

Pressemitteilung

Technische Universität Chemnitz

Dipl.-Ing. Mario Steinebach

30.01.2025

<http://idw-online.de/de/news846588>

Forschungsergebnisse, Wissenschaftliche Publikationen
Chemie, Umwelt / Ökologie, Werkstoffwissenschaften
überregional



Neuartiger bifunktioneller Katalysator ermöglicht neue Anwendungen

Ein Team von Prof. Dr. Johannes Teichert und Prof. Dr. Martin Breugst berichtet im Journal of the American Chemical Society über „Ansteuerung“ von Molekülen durch Katalysatoren mit zwei reaktiven Stellen

In einer aktuellen Ausgabe der renommierten Fachzeitschrift Journal of the American Chemical Society stellt das Team um die beiden Professoren Johannes Teichert (Professur Organische Chemie) und Martin Breugst (Professur Theoretische Organische Chemie) der Technischen Universität Chemnitz seine Forschungsergebnisse über die sogenannte „ortsselektive Katalyse“ vor. „Diese Art der Selektivität kann nur sehr selten realisiert werden, da sie eine große Herausforderung darstellt – nämlich die Unterscheidung verschiedener, aber sehr ähnlicher reaktiver Stellen innerhalb eines Moleküls. Diese Art von Reaktion ist von der Natur inspiriert, da Enzyme vielfach mit hoher Präzision diese ortsselektiven Reaktionen ermöglichen können. Dies mit einem menschengemachten Katalysator nachzubilden, ist allerdings sehr schwierig, da die Passgenauigkeit der künstlichen Verbindungen oft nicht hoch genug ist“, erklärt Teichert.

Doppelt reaktiver Katalysator unterscheidet zwischen verschiedenen Amiden

In der Publikation beschreibt das Chemnitzer Forschungsteam, dass mit einem sogenannten „bifunktionellen Katalysator“ zwischen strukturell sehr eng verwandten Untereinheiten der Moleküle, nämlich zwei Amiden, unterschieden werden kann. Bifunktionell bedeutet, dass im Katalysator zwei reaktive Untereinheiten Hand in Hand arbeiten – eine ist für die Erkennung des jeweiligen Amids zuständig, während die andere die eigentliche Reaktion, eine sogenannte Reduktion dann direkt am erkannten Amid durchführt. Wichtig dabei ist allerdings, dass die beiden Untereinheiten nur dann wirksam sind, wenn sie sich in unmittelbarer räumlicher Nähe zueinander befinden, also im selben Molekül miteinander verbunden sind.

Was die Bedeutung der aktuellen Arbeit noch unterstreicht ist die Tatsache, dass bisher kein anderer Katalysator oder Reagenz in der Lage ist, zwischen verschiedenen Amiden zu unterscheiden. In diesem Zuge konnten die Forscherinnen und Forscher der TU Chemnitz gleich mehrere sogenannten „privilegierte Amide“ identifizieren, die jeweils vom Katalysator bevorzugt angesteuert werden – auch wenn anderer Amide im selben Molekül vorhanden sind. Während diese „privilegierten Amide“ vom Katalysator schnell umgesetzt werden, reagieren die „nicht-privilegierten Amide“ kaum oder nur sehr langsam. Das ist die entscheidende Erkenntnis, die der Doktorand Dimitrios-Ioannis Tzaras aus der Arbeitsgruppe für Organische Chemie bei seinen Forschungsarbeiten herausfand.

Zusammenspiel zwischen Experiment und Theorie

Für ein erstes grundlegendes Verständnis waren neben den Experimenten auch quantenmechanische Berechnungen der Arbeitsgruppe von Prof. Breugst entscheidend. „Zur Aufklärung der Ursache der seltenen Ortsselektivität sind diese Berechnungen ein wichtiger Puzzlestein, ohne den hier wichtige Erkenntnisse fehlen würden“, sagt Breugst zur gemeinsamen Arbeit.

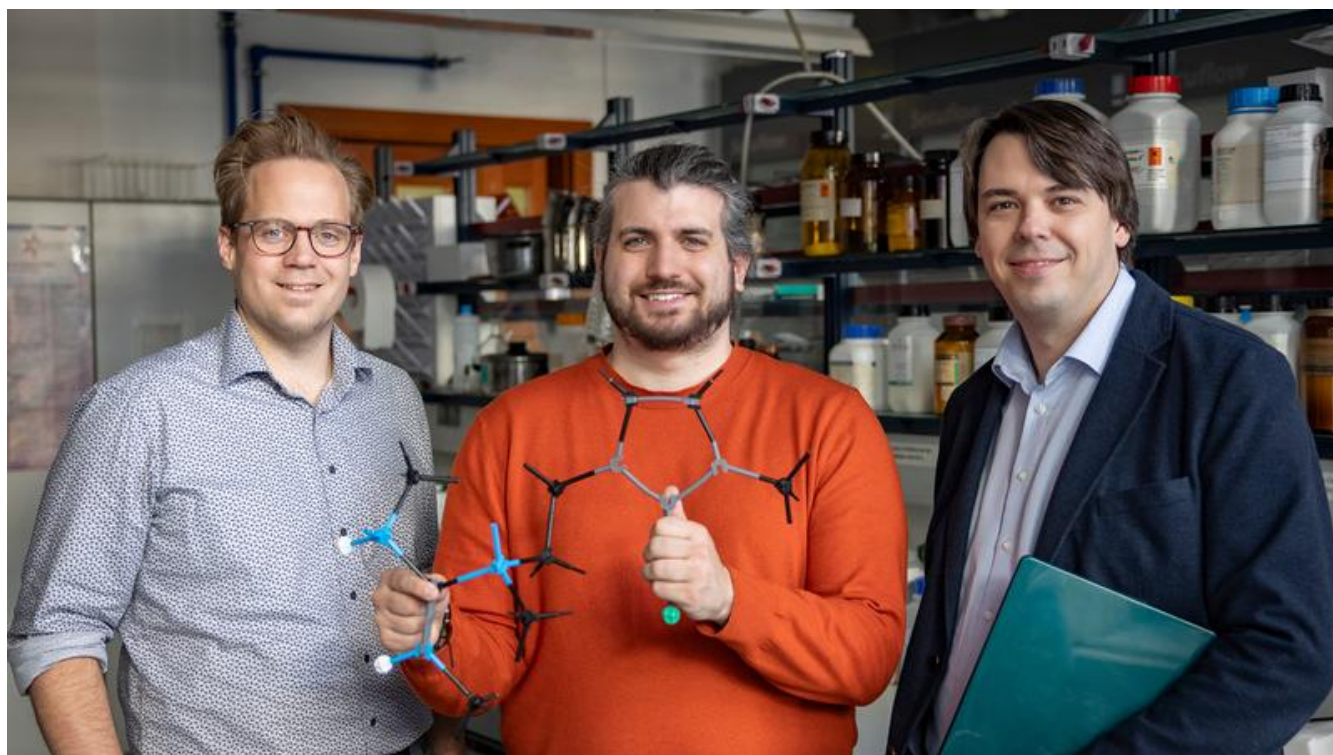
Mögliche Anwendung in der Wirkstoffforschung oder in der nachhaltigen Chemie

Amide sind wichtige Bausteine sowohl in Wirkstoffen als auch in Materialien, weshalb die vorliegende Arbeit wichtige Erkenntnisse für eine einfachere Herstellung komplexer biologisch aktiver Moleküle oder beispielsweise für eine hocheffizientes Plastikrecycling mit nachhaltigem Wasserstoff liefert. „Insbesondere in dieser Richtung forschen wir künftig aktiv weiter“, so Teichert.

Publikation: Dimitrios-Ioannis Tzaras, Mahadeb Gorai, Thomas Jacquemin, Thimo Arndt, Birte M. Zimmermann, Martin Breugst, Johannes F. Teichert. Site-Selective Copper(I)-Catalyzed Hydrogenation of Amides. Journal of the American Chemical Society. January 3, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1021/jacs.4c14174>

wissenschaftliche Ansprechpartner:

Prof. Dr. Johannes Teichert, Tel. +49 (0)371 531-33715, E-Mail johannes.teichert@chemie.tu-chemnitz.de



Sie lieferten Erkenntnisse für die molekulare Erkennung komplexer Moleküle (v. l.): Prof. Dr. Johannes Teichert und Dimitrios-Ioannis Tzaras (beide Professur Organische Chemie) und Prof. Dr. Martin Breugst (Professur Theoretische Organische Chemie).

Foto: Jacob Müller