



1. Simultanbestimmung von Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten und Adsorptionsisothermen an flüssigchromatographischen Systemen

Während die Ermittlung von Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten einfacher und einiger komplexer Reaktionen unter idealen Bedingungen (hohe Verdünnung, lineare Adsorptionsisothermen) bereits recht gut belegt ist [1], erfordert die Anwendung solcher Ergebnisse auf reale chromatographische Reaktoren außerdem die simultane Bestimmung der zugehörigen Adsorptionsisothermen für alle Reaktanten.

Dazu werden Reaktionschromatogramme unter Überladungsbedingungen (bei relativ hohen Konzentrationen) aufgenommen, und zur Ermittlung der Parameter werden die Konzentrationsprofile über numerische Lösungen des partiellen Differentialgleichungssystems berechnet, das den Reaktions-Separationsvorgang beschreibt, und optimal an die experimentellen Daten angepasst. Dieses Verfahren bezeichnet man auch als "Inverse Methode", da die Parameter nicht zur Berechnung vorgegeben, sondern aus den Experimenten erhalten werden sollen.

Bislang wurden von uns unter diesem Aspekt Enantiomerisierungen untersucht [2], eine Ausdehnung auf das Gebiet der enzymkatalysierten Reaktionen wird nun angestrebt.

[1] Thede, Richard: Rate Constants: Determination from On-Column Chemical Reactions, in Encyclopedia of Chromatography, Taylor&Francis, 2008

[2] Thede G, Below E, Thede R.: Determination of Adsorption Isotherms by the Inverse Method with a First Order Reversible Reaction Occurring in Both Phases of a Liquid Chromatographic Reactor. J LIQ CHROMATOGR R T 2010, 33(4):499-512

2. Beiträge zur Untersuchung homogener Katalysatoren

In Zusammenarbeit mit dem Arbeitskreis Prof. Dr. D. Heller vom Rostocker Leibniz-Institut für Katalyse beteiligen wir uns an der Behandlung komplexer Reaktionen, die bei asymmetrischen Katalysen auftreten[3].

[3] Christian Fischer, Richard Thede, Hans-Joachim Drexler, Anja König, Wolfgang Baumann, and Detlef Heller: Investigations into the Formation and Stability of Cationic Rhodium Diphosphane-Arene Complexes, Chem. Eur. J. 2012,