

Katalyseforscher, vereinigt Euch!

Bruce C. Gates* und Tobin J. Marks

Auf Katalyse bauen zahlreiche für die Menschen nützliche chemische Verfahren auf, und sie vermittelt jede Menge an für lebende Organismen essenziellen Reaktionen. Daher überrascht es nicht, dass Katalyseforschung schon seit über hundert Jahren durch die Vergabe von Nobel-Preisen – allein vier in den letzten elf Jahren – gewürdigt wurde. Trotzdem ist sie heute keine genuine wissenschaftliche Disziplin. Daher sind Fokus und Inhalt bei der Vermittlung von Katalysethemen an Studenten der Lebenswissenschaften erheblich anders als bei Chemie- und Chemieingenieurstudenten. Des Weiteren werden die neueren Nobel-Preisträger mit Katalysethemen häufig als „Synthesechemiker“ bezeichnet. Auch viele Katalysearbeiten in der *Angewandten Chemie* sind als „Synthesearbeiten“ klassifiziert. Natürlich kann man argumentieren, dass die Katalyse etwa so breit ist wie Chemie, Biochemie, Chemieingenieurwesen und Materialwissenschaften zusammen und dass man deshalb homogene und heterogene Katalyse (oder genauer Bio-, Organo-, Metall-, Elektro-, Photo- und Oberflächenkatalyse) besser separat betrachtet. Wir behaupten: Im Gegenteil, die Katalyse ist ein kohärentes Gebiet, das von einer besseren Kommunikation zwischen den Forschern verschiedener Teildisziplinen erheblich profitieren würde.

Die Zersplitterung der Katalyseforschung hat historische Wurzeln; sie spiegelt die technische Bedeutung der Oberflächenkatalyse, die Tatsache, dass

die Organometallchemie für einen Großteil der Katalyse in Lösung essenziell ist, und die Bedeutung der Organokatalyse für Synthesen im Labormaßstab ebenso wieder wie Unterschiede in den Sprachen, Bildungshintergründen und Regeln der Organisationen, die spezifische Forschungsgebiete fördern. Die Zersplitterung ist bei großen wissenschaftlichen Tagungen besonders offensichtlich. Beim Treffen der American Chemical Society 2012 in San Diego war das Presidential Symposium mit dem Schwerpunkt Katalyse versehentlich parallel zur Ehrung der

Die Katalyse ist eine Disziplin sui generis

Gewinner des ACS Somorjai Award für kreative Forschung in der Katalyse angesetzt. Die erste Veranstaltung wandte sich an ein breites Publikum, die zweite hatte die Oberflächenkatalyse zum Thema, was es Zuhörern schwer machte, von beiden Symposien zu profitieren. Beim internationalen Katalysekongress 2012 in München besuchten fast alle der 2200 Teilnehmer die Plenarvorträge (Schwerpunkt Oberflächenkatalyse), doch bei den spezialisierten Symposien trennten sie sich. Zeitschriften wie die *Angewandte Chemie* mit der Chemie in ihrer ganzen Breite als Thema veröffentlichten viele Katalysearbeiten, aber die meisten Gutachter dürften aus den jeweiligen Teildisziplinen stammen. Die etablierten Katalyse-Spezialzeitschriften sind Nischenzeitschriften, aber weil Autoren dort veröffentlichen wollen, wo sie gelesen werden, kämpfen die Herausgeber darum, das Spektrum über ihre traditionellen Teildisziplinen hinaus zu erweitern. Neue Katalysezeitschriften wie *ChemCatChem*, der bald *ACS Catalysis* und *Catalysis Science & Technology* folgten, steuern gegen diesen



Bruce C. Gates
University of California, Davis



Tobin J. Marks
Northwestern University

Trend; wir begrüßen diese Neuerungen und sind gespannt, wie sie die Katalyseliteratur insgesamt beeinflussen werden.

Uns ermutigen die Bemühungen von Katalyseorganisationen, Wissenschaftler verschiedener Teildisziplinen zusammenzubringen. Bei Bio- und Oberflächenkatalyse gibt es viele Gemeinsamkeiten, aber ihre Forscher haben sich kaum ausgetauscht oder zusammengearbeitet – bis man anfing, die Aussichten für den großtechnischen Einsatz der Katalyse bei der Biomasseumwandlung zu prüfen. Auch wenn Biokatalysespezialisten meist biokatalytische Wege bevorzugen und Oberflächenkatalyseforscher Prozesse mit anorganischen Festkörperkatalysatoren, führen neuere Versuche zu Prozesskonzepten, die von beiden Teildisziplinen profitieren.

In den vergangenen Jahren haben sich die Biokatalyse und die Oberflächenkatalyse gegenseitig befriedet. So wird der Begriff Umsatzfrequenz, der ursprünglich nur in der Enzymkatalyse zu Hause war, inzwischen auch in der Katalyse durch Metallooberflächen verwendet. Sättigungskinetiken an isolierten biokatalytischen Zentren (z.B. die Michaelis-Menten-Kinetik) lassen sich grob mit denselben Gleichungen in der Oberflächenkatalyse (z.B. Langmuir-Hinshelwood-Kinetik) vergleichen. Diese Zusammenhänge hat G.-M. Schwab schon früh in seinem Klassiker „Katalyse vom Standpunkt der chemischen Kinetik“ von 1931 aufgezeigt, die Zusammenhänge zu erkennen war aber nicht einfach, und die Akzeptanz der Kohärenz hat über die Jahre sogar eher abgenommen. So wurde ein Modell, das den Einfluss der Intrapartikel-Diffusion auf Reaktionsgeschwindigkeiten in po-

[*] B. C. Gates
Department of Chemical Engineering and Materials Science
University of California Davis
One Shields Avenue
Davis, CA 95616 (USA)
E-Mail: bcgates@ucdavis.edu

T. J. Marks
Department of Chemistry, Northwestern University, Evanston (USA)

rösen Festkörperkatalysatoren berücksichtigte und unabhängig von Damköhler, Thiele und Zeldowitsch entwickelt worden war, Jahrzehnte später von Forschern, die über trägerfixierte Enzyme arbeiteten, wiederentdeckt, ohne dass diese die grundlegenden Arbeiten gekannt hatten. Es scheint, als würden die meisten Katalyseforscher auf leistungsfähige Methoden zur Aufklärung komplexer gekoppelter Reaktionsnetzwerke vertrauen, sich gegenseitig aber wenig Vertrauen entgegenbringen!

Jargon und Ad-hoc-Nomenklatur trugen ebenfalls zur Zersplitterung der Katalyseforschung bei, wobei alle Teildisziplinen unter unpassendem Gebrauch leiden: Man betrachte nur *heterogene Katalyse* (besser: *Oberflächenkatalyse* oder *Grenzflächenkatalyse*), *Heterogenkatalysator* (*Festkörperkatalysator* – oder noch genauer ein Katalysator mit nichteinheitlichen Oberflächenzentren), *Tandemkatalyse* (im Wesentlichen *bifunktionelle Katalyse*), *heterogenisierter Homogenkatalysator* (*trägerfixierter Molekülkatalysator*), *Operando-Spektroskopie* (*Spektroskopie des Katalysators während der Reaktion*), *Substrat* (manche meinen damit den *Reaktanten*, andere den *Träger*). Das Wort *Mechanismus* ist derzeit in der Oberflächenkatalyse weniger genau definiert als in der Molekülkatalyse. Reaktionsnetzwerke werden fälschlich als Reaktionsmechanismen identifiziert; Reaktionen werden als (elementare) Stufen fehlinterpretiert. In allen Teildisziplinen wird der Begriff *Reaktionsgeschwindigkeit* oft zur Bezeichnung einer Form von gemittelten Geschwindigkeit missbraucht. *Umsatzfrequenzen* basieren nicht immer auf Reaktionsgeschwindigkeiten, sondern oft (fälschlich) auf einer gemittelten Geschwindigkeit und werden zudem häufig mit *Umsatzzahlen* verwechselt.

Die Katalyse sollte als ein genuines Forschungsgebiet gesehen werden, dessen Zersplitterung behoben werden muss, um den Fortschritt zu maximieren und die besten jungen Köpfe anzuziehen. Es gibt große Gemeinsamkeiten bei den Reaktanten (häufig organische Verbindungen), den katalytisch aktiven Zentren (enthalten häufig Metallatome) und der Bedeutung der Maxime, dass

Reaktionen oft an ungewöhnlichen „privilegierten“ Strukturen ablaufen. So einfache Reaktionsschritte wie Protonen- oder Elektronentransfer verbinden zahllose Reaktionen. Die Strukturen und die Kinetik katalytischer Prozesse bilden den gemeinsamen quantitativen Rahmen. Von allgemeiner Bedeutung sind Gleichgewichte und Phasenverteilungen, die Reaktanten, Katalysatoren und Produkte beeinflussen, die Zugänglichkeit von Katalysatoren für Reaktanten (Misch- und Transportphänomene) und die Abtrennung der Produkte von den Katalysatoren. Weitere gemeinsame Themen sind Desaktivierung, Recycling, Regenerierung und Ersatz von Katalysatoren sowie Temperaturgradienten in Reaktoren.

Zahllose Beispiele belegen die Vorteile einer Vermittlung von Katalyse als Einheit. Forscher, die sich mit der Oberflächenkatalyse befassen, profitieren von einem Verständnis der Mechanismen organischer und metallorganischer Reaktionen in Lösung. Denjenigen, die organische und metallorganische Reaktionen in Lösung untersuchen, hilft Wissen über die Mechanismen von Enzym- und Oberflächenreaktionen. Denen, die sich mit metallorganischer Katalyse in Lösung befassen, nützt es, Ligandeneffekte in Reaktionen an trägerfixierten Katalysatoren zu verstehen, die lösungsmittelfrei ermittelt wurden. Und natürlich nutzen jedem Katalyseforscher die großen Fortschritte bei den Methoden zur physikalischen Charakterisierung. Um äußerst schnelle Reaktionen zu verstehen, sollte man Transportphänomene verstehen, genauso wie für den Einsatz von Materialien mit sehr kleinen Poren und großen inneren Oberflächen, wie Metall-organischen Gerüsten (MOFs), als Katalysatoren. Zum Verständnis von Phasentransferkatalysatoren, trägerfixierten Flüssigphasenkatalysatoren sowie organischen und metallorganischen Molekülkatalysatoren auf Polymerträgern braucht es Kenntnisse in Phasengleichgewichten, Transportphänomenen und Grenzflächenphänomenen. Ein Verständnis von elektrokatalytischen Phänomenen erfordert Grundlagen in der Oberflächenkatalyse.

Darüber hinaus tragen auch die mo-

derne Theorie und die Computerchemie zum Fortschritt in allen Katalyse-Teildisziplinen bei – sowohl beim Verständnis der Eigenschaften bekannter als auch als Hilfe beim Design neuer Katalysatoren. Die Katalyse mit Zeolithen profitiert hier besonders, weil deren Kristallinität einheitliche Oberflächenzentren nahelegt, die genau modelliert werden können. Sollte nicht jedem, der Katalyse unterrichtet, die Leistungsfähigkeit der STM beim Abbilden von Molekülen, die sich auf Oberflächen bewegen, zusammenstoßen und reagieren, bewusst sein? Hilft es nicht uns allen, wenn wir Bilder von isolierten Metallatomen auf festen Oberflächen, die nahezu ideale katalytisch aktive Zentren sind, verfügbar haben – oder vollständige dreidimensionale Enzymstrukturen, die analog die katalytisch aktiven Zentren definieren und die Aufklärung subtler Einflüsse der Umgebung ermöglichen, z.B. das Anpassen an Übergangszustände?

Mit diesem Editorial wollen wir Anstoß geben, die Mauern zwischen den Teildisziplinen niederzureißen. Hier folgen ein paar erste Überlegungen:

1. Junge Forscher aus den einzelnen Teildisziplinen auf der ganzen Welt seien ermutigt, Netzwerke zu starten und Visionen für die Zukunft der Katalyse vorzustellen.
2. Stipendienprogramme sind einzurichten, die Postdocs und Hochschulforschern Freisemester ermöglichen, in denen sie die Grenzen zwischen den Teildisziplinen überwinden können.
3. Mehrautorenlehrbücher sollten geschrieben werden, die auch die Katalyse zum Thema machen.
4. Durch gemeinsames Unterrichten in Katalysevorlesungen sollten Studenten zu fachübergreifendem Denken angeregt werden.
5. Fördereinrichtungen sollten gemeinsame Forschungsprojekte von Teildisziplinen fördern, und das mit Beträgen, die es den Forschern erlauben, Zeit für ein tiefes Verständnis der anderen Teildisziplinen aufzuwenden.
6. Autoren, Gutachter und Herausgeber müssen Jargon vermeiden und einfache, gemeinsame Begriffe verwenden.