

# Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

## Institut für Chemie

### Fachgebiet: Angewandte Homogenkatalyse

Betreuer: Prof. Dr. Matthias Beller

**Dipl. Chem. Willi Desens**

(e-mail: willi.desens@catalysis.de)

#### ***Kooperative Katalysatorsysteme für die Umsetzung von CO<sub>2</sub> mit Epoxiden***

Die vorliegende Arbeit beschreibt die Entwicklung kooperativer Katalysatorsysteme für die Umsetzung von CO<sub>2</sub> mit Epoxiden. Im ersten Teil der Arbeit wurden, basierend auf leicht zugänglichen Metallsalzen wie Kalium- und Zinkiodid, effiziente Katalysatorsysteme für die Synthese von cyclischen Carbonaten untersucht. Hierbei konnten nach Optimierung exzellente Ausbeuten unter bereits milden Reaktionsbedingungen (<100 °C, 10 bar CO<sub>2</sub>) erreicht werden. Insbesondere gelang es, einen quantitativen Umsatz bei bereits 30 °C zu erzielen.

Der zweite Teil der Arbeit widmet sich der Copolymerisation von Cyclohexenoxid und CO<sub>2</sub> mittels Diethylzink zu Polycarbonaten. Zusätzlich wurde durch eine modulare Syntheseroute eine Ligandenbibliothek aufgebaut. Anschließend wurde durch die Kombination von ZnEt<sub>2</sub> mit einzelnen Liganden aus der Bibliothek versucht in situ ein Katalysatorsystem zu generieren. Der Einfluss der Ligandenstruktur auf die Copolymerisation wurde anhand der Produkteigenschaften evaluiert. Dabei wurden Polycarbonate mit einer Dispersität von <5.0 und einer mittleren Molmasse von >20.000 g·mol<sup>-1</sup> erhalten.

This thesis describes the development of cooperative catalytic systems for the conversion of CO<sub>2</sub> with epoxides. In the first part very efficient catalytic systems based on easily accessible metal salts, potassium and zinc iodide, were investigated for the synthesis of cyclic carbonates. After optimization excellent yields were obtained under mild reaction conditions (<100 °C, 10 bar CO<sub>2</sub>). Notably a quantitative conversion was achieved even at a temperature of 30 °C.

The second part deals with the copolymerization of cyclohexene oxide and CO<sub>2</sub> utilizing diethyl zinc yielding polycarbonates. Additionally a ligand library was established by a modular synthesis. Subsequently the generation of an in situ system was investigated by the combination of ZnEt<sub>2</sub> and the different ligands. Furthermore the influence of the ligand structure on the copolymerization was evaluated by analysis of the polymer properties. Herein, polycarbonates were obtained with a dispersity <5.0 and a mean molecular mass of >20.000 g·mol<sup>-1</sup>.