsutsui, J. Rabeah, T. Wang, S. Y. Djoko Tameu, M.-Y. Ye, J. Grüneberg, S. Li, C. Li, R. Schomäcker, R. Van De Krol, S. Seki, P. Saalfrank, A. Thomas, *Nat. Commun.* **2022**, *13*, 6317, Constitutional isomerism of the linkages in donor-acceptor covalent organic frameworks and its impact on photocatalysis.
- [290] Q. Yang, V. A. Kondratenko, S. A. Petrov, D. E. Doronkin, E. Saraçı, H. Lund, A. Arinchtein, R. Kraehnert, A. S. Skrypnik, A. A. Matvienko, E. V. Kondratenko, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202116517, Identifying Performance Descriptors in CO₂ Hydrogenation over Iron-Based Catalysts Promoted with Alkali Metals.
- [291] Z. Yang, J. Tang, Z. Chen, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2022**, *24*, 7288-7293, Ruthenium-Catalyzed Hydroxyl-Directed peri-Selective C-H Activation and Annulation of 1-Naphthols with CF₃-Imidoyl Sulfoxonium Ylides for the Synthesis of 2-(Trifluoromethyl)-2,3-dihydrobenzo[de]chromen-2-amines.
- [292] L. Yao, P. Wei, J. Ying, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2022**, *9*, 2685-2689, Nickel-catalyzed carbonylative domino cyclization of arylboronic acid pinacol esters with 2-alkynyl nitroarenes toward N-aryloxy indoles.
- [293] Z. Yin, X.-F. Wu, in *The Chemical Transformations of C1 Compounds*, **2022**, pp. 249-288.
- [294] U. Yorsh, A. S. Behr, N. Kockmann, M. Holena, in *ITAT'22 / IW-CIDM CEUR Workshop*, **2022**, pp. 28-34.
- [295] Y. Yuan, J.-X. Xu, X.-F. Wu, *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 12110-12113, Cooperative Cu/Pd-catalyzed borocarbonylation of ethylene.
- [296] A. Zanina, V. A. Kondratenko, H. Lund, J. Li, J. Chen, Y. Li, G. Jiang, E. V. Kondratenko, *ACS Catal.* **2022**, *12*, 15361-15372, The Role of Adsorbed and Lattice Oxygen Species in Product Formation in the Oxidative Coupling of Methane over M₂WO₄/SiO₂ (M = Na, K, Rb, Cs).
- [297] B. Zhang, C. Kubis, R. Franke, *Science* **2022**, *377*, 1223-1227, Hydroformylation catalyzed by unmodified cobalt carbonyl under mild conditions.
- [298] J. Zhang, S. Wang, J.-S. Wang, J. Ying, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2022**, *9*, 5219-5224, Palladium-catalyzed carbonylative synthesis of indole-3-carboxamides from 2-ethylanilines and nitroarenes.
- [299] Q. Zhang, T. Otroshchenko, E. V. Kondratenko, *Catal. Sci. Technol.* **2022**, *12*, 5210-5216, Fundamentals and application potential of the synergy effect between ZnO and Mo/SiO₂ for propene production

in the metathesis of ethylene and trans-2-butene.

[300] Y. Zhang, Z.-P. Bao, J.-X. Xu, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2022**, *24*, 6845-6850, Palladium-Catalyzed Perfluoroalkylative Carbonylation of 2-Alkylaryl Trifluoromethanesulfonates: Base-Controlled Selective Access to β -Perfluoroalkyl Amides.

[301] Y. Zhang, S. Ling, P. Li, Z. Chen, X.-F. Wu, *Org. Lett.* **2022**, *24*, 8864-8869, Rh(III)-Catalyzed Dual C-H Activation/Cascade Annulation of Benzimidates and CF₃-Imidoyl Sulfoxonium Ylides for the Synthesis of Trifluoromethyl-Decorated Benzo[de][1,8]naphthyridines.

[302] Y. Zhang, X.-F. Wu, *Chinese J. Org. Chem.* **2022**, *42*, 3007-3009, Switchable Radical Carbonylation by Philicity Regulation.

[303] Y. Zhang, Z. Yang, Z. Chen, L. Liu, X.-F. Wu, *Adv. Synth. Catal.* **2022**, *364*, 1044-1049, Copper-Catalyzed Decarbonylative Cyclization of Isatins and Trifluoroacetimidohydrazides for the Synthesis of 2-(5-Trifluoromethyl-1,2,4-triazol-3-yl)anilines.

[304] Y. Zhang, Y. Yuan, H.-Q. Geng, J.-X. Xu, X.-F. Wu, *J. Catal.* **2022**, *413*, 214-220, Visible light-induced perfluoroalkylative carbonylation of unactivated alkenes.

[305] D. Zhao, K. Guo, S. Han, D. E. Doronkin, H. Lund, J. Li, J.-D. Grunwaldt, Z. Zhao, C. Xu, G. Jiang, E. V. Kondratenko, *ACS Catal.* **2022**, *12*, 4608-4617, Controlling Reaction-Induced Loss of Active Sites in ZnO_x/Silicalite-1 for Durable Nonoxidative Propane Dehydrogenation.

[306] F. Zhao, H.-J. Ai, X.-F. Wu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202200062, Copper-Catalyzed Substrate-Controlled Carbonylative Synthesis of α -Keto Amides and Amides from Alkyl Halides.

[307] F. Zhao, X.-W. Gu, R. Franke, X.-F. Wu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202214812, Copper-Catalyzed 1,2-Dicarbonylative Cyclization of Alkenes with Alkyl Bromides via Radical Cascade Process.

[308] F. Zhao, P. Russo, R. Mancuso, B. Gabriele, X.-F. Wu, *J. Catal.* **2022**, *413*, 907-912, Copper-catalyzed carbonylative coupling of alkyl iodides with phenols for the synthesis of esters.

[309] P. Zhao, Y. He, X. Wen, H. Jiao, *Surf. Sci.* **2022**, *715*, 121936, Dissociative adsorption of H₂O and CO₂ on the clean and O-pre-covered high index Ru surfaces: Corrugated Ru(11-21) and stepped Ru(20-21) surfaces.

[310] S. Zhao, H.-Q. Liang, X.-M. Hu, S. Li, K. Daasbjerg, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202204008, Challenges and Prospects in the Catalytic Conversion of Carbon Dioxide to Formaldehyde.

[311] S. Zheng, S. Chakraborty, E. Baráth, S. Tin, J. G. de Vries, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2022**, *10*, 15642-15647, Synthesis of N-Substituted 3-Hydroxypyridinium Salts from Bioderived 5-Hydroxymethylfurfural in Water.

[312] S. Zheng, W. Smit, A. Spannenberg, S. Tin, J. G. de Vries, *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 4639-4642, Synthesis of α -keto aldehydes via selective Cu(I)-catalyzed oxidation of α -hydroxy ketones.

[313] B. Zhou, Z. Ma, A. M. Alenad, C. Kreyenschulte, S. Bartling, M. Beller, R. V. Jagadeesh, *Green Chem.* **2022**, *24*, 4566-4572, Cobalt-catalyzed CH-alkylation of indoles with alcohols by borrowing hydrogen methodology.

[314] F. Zhu, P. Yin, X.-F. Wu, *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 12122-12126, Regioselective catalytic carbonylation and borylation of alkynes with aryldiazonium salts toward α -unsubstituted β -boryl ketones.

[315] Y. Zhu, B. Guo, S. Gao, J. Ying, X.-F. Wu, *Org. Chem. Front.* **2022**, *9*, 5005-5009, Cobalt-catalyzed carbonylative synthesis of free (NH)-tetrahydro- β -carbolinones from tryptamine derivatives.

[316] Y. Zhu, J. Ying, X.-F. Wu, *Mol. Catal.* **2022**, *524*, 112267, Cobalt-catalyzed carbonylative cyclization of N-(2-Vinylphenyl)nicotinamides to access (NH)-quinolin-2(1H)-ones.

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

S. 1, Cover: LIKAT/Thomas Müller

S. 4: LIKAT/Martha Höhne

S. 6/7: LIKAT/Thomas Müller

S. 8-11: LIKAT

S. 14: LIKAT

S. 15: LIKAT/nordlicht

S. 25: LIKAT/nordlicht

S. 28: LIKAT

S. 29: LIKAT/nordlicht

S. 30: LIKAT

S. 31: LIKAT/nordlicht

S. 32: LIKAT

S. 34: Cover Picture in *ChemCatChem* (11/2021). DOI: <https://doi.org/10.1002/cctc.202100646>.

S. 37: LIKAT (Robert Francke/Bernd Müller)

S. 39: LIKAT/ Tobias Täufer

S. 40: Front Cover in *ChemCat Chem* (8/2023) DOI: <https://doi.org/10.1002/cctc.202300441>.

S. 41: LIKAT/nordlicht

S. 43: LIKAT

S. 44: LIKAT/ Thomas Müller

S. 46: ©Eikelpoth/Evonik AG, "Elements"-Ausgabe 03/2022, S. 48-53

S. 47: Cover Feature in *Chem. Eur. J.* (11/2022) DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.202200379>

Cover Picture in *ChemSusChem* (5/2022) DOI: <https://doi.org/10.1002/cssc.202200247>

K. Junge/LIKAT

S. 49: Cover Picture in *JACS Au* (2/2022), May 2022, Vol. 2, No. 5. pubs.acs.org/JACS Au. (DOI Article: <https://doi.org/10.1021/jacsau.1c00489>).

H. Junge/LIKAT

S. 50: Helfried Neumann

S. 51: LIKAT/nordlicht

S. 53: Fabian Reiß/LIKAT

S. 54: Hans-Joachim Drexler

S. 56: LIKAT/nordlicht

S. 57: Cover Picture in *ChemCatChem*(13/2021) DOI: <https://doi.org/10.1002/cctc.202001974>.

S. 58: Evgenii Kondratenko

S. 59: Uwe Rodemerck

S. 61: LIKAT/nordlicht

S. 62: Cover Picture *Catal. Sci. Technol.* (12/2022). F. Poovan, V. G. Chandrashekar, K. Natte, R. V. Jagadeesh, *Catal. Sci. Technol.* **2022**, *12*, 6623-6649. (DOI: <https://doi.org/10.1039/D2CY00232A>)

S. 63: LIKAT/nordlicht

S. 64/65: LIKAT/nordlicht

S. 66/67: LIKAT/nordlicht

S. 68: Jabor Rabeah

S. 70: Cover Picture in *ChemCatChem* (2/2023) DOI: <https://doi.org/10.1002/cctc.202201604>.

S. 71: Udo Armbruster

S. 73: LIKAT/nordlicht

S. 74: Robert Francke

S. 76: Cover Picture in *ChemCatChem* (11/2021) DOI: <https://doi.org/10.1002/cctc.202100646>

S. 77: LIKAT/Nordlicht

S. 82: Cover Picture in *EurJIC* (15/2022) DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic/202200262>.

S. 83: Osama El-Sepelgy

S. 86: Malte Brasholz

S. 87: Mirjam Schröder

Cover Picture in *ChemPhotoChem* (11/2021) DOI: <https://doi.org/10.1002/cptc.202100237>

S. 88: Marko Hapke

S. 89: Ralf Ludwig (<https://ludwig.chemie.uni-rostock/forschung/methoden/schwingungsspektroskopie/>)

S. 90: Klaus Neymeyr

S. 91: LIKAT/Nordlicht

S. 93: LIKAT/nordlicht

S. 94/95: LIKAT/nordlicht

S. 96: LIKAT/nordlicht, Eszter Báráth (privat)

S. 97: LIKAT/nordlicht, Milica Feldt (privat)

S. 98: LIKAT/nordlicht, LIKAT

S. 99: LIKAT/nordlicht

S. 102: LIKAT/nordlicht

S. 103: Martin Grolms

S. 105: Bildmontage: LIKAT

S. 106: Paul Hünemörder

S. 106: LIKAT/Maslack

S. 109: LIKAT/nordlicht

S. 111: LIKAT/ Thomas Müller

S. 112/114: LIKAT/Martha Höhne

S. 113: LIKAT

S. 115: LIKAT/nordlicht

