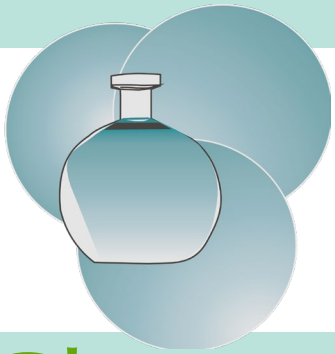
Fakultät für Naturwissenschaften

Institut für Chemie



lädt ein

gemeinsam mit der Gesellschaft Deutscher Chemiker zum

GDCh
Gesellschaft Deutscher Chemiker

Vortrag

von Herrn

Prof. Peter R. Schreiner

Institut für Organische Chemie
Justus-Liebig-Universität Gießen

"London Dispersion in Molecular Chemistry"

am: 14. Dezember 2023

um: 16:00 Uhr

wo: im Raum 1/232

Die kleine Kaffeerunde vor dem Vortrag beginnt um 15:30 Uhr im Raum 1/232.
Das Mitbringen von eigenen Trinkgefäßen ist erwünscht.

Gäste sind herzlich willkommen!

TECHNISCHE UNIVERSITÄT
IN DER KULTURHAUPTSTADT EUROPAS
CHEMNITZ

Prof. Dr. Michael Sommer
Telefon: 0371 / 531 32507
E-Mail: michael.sommer@chemie.tu-chemnitz.de

Fakultät für Naturwissenschaften

Institut für Chemie

Prof. Peter R. Schreiner

Institut für Organische Chemie
Justus-Liebig-Universität Gießen

GDCh Gesellschaft Deutscher Chemiker

„London Dispersion in Molecular Chemistry[1]“

The *Gecko* can walk up a glass window because of the adhesion in hydrophobic setae on its toes that convey van der Waals (vdW) interactions with the surface.[2] The attractive part of vdW-interactions is an electron correlation effect referred to as *London dispersion*. Its role in the formation of condensed matter has been known since van der Waals[3] and London[4] who related dispersion to polarizability. London dispersion has been underappreciated in molecular chemistry as a key element of structural stability, chemical reactivity, and catalysis. This negligence is due to the notion that dispersion is considered weak, which is only true for *one* pair of interacting atoms. For increasingly larger structures, the overall dispersion contribution grows rapidly and can amount to tens of kcal mol–1. This presentation shows selected examples that emphasize the importance of inter- and intramolecular dispersion for molecules consisting mostly of first row atoms.[5] We note the synergy of experiment and theory that now has reached a stage where dispersion effects can be examined in fine detail. This forces us to re-consider our perception of steric hindrance and stereoelectronic effects, and even the transferability of chemical bond parameters from one molecule to another, both in structural chemistry[6] and in catalysis.[7]

[1] J. P. Wagner, P. R. Schreiner, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 12274-12296.
[2] K. Autumn, M. Sitti, Y. A. Liang, A. M. Peattie, W. R. Hansen, S. Sponberg, T. W. Kenny, R. Fearing, J. N. Israelachvili, R. J. Full, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **2002**, *99*, 12252-12256.
[3] J. D. van der Waals, Leiden University (Leiden, The Netherlands), **1873**.
[4] F. London, *Z. Phys.* **1930**, *63*, 245-279.
[5] a) S. Rösel, C. Balestrieri, P. R. Schreiner, *Chem. Sci.* **2017**, *8*, 405-410; b) J. P. Wagner, P. R. Schreiner, *J. Chem. Theory Comput.* **2016**, *12*, 231-237; c) E. Prochazkova, A. Kolmer, J. Ilgen, M. Schwab, L. Kaltschnee, M. Fredersdorf, V. Schmidts, R. C. Wende, P. R. Schreiner, C. M. Thiele, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 15754-15759; d) C. Wang, Y. Mo, J. P. Wagner, P. R. Schreiner, E. D. Jemmis, D. Danovich, S. Shaik, *J. Chem. Theory Comput.* **2015**, *11*, 1621-1630; e) J. P. Wagner, P. R. Schreiner, *J. Chem. Theory Comput.* **2014**, *10*, 1353-1358; f) A. A. Fokin, L. V. Chernish, P. A. Gunchenko, E. Y. Tikhonchuk, H. Hausmann, M. Serafin, J. E. P. Dahl, R. M. K. Carlson, P. R. Schreiner, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 13641-13650; g) P. R. Schreiner, L. V. Chernish, P. A. Gunchenko, E. Y. Tikhonchuk, H. Hausmann, M. Serafin, S. Schlecht, J. E. P. Dahl, R. M. K. Carlson, A. A. Fokin, *Nature* **2011**, *477*, 308-311; h) S. Grimme, P. R. Schreiner, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 12639-12642; i) A. A. Fokin, D. Gerbig, P. R. Schreiner, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 20036-20039; j) S. Rösel, H. Quanz, C. Logemann, J. Becker, E. Mossou, L. Cañadillas-Delgado, E. Caldeweyher, S. Grimme, P. R. Schreiner, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 7428-7431; k) S. Rösel, J. Becker, W. D. Allen, P. R. Schreiner, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 14421-14432.
[6] a) J. M. Schümann, J. P. Wagner, A. K. Eckhardt, H. Quanz, P. R. Schreiner, *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 41-45; b) J. M. Schümann, L. Ochmann, J. Becker, A. Altun, I. Harden, G. Bistoni, P. R. Schreiner, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 2093-2097.
[7] a) C. Eschmann, L. Song, P. R. Schreiner, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 4823-4832; b) L. Rummel, M. H. J. Domanski, H. Hausmann, J. Becker, P. R. Schreiner, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202204393.

TECHNISCHE UNIVERSITÄT
IN DER KULTURHAUPTSTADT EUROPAS
CHEMNITZ

Prof. Dr. Michael Sommer
Telefon: 0371 / 531 32507
E-Mail: michael.sommer@chemie.tu-chemnitz.de