

**Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät**

**Institut für Chemie**

**Fachgebiet: Physikalische Chemie / Katalyse**

Betreuer: Prof. Dr. Ralf Ludwig

---

**Diplom Chemiker Enrico Barsch**  
(e-mail: enrico.barsch@o2online.de )

***Entwicklung und Anwendungen der in situ Infrarotspektroskopie zur Aufklärung von Reaktionsmechanismen in der homogenen Katalyse***

Die in situ Infrarotspektroskopie ist eine leistungsstarke Methode zur Aufklärung von Reaktionsmechanismen in der homogenen Katalyse. Die vorliegende Arbeit stellt die zur Verfügung stehenden Messtechniken vor, geht auf die, für einen effizienten Einsatz, notwendigen Voraussetzungen ein und unterstreicht die Bedeutung einer automatisierten Datenauswertung. Es wurden drei unterschiedliche experimentelle Setups entwickelt. Diese wurden anschließend in den Feldern der asymmetrischen Hydrierung, der Hydroformylierung, der Dehydrierung flüssiger organischer Wasserstoffspeicher sowie photokatalytischer Reaktionen eingesetzt, um die Funktionsweise der jeweiligen Katalysatorsysteme zu verstehen. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse konnten oftmals entscheidende Impulse zum Design verbesserter Katalysatoren geben.

The in situ infrared spectroscopy has become a powerful method for the investigation of reaction mechanisms in homogenous catalysis. This work presents the available measurement techniques, discusses the necessary requirements for an effective utilization and emphasizes the significance of automated data analysis. Three different experimental setups were developed and applied in the fields of asymmetric hydrogenation, hydroformylation, dehydrogenation of liquid organic hydrogen carriers and photocatalytic reactions, with the aim to understand the respective catalytic systems. The gained insight has often initiated the design of optimized catalysts.