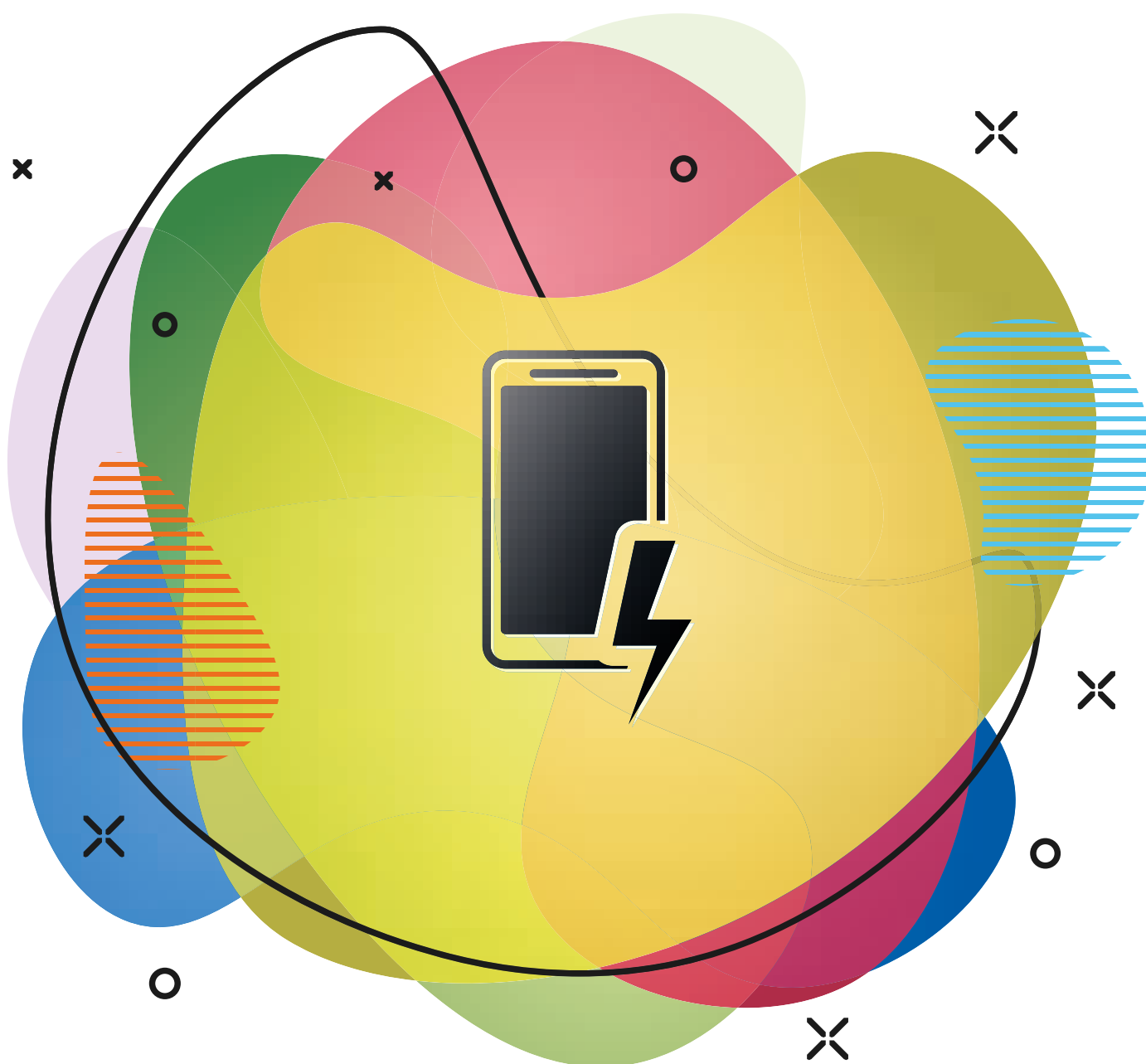


Nachrichten

aus der Chemie

67. Jahrgang | November 2019



Periodensystem
Wer hat's erfunden?
S. 3, 19

Seltene Erden
Billiger recyceln
S. 30

Nobelpreis
Energie mit Li
S. 48

UNVERZICHTBARER
BAUSTEINE IHRER
KARRIERE

Workshops Information
Konzepte **Kolloquien** Netzwerk

Beratung Perspektiven Wissen Impulse Beratung

Tagungen Konzepte International Karriereservice

Kurse Diskussion Beratung **Fortbildung** Jobbörse

Workshops **Kurse** Fortbildung Forschung Kolloquien

Netzwerk Tagungen Beratung Informationen Konzepte

Fortbildung Jobbörse Kurse **Wissen**

Diskussion Karriereservice

www.gdch.de



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V.
Postfach 90 04 40
60444 Frankfurt am Main

Telefon: 069 7917-0
Fax: 069 7917-232
E-mail: gdch@gdch.de

Leitartikel

Hinter die Geschichte(n) schauen

» St. Petersburg im Jahr 2019, der 21. Mendelejew-Kongress für reine und angewandte Chemie tagt. Ein Satellitensymposium ist dem 150. Geburtstag des Periodensystems gewidmet, auf dem ich über Lothar Meyer und seine Beiträge zum Periodensystem der Elemente vortragen darf. Diese Tagung bietet mir auch die Möglichkeit, die Räume zu besuchen, in denen der den meisten viel geläufigere Begründer des Periodensystems, Dmitri I. Mendelejew, wirkte. Es ist schon ein erhabener Moment, vor den Originaldokumenten zu stehen und einen Hauch Geschichte einzuatmen – völlig anders als ein Spaziergang durch das Internet.

Doch jenseits aller Romantik: Müs-sen wir uns überhaupt mit Persönlichkeiten aus der (Chemie-)Geschichte beschäftigen? Und wenn ja, mit welchen? Ich glaube, dass gerade der Blick in die Geschichte des eigenen Fachs aktuelle Entwicklungen besser verstehen lässt. Auch die Fragen nach Prioritäten und nach zwischenmenschlichen Problemen sind nicht neu, aber auch heute noch aktuell, wenn man so manche Entscheidungen des Nobelpreiskomitees betrachtet.

Gedruckte Wissenschaftlerbiografien waren lange Zeit eher Hagiographien, also Heldengeschichten. Aus Arbeiten über Wissenschaftlerleben müssen aber auch Irrwege, Fehler oder Auseinandersetzungen mit Konkurrenten hervorgehen, damit sie hilfreich für unser heutiges Tun sind und wir nicht vermeintlichen Idolen hinterherjagen. Deshalb bedauere ich es ein wenig, dass im Logo des „International Year of the Periodic Table“ nur Mendelejews Konterfei gezeigt ist. Warum ehren wir ihn, aber nicht die anderen wie Lothar Meyer, Alexandre-Émile Béguyer de Chancourtois, William Odling, Gustavus Hinrichs oder John Newlands, die alle auf unterschiedliche Art und Weise an der Erkenntnis einer Ordnung der chemischen Elemente beteiligt waren?

Hier sehe ich eine Verantwortung der Chemiegeschichte. Sie muss zeigen, dass gewöhnlich nicht nur ein Wissenschaftler oder eine Wissenschaftlerin Gesetze, Theorien oder Synthesewege gefunden oder formuliert hat. In welcher vielfältigen Weise eben auch Frauen an der Entdeckung von Elementen oder Aufklärung von Elementeigenschaften beteiligt waren, zeigt das gerade bei World Scientific erschienene Buch „Women in their element“, herausgegeben von Annette Lykkes und Brigitte van Tiggelen. Auch Mitglieder der GDCh-Fachgruppe „Geschichte der Chemie“ haben zu diesem Werk beigetragen.

Bemerkenswert ist auch, dass sich bei den Wegbereitern und Begründern des Periodensystems Ziele und Vorgehensweisen deutlich unterscheiden. Mendelejews Vorgehen war dabei besonders verständlich und einprägsam: Er brachte alle ihm bekannten Elemente in ein System und sagte einige unbekannte Elemente hinsichtlich ihrer Eigenschaften vorher. Das ist viel aufregender als die exakten Angaben zu Atommassen von Lothar Meyer, der sich besonders für die Atomtheorie interessierte.

Die Gesellschaft Deutscher Chemiker setzt mit ihrem Programm „Historische Stätten der Chemie“ Leuchttürme, die auf die Leistungen unserer chemischen Vorfahren aufmerksam machen, erinnern und zu einer intensiveren Beschäftigung mit unserer eigenen Fachgeschichte anregen. Besondere Anerkennung verdienen ebenso die vielen kleinen, zum Teil gar nicht allgemein bekannten Initiativen. Wenn Sie das nächste Mal im Oldenburgischen sind, vergessen Sie also nicht, das kleine, doch sehr informativ gestaltete Lothar-Meyer-Kabinett im Heimatmuseum in Varel zu besuchen.

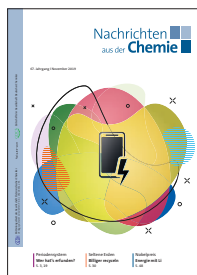


Gisela Boeck

Dr. Gisela Boeck, Universität Rostock,
stellvertretende Vorsitzende der
Fachgruppe Geschichte der Chemie

Die Chemie-
geschichte
trägt Verant-
wortung

«



Titel: Seit ihrer Entdeckung in die Anwendung geströmt: Nobelpreis für Lithiumionenbatterien [zu S. 48].
Bild: vector_v / stock.adobe.com

Zeitschrift der Gesellschaft Deutscher Chemiker
 Mitteilungsblatt der Gesellschaft Österreichischer Chemiker

Band 67 | November 2019



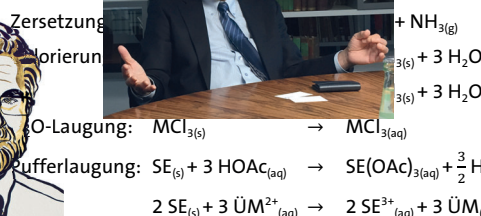
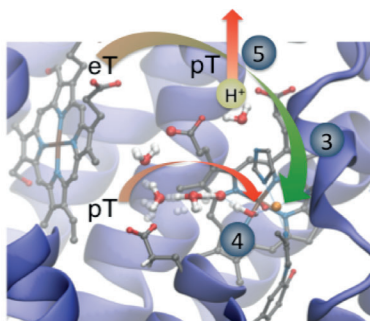
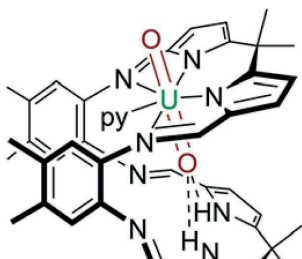
WILEY-VCH

Bildung + Gesellschaft

- Leitartikel
- 3** **Hinter die Geschichte(n) schauen**
G. Boeck
- 6** **Notizen aus Forschungspolitik und Bildung**
- Interview
- 8** **„Vom Nutzen des Nutzlosen“**
F. Zbikowski
 Susumu Kitagawa synthetisierte als einer der Ersten metal organic frameworks, MOFs.
- Chemiedidaktik
- 10** **Redoxflussbatterien mit Farbumschlag**
D. Rosenberg, W. Jansen, M. Busker
 Auch in der Schule lassen sich Redoxflussbatterien mit anorganischen Substanzen aufbauen.
- Hochschuldidaktik
- 14** **Anleiten, beraten, begleiten**
P. Lindenstruth
 Ein Kurs für angehende Praktikumsassistenten.
- Gute wissenschaftliche Praxis
- 17** **Sei frei und glücklich**
M. Seidl-Nigisch
 Zu ethischem Verhalten gehört mehr, als wissenschaftlich korrekt zu arbeiten.
- Chemiegeschichte
- 19** **Lothar Meyer – eine Wiederentdeckung**
N. Kuhn, K.-P. Zeller
 Es lohnt sich, einen Blick auf den anderen großen Mitbegründer des Periodensystems zu werfen: Lothar Meyer.
- Karrierespalte
- 27** **Was bedeutet Mobilität?**
P. Gramlich

Industrie + Technik

- 28** **Notizen aus der Wirtschaft**
- Seltenerdrecycling
- 30** **Ammoniumchlorid statt Salzsäure**
T. Lorenz, K. Jacob-Seifert, M. Bertau
 Feststoffchlorierung überführt universitäre Forschung in den industriellen Alltag und macht so Leuchtstoffe, Permanentmagnete und Akkus kostengünstig recycelbar.
- Kreislaufwirtschaft
- 34** **Plastik runderneuert**
M. Bulmahn
 Die Kunststoffmesse K 2019 zeigte den Einfluss der Abfallwirtschaft auf die Branche.
- Materialien
- 37** **Gefrorene Luft macht alles leichter**
I. Smirnova
 Das europäische Forschungsprojekt Cost Action Aerogel lässt nun Anwendungen von Aerogelen für Umwelt und Lebenswissenschaften untersuchen.
- Digitalisierung
- 40** **Eine neue Aufgabe für Laborgeräte**
C. Ehrensberger
 Damit sich unterschiedliche Laborgeräte verstehen, müssen sich Anwender und Hersteller dafür öffnen, Daten und Know-how in eine gemeinsame digitale Infrastruktur einzubringen.
- Analysentechnik
- 42** **Komponenten sicher zuordnen**
S. Schröder
 Bei der Identifikation zinnorganischer Verbindungen erhöhen Multiple-Reaction-Monitoring-Massenspektren die Nachweissicherheit.



Wissenschaft + Forschung

44 Notizen aus der Chemie

Mitmachen und gewinnen

46 Wer bin ich: Elementerätsel I

63 Wer bin ich: Elementerätsel II

Nobelpreis 2019

48 Niederdimensionale Materialien für die ersten Li-Ionenbatterien

M. Wilkening

Trendbericht

52 Theoretische Chemie

V. Kaila, S. Knecht, S. Lubert

Analytische Chemie

65 Farbstoffanalyse mit MS

A. E. Kramell, R. Csuk, R. Kluge

Archäologische Textilfunde waren ursprünglich oft farbig.

Entstehung des Lebens

68 Am Anfang war das Narrengold

M. Groß

Kürzlich wurden Mikroben entdeckt, die Pyrit herstellen.

Synthese im Blickpunkt

70 Stereozentrum wechsle dich

N. Schützenmeister

Neue Reaktionsführung bei der Mitsunobu-Reaktion.

Sensorik

73 Große Leuchten mit Pillararenen

D. Cao, H. Meier

Manche Pillar[n]arene eignen sich als Chemosensoren.

Interskriptum

77 Wenn es nobel kribbelt

C. Remenyi

SERVICE

78 Personalmeldungen

81 Korrespondenz

83 Rezensionen

85 Neue Produkte

86 Tagungskalender und -berichte



94 Young Investigator Workshop 2019

96 Lebensmittelchemiker-Tage

96 Asac-News, Diverse Veranstaltungen

96 Zweigstellen

97 Adolf Lieben Lectureship

97 Abschied, Geburtstage

98 Neumitglieder, Vorträge



100 Wissenschaftsforum Chemie

102 GDCh-Präsidium

103 August-Wilhelm-von-Hofmann-Stipendium

104 Jungchemikerforum

105 Fachgruppen

106 Die GDCh vor Ort

107 Neuaufnahmen

109 Fortbildungskalender

112 Stellenanzeigen



114 Ausgeblättert:

Absorbierende Kunst

115 Impressum



Nachrichten aus der Chemie online

Alle Hefte der Nachrichten stehen für GDCh-Mitglieder frei zugänglich im Internet: www.gdch.de/nachrichten

Wünsche, Kritik, Anregungen?

Schreiben Sie uns: nachrichten@gdch.de

Notizen aus Forschungspolitik und Bildung

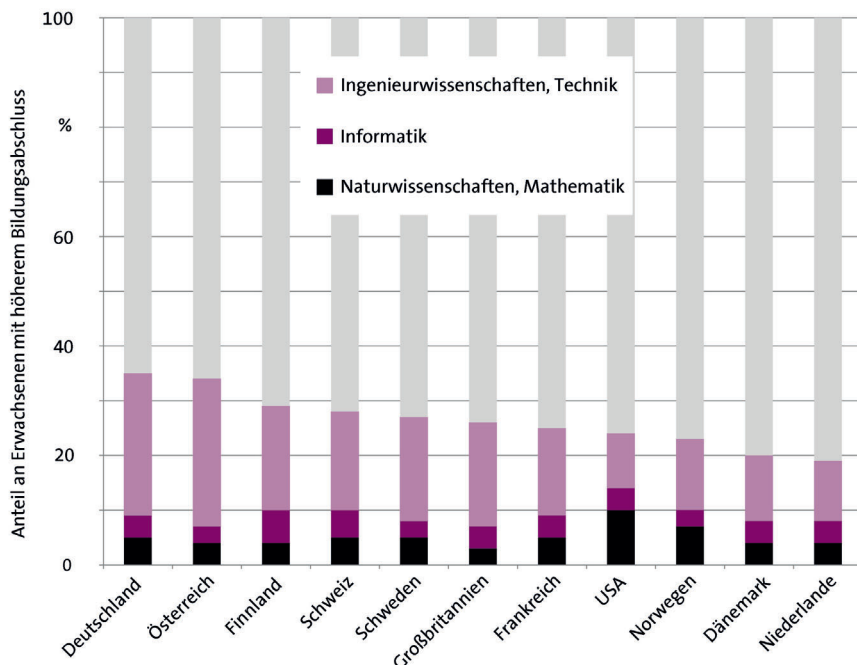
Mehr Platz für Energieforschung | Das Max-Planck-Institut für chemische Energiekonversion in Mülheim/Ruhr vergrößert sich räumlich und personell. Der Rohbau des künftigen Bürogebäudes und der Chemielabore ist fertig gestellt. Der Forschungsbetrieb beginnt voraussichtlich Ende nächsten Jahres. Geplant ist, die Mitarbeiterzahl von 250 auf 400 zu erhöhen. <https://cec.mpg.de/aktuelles/detailansicht/news/richtfest-am-institut/>

Österreich plant eine Exzellenzinitiative | Österreichs Regierung plant eine Exzellenzinitiative nach internationalem Vorbild wie etwa in Deutschland. Das Land möchte neue Forschungsfelder stärken und die Forschungsquote erhöhen. Ein Gesetz legt Finanzierungsperioden und Leistungsvereinbarungen fest. www.fwf.ac.at

Open-Access-Vertrag mit Springer Nature in Österreich | Springer Nature und das Bibliothekskonsortium KEMÖ in Österreich haben den Open-Access-Vertrag für Springer-Zeitschriften erneuert. Das Abkommen ermöglicht Wissenschaftlern und Studierenden in Österreich, in über 1900 Springer-Zeitschriften ohne zusätzliche Gebühren open access zu publizieren. Darüber hinaus erhalten die Konsortialmitglieder Zugriff auf mehr als 2000 Zeitschriften. Der erneuerte Vertrag läuft bis Ende des Jahres 2021. 34 österreichische Universitäten, Fachhochschulen, Forschungsinstitute und Landesbibliotheken sowie der österreichische Wissenschaftsfond FWF beteiligen sich daran.

Weniger Studienanfänger in Physik | Im Jahr 2018 gab es in Deutschland 16 404 Studienanfänger in der Physik, 188 weniger als im Jahr zuvor. Doch die Studierendenstatistik zeigt: 45 % der Einschriebenen nehmen ihr Studium nicht auf, sie erschienen nicht in Vorlesungen und Seminaren oder erbringen keine Leistungsnachweise. So fanden sich an einem Fachbereich von 806 Immatrikulierten lediglich 10 im Hörsaal.

Im Jahr 2018 haben 2836 Studenten den Bachelor of Science in Physik abgeschlossen. Die Zahl der Mastereinschreibungen liegt derzeit bei 3433. Physikstudenten benötigen für ihr Studium bis zum Abschluss Master of Science im Durchschnitt 12,6 Semester. Im Jahr 2019 promovierten 1808 Physikabsolventen, das sind 68 % und damit 4 Prozentpunkte mehr als in den Vorjahren 2015 bis 2017. Der beliebteste Studienschwerpunkt unter den Physikern ist die Festkörperphysik, am wenigsten beliebt ist die physikalische Ozeanografie. www.studienatlas-physik.de



Mehr als ein Drittel mit Mint-Abschluss | In Deutschland verfügen 35 Prozent der Hochschulabsolventen zwischen 25 und 64 Jahren über einen Abschluss in Mathematik, Informatik, einer Natur- oder Ingenieurwissenschaft (Mint-Fächer). Das ist mehr als in allen anderen OECD-Ländern. Fast genauso hoch ist der Anteil in Österreich (34%). Der Anteil an Naturwissenschaftlern und Mathematikern liegt mit 5 Prozent im OECD- und EU-Durchschnitt, höher ist er in den USA (10%), in Italien (8%) und Norwegen (7%). In Deutschland haben 26 Prozent eine Ingenieurwissenschaft studiert. Dieser Wert ist nur in Österreich höher (27%).

www.oecd.org/berlin/publikationen/bildung-auf-einen-blick.htm

Erklärung zur Grundlagenforschung | Die Nationale Akademie der Wissenschaften Leopoldina und die Chinesische Akademie der Wissenschaften (CAS) wollen langfristig wissenschaftlich kooperieren. Dazu haben sie eine Erklärung zur Grundlagenforschung veröffentlicht. www.leopoldina.org/publikationen/detailansicht/publication/beijing-declaration-on-basic-science-2019/

Fortschrittsbericht zur High-Tech-Strategie | Erste Ziele ihrer High-Tech-Strategie 2025 sind nach Auffassung der Bundesregierung bereits erreicht. So stellt die Regierung bis zum Jahr 2022 rund 6,4 Mrd. Euro für die Energiewende zur Verfügung; seit dem Sommer gibt es Geld für Forschung an Wasserstofftechnik, energieoptimierten Quartieren und großskaligen Stromspeichern. Noch mehr Ziele und Zwischenstände stehen im aktuellen Fortschrittsbericht.

www.bmbf.de/upload_filestore/pub/Fortschrittsbericht_zur_Hightech_Strategie_2025.pdf



Das neue Nano-Institut in München. Foto: LMU

München hat neues Nano-Institut

Die Ludwig-Maximilians-Universität hat im Juni ein neues Institut für Energie- und Nanoforschung eröffnet. Die Wissenschaftler forschen dort unter anderem an Nanostrukturen für solare Energieumwandlung und an Photokatalyse. In dem 2700 m² großen Neubau sind der Lehrstuhl für Photonik und Optoelektronik sowie der Lehrstuhl für hybride Nanosysteme untergebracht. Das Nano-Institut ist der erste Teil eines neuen Physik-Campus am Englischen Garten. LJ
www.uni-muenchen.de

Kandidaten für den Klung-Wilhelmy-Wissenschaftspreis gesucht

Im nächsten Jahr vergeben die Otto-Klung-Stiftung und die Dr.-Wilhelmy-Stiftung ihren Wissenschaftspreis wieder an einen Chemiker. Der Preisträger erhält 60 000 Euro. Der Kandidat sollte jünger als 40 Jahre und deutscher Staatsbürger sein. Vorschläge nimmt der Vorsitzende der Auswahlkommission, Eckard Rühl, bis zum 1. Februar 2020 entgegen.
www.klung-wilhelmy-wissenschafts-preis.de

Weiterbildung durch Hochschulen gefordert

Der Stifterverband für die deutsche Wissenschaft und die Unternehmensberatung McKinsey sehen die Hochschulen in der Pflicht, mehr Weiterbildung und berufsbegleitende Masterstudiengänge anzubieten. Ihr aktueller Hochschulbildungsreport sieht durch die veränderte Arbeitswelt hier besonderen Bedarf. Vorwärts gekommen sei das deutsche Hochschulsystem bei der Internationalisierung.
www.hochschulbildungsreport2020.de

Biotechnik und Chemie für Schüler

Der Dechemax-Schülerwettbewerb befasst sich in diesem Jahr mit Bioökonomie. Schülergruppen der Klassenstufen 7 bis 11 mit drei bis fünf Teilnehmern können sich noch bis zum 24. November anmelden. In der ersten Runde beantworten die Teilnehmer jede Woche eine Frage, in der zweiten Runde experimentieren sie selbst.
<https://dechemax.de/wettbewerb.html>

Schüler, Lehrer und Wissenschaftler forschen gemeinsam

Bis zum 30. November können Wissenschaftler und Lehrer mit einer gemeinsamen Projektidee zum Thema Nachhaltigkeit Fördermittel der Robert-Bosch-Stiftung beantragen. Bis zu drei Jahre unterstützt die Stiftung mit dem Programm „Our Common Future“ Forschungsarbeiten, an denen sich mindestens eine weiterführende Schule beteiligt.
www.bosch-stiftung.de/ourcommonfuture

Neues Max-Planck-Center in Bristol

Die Max-Planck-Gesellschaft und die Universität Bristol haben ein gemeinsames Forschungszentrum in Bristol: das Institut für Minimalbiologie. Im März hat es die Arbeit aufgenommen, die Projekte laufen seit August und über mindestens fünf Jahre. Forscher wollen künstliche Zellen entwerfen und aufbauen.
<https://maxplanck-minimalbiology.bristol.ac.uk>

Preise für Naturstoffforschungsnachwuchs

Bis zum 24. November können sich Nachwuchswissenschaftler mit ihrer Doktorarbeit über Naturstoffforschung sowie jüngere Hochschullehrer um Preise der Dechema bewerben. Der Doktorandenpreis ist mit 500 Euro dotiert, der Preis für den Hochschullehrernachwuchs mit 3000 Euro.
www.dechema.de/nf_dokpreis
www.dechema.de/nf_nwpreis

Lara Janus, Frauke Zbikowski

Vor 50 Jahren

November 1969

Nur wenige Monate, nachdem der Mensch erstmals den Mond betreten hat, sind die Ergebnisse der Gesteinsanalysen da:

Über die Zusammensetzung des Mondgesteins, das von der Apollo 11-Besatzung zur Erde gebracht wurde, haben Wissenschaftler des Lunar Receiving Laboratory bis jetzt folgende Details bekanntgegeben: 1. Verglichen mit Erdgestein hoher Gehalt an hochschmelzenden Elementen, z.B. Titan, Zirkon und Yttrium. Titan ist – mit nur geringfügigen Abweichungen – in allen 23 Proben bis zu 12 % enthalten (in irdischen vulkanischen Gesteinen bis 4,5 %). 2. Geringes Vorkommen von niedrigschmelzenden Elementen (Na, K, Pb, Bi, Pd). Gold, Silber und Platin wurden nicht gefunden. 3. Wasser und das Hydroxylion fehlen; offenbar hat es am Landeplatz niemals Oberflächenwasser gegeben. 4. Eisen kommt wahrscheinlich zusammen mit den Mineralien Troilit und Ilmenit vor; ein Hinweis, daß die Gesteine unter extrem niedrigem Partialdruck von Sauerstoff, Wasserstoff und Schwefel entstanden sind. 5. Hohe Gehalte an Edelgasen, die wahrscheinlich aus dem Sonnenwind stammen. 6. Flüchtiges und/oder pyrolysierbares organisches Material fehlt; Spuren unter 1 ppm sind wahrscheinlich irdische Verunreinigungen. 7. Uran- und Thoriumgehalt entsprechen typischen irdischen Werten, doch ist das Verhältnis K : U viel niedriger, als je in irdischen Gesteinen oder Meteoriten bestimmt wurde. 8. ⁴⁰K/⁴⁰Ar-Datierung läßt auf ein Alter von $3,0 \pm 0,7 \cdot 10^9$ Jahre schließen. [Chem. Engng. News 47, Nr. 40, 18 (1969)]

Mitglieder der GDCh haben Zugriff auf sämtliche *Nachrichten*-Jahrgänge – bis zurück zur ersten Ausgabe der GDCh-Mitgliederzeitschrift aus dem Jahr 1953, und zwar über www.gdch.de/nachrichten und „mygdch“.

INTERVIEW

Der japanische Chemiker Susumu Kitagawa interessierte sich für die Löcher in einer Struktur und wurde so einer der Erfinder der metal organic frameworks, MOFs.



Sucht einen anderen Blick auf die Anwendbarkeit von Forschung: Susumu Kitagawa, Materialwissenschaftler.
Fotos: Frauke Zbikowski, Vera Köster

„Vom Nutzen des Nutzlosen“

Nachrichten aus der Chemie: In der Angewandten Chemie stand, dass Sie Architekt werden wollten, als Sie 18 Jahre alt waren. Was haben Architektur und die Chemie, die Sie betreiben, gemeinsam?

» Susumu Kitagawa: Meine Chemie ist wie Bauen, nur mit Molekülen. In der Welt der Menschen heißt bauen, vor allem auf der Makroskala, verschiedene Bausteine zu verwenden. In der Geschichte der Chemie war es genauso: Um natürliche Strukturen nachzubauen, haben die Forscher sie zunächst dekonstruiert, um die Bausteine zu erkennen. Das ist zwar sehr wichtig, aber ich habe das Gefühl, dass das nicht ausreicht.

Spielt für Sie dabei die Schönheit einer Struktur eine Rolle?

» Schönheit heißt für mich exzellente Funktionalität. Ich möchte Funktionalität haben. Die meisten Materialwissenschaftler konzentrieren sich auf die Materie selbst, auf dichte, gut organisierte Strukturen, ohne Fehlstellen und Hohlräume. Alle versuchen, durch noch dichtere Strukturen besonders leitfähige Systeme zu erhalten oder solche mit exzellenten magnetischen Eigenschaften. Aber ich konzentriere mich auf die Hohlräume. Das sieht nutzlos aus, aber das Nutzlose interessiert mich.

Warum das Nutzlose?

» Vor etwa 2400 Jahren sprach der chinesische Philosoph Zhuang Zhou vom Nutzen des Nutzlosen. Welchen Nutzen Nützliches hat, ist offensichtlich. Aber wenn wir in die Zukunft denken wollen, müssen wir auf das Nutzlose schauen.

Was ist damit gemeint?

» Ein schöner, gerade gewachsener Baum beispielsweise ist nützlich: Er wird gefällt und zu Bauholz verarbeitet. Einen hässlichen, krumm gewachsenen Baum beachtet keiner, aber so ein Baum kann sehr sehr alt werden. Der Nutzen des Nutzlosen kommt also aus einer anderen Richtung. Das ist immer so.

Ist ein solcher Perspektivwechsel der Schlüssel zur Kreativität in der Wissenschaft?

» Ich denke schon. Aber das ist schwer, denn besonders heute suchen alle nach Lösungen, etwa für die Energiefrage oder den Schutz der Umwelt. Wenn Chemiker Stoffe synthetisieren, fragen alle immer zuerst, wofür die gut sind.

Für nützliche Forschung bekommt man leichter Fördergelder.

» Aber manchmal ändern sich Gesellschaften plötzlich und sind dann bereit, verrückte Konzepte

zu akzeptieren. Und als Wissenschaftler sind wir in der komfortablen Lage, dass unsere ungewöhnlichen Ideen eines Tages nützlich werden.

Ich hatte viel Glück mit den porösen Materialien. Ich habe mich ganz auf die Grundlagenforschung konzentriert, und auf einmal zeigte sich, dass sich mit den Koordinationspolymeren, die wir synthetisiert hatten, etwas anfangen lässt.

Die Anwendung der porösen Materialien, die Sie entwickelt haben, stand für Sie also nie im Vordergrund.

» Das entspricht nicht meiner Denkweise. Natürlich wirkt auch auf mich der gesellschaftliche Druck, denn schließlich habe ich für meine Forschung Geld von der Regierung bekommen.

Wie kam es, dass die Koordinationspolymere für praktische Anwendungen interessant wurden?

» Wir hatten nicht die Geräte, um die Porosität unserer Materialien zu untersuchen. Aber auf einer Tagung über Koordinationschemie kam nach meinem Vortrag ein Firmenvertreter auf mich zu und sagte, sein Gasunternehmen würde die Koordinationspolymere gerne testen. Ich war hocherfreut, und wir starteten eine Zusammenarbeit. Wir synthetisierten Materialien und schickten sie ihm. Aber jedes Mal, wenn er anrief, berichtete er, dass die Strukturen kollabierten.

Sie haben trotzdem weitergemacht?

» Ja. So etwa zwei Jahre dauerte es, bis wir endlich verstanden, welche Art von Verbindungen wir einsetzen mussten, um ein stabiles Gerüst zu erhalten. Das haben wir dann 1996 bei der *Angewandten Chemie* eingereicht, und 1997 erschien das Paper.

Als wir anfangen, an Koordinationspolymeren zu arbeiten, meinten viele Chemiker, es sei unmöglich, poröse Materialien aus organischen Molekülen aufzubauen.

Wie ermutigen Sie Ihre Studenten, bei ihrer Forschung gewohnte Denk- und Sichtweisen zu verlassen?

» Es ist wichtig, dass sie an sich glauben. Es ist einfacher, den Entdeckungen anderer zu folgen, als eigene Konzepte zu entwickeln. Wenn man an Bekanntes anknüpft, kommt man viel schneller zu Ergebnissen, und das fühlt sich gut an, auch wenn die Entdeckungen klein sind. Es ist viel schwieriger, zu verstehen und zu entscheiden, ob ein Konzept wirklich neu ist, ob ich es als Wissenschaftler weiterverfolgen sollte. Dafür muss man von sich überzeugt sein und auf seine Neugier vertrauen. Neugier ist extrem wichtig. In diese Richtung schiebe ich meine Studenten. Die Entwürfe für ihre Veröffentlichungen, gerade wenn

es die erste ist, diskutieren wir bis zu 50 Mal. Und die Belohnung ist dann eine exzellente Publikation.

Das Forschungsgebiet MOFs ist in den letzten Jahren recht populär geworden.

» Ja, denn mit einer einfachen Synthese lassen sich stabile, poröse Materialien aufbauen. Die meisten interessieren sich zuerst für Gasspeicherung

Unordnung durch Defekte kontrollieren

von Methan oder CO₂ und befassen sich dann mit Wasserstoff. Einige wenige fokussieren sich auf Trennung, das ist ein sehr aktives Forschungsfeld. Aber was kommt als nächstes? Ich denke, der Trend geht hin zu Leitfähigkeit und Katalyse.

Was ist Ihr nächstes Ziel?

» Anisotrope MOFs. Unsere Idee ist, die Unordnung durch Defekte zu kontrollieren. Dotieren bedeutet ja, Fehlstellen in eine Struktur einzubauen. Um eine bestimmte Funktion zu erhalten, sind also die Defekte wichtig. Ich nenne das HAD, H steht für hybrid und hierarchy, A für anisotropy und asymmetry, D für disorder und defects. Das sind die Schlüsselbegriffe der Zukunft, nicht nur für MOFs, auch für andere poröse organische Materialien und Polymermaterialien. <<

Nachrichten-Redakteurin **Frauke Zbikowski** traf Susumu Kitagawa im Merck-Museum in Darmstadt.

Mehr auf: www.chemistryviews.org/details/video/11154523/What_Makes_MetalOrganic_Frameworks_Beautiful.html



ZUR PERSON: Susumu Kitagawa

Susumu Kitagawa ist Professor und Direktor am Institut für Integrierte Zellmaterialwissenschaften der Universität Kyoto. In Kyoto studierte er und promovierte in organischer Chemie. Im Jahr 1997 veröffentlichte er seine Koordinationspolymere (metal organic frameworks, MOFs)¹⁾ und zählt damit zu den Pionieren auf dem Gebiet. Für seine Arbeiten erhielt er mehrere Preise, unter anderem den Humboldt-Forschungspreis, den Preis der Chemischen Gesellschaft Japans, den Solvay-Preis „Chemie für die Zukunft“ sowie im Mai dieses Jahres die Emanuel Merck Lectureship.

1) M. Konod, T. Yoshitomi, K. Seki, H. Matsuzaka, S. Kitagawa, *Angew. Chem. Int. Ed.* 1997, 36, 16

Chemiedidaktik

Redoxflussbatterien mit Farbumschlag

Redoxflussbatterien gelten als Hoffnungsträger zur Energiespeicherung. Pilotprojekte nutzen vor allem anorganische Elektrolyte. Auch in der Schule lassen sich solche Akkumulatoren in einfachen Versuchsaufbauten veranschaulichen.

Wind- und Solarkraftwerke produzieren Strom in unregelmäßigen Mengen. Daher ist es erforderlich, große Energiemengen zu speichern, und dieses Problem braucht dringend eine Lösung.¹⁾ Systeme wie die Wasserelektrolyse mit Brennstoffzellentechnik und Druckluftspeicher haben Wirkungsgrade von etwa 45 Prozent.²⁾ Das System Power-to-Gas (PtG) gewinnt elektrochemisch Wasserstoff, setzt ihn mit Kohlendioxid zu Methan um und gewinnt die elektrische Energie durch Verbrennung des Methans zurück; es hat einen Wirkungsgrad von etwa 30 Prozent.^{3,4)} Pumpspeicherwerke erreichen Wirkungsgrade von etwa 85 Prozent, haben allerdings sehr geringe Energiedichten, und sie brauchen Gefälle, sind also aufgrund der geografischen Bedingungen nicht überall möglich.^{3,4)} Diskutiert werden auch Ag-

gregate aus Lithiumionenakkumulatoren, die allerdings teuer sind. Ihr Wirkungsgrad beträgt annähernd 100 %, aber ihre Energiedichte ist relativ gering.^{5,6)}

Als Alternative zu den bisher diskutierten Systemen gelten Redoxflusszellen, die einen Wirkungsgrad von 75 bis 80 % aufweisen, allerdings bei einer relativ geringen Energiedichte. Hierbei werden elektrochemisch aktive Substanzen in Wasser gelöst, in Tanks gelagert und den elektrochemischen Zellen zugeführt. Deren Elektroden müssen keine besonderen Ansprüche erfüllen, es sind in der Regel Graphitfolien ohne Katalysatoren.

Am weitesten entwickelt sind Redoxflussbatterien auf der Basis von Vanadiumsalzen.⁷⁾ Erste Versuchsanlagen, etwa in Braderup in Schleswig-Holstein sind bereits in Betrieb.⁸⁾ Ebenso werden erste Elektroautos mit Akkumulatoren auf Basis anorganischer Redoxflussbatterien gebaut und getestet.⁹⁾

Vanadiumsalze sind jedoch teuer und Vanadium(V)-Verbindungen wirken korrosiv und sind giftig. Forschergruppen in den USA um Aziz und Mitarbeiter sowie Narayanan und Mitarbeiter haben deshalb organische Systeme auf Basis von Anthrachinondisulfonsäuren für Redoxflussbatterien untersucht.^{10–12)} Diese und weitere, von uns untersuchte organische Redoxsysteme sind anders als Vanadiumsalze im Chemieunterricht in Schulen einsetzbar.^{13–17)}

Elementarer Schwefel wird schnell an Eisen(II)sulfid-Elektroden reduziert, dies nutzen Niedertemperatur-Zinkschwefelbatterien. Ebenso schnell oxidieren Sulfidionen zu Disulfidionen an Eisen(II)sulfid.¹⁸⁾ Daher liegt es nahe zu untersuchen, ob auf der Anodenseite in Redoxflusszellen Sulfide und andere schwefelhaltige Anionen oxidiert werden können.

Auf der Kathodenseite haben sich Cer(IV)sulfat, die Sauerstoffverzehrkathode (SVK) sowie Eisen(III)sulfat bewährt. Schulen und Hochschule beziehen Cer(IV)-Verbindungen über den Chemikalienhandel, 100 g Cer(IV)sulfat kosten etwa 100 Euro. Die Verbindung hat ein besonders hohes Oxidationspotenzial und eignet sich daher für Redoxflusszellen. Zudem ist Cer(IV)sulfatlösung gelb, Änderungen in der Oxidationsstufe sind gut zu erkennen.

Versuchsanordnungen

Für Experimente in der Schule hat sich eine einfache Versuchsanordnung bewährt.¹⁷⁾ Die hier beschriebenen Experimente nutzen statt einer Graphitfolie eine Eisen(II)sulfidelektrode auf der Anodenseite.

Die Elektrode ist zunächst ein großes unregelmäßig geformtes Stück Eisen(II)sulfid. Deshalb wurde anstelle des Becherglases eine Kristallierschale genutzt, um die klobige



Dominique Rosenberg ist wissenschaftliche Mitarbeiterin im Arbeitskreis der Chemiedidaktik der Europa-Universität Flensburg. Sie studierte in Flensburg Vermittlungswissenschaften im Bachelor, Master of Education in Chemie und Wirtschaft/Politik und hat über Redoxflussbatterien als Thema des Chemieunterrichts promoviert.



Walter Jansen, Ehrenmitglied der GDCh-Fachgruppe Chemieunterricht, ist emeritierter Professor für Didaktik der Chemie an der Universität Oldenburg und Lehrbeauftragter an der Universität Flensburg.

Maike Busker ist Professorin für Chemie und ihre Didaktik in Flensburg.

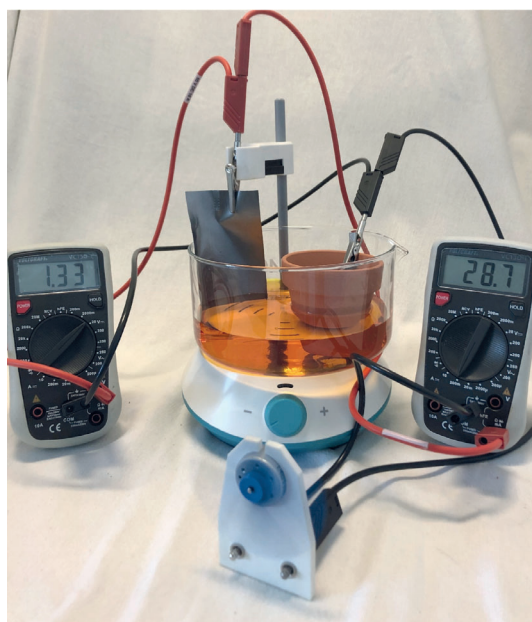
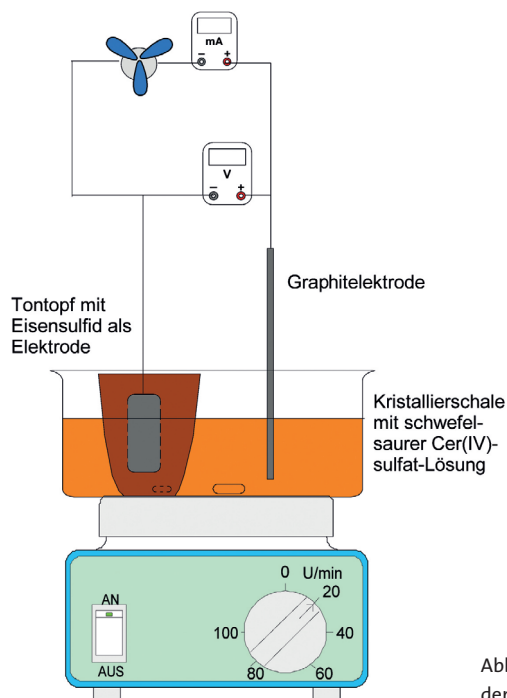


Abb. 1. Versuchsaufbau einer Redoxflussbatterie für den Unterricht, hier mit einer Eisensulfidelektrode.

Eisensulfidelektrode aufzunehmen. Alternative ist ein weites 600-mL-Becherglas. Dann müssen allerdings die Eisensulfidelektrode und die Anodenlösung in den Tontopf gegeben werden (Abbildung 1).

Anstatt des Eisensulfidklotzes können Eisensulfidstangen aus dem Chemikalienhandel verwendet werden. In dem Fall wird eine Stange, die sich mit einer Krokodilklemme greifen lässt, in den Tontopf gestellt.

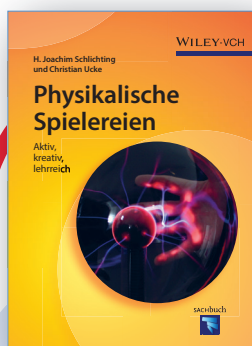
Bei den Versuchen kann sich Schwefelwasserstoff bilden, daher müssen die Versuche mit Natriumsulfid im Abzug durchgeführt werden.

Die Natriumsulfid-Cer(IV)sulfat-Batterie

20 g Natriumsulfid werden in 400 mL 1-molarer Natronlauge gelöst und in den Tontopf gegeben, in dem die Eisen(II)sulfidelektrode steht. 20 g Cer(IV)sulfat in 400 mL 1-molarer Schwefelsäure werden in die Kristallierschale gegeben und mit einer Graphitfolie versehen. Zur Potenzialmessung der Halbzellen kann eine Silber-Silberchlorid-Elektrode in 1-molarer Kaliumchloridlösung dienen. Die Filterpapierbrücke dafür darf nur zur Cer(IV)sulfatlösung führen, denn diffundierende Sulfidionen zerstö-

ren die Silber-Silberchlorid-Elektrode.

Zu Beginn des Versuchs ist die Ruheklemmenspannung mit 1,85 V recht hoch. Das ist auf das Potenzial der Cer(IV)sulfat-Graphitelektrode von +1,50 V zurückzuführen und auf das der Sulfid-Eisensulfidelektrode von -0,35 V, das im Laufe der Belastung leicht steigt. Bei Belastung der Zelle mit einem Motor, der knapp 40 mA aufnimmt, verändert sich das Potenzial der Cer(IV)sulfat-Graphitelektrode kaum (Abbildungen 2 und 3, S. 12). Mit dieser Batterie lassen sich bis zu drei parallel geschaltete Elektromotoren problemlos betreiben.



H. J. SCHLICHTING, und C. UCKE

Physikalische Spielereien

Aktiv, kreativ, lehrreich

2016. 150 Seiten, ca. 250 Abbildungen, davon 250 in Farbe. Gebunden.
€ 29,90. ISBN: 978-3-527-33893-1

„Der Mensch ist nur da ganz Mensch, wo er spielt“

Dass dieses Motto von Friedrich Schiller auch und gerade im Zusammenhang mit der Physik gilt, zeigen Christian Ucke und H. Joachim Schlichting eindrucksvoll im Buch „Physikalische Spielereien“.

Visit www.wiley-vch.de

Wiley-VCH • Postfach 10 11 61, 69451 Weinheim, Germany
Tel. +49 (0) 62 01-60 64 00 • Fax +49 (0) 62 01-60 61 84
E-mail: service@wiley-vch.de

WILEY-VCH

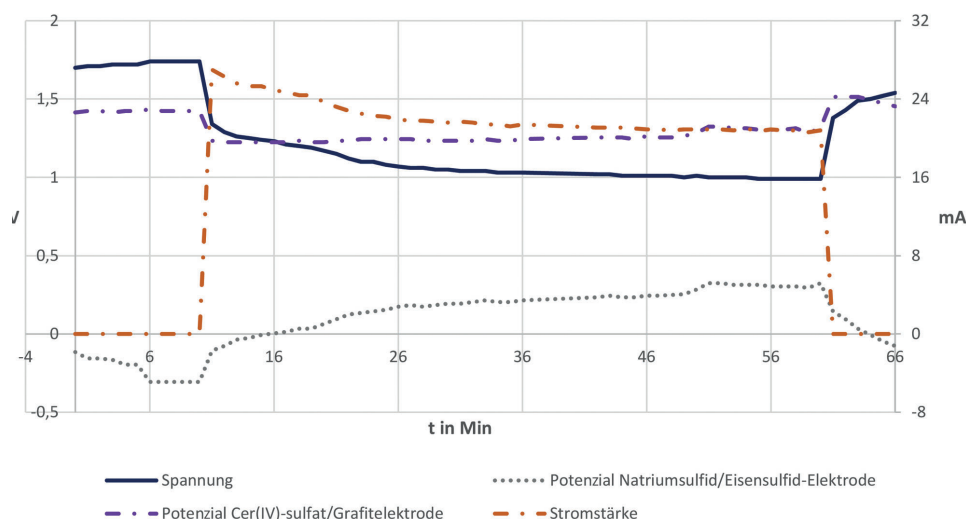


Abb. 2. Zeitlicher Verlauf von Spannung, Stromstärke und Potenzialen der Natriumsulfid/Cer(IV)sulfat-Batterie.

Aufgrund der einfachen Durchführung eignet sich der Versuch für Schule und Hochschulpraktikum.

Mit einer Graphitfolie anstelle der Eisen(II)sulfidelektrode funktioniert der Versuch auch. Die Ergebnisse sind etwas schlechter, weil das Potenzial der Sulfidionen-Kohlelektrode etwa 0,15 V höher liegt als das der Sulfidionen-Eisen(II)sulfidelektrode.

Wiederaufladen der Batterie

Nach einem Langzeitversuch von 24 Stunden bei konstant 25 mA war die Zellspannung der Natriumsulfid-Cer(IV)-Batterie auf 0,5 V gesunken, es floss nur noch ein Strom von etwa 1 mA. Die Lösung an der Cer(IV)sulfat-Graphitelektrode hatte sich entfärbt, und ein Teil des Cer(III)sulfats war ausgefallen (Abbildung 4).

Versuche, die entladene Batterie mit üblichen Labornetzgeräten wieder aufzuladen, hatten keinen Erfolg. Mit einem speziellen Ladegerät (HAME 13 Triple Power Supply HM 8040, gehört eher an Hochschulen als an Schulen zur Ausstattung), mit dem sich die einzelnen Potenziale einstellen lassen, kehrte bereits nach zwei Minuten die gelbe Farbe des Cer(IV)sulfats am positiven Pol (Kristallierschale) zurück. Das Potenzial der Cer(III)sul-

fat-Graphitelektrode wurde auf etwas mehr als +1,5 V und das der Natriumsulfid-Eisen(II)sulfidelektrode auf etwa -2,4 V eingestellt. Zudem war an beiden Elektroden eine leichte Gasentwicklung zu erkennen.

Die aufgeladene Batterie lieferte 30 Minuten lang Strom von 27 mA für einen Elektromotor.

Cyclovoltammetrie

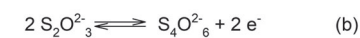
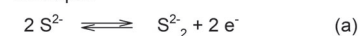
Die Wiederaufladbarkeit des Cer(IV)sulfats wurde über Cyclovoltammetrie (CV) geprüft (Abbildung 6).^{14,17)} Die Oxidations- und Reduktionspeaks, die für eine Wiederaufladung sprechen, sind bei geringen Scangeschwindigkeiten bei 10 bis 20 mV·s⁻¹ erkennbar.

Bei höheren Scangeschwindigkeiten sind Oxidations- und Reduktionspeak nur schlecht zu erkennen. Die Wiederaufladbarkeit ist aufgrund des CVs hier nur zu vermuten.

Die Natriumsulfidbatterie mit weiteren Kathodensystemen

Statt Cer(IV)sulfat können bei den Versuchen mit Natriumsulfid und Eisensulfid als Elektrode eine Sauerstoffverzehrkathode oder eine schwefelsaure Eisen(III)sulfatlö-

Minuspol:



Pluspol:

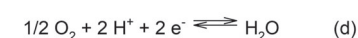


Abb. 3. Elektrodenreaktionen der Redoxflussbatterien von (a) Sulfidionen zu Disulfidionen, (b) Thiosulfationen zu Tetrathionationen, (c) Cer(IV)ionen zu Cer(III)ionen, (d) Sauerstoff zu Wasser, (e) Eisen(III)ionen zu Eisen(II)ionen.

sung mit Graphitfolie als Kathodensubstanz eingesetzt werden. Eisen(III)sulfat ist eine preiswerte Alternative zu Cer(IV)sulfat.

In die Kristallierschale wird 1-molare Schwefelsäure gegeben und noch etwa 3 g elektrochemisch zunächst nicht wirksames Natriumperoxodisulfat hinzugefügt, das langsam in Sauerstoff, Wasserstoffperoxid und Natriumsulfat zerfällt und so das Potenzial der Sauerstoffelektrode stabilisiert.¹⁶⁾ Anschließend wird eine Aktivkohlelektrode hineingestellt (Abbildung 3a).¹⁷⁾

Zu Beginn beträgt die Ruheklemmenspannung dieser Batterie etwa 1,56 V. Das Ruhepotenzial der Sulfidionen-Eisen(II)sulfidelektrode beträgt -0,33 V und das der Sauerstoffelektrode +1,25 V. Damit lassen sich bis zu drei Elektromotoren mit insgesamt 55 mA betreiben.

Für einen Versuchsaufbau einer Natriumsulfid-Eisen(III)sulfatbatterie wird anstelle einer Cer(IV)sulfatlösung eine schwefelsaure Eisen(III)sulfatlösung verwendet.

Die Ruheklemmenspannung dieser Batterie beträgt 1,15 V, das Potenzial der Eisen(III)sulfat-Graphitelektrode +0,84 V und das Potenzial der Sulfidionen-Eisensulfidelektrode -0,31 V. Ein leistungsstarker Motor kann Minuten ohne Spannungsabfall betrieben werden.

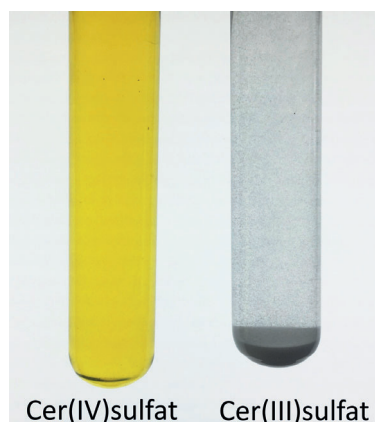


Abb. 4. Lösungen des gelben Cer(IV)sulfats (linkes Reagenzglas) vor dem Entladen und von Cer(III)sulfat (rechtes Reagenzglas) nach der Entladung.

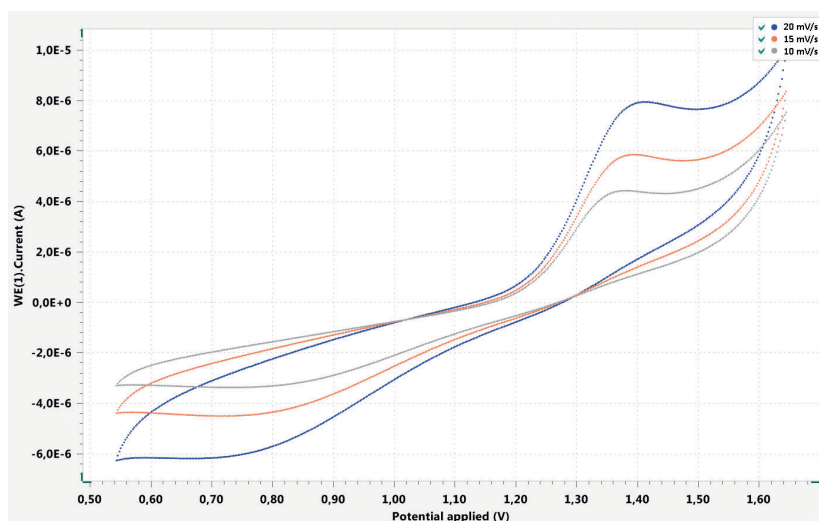


Abb. 5. Cyclovoltammogramm einer schwefelsauren Cer(IV)sulfatlösung.

Versuche mit Thiosulfationen

Die beschriebenen Versuche laufen auch mit Natriumthiosulfat anstatt mit Natriumsulfid. Als Kathodensysteme eignen sich die Sauerstoffverzehrkathode, Cer(IV)sulfat und auch Eisen(III)sulfat.

Die Ruheklemmenspannung beträgt bei dieser Batterie 1,11 V, und das Ruhepotenzial der Thiosulfationen-Eisen(II)sulfidelektrode liegt mit +0,11 V höher als das Ruhepotenzial der Sulfidionen-Eisen(II)sulfidelektrode. Dennoch laufen drei Elektromotoren mit dieser Batterie. Sie birgt auch bei fehlerhafter Bedienung kaum Gefahrenpotenzial.

Wird anstelle der Eisen(II)sulfidelektrode eine Graphitfolie als Elektrode verwendet, so liegt dort das Ruhepotenzial der Thiosulfationen-Graphitelektrode mit etwa +0,20 V um etwa 0,1 V höher als bei der Eisen(II)sulfid-Thiosulfatelektrode. Dies verdeutlicht, wie gut sich Eisen(II)sulfid als Elektrode eignet. Auch mit Natriumdithionit lassen sich anorganische Batterien konstruieren. Hier funktioniert allerdings die Kohlefolie als Elektrode besser als Eisen(II)sulfid.

Ausblick

Eisen(II)sulfid eignet sich gut als Elektrodenmaterial in anorganischen Redoxflussbatterien. Wir untersuchen nun, ob sich Eisen(II)sulfid in Experimenten als alternatives Elektrodenmaterial für Lithiumionenakkus eignet. Die bisherigen Ergebnisse sprechen dafür. Von diesen werden wir demnächst berichten. <<

- 1) https://mente.et/Archiv_Zukunftsfragen/2012/Zukunftsfragen_2012_07.pdf (Stand 24.09.2019)
- 2) P. Kurzweil, O. K. Dietlmeier, Elektrochemische Speicher – Superkondensatoren, Batterien, Elektrolyse-Wasserstoff, Rechtliche Grundlagen, Springer, Wiesbaden, 2015, 343
- 3) M. Kaltschmitt, W. Streicher und A. Wiese, Erneuerbare Energien – Systemtechnik, Wirtschaftlichkeit, Umweltaspekte, Springer, Berlin-Heidelberg, 2006
- 4) M. Sterner, I. Stadler, Energiespeicherung – Bedarf, Technologien, Integration, Springer, Berlin-Heidelberg, 2014, 282f
- 5) P. Bieker, M. Winter, Chem. Unserer Zeit 2016, 50, 26–33
- 6) P. Bieker, M. Winter, Chem. Unserer Zeit 2016, 50, 172–186
- 7) A. Z. Weber, M. M. Mench, J. P. Meyers, P. N. Ross, J. T. Gostick, Q. Liu, Appl. Electrochem. 2011, 41, 1137–1164
- 8) www.elektroniknet.de/power/energiespeicher/artikel/111844/ (Stand 24.09.2019)
- 9) www.focus.de/auto/elektroauto/nanoflowcell-quantino-neues-zeitalter-investoren-bestellen-25-000-flusszellen-elektroautos-fuer-3-2-milliarden-euro_id_9090446.html (Stand 24.09.2019)

- 10) B. Huskinson, S. Nawar, M. R. Gerhardt, M. Aziz, ECS Trans. 2013, 57 (7), 101–105
- 11) B. Huskinson, M. P. Marshak, S. Changwon et al., Nature 2014, 505, 195–198
- 12) B. Yang, L. Hooper-Burkhardt, F. Wang, G. K. S. Prakash, S. R. Narayanan, J. Electrochem. Soc. 2014, 161(p), A1371–A1380
- 13) D. Rosenberg, K. Dick, S. Gudenschwager, M. Busker, W. Jansen, World J. Chem. Educ. 2019, 7 (2), 145–152
- 14) D. Rosenberg, S. Pansegrau, M. Wachholz, A. Köppen, M. Busker, W. Jansen, World J. Chem. Educ. 2018, 6 (1), 63–71
- 15) D. Rosenberg, D. Koring, S. Pansegrau, A. Rehling, M. Busker, W. Jansen, 2018, Math. Nat. Unterr. 2018, 71 (1), 29–36
- 16) D. Rosenberg, S. Pansegrau, W. Wachholz, A. Rehling, M. Busker, W. Jansen, CHEM-KON 2017, 24/4, 327–342
- 17) D. Rosenberg, S. Pansegrau, M. Busker, W. Jansen, Nachr. Chem. 2017, 65, 167–171
- 18) H. Helms, J. Ristau, H. Kunz, W. Jansen, Monatshefte für Chemie 2000, 131, 165–174

AUF EINEN BLICK

In Redoxflussbatterien werden großtechnisch Vanadiumsalze eingesetzt. Sie sind korrosiv und giftig und eignen sich daher nicht für Experimente in der Schule.

Ein Alternative sind Natriumsulfidbatterien mit Cer(IV)sulfidlösung oder Eisen(III)sulfid an der Kathodenseite.

Wissenschaftler der experimentell-konzeptionell ausgerichteten chemiedidaktischen Forschung berichten hier in loser Folge über zukunftsweisende Themen für den Chemieunterricht.

Hochschuldidaktik

Anleiten, beraten, begleiten

Masterstudenten und Doktoranden, die als Assistenten Studierende in den Laborpraktika betreuen, werden in der Regel nicht speziell auf ihre Aufgaben vorbereitet. An der Universität Marburg hat sich das nun geändert.

Assistenten sind ein wichtiger Bestandteil der Lehre in chemischen Laborpraktika. Ihre Tätigkeit geht weit über das Vermitteln fachlicher Inhalte hinaus: Sie leiten die Studierenden im Labor an, sind deren Ansprechpartner bei Problemen und beraten sie bei fachlichen Fragen sowie Verständnisschwierigkeiten. Sie unterstützen Studierende darüber hinaus bei fachübergreifenden Themen wie dem Einüben wissenschaftlichen Denkens und kooperativen Arbeitens. Assistenten bereiten die Praktikumstage vor, vermitteln fachliche Inhalte und setzen diese mit den Versuchen und der Labortätigkeit in Beziehung. Sie prüfen und bewerten die mündlichen und schriftlichen Leistungen der Studierenden und geben diesen dazu Feedback.

Praktikumsassistenten sind also mit einem breiten Aufgabenfeld betraut, das von ihnen fachliche, überfachliche und didaktische Kompetenzen verlangt.

Fachlich sind Assistenten, die sich häufig im Masterstudium oder in der Promotion befinden, durch ihr Studium gut ausgebildet. Didakti-

sche und überfachliche Kompetenzen, die eine Assistententätigkeit ebenfalls erfordert, vermittelt das Studium hingegen nur selten; Beratung und Anleitung Studierender, effektive Kommunikation oder die didaktische Aufbereitung und Strukturierung komplexer fachlicher Inhalte sind nicht Bestandteil eines Chemiestudiums. Dies beeinflusst die Qualität von Laborpraktika mitunter erheblich, gerade wenn Assistenten am Anfang ihrer Tätigkeit stehen. Sie sind schnell überfordert und wissen nicht, wie sie mit den für sie noch unbekannten Situationen kompetent umgehen können. Dies kann den Lernprozess der Studierenden beeinträchtigen.¹⁾

Rollenwechsel: vom Lernenden zum Lehrenden

Viele Assistenten eignen sich ihr didaktisches Können selbstständig im Verlauf des betreuten Praktikums an – häufig nach einem zeitaufwendigen und nicht immer erfolgreichen Trial-and-error-Vorgehen, ganz ohne Förderung. Dabei müssen sie von der Rolle des Studierenden hin zu der des Lehrenden wechseln, ihre eigene Tätigkeit und erlebte Situationen reflektieren und eigenständig Lösungen für Probleme finden. Dieser Prozess ist herausfordernd, da kein Experte sie anleitet oder unterstützt und sie bei diesem Prozess oft nur auf ihre eigenen Erfahrungen aus Schule, Studium oder aus Aktivitäten außer-

halb der Universität zurückgreifen können.¹⁾ Zumeist konzentrieren sie sich hierbei auf den praktischen und den fachlichen Anteil. Ebenso wichtige begleitende, unterstützende und anleitende Aspekte bleiben außen vor.²⁾

Auch im späteren Berufsleben in Industrie und Universität, etwa in der Leitung eines Forschungsteams, sind die Fähigkeiten zu kommunizieren, andere anzuleiten und zu unterstützen erforderlich.²⁾ Eine frühzeitige Förderung dieser Kompetenzen ist daher auch für den späteren Lebensweg sinnvoll und erleichtert den Einstieg in den Beruf.

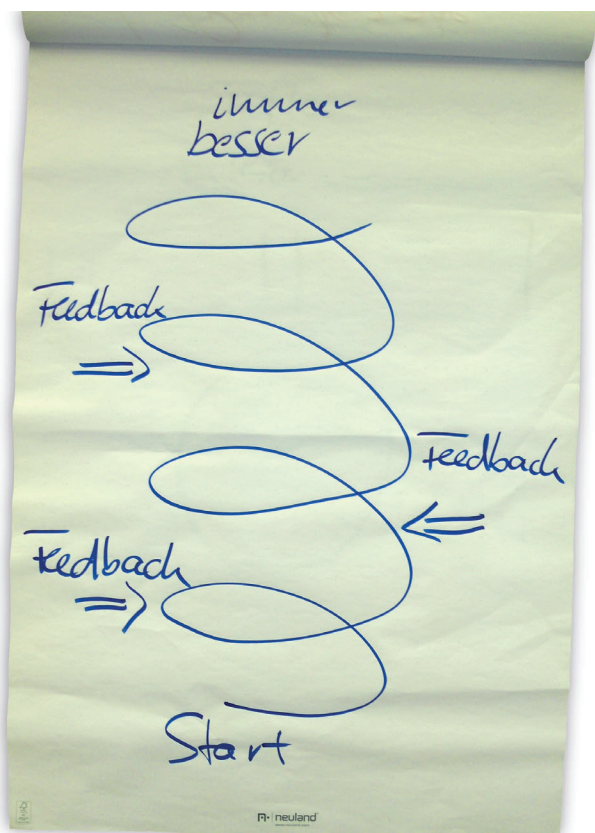
An einigen Universitäten entstehen deshalb gerade Fördermaßnahmen, die Studierende bei ihrem Rollenwechsel vom Lernenden zum Lehrenden unterstützen (Kasten S. 16).

Workshop für Praktikumsassistenten

Um didaktische Kompetenzen bei Assistenten zu fördern, hat das Referat für Lehrentwicklung und Hochschuldidaktik an der Universität Marburg einen zweitägigen Workshop entwickelt. Das Angebot „Betreuung und Anleitung Studierender im Chemischen Praktikum“ ist Teil des Projekts „Für ein richtig gutes Studium“ im Rahmen des Qualitätspakts Lehre und hat bisher zweimal stattgefunden, den dritten Workshop gibt es nächstes Jahr. Als



Philipp Lindenstruth arbeitet seit dem Jahr 2017 als Referent für Lehrentwicklung und Hochschuldidaktik im Qualitätspakt-Lehre-Projekt „Für ein richtig gutes Studium“ an der Universität Marburg. Er hat Chemie und Geschichte für das Lehramt an Gymnasien studiert und promoviert im Arbeitskreis Fachdidaktik der organischen Chemie.



Feedback-Runden sind Teil eines Workshops für angehende Praktikumsassistenten.

Referent engagierte die Universität den Dozenten Alexander Schiller (www.schillermertens.de).

In diesem Workshop lernen die angehenden Praktikumsassistenten die Grundlagen des Lernens und Lehrens kennen, setzen sich mit ihren Vorstellungen von guter Lehre, von perfekten Studierenden und guten Lehrenden auseinander. Einzelne Aspekte wie das eigene Auftreten, Kommunikation und die Arbeitsweise des Gehirns, wenn wir uns an Informationen erinnern, erfahren die Teilnehmenden direkt in Übungen.

Ihre Erfahrungen aus dem Workshop setzen die Teilnehmer zuerst um, indem sie eigene fachliche Themen aus Forschungspraktika, Bachelor-, Master- oder Promotionsarbeit aufbereiten und während der Veranstaltung präsentieren.

Situationen aus dem Praktikumsalltag

Anhand eigener Beispiele und Erfahrungen analysieren die Teilnehmenden als problematisch empfundene Situationen im Praktikumsalltag – etwa wenn ein Student seinen Abzug nicht aufräumt –, spielen diese im Praktikumslabor durch und leiten daraus Handlungsweisen ab. Hierbei wenden sie auch die zuvor thematisierten Kommunikations- und Führungsstrategien sowie verschiedene Feedback-Methoden an.



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Fortbildung



**Unverzichtbare
Bausteine
Ihrer Karriere**



Ihre Vorteile bei GDCh-Fortbildungskursen sind

- kompetente Referenten aus Industrie, Hochschule oder Forschungsinstituten
- Einblicke in neueste Forschungsergebnisse sowie in moderne Methoden und Verfahren
- Foren für Informations- und Erfahrungsaustausch auf hohem fachlichen Niveau
- limitierte Teilnehmerzahlen als Garant für effektive Schulungen
- GDCh-Zertifikat nach erfolgreichem Abschluss

Nutzen Sie unser Know-how und gestalten Sie aktiv Ihre berufliche Zukunft!

Wir stehen Ihnen ebenfalls als erfahrener Anbieter von Inhouse-Kursen zur Seite.

Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V.
Fortbildung
Postfach 90 04 40
60444 Frankfurt am Main
Telefon: +49 69 7917-364
E-Mail: fb@gdch.de

www.gdch.de/fortbildung

Am Beispiel mündlicher Prüfungen und Kolloquien befassen sich die Teilnehmenden mit Kommunikation und Feedback und erstellen Bewertungskriterien für eigene Prüfungen. Mit Hilfe der ARIVA-Methode (Ausrichten, Reaktivieren, Informieren, Verarbeiten, Auswerten) planen die Teilnehmenden schließlich eigene Lernumgebungen für die von ihnen betreuten Laborpraktika und wenden dabei die bis dahin erarbeiteten Konzepte an. Zu diesen Lernsettings erstellen sie Lernziele. Dafür nutzen sie die SMART-Methode (specific, measurable, achievable, relevance, timeliness) und verschiedene Taxonomien, also Operatorenlisten, mit denen sich Lernziele beschreiben lassen.

Eigene Arbeit als Anknüpfungspunkt

Durch den Workshop erhalten die Teilnehmenden einen Eindruck davon, wie sie Laborpraktika betreuen können, damit die Lehre gelingt. Zudem lernen sie Möglichkeiten kennen, ihre überfachlichen und didaktischen Kompetenzen zu erweitern. Dabei nehmen sie ihre eigenen Erfahrungen als Student sowie Assistent in den Laborpraktika und aus ihren Arbeitsgruppen auf und verwenden diese als Ausgangs- und Anknüpfungspunkte, anhand derer der

Workshop den Rollenwechsel thematisiert.

Auch der Nutzen und die Bedeutung der erarbeiteten Kompetenzen außerhalb des Laborpraktikums kommen in diesem Zusammenhang zur Sprache. Sie sind auch Themen für den Austausch zwischen den Teilnehmenden sowie mit dem Referenten.

Vor dem Workshop wurden die Teilnehmenden nach ihren Anliegen gefragt; sie haben aber auch während des Workshops Gelegenheit, diese in den Workshop aufnehmen zu lassen.

Grundlagen schaffen

Die Teilnehmenden bewerteten die Veranstaltung in einem Fragebogen als sehr gut. Als sehr lernfördernd nennen sie den Praxisbezug, der über die Assistententätigkeit an der Universität hinausgeht, und die praktischen Übungsmöglichkeiten, die interaktiven Trainingsmethoden nach Thiagi (www.thiagi.com). Auch den Bezug auf die eigene Situation und auf eigene Erfahrungen sowie die damit verknüpften Möglichkeiten zur Reflexion und zum Perspektivwechsel hoben die angehenden Assistenten positiv hervor.

Ein zweitägiger Workshop kann nicht alle Themen vollständig und ausführlich behandeln, die bei der Betreuung Studierender auf Assis-

tenten zukommen. Der Workshop bietet den Teilnehmenden vielmehr eine Grundlage, auf der sie ihre Tätigkeit als Assistenten innerhalb und außerhalb von Laborpraktika reflektieren und ihre Kompetenzen für den Beruf weiterentwickeln können.

Der Referent unterstützt und berät sie praxisnah an wichtigen Schlüsselstellen, vor allem bei der Anleitung Studierender und der didaktischen Ausrichtung von Lernsituationen. Dadurch können die Teilnehmenden selbstbewusster und zielgerichteter ihre Rollen vom Lernenden zum Lehrenden wechseln, schwierige Situationen entschärfen und kompetenter agieren. Sie erwerben die Kompetenzen schneller als ohne Anleitung und können hinderliche oder ineffektive Vorgehensweisen vermeiden.

Die hier vorgestellten Ansätze und Konzepte können die Teilnehmenden im Anschluss im Rahmen des hochschuldidaktischen Angebots der Universität Marburg und der dortigen Serviceeinrichtungen weiter vertiefen.⁴⁾ <<

- 1) G. E. Gardner, J. Parrish, J. Biochem. Mol. Biol. Edu. 2018, 47 (1), 51–57.
- 2) A. A. Flaherty, T. L. Overton, High. Educ. Res. Dev. 2018, 37 (7), 1380–1394.
- 3) S. Freeman, S. L. Eddy, ? McDonough; M. K. Smith, N. Okoroafor, H. Jordt, M. P. Wenderoth, PNAS 2014, 111 (23) S. 8410–8415.
- 4) www.uni-marburg.de/de/hochschuldidaktik/

AUF EINEN BLICK

In der Regel bringen sich Praktikumsassistenten didaktische Kenntnisse selbst bei.

Das kann ineffektiv sein und die Qualität von Laborpraktika beeinträchtigen.

Spezielle Anleitung der Assistenten kann die Qualität der Lehre verbessern und vermittelt zudem Kompetenzen für den Beruf.

Das Bundesforschungsministerium finanziert das Projekt „Für ein richtig gutes Studium“.

NEUES PROJEKT: Führungsethik für Chemiker

Studierenden frühzeitig Führungskompetenzen vermitteln und das Thema Führungsethik in das Curriculum naturwissenschaftlicher und technischer Studienfächer integrieren: Das ist das Ziel des neuen Verbundprojekts „Führungsethik als Ethik in den Wissenschaften – Von der Theorie zur Praxis in Hochschule und Unternehmen“. Daran beteiligt

sind das Internationale Zentrum für Ethik in den Wissenschaften (IZEW) der Uni Tübingen, die Arbeitsgruppe Chemiedidaktik der Uni Jena, das Zentrum für Qualitätssicherung und -entwicklung der Uni Mainz und das Wittenberg-Zentrum für Globale Ethik (WZGE). Die Carl-Zeiss-Stiftung fördert das Projekt. www.fuehrungsethik.de

Gute wissenschaftliche Praxis

Sei frei und glücklich

Bei Ethik in der Wissenschaft geht es um mehr als um das, was ein Forscher im Labor tut und wie. Staunen, Ehrfurcht, Sorgfalt und innere Distanz charakterisieren das wissenschaftliche Ethos. Warum ist das so?

Wissenschaften kämpfen um ihre Glaubwürdigkeit: Plagiate, Fälschungen, selektive Datenauswahl, Überinterpretationen und andere Formen wissenschaftlichen Fehlverhaltens untergraben sie.

Besonders augenfällige Beispiele gibt es immer wieder in der medizinischen Forschung, wie aktuell an der Universität Heidelberg: Anfang des Jahres hatte der Chefgynäkologe des Universitätsklinikums, Christof Sohn, als Weltsensation einen Bluttest für Brustkrebs angekündigt. Der Test genügte zu dem Zeitpunkt keinerlei wissenschaftlichen Kriterien.^{1,2)}

Nur wenig älter ist ein Fall an der Universität Tübingen: Der Hirnforscher Nils Birbaumer hatte – ebenfalls öffentlichkeitswirksam – behauptet, mit vollständig gelähmten Patienten über Hirnströme kommunizieren zu können. In Wirklichkeit hatte er Daten großzügig ausgelegt, fehlerhaft analysiert oder ignoriert.^{3,4)}

Beiden Fällen gemeinsam ist, dass die Hauptverantwortlichen bislang kaum Konsequenzen fürchten müssen und auch übergeordnete Stellen Bedenken überhört haben. Der Präsident der Leibniz-Gemeinschaft Matthias Kleiner, der einer externen Untersuchungskommission zu dem Heidelberger Fall vorsitzt, sprach von „Führungsversagen, Machtmissbrauch und Eitelkeit“.⁵⁾

Medien, Geldgeber und Universitätsleitungen fördern allerdings

den Hype um einzelne Protagonisten in der Wissenschaft. In ihren Augen haben neue Erkenntnisse allein offenbar einen zu geringen Wert. Die forschende Person steht zwar im Zentrum der Wissenschaft. Aber vor dem Erfolg des Einzelnen – wie auch immer dieser definiert sein mag – müssen wir seiner ethischen Grundhaltung Aufmerksamkeit schenken.

Ethos des Wissenschaftlers

Ein Forscher, der die Regeln guter wissenschaftlicher Praxis verletzt, ist einerseits Opfer unseres Wissenschaftssystems. Dieses fördert nämlich Fehlverhalten.^{6–10)}

Andererseits befreit ein Umfeld, das unethisches Verhalten fördert, den einzelnen Menschen nicht von seiner Verantwortung. Im Namen wirtschaftlicher Dogmen^{6,9)} wurde zwar die „Freiheit, die das Wesen einer Universität ausmacht“,⁸⁾ eingeschränkt. Es ist jedoch erstaunlich und zugleich erschreckend, wie wenig Widerstand Akademikerinnen leisteten und leisten. Jeder Wissenschaftler muss sich daher fragen, ob er nicht selbst zu angepasst handelt.¹⁰⁾

Ethik in der Wissenschaft ist daher mehr als bloß das Vermeiden von wissenschaftlichem Fehlverhalten. Sie erfordert nicht nur Redlichkeit, sondern ein Ethos des Forschers, das auf inneren Werten beruht. Die den Forschungsalltag dominierenden Werte können damit

nicht gemeint sein: eingeworbenes Geld, Zahl an Publikationen, Hirsch-Faktor, Positionen in Rankings, Evaluationsergebnisse. Auch nicht jene Werte, die Universitäten ihren Studierenden nahelegen: „Werdet reich und mächtig.“¹¹⁾

Die Klimaforscherin Helga Kromp-Kolb hingegen bringt den Kern des von Wissenschaftlern zu fordernden Ethos auf den Punkt: Sie sollten ihren Studenten den Wert eines geglückten Lebens vermitteln.¹¹⁾

Tatsächlich stellt die Frage nach dem richtigen, verantwortungsvollen Verhalten nur einen Aspekt der Ethik dar. Nach Aristoteles geht es letztlich um „das höchste Gut des menschlichen Lebens“, die Glückseligkeit.¹²⁾ Sie ist die „optimale Verfassung des Menschen, in der seine biologischen, psychischen und rationalen Vermögen [...] sich in wohlproportionierter Harmonie befinden.“ Richtiges Handeln folgt aus dem Ziel, gut zu leben.

Für eine Wissenschaftlerin geht es deshalb bei Ethik primär nicht darum, was sie zum Beispiel im Labor tut, welche Qualitätsstandards sie einhält, dass sie die Einflüsse ih-

Abbildung: ©xyz+ – stock.adobe.com

Markus Seidl-Nigsch hat in Wien Chemie studiert und in Innsbruck in physikalischer Chemie promoviert. Er lebt in Schopponau, Österreich, und arbeitet aktuell an einer Phänomenologie des gedruckten Buchs und dessen Vorzügen gegenüber E-Books. m-seidl@a1.net, <http://members.aon.at/m-seidl/>



rer Arbeit auf Gesellschaft und Umwelt¹³⁾ bedenkt und ähnliches. Ethik in der Wissenschaft betrifft die Forscherin in ihrer ganzen Persönlichkeit.

Wir müssen daher gängige Regeln zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis so erweitern, dass sie das Ethos des Wissenschaftlers erfassen: Raum zum Staunen offenhalten, Ehrfurcht vor dem Forschungsgegenstand haben, sorgfältig arbeiten und fachliche Grenzen achten, Distanz zur eigenen Arbeit einnehmen, sich Zeit lassen.

Staunen

Staunen steht am Anfang des Fragens.¹⁴⁾ Es gibt die Fragen der Einzelwissenschaften; sie gleichen Rätseln, und Antworten heben sie auf – samt dem Impuls des Staunens. Ihnen stehen Fragen gegenüber, die keine Antwort finden.¹⁴⁾ Zum Beispiel: Warum ist die Natur nicht chaotisch, sondern geordnet? Und wie ist es möglich, dass wir ihre Ordnungsprinzipien erkennen und mathematisch erfassen können?

Wir sollten Empfindsamkeit für solche Fragen bilden, denn sie bleiben im „Milieu des Staunens“:¹⁴⁾ Antworten scheinen in Griffweite zu sein. Versuchen wir jedoch, sie zu formulieren, erfassen wir nur Teilaspekte. Das Staunenswerte aber zieht uns an, wir stimmen ihm zu – weil es Sinn stiftet und beglückt.¹⁵⁾

Ehrfurcht

Ehrfurcht ist die Grundlage aller Tugenden, sagte Cicero. Wir müssen sie anderen Menschen gegenüber einüben, als Wissenschaftler aber genauso gegenüber dem Gegenstand unserer Forschung. Das heißt, dass wir dem „zu Erkennen“ [...] Vorrang vor dem Erkennen¹⁴⁾ einräumen und nicht uns selbst, sondern die zu erforschende Sache in den Mittelpunkt stellen.¹⁶⁾

Zur Ehrfurcht vor dem Forschungsgegenstand gehört auch, dass wir sorgfältig arbeiten und Erkenntnisse vor ihrer Veröffentlichung reifen lassen. Schließlich müssen wir fachliche Grenzen achten, wir dürfen daher Einzelwissenschaften nicht zu einer Metaphysik erheben. Wenn wir Distanz zur eigenen Arbeit einnehmen, sind wir weniger anfällig für wissenschaftliches Fehlverhalten.

Wer diese Handlungsanleitungen ernst nimmt, muss sich Zeit lassen. Sie alle setzen Maße voraus. Auch die Idee des guten Lebens selbst hat eine zeitliche Dimension. Wir haben das gute Leben nie in der Tasche, weil wir uns „immer wieder zwischen Verhaltensweisen entscheiden [müssen], die mehr oder weniger gut oder schlecht sind“.¹⁷⁾ Das Leben, auch das des Wissenschaftlers, ist daher ein Auf-dem-Weg-Sein.

Deshalb gilt für die Forschung: Regeln guter wissenschaftlicher Praxis suggerieren eine Klarheit, die es nicht gibt. Wissenschaftler müssen immer wieder selbst Verantwortung übernehmen und „das jeweils Bessere, das kleinere Übel“¹⁷⁾ wählen.

Mehr Freiheit wagen

Die „Unterwerfung des Wissens unter die Prinzipien des Marktes“ hat die akademische Freiheit eingeschränkt.⁸⁾ Das wissenschaftliche Ethos indes liegt quer zur betriebswirtschaftlich strukturierten Universität – und es fördert die Freiheit der Wissenschaftler. Das ist kein Zufall, denn Freiheit fällt mit dem unbedingt Guten, der Glückseligkeit der aristotelischen Ethik zusammen.¹⁷⁾ Das Ethos verlangt also von Forschern, sich falschen ökonomischen Anreizen^{6–9)} und dem Streben nach persönlichem Ansehen¹⁶⁾ zu widersetzen. Es heißt, den verbliebenen Freiraum auszu-schöpfen und ihn durch Grenzüberschreitungen wieder auszu-dehnen.

- 1) www.sueddeutsche.de/gesundheits/heidelberg-brustkrebs-bluttest-skan-dal-1.4527497 (Stand 27.09.2019)
- 2) www.uni-heidelberg.de/de/newsroom/bluttest-zur-brustkrebsdiagnostik (Stand 27.09.2019)
- 3) P. Bauer, P. Illinger, T. Krause, Wunschenken, *Süddeutsche Zeitung Magazin* 2019, 15, 9
- 4) *Untersuchungskommission stellt wissenschaftliches Fehlverhalten durch Tübinger Hirnforscher fest*, Pressemitteilung der Universität Tübingen, 06.06.2019, <https://uni-tuebingen.de/universitaet/aktuelles-und-publikationen/pressemitteilungen/newsfullview-pressemitteilungen/article/untersuchungskommission-stellt-wissenschaftliches-fehlverhalten-durch-tuebingen-hirnforscher-fest/> (Stand 22.08.2019)
- 5) www.forschung-und-lehre.de/kommission-kritisiert-falsch-verstandene-freiheit-der-wissenschaft-1961/ (Stand 27.09.2019)
- 6) M. Binswanger, *Sinnlose Wettbewerbe*, Verlag Herder, Freiburg im Breisgau 2010
- 7) W. F. van Gunsteren, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2013, 52, 118
- 8) K. P. Liessmann, *Geisterstunde*, Paul-Zsolnay-Verlag, Wien, 2014
- 9) M. Seidl, *Nachr. Chem.* 2016, 64, 1094
- 10) T. G. Baudson, *Nachr. Chem.* 2018, 66, 383
- 11) H. Kromp-Kolb, „Aufgabe der Bildung“, *BildungsTV*, 02.11.2015, www.youtube.com/watch?v=2OL-0QvQoCI (Stand 12.04.2019)
- 12) B. Merker, „Ethik/Moralphilosophie/Moral“, In: H. J. Sandkühler (Hrsg.), *Enzyklopädie der Philosophie, Band 1*, Felix-Myner-Verlag, Hamburg, 2010
- 13) J. Mehlich, F. Moser, B. Van Tiggelen, L. Campanella, H. Hopf, *Chem. Eur. J.* 2017, 23, 1210
- 14) G. Haefner, *Wege in die Freiheit*, Verlag W. Kohlhammer, Stuttgart, 2006
- 15) M. Hagner, *Die Lust am Buch*, Insel-Verlag, Berlin, 2019
- 16) R. Reuß, *Ende der Hypnose*, Stroemfeld-Verlag, Frankfurt am Main und Basel, 2013
- 17) A. Keller, *Vom guten Handeln*, Echter-Verlag, Würzburg, 2010



Chemiegeschichte

Lothar Meyer – eine Wiederentdeckung

Das von den Vereinten Nationen ausgerufenen Internationale Jahr des Periodensystems rückt Dmitri Mendelejews Elementetafel aus dem Jahr 1869 in den Mittelpunkt. Doch es lohnt sich, einen Blick auf den anderen großen Mitbegründer des Periodensystems zu werfen: Lothar Meyer.

Die Chemie lebt zur Erklärung ihrer Befunde und Begründung ihrer Aussagen von konstruierten Modellvorstellungen. Diese werden bei Bedarf ergänzt, korrigiert oder gegen neue Modelle ausgetauscht. Die gewonnene Flexibilität wird erkaufte durch einen weitgehenden Verzicht auf eine an der Geschichte orientierte Betrachtungsweise: Der jeweils zeitgenössische Kenntnisstand ist quasi als Momentaufnahme akzeptiert.

Eine Ausnahme – in der Konstanz seiner Bedeutung – bildet das in der zweiten Hälfte des 19. Jahrhunderts entwickelte Periodensystem der chemischen Elemente. In diesem sind (nach heutiger Schreibweise) die Atomsorten, die Elemente, aufsteigend nach ihrer Ordnungszahl in waagrechten Reihen, den Perioden, so angeordnet, dass Elemente mit ähnlichen chemischen Eigenschaften jeweils unter das leichtere Vorgängerelement zu stehen kommen. Die hierdurch gebildeten Spalten, genannt Gruppen, enthalten folglich chemisch verwandte Elemente.¹⁾ Dieses System dient auch heute noch selbst in der akademischen Lehre als Orientierungshilfe für das Verständnis insbesondere der anorganischen Chemie.

Das Periodensystem wurde über einen jahrzehntelangen Zeitraum entwickelt; es kann nicht einem einzelnen Wissenschaftler gutgeschrieben werden. Die heute verwendete Fassung geht auf in Kon-

kurrenz zueinander stehende Arbeiten von Lothar Meyer und Dmitri Mendelejew zurück.

Galten zum Ausgang des 19. Jahrhunderts noch beide Wissenschaftler als in ihren Verdiensten gleichberechtigt, so trat das Ansehen Lothar Meyers im Verlauf der folgenden Jahrzehnte deutlich hinter die Wertschätzung Dmitri Mendelejews zurück; erst in den letzten fünfzig Jahren gab es eine deutliche Korrektur.^{2,3)} Dennoch hat die Unesco das Jahr 2019 als Jubiläumsjahr benannt; sie bezieht sich damit ausschließlich auf die Erstveröffentlichung Mendelejews. In einem kürzlich erschienenen Beitrag in den *Nachrichten aus der Chemie* wird Meyer gar als „Wegbereiter“ eingestuft.⁴⁾ Dem wollen wir parallel zu einer kürzlich erschienenen Veröffentlichung Gisela Boecks in *Chemie in unserer Zeit*⁵⁾ entgegentreten.

Heutige Gr.-Nr.	Ia	IIa	IIIb	IVb	Vb	VIb	VIIb	VIIIb	IXb	Xb	XIb	IIa	IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa
Meyers Gr.-Nr.	12	13		14	15	1	2	3	4	5	6	7		8	9	10	11
1																	
2	Li 7,03	Be 9,3						(Al)	Al 27,3					C 12,00	N 14,04	O 16,00	F 19,0
3	Na 23,05	Mg 24,0												Si 28,5	P 31,0	S 32,07	Cl 35,46
4	K 39,15	Ca 40,0		Ti 48	Mo 92	Cr 52,5	Mn 55,1	Fe 56,0	Co 58,7	Ni 58,7	Cu 63,5	Zn 65,0		— 72	As 75,0	Se 78,8	Br 79,97
5	Rb 85,4	Sr 87,6		Zr 90	V 187		Ru 104,3	Rh 104,3	Pd 106,0		Ag 107,8	Cd 111,9		Sn 117,6	Sb 120,6	Te 128,3	J 126,8
6	Cs 133,0	Ba 137,1		Ta 181,8	W 184		Pt 197,1	Ir 197,1	Os 198,0		Au 198,7	Hg 200,2		Pb 207,0	Bi 208,0		
7	Tl 204																

Abb. 1. So hat nach Karl Seubert Lothar Meyers Entwurf des Periodensystems aus dem Jahr 1868 ausgesehen. Veröffentlicht wurde diese Version im Jahr 1895.^{2,26)}

Die Vorgeschichte

Die moderne Chemie beginnt im Jahr 1627 mit der Einführung einer neuen Atomistik durch Joachim Jungius.⁶⁾ Seiner Auffassung schloss sich eine Generation danach der große englische Naturforscher Robert Boyle an.⁷⁾ Doch es dauerte mehr als ein Jahrhundert,

Norbert Kuhn, Jahrgang 1947, forschte nach seiner Habilitation im Jahr 1983 im Fach anorganische Chemie als Universitätsprofessor zur metallorganischen und elementorganischen Synthesechemie. Seit dem Eintritt in den Ruhestand als Abteilungsleiter an der Universität Tübingen im Jahr 2012 beschäftigt er sich mit chemiehistorischen Fragen.

Klaus-Peter Zeller, Jahrgang 1944, wurde im Jahr 1983 Professor für organische Chemie an der Universität Tübingen mit den Arbeitsgebieten Massenspektrometrie, Aufklärung von Reaktionsmechanismen sowie Photochemie. Seit seinem Ruhestand 2012 widmet er sich der Geschichte bedeutender Tübinger Chemiewissenschaftler.



bis die aus der Antike stammende und bis in die frühe Neuzeit als Dogma gültige Elementelehre (Erde, Wasser, Luft, Feuer, Quecksilber, Schwefel, Salz) überwunden war. Verzögert wurde dies durch den Irrweg der Phlogiston-Theorie, welche die Verbrennung als Freisetzung eines Feuerstoffs beschrieb;⁸⁾ erst der Experimentierkunst Antoine-Laurent de Lavoisiers, der an die Stelle des Feuerstoffs die Oxidation als reversiblen chemischen Vorgang setzte, gelang es, sie aufzuheben.⁹⁾ Die von Lavoisier und John Dalton¹⁰⁾ formulierten Gesetze der konstanten und multiplen Proportionen erlaubten es nun bei der Elementaranalyse, die relativen Massenanteile in chemischen Verbindungen zu bestimmen.

Die Unkenntnis der formelmäßigen Zusammensetzung und ihre spekulative Annahme hatten noch bei Dalton zu falschen „Äquivalenzgewichten“ geführt. Deren korrekte

Berechnung, zunächst in Gasen, wurde erst durch das Postulat von Amedeo Avogadro möglich:¹¹⁾ Dieses forderte für Gase gleicher Volumina die gleiche Zahl von Teilchen („Molekeln“¹¹⁾). Aus dem von Pierre Louis Dulong und Alexis Petit beobachteten Zusammenhang zwischen Atomwärme und Gaskonstante R ließen sich bald darauf auch die Äquivalenzgewichte kristalliner Körper ermitteln.¹²⁾ Die Entdeckung neuer Elemente²⁾ sowie verbesserte und ausgeweitete Methoden zur Äquivalenzgewichtbestimmung¹³⁾ veranlassten Jöns Jakob Berzelius¹⁴⁾ und Leopold Gmelin¹⁵⁾ dazu, umfangreiche Elementtabellen aufzustellen. Die Äquivalenzgewichte darin waren bereits erstaunlich exakt; Wasserstoff als leichtestem Element wurde der Wert 1 zugewiesen.

Wolfgang Döbereiner fand im Jahr 1829 in Dreiergruppen von Elementen („Triaden“¹⁶⁾) einen arith-

metischen Zusammenhang zwischen dem Äquivalenzgewicht und chemischen Eigenschaften, wobei das jeweils mittlere Element in gleichem Abstand zu seinen Nachbarn steht.¹⁶⁾ Hierin ist der erste Versuch einer Ordnung der Elemente nach Eigenschaft und Äquivalenzgewicht zu sehen. Max Pettenkofer¹⁷⁾ und Jean Baptiste Dumas¹⁸⁾ scheiterten mit ihren Versuchen einer Ausdehnung der Gruppierungen auf mehrere Elemente und der arithmetischen Interpretation der nun nicht mehr konstanten Differenzen. Eine Übersicht über die mittlerweile zahlreichen Konzepte gibt aus dem Rückblick des Jahres 1895 Lothar Meyer.¹⁹⁾

Die Begriffe Element, Atom und Molekül waren in den zurückliegenden Jahren nicht einheitlich verwendet worden; ein ähnliches Problem ergab sich in der Strukturchemie durch die Konkurrenz der Radikaltheorie mit der Typenlehre. Unter anderem diese Fragen sollte der im Jahre 1860 nach Karlsruhe einberufene Chemikerkongress klären; dieses Problem konnte er aber nicht lösen. Jedoch öffnete der Vortrag von Stanislaw Cannizzaro die Tür zu weiteren Überlegungen. Cannizzaro beschrieb auch die damals bekannten gasförmigen Elemente als aus zweiatomigen Molekülen aufgebaut und unterwarf sie dem Postulat von Avogadro; die Begriffe „Element“ und „Atomgewicht“ ließen sich so durchgehend und einheitlich verwenden. (Lothar Meyer veröffentlichte später einen Abdruck des Vortragstextes.)²⁰⁾

Der leider in Vergessenheit geratene Geowissenschaftler Alexandre-Emile Béguyer de Chancourtois hatte im Jahr 1862 die Elemente in der Abfolge ihres Atomgewichts auf einem Zylindermantel derart angeordnet, dass erstmals ein fortlaufender Bezug von chemischer Verwandtschaft und Atomgewicht sichtbar wurde.²¹⁾ Wenig später veröffentlichte John A. R. Newlands ein als „Gesetz der Oktaven“ bekanntes Ordnungssys-

BIOGRAPHIE : Lothar Meyer

Julius Lothar (ab 1892: von) Meyer studierte Medizin an den Universitäten Zürich und Würzburg; in Würzburg wurde er im Jahr 1854 promoviert. Anschließend arbeitete er in Robert Bunsens Labor in Heidelberg mit gasanalytischen Methoden.

Im Jahr 1856 begann er in Königsberg ein zweites Studium der mathematischen Physik. 1858 wurde Meyer zum Dr. phil. promoviert mit einer Dissertation zur Einwirkung von Kohlenmonoxid auf den Blutfarbstoff.

Im Jahr 1859 habilitierte er sich in Breslau für Physik und Chemie und die dortige Universität ernannte ihn zum Privatdozenten sowie zum Leiter des chemischen Laboratoriums am Physiologischen Institut.

Nach sieben Jahren in Breslau ging Meyer als Dozent an die Forstakademie Neustadt-Eberswalde; dort wurde er 1867 zum Professor



Lothar Meyer: * 19. August 1830 in Varel, Oldenburg; † 11. April 1895 in Tübingen.

ernannt, bereits im Frühjahr 1868 nahm er einen Ruf an das Polytechnikum Karlsruhe an.

Ab 1877 forschte und lehrte er als Professor und Nachfolger Rudolf Fittigs in Tübingen; 1894/95 bis zu seinem Tod war er Rektor der Universität.

	Ia	IIa	III b				IV b	Vb	VI b	VII b		VIII b			I b	II b	III a	IV a	V a	VI a	VII a
	14	15	16	17	18	19	1	2	3			4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
1.															H 1						
2.	Li 7															Be 9,4	B 11	C 12	N 14	O 16	F 19
3.	Na 23															Mg 24	Al 27,4	Si 28	P 31	S 32	Cl 35,5
4.	K 39	Ca 40	? 45	Er ? 56	V ? 60	In ? 75,6	Ti 50	V 51	Cr 52			Mn 55	Fe 56	Ni,Co 59	Cu 63,4	Zn 65,2	— 68	— 70	As 75	Se 79,4	Br 80
5.	Rb 85,4	Sr 87,6	Ce 92	La 94	Di 95	Th 118 ?	Zr 90	Nb 94	Mo 96			Rh 104,4	Ru 104,4	Pd 106,6	Ag 108	Cd 112	U 116	Sn 118	Sb 122	Te 128 ?	I 127
6.	Cs 133	Ba 137					? 180	Ta 182	W 186			Pt 197,4	Ir 198	Os 199	Hg 200		Au 197?		Bi 210		
7.	Tl 204	Pb 207																			

Abb. 2. Entwurf des Periodensystems von Dmitri Mendelejew aus dem Jahr 1869.^{2,27)}

tem, in dem er – die Edelgase waren noch nicht bekannt – in der Abfolge der leichten Elemente das jeweils achte unter ein chemisch verwandtes platzierte.²²⁾ Auch dieses System fand bei seinen Zeitgenossen keine positive Resonanz.

Lothar Meyer und Dmitri Mendelejew

Sowohl Lothar Meyer als auch Dmitri Mendelejew hatten am Karlsruher Kongress teilgenommen; ob sie sich dabei begegnet sind, ist nicht bekannt. Beide begannen von einander unabhängig, sich intensiv mit dem von Canniz-

zaro angesprochenen Problem der „Chemischen Statik“ zu beschäftigen. Beide verfassten dazu Lehrbücher in ihrer Muttersprache, die sie bald international bekannt machten.^{23,24)}

Beide Wissenschaftler waren zu dieser Zeit in ihrer Schaffenskraft durch den Fortgang ihrer akademischen Karriere und durch umfangreiche Lehrverpflichtungen eingeschränkt;²⁾ Lothar Meyer etwa wechselte im Jahr 1866 von Breslau nach Neustadt-Eberswalde, doch konnte er seine Vorlesungsmanuscripte im Jahr 1868 bei der Einreichung einer 2. Auflage seines Lehrbuchs verwenden. Durch die Belastung seines erneuten

Wechsels auf einen Lehrstuhl des Polytechnikums Karlsruhe erschien das Werk erst mit vierjähriger Verspätung.²⁵⁾ Eine gleichfalls in der Lehre verwendete im gleichen Jahr entstandene handschriftliche Fassung eines Periodensystems wollte Lothar Meyer zu einem späteren Zeitpunkt veröffentlichen,^{2,5)} was zu bedauern er später Anlass hatte. Sie erschien im Druck erst im Jahr 1895 (Abbildung 1, S. 19).²⁶⁾

Im Folgejahr 1869 wurde auf einer Sitzung der Russischen Chemischen Gesellschaft die erste Mitteilung Dmitri Mendelejews verlesen, die im gleichen Jahr in russischer Sprache wie auch in deutscher



D A S
K A R R I E R E
P O R T A L

für Chemie und Life Sciences

Von Chemikern für Chemiker

Nutzen Sie das Netzwerk der GDCh:

- Stellenmarkt – Online und in den *Nachrichten aus der Chemie*
- Publikationen rund um die Karriere
- CheMento – das Mentoring Programm der GDCh für chemische Nachwuchskräfte
- Bewerbungsseminare und –workshops
- Jobbörsen und Vorträge
- Gehaltsumfrage

GDCh

GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

www.gdch.de/karriere
twitter.com/GDCh_Karriere

Übersetzung veröffentlicht vorlag.²⁷⁾ Hierin enthalten waren neben seiner Fassung eines Periodensystems (Abbildung 2, S. 21) seine historisch gewordenen Schlussfolgerungen.²⁾

Meyer antwortete darauf in einer Veröffentlichung, in der er eine verbesserte Form seines Periodensystems aus dem Jahr 1868 vorstellte (Abbildung 3). Durch Auswertung einer Atomvolumenkurve (Abbildung 4) korrigierte er dabei einige Fehlzusammenordnungen Mendelejews. Er erkannte Mendelejews Priorität des Erstdrucks an, bestand jedoch auf seinem Urheberrecht.²⁸⁾

Hierauf folgte von Mendelejew eine überarbeitete Version seines Systems von 1869 (Abbildung 5); in der zugehörigen Veröffentlichung²⁹⁾ wagte er nun Vorhersagen der Eigenschaften noch nicht bekannter Elemente („Eka-Bor“, „Eka-Aluminium“, „Eka-Silicium“), für die er bereits in seinem Periodensystem des Jahres 1869 Lücken gelassen hatte. Die Lücke zwischen Silicium und Zinn hatte zuvor auch Lothar Meyer freigehalten, allerdings ohne Kommentar.²⁶⁾ In den folgenden Jahren führte die Entdeckung der von Mendelejew vorhergesagten Elemente

Scandium (Lars F. Nilson 1879, Eka-Bor)³⁰⁾, Gallium (Paul Emile Lecoq de Boisbaudran 1875, Eka-Aluminium),³¹⁾ Germanium (Clemens Winkler 1886, Eka-Silizium)³²⁾ sowie fast aller kernstabiler Lanthanoide (als Letztes 1907 Lutetium durch Carl Auer von Welsbach) und ihre problemlose Eingliederung in das Periodensystem zu einer rasch wachsenden Akzeptanz des bislang distanziert gesehenen Konzepts. Lediglich das von György Hevesy 1923 gefundene Hafnium sowie das von Mendelejew „Dwi-Mangan“ genannte Rhenium (1928, Walter Noddack und Ida Tacke) folgten später. Die Entdeckung der schwereren Edelgase durch William Ramsay und Lord Walter Raleigh in den Jahren 1894 bis 1898 und ihren Einbau als VIII. Hauptgruppe³³⁾ hat Lothar Meyer nicht mehr erlebt.

Zwischenzeitlich löste der vermutlich berechtigte Protest des französischen Chemikers Adolph Wurtz gegen die zu Gunsten von Lothar Meyer erfolgte Änderung seines Textes in der deutschen Übersetzung seines Lehrbuchs durch den Verleger eine erneute Auseinandersetzung aus. Mendelejews einseitige Stellungnahme, in der er freilich ohne Kenntnis des in Abbildung 1 wiedergegebenen

	I		II		III		IV		V		VI		VII		VIII	
	11	12	13	14	1	2	3	4	5	6	7	8	9		10	
1																
2	Li 7,01		Be ? 9,3		B 11,0		C 11,97		N 14,01		O 15,96		F 19,1			
3	Na 22,99		Mg 24,3		Al 27,3		Si 28		P 30,9		S 31,98		Cl 35,38			
4	K 39,04		Ca 39,9					Ti 48		V 51,2		Cr 52,4			Mn, Fe, Co = Ni 54,8 55,9 58,6	
		Cu 63,3		Zn 64,9					As 74,9		Se 78		Br 79,75			
5	Rb 85,2		Sr 87,0					Zr 89,7		Nb 93,7		Mo 95,6			Ru, Rh, Pd 101,6 104,1 106,2	
		Ag 107,88		Cd 112,6		In ? 113,4		Sn 117,8		Sb 122,1		Te 128 ?		I 126,9		
6	Cs 132,7		Ba 138,6							Ta 182,2		W 183,6			Os, Ir, Pt 190,6 196,7 198,7	
		Au 198,2		Hg 200,6		Tl 202,7		Pb 208,4		Bi 207,5						
7																

Abb. 3. Entwurf des Periodensystems von Lothar Meyer aus dem Jahr 1870.^{2,28)}

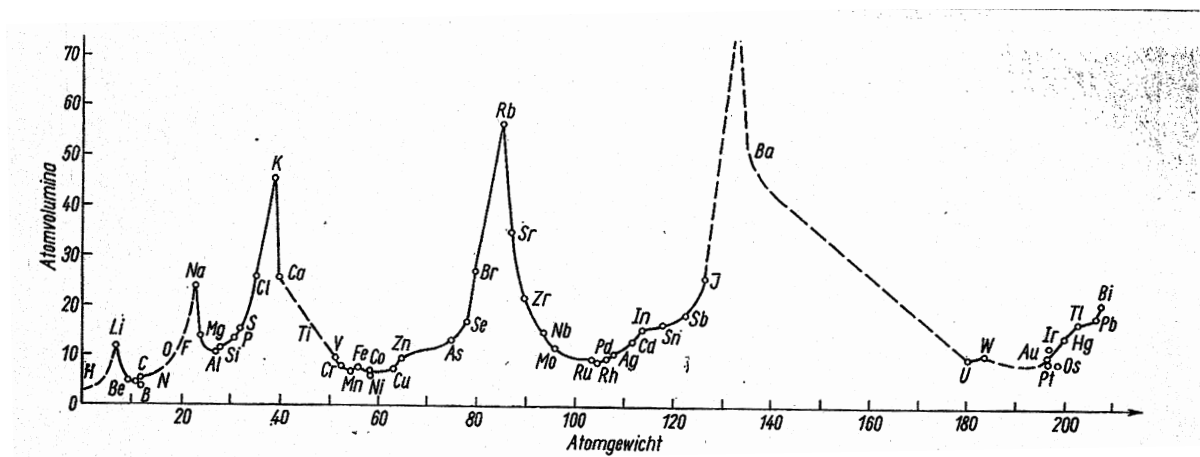


Abb. 4. Atomvolumenkurve, aufgestellt von Lothar Meyer im Jahr 1870.^{2,28)}



Abb. 6. Meyer (untere Reihe links) und Mendelejew (rechts daneben) gemeinsam bei einem Treffen der British Association for the Advancement of Science in Manchester 1887. Von diesem Treffen ist auch eine Fotografie erhalten, die eine persönliche Widmung Mendelejews an Meyer trägt.²⁾ Foto: Universität Manchester

Wenn man die in den Abbildungen 1 und 2 angegebenen Tabellen von 1868 und 1869 als voneinander unabhängig erstellt ansieht, zeigt sich, dass Lothar Meyer und Dmitri Mendelejew die große Mehrzahl der Hauptgruppenelemente zugleich korrekt einordneten. Ausnahmen bildeten die von Mendelejew erstmals genannten Elemente H, B und Al, während Lothar Meyer die Einordnung der Elemente Tl, In und Pb zuzugestehen ist. Bei den zu diesem Zeitpunkt bekannten 3d-Elementen ist es Lothar Meyer gelungen, die Reihe mit Ausnahme von V vollständig aufzustellen. Auch im ersten System von Mendelejew (Abbildung 2, S. 21) sind Ti, Cr, Cu und Zn korrekt zu finden. Gleiches gilt für die schwereren Gruppennachbarn Zr, Ag und Cd, während für Y, Nb, Ta, Mo und W die Priorität bei Mendelejew, für Au und Hg jedoch bei Lothar Meyer liegt.

Die Royal Society war bei der Verleihung der Davy-Medaille an beide Wissenschaftler im Jahr 1882 über Lothar Meyers ursprüngliche Fassung (Abbildung 1, S. 19) nicht informiert. Unter Vernachlässigung der Frage zeitlicher Priorität bewertete sie nur das Ge-

wicht des wissenschaftlichen Beitrags. Hier ist unstrittig, dass Dmitri Mendelejews Interpretation mit der Vorhersage der Eigenschaften noch unbekannter Elemente weit über die Aussagen Lothar Meyers hinausging. Jedoch ist festzuhalten, dass der Vergleich der Fassungen von 1871 (Mendelejew, Abbildung 5, S. 23) und 1870 (Meyer, Abbildung 3, S. 22) den Einfluss Meyers auf die vielfach als Endfassung des Periodensystems angesehene Tabelle Mendelejews deutlich zeigt, etwa durch Übernahme der kurzperiodischen Darstellung. Hinzu tritt die von Lothar Meyer bis zu seinem Tod mit großer Sorgfalt fortgesetzte Bestimmung und Verbesserung von Atomgewichten, deren Resultat für die korrekte Platzierung vieler Elemente unumgänglich war.

Fazit

Es bleibt die Frage, wie es, etwa seit Beginn des 20. Jahrhunderts, zu dieser konsequenten Abwertung der Leistungen Lothar Meyers kam. Die Antwort muss notgedrungen spekulativ ausfallen.

Zunächst sind wohl persönliche Eigenheiten der beiden Wissen-

schaftler zu beachten. Auf der einen Seite der offensive, charismatische, visionäre Dmitri Mendelejew, der seine Sache führen wollte und zu führen verstand. Auf der anderen Seite der defensive, akribisch arbeitende, menschlich zurückhaltende Lothar Meyer. Wir wissen um die Bedeutung solcher Gesichtspunkte bei der nachträglichen Bewertung von Persönlichkeiten. Auch der vergleichsweise frühe Tod und der im Folgejahr erfolgte Wechsel seines Schülers Karl Seubert nach Hannover haben der Erinnerung an Lothar Meyer sicher geschadet.

Fachlich fällt der bedeutende Werbewert der Vorhersagen Dmitri Mendelejews und ihre Bestätigung in ihrem Einfluss gerade auf die mit der Materie weniger Befassten ins Gewicht. Lothar Meyers Leistung hingegen bei der ursprünglich als grundlegend angesehenen Atomgewichtsbestimmung musste zwangsläufig in den Hintergrund treten mit der Erkenntnis der Kernladung (Ordnungszahl) als Sortierkriterium der Elemente im Periodensystem.

Ein dritter Punkt liegt wohl auch in der politischen Entwicklung in der zweiten Hälfte des 19. Jahrhunderts begründet. Frankreichs Niederlage im deutsch-französischen Krieg 1870/71 und die dadurch erzwungene Abtretung der Länder Elsaß und Lothringen an Deutschland hatte auch bei den französischen Wissenschaftlern zu einer markant deutschfeindlichen Stimmung geführt. Es gibt dazu zahlreiche Einzelbefunde, etwa die exklusive Benennung der Wurtz'schen Synthese nach ihrem französischen Mitentdecker unter Vernachlässigung seines deutschen Kollegen Rudolph Fittig. Auch die Benennung des Elements Germanium durch Clemens Winkler nach seinem Fundort sorgte für Entrüstung (die zuvor erfolgte Benennung des Elements Gallium wurde als angemessen angesehen). Einen Höhepunkt dieser Entwicklung bildet die Benennung der

noch heute so genannten „Avogadro-Zahl“ im Jahr 1909 auf Vorschlag eines französischen Wissenschaftlers – unter Umgehung von Wilhelm Ostwald, dem die hierfür essenzielle Formulierung des Molebegriffs zu verdanken ist.

Offensichtlich sind solche Einflüsse, zumindest unterbewusst, auch später noch wirksam gewesen, dürfen heute jedoch als überwunden gelten. Dennoch hat die Unesco bei der Ausrufung des Internationalen Jahrs des Periodensystems mit ihrer Fixierung auf Dmitri Mendelejew eine Gelegenheit versäumt, eine zentrale wissenschaftliche Leistung als gesamteuropäische Leistung darzustellen – etwa durch die Betonung des Gewichts der aus fünf verschiedenen europäischen Wissenschaftsnationen stammenden wesentlichen Forscher: Stanislaw Cannizzaro, Alexandre-Emile Béguyer de Chancourtois, John A. R. Newlands, Lothar Meyer und Dmitri Mendelejew. ❧

- 1) a) P. Walden, Meyer, Mendelejew, Ramsay, in: Das Buch der großen Chemiker [Hrsg.: D. G. Bugge], Verlag Chemie, Weinheim 1965;
b) D. G. Cooper, Das Periodensystem der Elemente, Verlag Chemie, Weinheim 1972;
c) E. R. Scerri, The Periodical Table – its story and its significance, Oxford University Press, New York 2007
- 2) K. Danzer, Dmitry I. Mendelejew und Lothar Meyer. Die Schöpfer des Periodensystems der chemischen Elemente, Teubner, Leipzig 1971
- 3) a) M. D. Gordin, The Textbook Case of a Priority Dispute: D. I. Mendeleev, Lothar Meyer, and the Periodic System, in: Nature Engaged: Science in Practice from the Renaissance to the Present [Hrsg.: J. Riskin, M. Biagioli], Palgrave Macmillan, New York 2012;
b) H. Kluge, I. Kästner, E. Punzel, H. Scheepker, Ein Wegbereiter der Physikalischen Chemie im 19. Jahrhundert – Julius Lothar Meyer, Shaker, Aachen 2014
- 4) W. Reschtilowski, Nachr. Chem. 2019, 67(6), 8
- 5) G. Boeck, Chem. Unserer Zeit 2019, 53, doi: 10.1002/ciuz.201900001
- 6) a) J. Jungius, Doxoscopia Physicae Minores, Dissertation Rostock 1630;
b) C. Meinel, Sudhoffs Archiv 1982, 66/4, 313
- 7) a) R. Boyle, The sceptical chymist, London 1661 (Übersetzung Akad. Verlagsgesellschaft Leipzig 1929);
b) The works of Robert Boyle [Hrsg.: M. Hunter, E. B. Davis], Pickering & Chatto, London 1990
- 8) J. R. Partington, Historical studies on the phlogiston theory, Arno Press, New York 1981
- 9) a) A.-L. de Lavoisier, Traité élémentaire de chimie, 2 Bände, Paris 1789 und 1793;
b) S. F. Helmbstadt, System der antiphlogistischen Chemie von Anton Lorenz Lavoisier, Berlin 1992
- 10) J. Dalton, On the adsorption of gases by water and other liquids; memoirs of the Literary and Philosophical Society of Manchester, Vol. 1, 1805
- 11) L. R. A. C. Avogadro, Journal de physique, de chimie, d'histoire naturelle et des arts 1811, 73, 58
- 12) A. Petit, P. L. Dulong, Annales de chimie et de physique, 1819, 10, 395
- 13) L. Meyer, Grundzüge der Theoretischen Chemie, Breitkopf & Härtel, Leipzig 1893
- 14) D. J. J. Berzelius, Versuch über die Theorie der chemischen Proportionen und über die chemischen Wirkungen der Elektrizität nebst Tabellen über die Atomgewichte der meisten unorganischen Stoffe und deren Zusammensetzungen (übersetzt von K. A. Blöde), Arnold'sche Buchhandlung, Dresden 1820
- 15) L. Gmelin, Handbuch der theoretischen Chemie Bd. 1, 1. Abt., 3. Aufl., Frankfurt 1827, S. 35
- 16) J. W. Döbereiner, Pogg. Ann. d. Phys. u. Chem. 1829, 15, 301
- 17) a) M. Pettenkofer, Münchener Gelehrten Anzeigen, 1850, 30, 261;
b) M. Pettenkofer, Liebigs Ann. d. Chem. u. Pharm. 1858, 105, 187
- 18) J. P. Dumas, Compt. Rend. 1857, 45, 708
- 19) L. Meyer, Die Anfänge des natürlichen Systems der chemischen Elemente, Wilhelm Engelmann, Leipzig, 1895
- 20) S. Cannizzaro, Abriss eines Lehrganges der theoretischen Chemie (1858), herausgegeben von Lothar Meyer: Ostwalds Klassiker der exakten Wissenschaften 30, Leipzig, 1891
- 21) A.-E. Béguyer de Chancourtois, Compt. Rend. 1862, 54, 757
- 22) J. A. R. Newlands, Chemical news 1864, 10, 59, 94
- 23) D. Mendelejew, Organische Chemie, Petersburg 1861, 1. Auflage (2. Auflage 1863); Grundlagen der Chemie (2 Bände), Petersburg 1868 (8 Auflagen, englische Übersetzung 1891, deutsche Übersetzung 1892, französische Übersetzung 1896)
- 24) L. Meyer, Die modernen Theorien der Chemie und ihre Bedeutung für die chemische Statik, 1. Auflage, Maruschke & Berendt, Breslau 1864 (insges. 5 Auflagen)
- 25) L. Meyer, Die modernen Theorien der Chemie und ihre Bedeutung für die chemische Statik, 2. Auflage, Maruschke & Berendt, Breslau 1872.
- 26) K. Seubert, Z. anorg. Chem. 1895, 9, 334
- 27) D. Mendelejew, J. russ. Physik.-chem. Ges. 1869, 1, 60, 229; Z. Chem. 1869, 5, 405; Ber. dt. chem. Ges. 1869, 2, 553; J. prakt. Chem. 1869, 106, 251
- 28) L. Meyer, Liebigs Ann. Chem. Pharm. 1870, Suppl. 7, 354
- 29) D. Mendelejew, J. russ. Phys.-chem. Ges. 1871, 3, 25; b) D. Mendelejew, Ber. dt. chem. Ges. 1871, 4, 343
- 30) Vgl. hierzu: Mary E. Weeks, Discovery of the Elements, Klessinger Publishing, (Nachdruck 3. Auflage) 2003
- 31) P. E. Lecoq de Boisbaudran, Ann. Chim. Phys. 1877, 10, 100
- 32) C. Winkler, Ber. dt. chem. Ges. 1886, 19, 2010
- 33) W. Ramsay, Die Edelgase, Salzwasser, Paderborn (Nachdruck des Originals von 1914)
- 34) L. Meyer, Ber. dt. chem. Ges. 1880, 13, 2043
- 35) D. Mendelejew, Ber. dt. chem. Ges. 1880, 13, 1796
- 36) Als Zusammenfassung vgl.: Das natürliche System der chemischen Elemente. Abhandlungen von Lothar Meyer und D. Mendelejew [Hrsg.: K. Seubert], Ostwalds Klassiker der exakten Wissenschaften Nr. 68, Leipzig 1895
- 37) K. Seubert, Ber. Dt. Chem. Ges. 1895, 28, 1109
- 38) E. Rutherford, Phil. Mag. 1911, 21, 669
- 39) F. Soddy, Die Radioelemente und das periodische Gesetz, J. A. Barth, Leipzig 1914
- 40) H. G. J. Moseley, Phil. Mag. 1913, 1024
- 41) N. Bohr, Phil. Mag. 1913, 26, 1
- 42) L. de Broglie, Foundations of Physics 1979, 1, 5
- 43) E. Schrödinger, Ann. Phys. 1926, 79, 361 u. 481; ibid. 80, 437; ibid. 81, 109
- 44) Wolfgang Pauli: Collected works [Hrsg.: R. Kronig, V. F. Weisskopf], Wiley, New York, 1964

AUF EINEN BLICK

Zeitgenossen schätzten Lothar Meyers Beitrag zur Aufstellung des Periodensystems als hoch ein; erst später stand er im Schatten Dmitri Mendelejews.

Mendelejews Interpretation mit den Vorhersagen der Eigenschaften noch unbekannter Elemente ging über die Aussagen Meyers hinaus.

Meyers größte Leistungen liegen bei der damals als grundlegend angesehenen Atomgewichtsbestimmung.

Eine Frau an der Spitze

Die Deutsche Forschungsgemeinschaft hat nun erstmals eine Präsidentin, und die Organisation ordnet sich neu.

Katja Becker (Foto), Biochemikerin und Medizinerin von der Universität Gießen, ist die erste Präsidentin der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG). Im Frühjahr hat die Mitgliederversammlung der DFG die Wissenschaftlerin in das Amt gewählt, das diese am 1. Januar 2020 antreten wird.

Parallel dazu haben die DFG-Mitglieder eine veränderte Satzung verabschiedet, die die leitenden Ämter neu definiert. Ein Vorstand aus zwei Personen und eine unklare Aufgabenverteilung hatten in der Vergangenheit zu Konflikten geführt. Für den Präsidenten gilt nun eine Richtlinien- und Vertei-

lungskompetenz. Aus der Satzung gestrichen ist die dritte Amtszeit. Der Generalsekretär leitet die Geschäftsstelle und ist zuständig für den Wirtschaftsplan, seine Amtszeit beträgt künftig acht Jahre. Die Position ist neu zu besetzen, bereits neu besetzt sind zwei der drei Vizepräsidentenämter.

Bund und Länder stellen der DFG jährlich 3,4 Mrd. Euro zur Verfügung. Im Jahr 2018 förderte die DFG 33 160 Projekte an Universitäten und Forschungsinstituten, 700 mehr als im Vorjahr.



Karriere kurz notiert

Frauen in Vorständen – eine Minderheit

Fresenius Medical Care hat mit 29 % den höchsten Frauenanteil im Vorstand eines Dax-30-Unternehmens. Einen Anteil von 25 % hat Covestro, Merck kommt auf 20 %, Henkel auf 17 %. 14 % sind es bei BASF, Beiersdorf, Linde und Fresenius. Im Bayer-Vorstand ist keine Frau, das Unternehmen hatte als einziger Chemiekonzern im Dax 30 noch nie eine Frau im Vorstand. International sind deutsche Unternehmen die Schlusslichter. So ist der Vorstand von Air Liquide zu 40 % mit Frauen besetzt, der von Pfizer mit 39 %, bei Procter & Gamble sind es 37 % und beim schwedischen Pharmakonzern AstraZeneca 33 %.

Börsennotierte Unternehmen sind gesetzlich verpflichtet, eine Zielgröße für den Frauenanteil anzugeben. Von den Unternehmen der Chemiebranche und verwandter Branchen im Dax 30, im MDax und im SDax haben K+S, das Biotechunternehmen Evotech, Wacker-Chemie, SGL-Carbon und der Batteriehersteller Varta diese Größe mit Null angegeben. Bei Varta gibt es auch keine Frau im Aufsichtsrat.

<https://gdch.link/2m>

Unternehmensgründer gesucht | Der Gründerwettbewerb Science4Life sucht Jungunternehmer, die Geschäftsmodelle in Life Sciences und Chemie entwickeln oder bereits Produkte und Dienstleistungen anbieten. Start-ups aus dem Bereich Energie reichen ihre Konzepte beim Science4Life Energy Cup ein. Der Einsendeschluss der Konzeptphase ist der 17. Januar 2020. Ihre Businesspläne können die angehenden Unternehmer noch bis zum 17. April einreichen, auch ohne an der Konzeptphase teilgenommen zu haben. Die Preisgelder betragen insgesamt rund 85 000 Euro.

science4life.de

FZ

Arbeitsklima in Forschung

Auf Mobbingvorwürfe hat die Max-Planck-Gesellschaft mit einer Mitarbeiterumfrage zu den Arbeitsbedingungen reagiert.

Die Max-Planck-Gesellschaft erhält aus ihrer Umfrage zur Arbeitskultur und -atmosphäre ein durchwachsenes Stimmungsbild. Zwar beschreiben die Befragten die Kollegialität und Führungskultur positiv, 28 % haben sich aber schon einmal ignoriert gefühlt.

Die Führungskultur beschreiben 84 % als freundlich, 73 % sehen sie als rücksichtsvoll an. Ein Drittel der Arbeitnehmer kann Privatleben und Arbeit mindestens ein paarmal im Monat schwer miteinander vereinbaren. In Führungspositionen, bei Doktoranden oder Postdoktoranden hat jeder Zweite mindestens einmal im Monat einen Work-Life-Konflikt. In den letzten zwölf Monaten hat sich nach eigenen Angaben jeder Zehnte gemobbt gefühlt. 4 % der Befragten sind im letzten Jahr sexuell belästigt oder diskriminiert worden.

Jede dritte Mitarbeiterin hat sich aufgrund ihres Geschlechts ungleich behandelt gefühlt, dreimal häufiger als männliche Mitarbeiter. Im internationalen Vergleich sind die Mobbingfälle in einem durchschnittlichen Rahmen, der Anteil der sexuell Belästigten sogar geringer.

Anlass der Mitarbeiterumfrage waren Mobbing und Machtmissbrauch durch Führungskräfte an zwei Instituten. Mehr als die Hälfte der Beschäftigten hat an der Umfrage teilgenommen, 38 % gaben eine gültige Stimme ab.

Die Max-Planck-Gesellschaft plant, bei Fehlverhalten konsequenter durchzugreifen und Führungskräfte besser zu schulen. Betroffene können die Vorkommnisse zusätzlich einer Anwaltskanzlei melden.

www.mpg.de/13631088/Kurzbericht_MPG-Arbeitskultur.pdf

U

U

KARRIEREKOLUMNE

Was bedeutet Mobilität?

In einem Seminar für Postdocs diskutieren wir, ob es für Dirk sinnvoll ist, auf ein Emmy-Noether-Stipendium für Nachwuchsgruppenleiter hinzuarbeiten. „Dafür muss ich Auslandserfahrung mitbringen, und das kann ich mir im Moment nicht vorstellen. Ich möchte meine Kinder nicht mehrfach umtopfen müssen,“ wendet er ein. Seine Formulierung lässt den Rest der Gruppe schmunzeln, aber ich sehe auch sorgenvolle Blicke, die verraten, dass er mit seinen Bedenken nicht allein ist. „Ja, Sie brauchen Erfahrungen aus dem internationalen Umfeld, doch ist das nicht unbedingt ein Auslandsaufenthalt“, relativiere ich. Selbst beim Emmy-Noether-Programm mit seiner strengen Auswahl wurden die Kriterien für internationale Erfahrungen erweitert: Diese können Bewerber auch über Kooperationen oder ein internationales Arbeitsumfeld nachweisen. Natürlich ist es harte Arbeit, gegenüber der Konkurrenz mit Auslandsaufenthalten zu bestehen, insbesondere bei den Berufungskommissionen, die meist wenig nachgiebig sind. Versuchen Sie also, das zu beschreiben, was Sie gelernt haben, wie Sie Ihre Arbeitstage verbracht haben und wie diese Erfahrungen Ihre Arbeitsweise verändert haben.

Was steckt hinter der Forderung nach internationaler Erfahrung? Die Wissenschaftsorganisationen möchten weltoffene Geister fördern, die Inspiration aus mehreren Quellen schöpfen. Sie sollen nicht nur wissen, wie es am Heimatinstitut läuft, sondern zudem die Situation ihrer zukünftigen Mitarbeitenden aus dem Ausland verstehen können.

Die Wissenschaftsorganisationen haben einen sinnvollen Schritt getan, das harte Kriterium des Auslandsaufenthalts aufzuweichen. In Zeiten immer verschiedenartigerer Lebensläufe junger Menschen ist dies ein positives Zeichen. Denn wer garantiert, dass die Forschung in einer Postdoc-Blase den Horizont erweitert? In dieser Phase ist man manchmal nicht ans Geschehen am Institut eingebunden und bekommt dann wenig davon mit, wie diese Organisation funktioniert. Manch laborversessener Postdoc bemerkt den Wechsel des Aufenthaltsortes nur daran, dass die Tütensuppe nun nicht mehr von Sainsbury, sondern von Carrefour kommt, der Lerneffekt ist gering. Ob Sie an Auslandserfahrung wachsen, hängt davon ab, wie Sie Ihren Postdoc verbringen.

Und vielleicht kann Erweiterung des geistigen Horizonts noch weiter gedacht werden? Warum sollten Wissenschaftsorganisationen nicht auch Inspirationsquellen wie einige Jahre Industrieerfahrung positiv bewerten?



Der promovierte Chemiker **Philipp Gramlich** ist Mitgründer von Natural Science Careers, einem Unternehmen für Karriereberatung und Soft-Skill-Seminare für Naturwissenschaftler. Für die Nachrichten aus der Chemie schreibt er über Beobachtungen aus seiner Beratungstätigkeit.
p.gramlich@naturalscience.careers

Illustration: Uta Neubauer

Notizen aus der Wirtschaft

BASF in Antwerpen | BASF erweitert seine Anlagen für Ethylenoxid und Ethylenoxidderivate in Antwerpen. Mit einer Investition von mehr als 500 Mio. Euro soll die Produktionskapazität für diese Produkte um etwa 400 000 Tonnen pro Jahr steigen. Die Inbetriebnahme ist Schritt für Schritt ab dem Jahr 2022 geplant. In Europa betreibt BASF Ethylenoxidanlagen in Antwerpen und Ludwigshafen mit einer Gesamtkapazität von 845 000 Jahrestonnen.

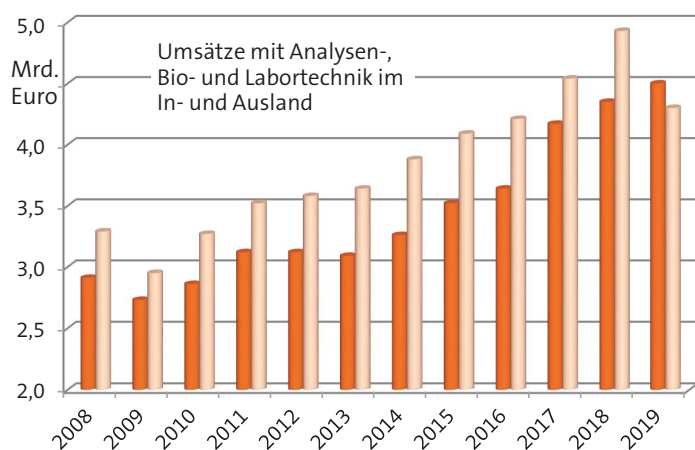
Lanxess in China | Der Spezialchemiekonzern Lanxess hat Ende September ein Werk in Changzhou eröffnet. Die Compoundieranlage stellt Kunststoffe für die Automobil- sowie die Elektro- und Elektronikindustrie her. Ein Fokus der neuen Anlage liegt auf automatisch optimierter Produktion – von der Dosierung, dem Heißschmelzen, Mischen, Granulieren und Kühlen der Granulate bis hin zur Palettierung. So setzt das Dosiersystem beispielsweise mehrere kontinuierliche Differenzialdosierwaagen ein, um eine fortlaufende Produktion zu ermöglichen.

Wacker beteiligt sich an Nexeon | Wacker Chemie intensiviert ihre Forschung zu siliciumbasierten Materialien für Hochleistungsbatterien mit einer 25-prozentigen Beteiligung an Nexeon, einem britischen Unternehmen für neue Batteriematerialien. Dieses entwickelt, produziert und vertreibt Anodenmaterialien auf Basis von Silicium, welche die Leistungsfähigkeit von Lithiumionenbatterien steigern.

Solvay baut Composites aus | Im kalifornischen Anaheim erweitert das belgische Unternehmen Solvay die Kapazitäten für Bänder mit Thermoplastmatrix für die Luftfahrtindustrie. Die neue Anlage und Verbesserungen an den bestehenden Anlagen erhöhen die Standortkapazität um das Vierfache. Im vergangenen Jahr hatte Solvay im texanischen Greenville die Composites-Fertigung ausgebaut.

Wacker: mehr Dispersionspulver | Wacker Chemie erweitert mit einem neuen Sprühtrockner im südkoreanischen Ulsan die Produktionskapazitäten für Dispersionen und Dispersionspulver in Asien. Die Gesamtkapazität der neuen Anlage beträgt 80 000 Jahrestonnen. Neben dem Sprühtrockner errichtet das Unternehmen in Ulsan einen weiteren Reaktor für Dispersionen und investiert in den Anlagenkomplex etwa 65 Mio. Euro.

Bayer verkleinert Vorstand | Der Leverkusener Konzern Bayer verkleinert zum 1. Januar 2020 den Vorstand des Unternehmens von sieben auf fünf Vorstände. Hartmut Klusik und Kemal Malik werden das Unternehmen Ende dieses Jahres verlassen. Die beiden Vorstandspositionen werden als Teil von Effizienzmaßnahmen nicht nachbesetzt. Der Bayer-Vorstand besteht damit aus dem Vorstandsvorsitzenden Werner Baumann, Finanzvorstand Wolfgang Nickl sowie den für die Divisionen zuständigen Liam Condon (Crop Science), Stefan Oelrich (Pharmaceuticals) und Heiko Schipper (Consumer Health).



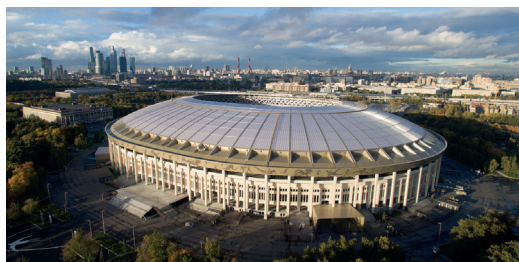
Labortechnik erwartet sinkende Exportumsätze | Die 330 deutschen Hersteller der Analysen-, Bio- und Labortechnik rechnen dem Industrieverband Spectaris zufolge für das laufende Jahr mit einem Umsatzplus in Deutschland, aber sinkenden Exporten (Grafik, dunkle beziehungsweise helle Säule). Die Hersteller setzten im Jahr 2018 insgesamt etwa 9,3 Mrd. Euro um (+6,6 Prozent). Die Beschäftigtenzahl stieg um 6,3 Prozent auf 47 000 Mitarbeiter. 53 Prozent des Umsatzes stammen aus dem Ausland, davon 41 Prozent aus Ländern der Europäischen Union; Geschäfte mit den USA und China lieferten 13 beziehungsweise 12 Prozent. Der Weltmarkt für Analysentechnik liegt zu 26 Prozent in den USA; es folgen Europa, China und Japan mit 24, 22 beziehungsweise 10 Prozent.

MB

Quelle: www.spectaris.de

Evonik baut in Marl | Die Bauarbeiten für die bisher größte Investition des Spezialchemieunternehmens Evonik in Deutschland haben im September im Chemiepark Marl begonnen. An seinem weltweit größten Standort baut der Konzern seine Gesamtkapazität für Polyamid-12 um mehr als 50% aus. Die Inbetriebnahme ist für Anfang des Jahres 2021 geplant. Der Umfang der Einzelinvestition beträgt mehr als 400 Mio. Euro. Polyamid-12 dient im 3-D-Druck und im Automobilbau als leichter und langlebiger Kunststoff.

BASF: Neopentylglykol | BASF hat die Kapazität der Produktionsanlage für Neopentylglykol (NPG) in Ludwigshafen um 10 000 Jahrestonnen erhöht und verfügt mit seinen Anlagen in Ludwigshafen, im US-amerikanischen Freeport, in Nanjing und Jilin nun über 215 000 Jahrestonnen NPG-Kapazität. In Nanjing sollen ab nächstem Jahr weitere 40 000 Jahrestonnen verfügbar sein. NPG dient vor allem für Polyester- und Alkydharze in Lacken, Pulverlacken und Kunststoffen.



Polycarbonatstegplatten überdachen die Moskauer Luschniki-Arena. Foto: Covestro

Covestro verkauft Polycarbonatplattengeschäft

Der Werkstoffhersteller Covestro veräußert sein europäisches Polycarbonatplattengeschäft an die Münchner Serafin-Unternehmensgruppe. Der Geschäftsbereich umfasst Produktionsstandorte in Belgien und Italien sowie zentrale Management- und Vertriebsfunktionen in Europa; er erzielte im Jahr 2018 einen Umsatz von 130 Mio. Euro. Der Abschluss wird für das vierte Quartal 2019 erwartet. Covestro wird der wichtigste Rohstoffzulieferer bleiben. Polycarbonatplatten sind bruchfest und werden hauptsächlich im Industrieschutz, für Werbeanwendungen oder im Bau eingesetzt (Foto).

Künstliche Intelligenz in der Prozessindustrie

Ab April 2020 fördert das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) die Plattform „KEEN – Künstliche-Intelligenz-Inkubator-Labore in der Prozessindustrie“ voraussichtlich mit insgesamt 10 Mio. Euro. Zum Projektvolumen kommen noch 7,5 Mio. Euro von den Industriepartnern. KEEN wird von der TU Dresden koordiniert und verbindet 25 Industrie- und Wissenschaftseinrichtungen mit dem Ziel, die Technologien und Methoden der KI in der Prozessindustrie einzuführen. Das KEEN-Konsortium forscht an KI-Verfahren für die Modellierung von Prozessen, Produkteigenschaften und Anlagen, dem Engineering sowie an selbstoptimierenden Anlagen.

Lithiumionenbatterien | Das französische Bergbau- und Metallurgieunternehmen Eramet, BASF und das Entsorgungsunternehmen Suez wollen gemeinsam ein Kreislaufsystem für das Recycling und die Produktion von Lithiumionenbatterien entwickeln. Das Projekt Relieve (Recycling Li-ion batteries for electric vehicles) erhält von einem europäischen Konsortium (European Institute of Innovation and Technology, EIT Raw Materials) und den drei Projektpartnern zusammen 4,7 Mio. Euro. Es startet im Januar und dauert zwei Jahre. Dabei sammelt und demontiert Suez die Altbatterien, Eramet entwickelt das Recyclingverfahren und BASF stellt Kathodenmaterialien her.

Merck mit Intermolecular | Merck hat die Übernahme des kalifornischen Elektronikmaterialspezialisten Intermolecular abgeschlossen. Mit der Transaktion im Eigenkapitalwert von 62 Mio. US-Dollar werden fast 90 Intermolecular-Mitarbeiter Teil des Merck-Unternehmensbereichs Performance Materials.

BASF ohne Ultrafiltrationsmembranen

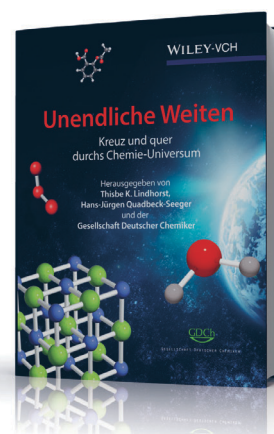
Die BASF verkauft ihr Geschäft mit Ultrafiltrationsmembranen etwa für Trinkwasser-, Industrie- und Abwasserbehandlungen an Dupont Safety & Construction. Vorausgesetzt die Behörden genehmigen die Transaktion, ist der Abschluss Ende des Jahres zu erwarten. Der Verkauf umfasst die Anteile am Unternehmen Inge, dessen Vertrieb, den Hauptsitz und die Produktion im bayerischen Greifenberg sowie Rechte an geistigem Eigentum.

PVC in und aus China

China importierte im ersten Halbjahr etwa 437 000 Tonnen PVC, 7000 Tonnen mehr als im ersten Halbjahr 2018. Die Exporte sanken um 19,2% auf 357 000 Tonnen. USA, Taiwan, Japan und Südkorea kommen zusammen auf vier Fünftel von Chinas PVC-Einfuhren. Trotz der Zölle auf US-PVC bleiben die USA wichtigster Lieferant (36% Lieferanteil).

Jörg Wetterau, Labor für Kommunikation

Neugierig?



THISBE K. LINDHORST,
HANS-JÜRGEN QUADBECK-SEEGER
und GDCH (HRSG.)

Unendliche Weiten Kreuz und quer durchs Chemie-Universum

ISBN: 978-3-527-34203-7
März 2017 230 S.
Gebunden € 29,90

Ohne Chemie geht gar nichts. Die Chemie ist die zentrale Naturwissenschaft, die Wohlstand, Wirtschaft, Fortschritt und damit die Hoffnung auf ein besseres Leben überhaupt erst möglich macht.

Dieser einzigartige und hochspannende Bildband nimmt den Leser mit auf eine vielfältige Reise durch die Welt der Chemie und ihre Bedeutung für unsere Gegenwart und für die Zukunft.



Erlebnis
Wissenschaft

WILEY-VCH

Die Euro-Preise gelten ausschließlich für Deutschland. Alle Preise enthalten die gesetzliche MwSt. Irrtum und Preisänderungen vorbehalten. Stand der Daten: März 2017

Seltenerdrecycling

Ammoniumchlorid statt Salzsäure

Feststoffchlorierung überführt universitäre Forschung in den industriellen Alltag und macht so Leuchtstoffe, Permanentmagnete und Akkus kostengünstig recycelbar. Damit würde wirtschaftliches Rezyklieren kein Widerspruch bleiben, sondern Wirklichkeit werden.

Preisschwankungen im weltweiten Rohstoffmarkt lassen sich nicht nur auf knappe Primärrohstoffe zurückführen, sondern auch auf handelspolitische Entscheidungen. So drohen die Seltenen Erden im Handelsstreit zwischen den USA und China zu einem politischen Druckmittel zu werden.

Metalle der Seltenen Erden (SE) sind Bestandteil von Generatoren in Windkraftanlagen, von Magneten in Festplatten und Lautsprechern, von Leuchtstoffen in Energiesparlampen, von Industriekatalysatoren, Lasern sowie Spezialgläsern. SE-Hauptproduzent ist seit den frühen 1990er Jahren China. Der Anteil an der Weltjahresproduktion lag im Jahr 2018 bei 70,6 Prozent – das sind etwa 120 000 Tonnen.¹⁾ Wie stark chinesische Handelspolitik die Preise beeinflusst, war im Jahr 2011 zu sehen, als Exportbeschränkungen die SE-Rohstoffpreise innerhalb eines Jahres um bis zu 500 Prozent steigen ließen. Entsprechend stiegen die Preise der Folgeprodukte.

Auf der Liste der EU-Kommission zu Rohstoffen, deren Versorgungslage als kritisch gilt, stehen die Seltenerdmetalle ganz vorne. An der

Material und enthaltene SE	Abfallart	Abfallform	SE-Anteil [Gew.-%]
Dreibandenleuchtstoffe: Y, Eu , La, Ce, Gd, Tb	EoL; EoU Produktion	Pulver Suspension	0–8 15–28
Fe ₁₄ Nd ₂ B-Magnete: Nd, Dy, Pr , Tb	EoL; EoU Produktion	Magnetschrott Pulver, Suspension, Stücke	15–35 15–35
SmCo-Magnete: Sm , Gd	EoL; EoU Produktion	Magnetschrott Pulver, Suspension, Stücke	30–33 30–33
Szintillationsdetektoren: Gd	Produktion	Pulver	≤76
NiMH-Akkumulatoren: La, Ce, Nd , Pr	EoL; EoU	Schrott oder Schlacke	2,5–10

Materialien mit Kenndaten für das Seltenerdrecycling. SE: Seltenerdmetalle, EoL: End-of-Life-Abfälle, EoU: End-of-Use-Abfälle; fett: Hauptkomponenten.

Abhängigkeit des europäischen Markts von Importen aus dem Ausland hat sich in den letzten Jahren nichts geändert, und das, obwohl vor allem zum Seltenerdrecycling ausgiebig geforscht wurde.

Die fallenden Rohstoffpreise der letzten Jahre haben alle bis dahin verwendeten Recyclingkonzepte unwirtschaftlich werden lassen. Deshalb sind neue Verfahrenskonzepte nötig, welche die klassischen hydro-metallurgischen Prozesse umgehen. Dies war an der TU Bergakademie Freiberg der Ausgangspunkt für Verfahren zum Seltenerdrecycling. Diese basieren auf unkonventionellen Ansätzen und sind inzwischen in der industriellen Anwendung.

Abfälle für ein Seltenerdrecycling

Bei neuen Recyclingverfahren geht es darum, die Lücke zwischen einem Abfallstoff und seinem Einsatz

in etablierten großtechnischen Verfahren möglichst effektiv zu schließen, und das zu wirtschaftlichen Konditionen. Bei den seltenerdhaltigen Abfällen besteht die Hauptaufgabe daher meist darin, die festen Seltenerdverbindungen aus den Abfallchargen in ein wässriges, reines Konzentrat zu überführen. Alle weiteren Aufarbeitungsschritte von der extraktiven Trennung der Seltenen Erden voneinander über deren Abtrennung aus der Lösung bis hin zur Reduktion zum Metall entsprechen bereits dem Stand der Technik und werden in der Industrie seit Jahrzehnten eingesetzt.

In der engeren Auswahl für das Recycling der Seltenen Erden stehen vier Stoffströme, deren Seltenerdgehalte bei bis zu 76 Gewichtsprozent liegen (Tabelle):

- Dreibandenleuchtstoffe aus Leuchtstoff- und Energiesparlampen,
- Permanentmagnete aus Windkraftgeneratoren, E-Motoren und



Der promovierte Chemiker **Tom Lorenz** ist wissenschaftlicher Mitarbeiter im Institut für Technische Chemie der TU Bergakademie Freiberg. tom.lorenz@chemie.tu-freiberg.de
Karin Jacob-Seifert ist Geschäftsführerin der FNE Entsorgungsdienste Freiberg.
Martin Bertau ist Direktor des Instituts für Technische Chemie der TU Bergakademie Freiberg.

- Festplatten mit FeNdB- und SmCo-Legierungen,
- Szintillationsdetektoren aus der Medizintechnik sowie
- NiMH-Akkumulatoren aus Hybridfahrzeugen und wiederaufladbaren Haushaltsbatterien.

Obwohl die Seltenen Erden in diesen Abfällen in hohen Konzentrationen vorkommen, werden sie in Europa bislang nicht zurückgewonnen. Vielmehr werden SE-haltige Abfallprodukte oft kostenaufwendig entsorgt, etwa unter Tage, wo sie nicht mehr zugänglich sind.

Wie kompliziert die Situation ist, zeigen Seltenerdminerale. Hier wurde seit dem Jahr 2011 versucht, mit drei Recyclingstrategien einen wirtschaftlichen Prozess zu realisieren: mit mechanischem, pyro- und hydrometallurgischem Recycling.

Mechanisches Recycling

Das mechanische Recycling verwertet gebrauchte Magnete als Ganzes etwa in neuen Elektromotoren. Sind die Magnete jedoch beschädigt oder korrodiert, sind sie unbrauchbar. Das gleiche gilt, wenn die Form oder Bauart nicht den aktuellen Anforderungen genügt. Nur wenige Magnete lassen sich daher mit dieser Methode recyceln.

Pyrometallurgisches Recycling

Das pyrometallurgische Recycling mahlt die Altmagnete und verschneidet das gewonnene Pulver mit neuen Ausgangslegierungen. Die Mischung wird anschließend pyrometallurgisch zu neuen Magneten verarbeitet. Dies scheitert jedoch in fast allen Fällen daran, dass die Altmagneten korrodiert, durch andere Magnetsorten verunreinigt oder mit einer Korrosionsschutzschicht aus Cobalt oder Nickel überzogen sind. Daher sind Magnete aus dem pyrometallurgischen Recycling schwächer als die ursprünglichen. Aber schon dann, wenn nur ein bis drei Prozent Magnetisie-

rungsstärke verloren gehen, wird das Material für weitere Anwendungen unbrauchbar.

Hydrometallurgisches Recycling

Das hydrometallurgische Recycling löst die Magnete auf und gewinnt die SE als Oxide, die zum Metall reduziert und erneut in der Magnetherstellung eingesetzt werden können. Hier gibt es keine Qualitätsverluste, und alle Arten an Altmagneten lassen sich verarbeiten. Dafür ist der Aufwand im Hinblick auf die Prozesskosten am höchsten. Konventionelle Verfahren setzen in der Regel auf saure Laugungsschritte, weswegen die Ansätze unter den aktuellen Marktbedingungen zu teuer sind. In der Konsequenz beträgt der Anteil des SE-Recyclings außerhalb Chinas weniger als ein Prozent.²⁾

Feststoffchlorierung statt saurem Aufschluss

Wie also lässt sich ein Seltenerdrecycling unter den gegebenen Um-

ständen in Europa realisieren? Nur hydrometallurgische Ansätze erreichen die für ein Recycling aus End-of-Life-Abfällen notwendige Reinheit.

Alle bestehenden Konzepte haben allerdings das gleiche Problem: Der Aufschlussschritt, der die SE in Lösung bringt, ist zu teuer und macht mehrere Reinigungsschritte erforderlich, weil er Begleitelemente wie Eisen, Nickel, Cobalt oder Calcium in hohem Maß mitlöst. Eine Alternative ist die Feststoffchlorierung. Sie gestaltet den Aufschlussschritt ressourceneffizient und preiswert.

Selektiv aufschließen

Das Recycling mit Feststoffchlorierung schließt mit gasförmigem Chlorwasserstoff auf. Das wasserfreie Überführen der Metalle ist der Schlüssel, die seltenerdmetallhaltigen Abfallströme selektiv aufzuschließen. Sie geschieht in zwei Schritten (Abbildung 1):

Im Chlorierungsschritt wird Ammoniumchlorid NH_4Cl mit dem festen, pulverförmigen Ausgangsstoff

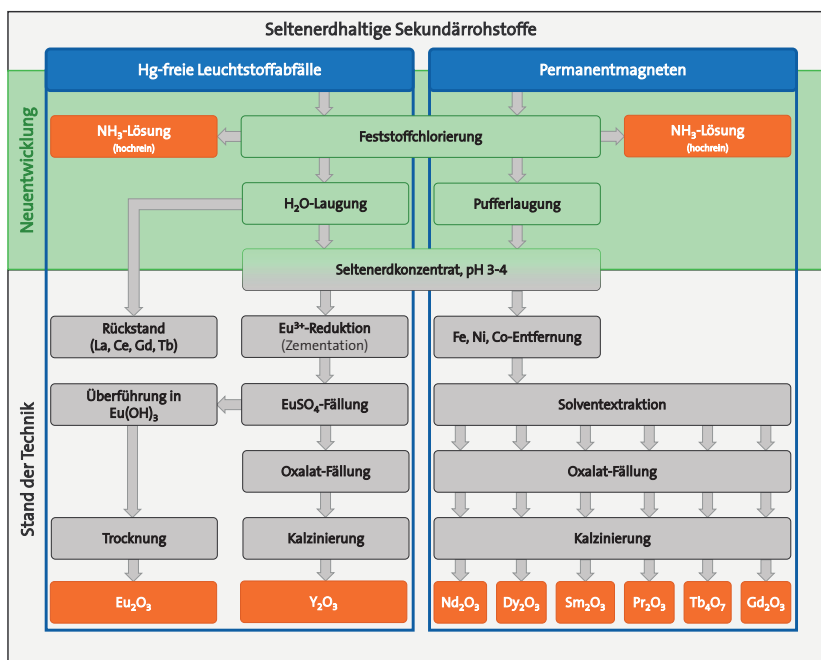


Abb. 1. Seltenerdrecycling mit Feststoffchlorierung aus Leuchtstoffabfällen und Permanentmagneten.

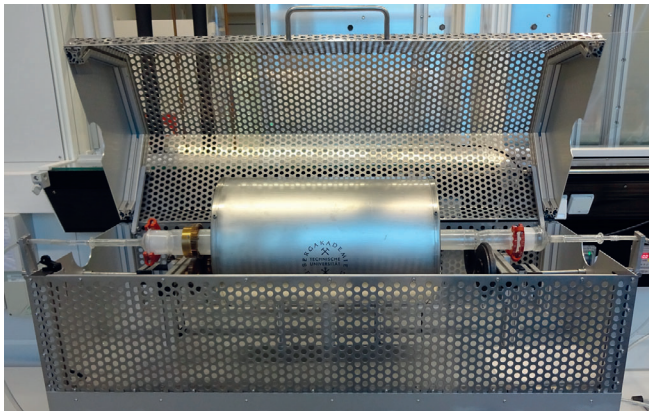


Abb. 2. Im Drehrohrföfen gelingt Seltenerdrecycling. Foto: TU Freiberg

vermischt und im Drehrohrföfen erhitzt (Abbildung 2). Durch die thermische Zersetzung des NH_4Cl bei 338°C entstehen Chlorwasserstoff und Ammoniak (Abbildung 3, Gleichung 1). HCl überföhrt die Metalle in ihre wasserlöslichen Metallchloride (Abbildung 3, Gleichungen 2 und 3), während NH_3 über einen Gaswäscher entfernt wird und eine Ammoniaklösung mit einer Reinheit von über 99,9998 % und weniger als 1,5 ppm Chloridgehalt entsteht. Nicht umgesetztes NH_4Cl lässt sich aufgrund der Reversibilität der Zersetzungsreaktion aus dem sich abkühlenden Gasstrom, der den Reaktor verlässt, zurückgewinnen. Daher ist kein Säureüberschuss nötig, sondern es wird nur so viel Chlorwasserstoffgas verbraucht, wie notwendig ist, um die SE in ihre Chloride zu überföhren,

die sich niederschlagen. Sie werden anschließend in Wasser oder einem verdünnten Essigsäurepuffer aufgelöst, der die Fällung von Eisenhydroxidspezies verhindert (Abbildung 3, Gleichung 4). Der Essigsäurepuffer trägt zudem zum Aufschluss bei, indem er nach dem Chlorieren verbliebene Feststoffpartikel auflöst (Abbildung 3, Gleichung 5).

Sind Übergangsmetalle wie Eisen, Cobalt und Nickel in der Lösung, steigt bei Permanentmagneten die Seltenerdausbeute durch die Zementationsreaktion, in der die gelösten Übergangsmetalle mit den unedleren, ungelösten Seltenerdmetallen eine Redoxreaktion durchlaufen (Abbildung 3, Gleichung 6).

Im Gegensatz zur hydrometallurgischen Variante gelangen die SE somit selektiv in Lösung – ohne Nickel und Cobalt.

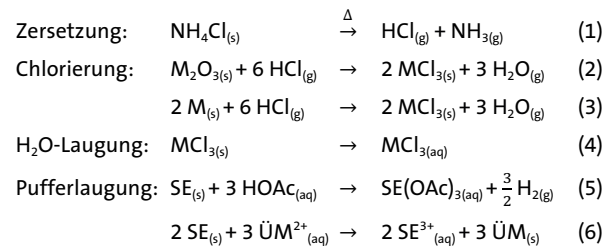


Abb. 3. Reaktionsgleichungen zur Feststoffchlorierung. M: Metall, SE: Seltenerdmetall, ÜM: Übergangsmetall (Eisen, Cobalt, Nickel)

während die übrigen SE ungelöst im Rückstand bleiben. Dies ist ein notwendiger Kompromiss, da die extraktive Trennung aller SE gewöhnlich über mehrere hundert Extraktionsstufen läuft und damit sehr teuer ist.

Yttrium und Europium lassen sich hingegen leicht voneinander trennen und machen zusammen ungefähr 80 Prozent der enthaltenen SE aus. Um beide Metalle zu trennen, wird Europium zu Eu^{2+} reduziert, etwa durch Leiten der Lösung über Zinkkörnerchen, und anschließend als EuSO_4 gefällt.

Alle dreiwertigen Seltenen Erden, wie Y^{3+} bei Leuchtstoffen oder Nd^{3+} und Dy^{3+} bei Magneten, lassen sich mit Oxalsäure fällen und durch Kalzinieren bei 800°C in die marktfähigen Seltenerdoxide überföhren. Diese Prozessschritte sind seit langem etabliert.³⁾ Letztlich lassen sich so alle Seltenerdkonzentrate verarbeiten und damit Abfallchargen in die industriellen Gewinnungsverfahren einspeisen.

AUF EINEN BLICK

Die Rohstoffpreise sind zu niedrig, um mit den konventionellen Methoden Seltenerdmetalle wirtschaftlich recyceln zu können.

Um seltenerdhaltige Abfälle aufzubereiten, müssen die festen Seltenerdverbindungen in ein wässriges, reines Konzentrat überföhrt werden.

Feststoffchlorierung schließt Metalle mit Chlorwasserstoff in der Gasphase auf, und dies je nach Matrix und Verfahren selektiv.

Vorteile der Feststoffchlorierung sind geringe Chemikalienkosten und wenig Abwasser.

Leuchtstoffabfälle

Die nach der Feststoffchlorierung gewonnenen Lösungen erreichen höhere Seltenerdkonzentrationen als die sauren Aufschlüsse der nasschemischen Recyclingverfahren und haben den richtigen pH-Wert von 3 bis 4, um weiterverarbeitet zu werden. Die sonst obligatorische Neutralisation entfällt.

Bei Leuchtstoffabfällen löst die Feststoffchlorierung hochselektiv nur den Rotleuchtstoff $\text{Y}_2\text{O}_3 \cdot \text{Eu}^{3+}$,

Kosten reduzieren

Das Ergebnis einer Feststoffchlorierung ist prinzipiell auch über eine nasschemische saure Laugung zu erreichen. Was also macht die Feststoffchlorierung zu einer besseren Alternative? Und wo wird sie technisch betrieben?

Die Vorteile der Feststoffchlorierung bestehen vor allem in geringen

Chemikalienkosten und in der Abwassermeidung. Das für den Aufschluss verwendete NH_4Cl ist preiswerter als Salz-, Schwefel- oder Salpetersäure, die gewöhnlich in den hydrometallurgischen Verfahren eingesetzt werden. Zudem enthält es mit 68 Gew.-Prozent im Vergleich zu konzentrierter Salzsäure beinahe die doppelte Menge an HCl , und unverbrauchtes NH_4Cl lässt sich aus dem Abgasstrom zurückgewinnen. Diese Punkte reduzieren die Kosten für den Aufschluss um mindestens 50 Prozent. Rechnet man den Erlös aus dem Verkauf des Koppelprodukts NH_3 hinzu, werden die Chemikalienkosten für den Aufschluss fast vollständig kompensiert.

Beim Auflösen der SE muss nur die Menge an Wasser hinzugegeben werden, die für das Lösen der Metallchloride erforderlich ist. So entstehen hochkonzentrierte Seltenerdösungen, die überdies nicht neutralisiert werden müssen. Die Entsorgungskosten sinken dadurch im Vergleich zur HCl -Laugung um mehr als 66 Prozent.

Arbeiten am Institut für Technische Chemie in Freiberg sollen dazu führen, den wässrigen Laugungsschritt zu eliminieren und die Seltenerdchloride selektiv in organischen Lösungsmitteln aufzunehmen. Dadurch ließe sich, so die Hoffnung, das Seltenerdkonzentrat direkt in den nächsten Aufarbeitungsschritt einspeisen, also in die Solventextraktion zur Trennung der Seltenerdelemente.

Vom Labor in die Industrie

An ein Umsetzen der Feststoffchlorierung im industriellen Maßstab war bisher nicht zu denken. Die zugrunde liegende Reaktion – die thermische Zersetzung von NH_4Cl – ist seit dem Mittelalter bekannt, aber damit diese Methode über die präparative Anwendung im Labor hinaus einzusetzen ist, waren viele Probleme zu lösen.

Eine der größten Schwierigkeiten bestand im Gasvolumen. So

entstehen aus einer Handvoll NH_4Cl nach dem Erhitzen auf 350°C insgesamt 100 L Gas. Kein Reaktor kann dieses Gasvolumen fassen und gleichzeitig große Durchsätze erreichen. Um einen Drehrohrofen also überhaupt für das Seltenerdrecycling nutzen zu können, musste das Gasvolumen reduziert werden. Wird die Gasphase jedoch unter Druck gesetzt, sind keine großen Durchsätze mehr möglich. Deshalb wird das NH_4Cl langsam im Reaktor umgesetzt, in dem unterhalb der Zersetzungstemperatur chloriert wird, also zwischen 225 und 325°C . Das NH_4Cl verdunstet hierbei eher, als dass es verdampft. So sinkt das Volumen der Gasphase etwa bei 325°C um 32 % und bis zu 98 % bei 225°C . Die Temperatur bestimmt die Zersetzungsgeschwindigkeit und stimmt sie auf die Geschwindigkeit der anschließenden Chlorierungsreaktionen ab. Dies ermöglicht sowohl die Chlorierung im Drehrohrofen als auch die erforderlichen Durchsätze, um große Abfallaufkommen zu verarbeiten.

Entwicklungen

Im Jahr 2015 nahm das Sep-Selsa-Verfahren bei FNE Entsorgungsdienste Freiberg den Regelbetrieb für das Leuchtstoffrecycling mit Feststoffchlorierung auf. Im Jahr 2017 folgte das Pla-Gado-Verfahren, mit dem Gadolinium aus End-of-Life-Produkten der Medizintechnik zurückgewonnen wird, etwa aus den Detektoren von Szintillationszählern. Im vierten Quartal soll das Magneto-Rec-Verfahren starten. Hier wird das Seltenerdrecycling aus Permanentmagneten zunächst im 0,5-Tagestonnen-Maßstab umgesetzt. Eine Anlage mit größerer Kapazität ist geplant.

Als nächstes sollen Nickel, Cobalt und die Seltenen Erden aus NiMH-Akkumulatoren mit der Feststoffchlorierung zurückgewonnen werden. Dies könnte einen weiteren Stoffstrom der seltenerdhaltigen

Sekundärrohstoffe in den Wertstoffkreislauf zurückführen.

Feststoffchlorierung ist nicht auf SE beschränkt; sie ist auf einem guten Weg, zu einem Standardverfahren der chemischen Aufarbeitung zu werden. Da die Methode als Alternative zur sauren Laugung angelegt ist, könnte sie die in zahlreichen hydrometallurgischen Verfahren etablierten Laugungsschritte effektiver, kostengünstiger und ressourcenschonender gestalten. <<

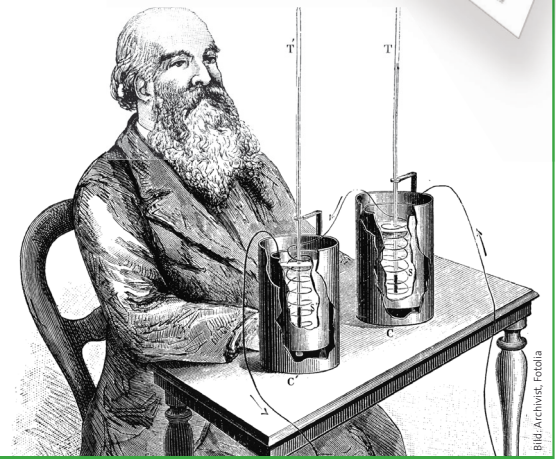
- 1) J. Gambogi, Mineral Commodity Summaries 2019, Rare Earths, 2019
- 2) T. E. Graedel, J. Allwood, J.-P. Birat et al., Recycling rates of metals. A status report, United Nations Environment Programme, Nairobi, Kenya, 2011
- 3) B. Adler, M. Schwarz, Nachr. Chem. 2017, 65, 140

Die Autoren danken dem Bundesministerium für Bildung und Forschung für die finanzielle Unterstützung der Forschungsprojekte SepSEL-SA (FKZ 033R113B), PlaGado (FKZ 033RK022B) sowie MagnetoRec (FKZ 033RK039B).

Für Neugierige:

Der GDCh-Newsletter

Nützliche Informationen
aktuell im 2-Wochen-Rhythmus.



Lesen und bestellen Sie den Newsletter hier:
www.gdch.de/newsletter



Kreislaufwirtschaft

Plastik runderneuert

Rohstoffhersteller kaufen Recycler, denn es ist schwierig, genügend Rezyklate in ausreichender Qualität zu finden. Die Kunststoffmesse K 2019 zeigte, welchen Einfluss dabei chemisches Recycling und die Abfallwirtschaft haben.



Das Projekt www.stopoceanplastics.com, angestoßen von den Unternehmen Borealis und Systemiq, unterstützt Städte in Indonesien beim Abfallsammeln. Foto: Systemiq

Viele Kunststoffe lassen sich nach Nutzungsende so aufbereiten, dass sie wiederverwendet werden können. Davon sind die meisten der 3330 Aussteller der Kunststoffmesse K 2019 Ende Oktober in Düsseldorf überzeugt. Kreislaufwirtschaft war Thema der Sonderschau „Plastics Shape the Future“ unter Federführung von PlasticEurope, ebenso wie beim „VDMA Circular Economy Forum“ des Verbands Deutscher Maschinen- und Anlagenbau. Der „Science Campus“ der K 2019 arbeitete am Dialog zwischen Wissenschaft und Wirtschaft.

Kreislauf- statt Abfallwirtschaft

Nach Berechnungen der University of California hat die Industrie weltweit in den letzten 70 Jahren 8,3 Milliarden Tonnen Kunststoffe produziert; im Jahr 1950 entstanden etwa 2 Millionen Tonnen, im Jahr 2017 waren es 348 Millionen. Entsprechend stieg die Kunststoffabfallmenge. Deshalb stellt die EU in ihrer Kunststoffstrategie die Kreislaufwirtschaft in den Mittelpunkt, und Chinas Fünf-Jahres-Plan zielt ebenso darauf [Nachr. Chem. 2016, 64, 758].

Weil Verbraucher Kunststoffe kritisieren, steigen Markenhersteller von Konsumgütern und Lebensmitteln beim Recycling ein: Coca-Cola,

Ikea und Adidas wollen bei der Produktion oder für Verpackungen mehr Rezyklate einsetzen als bisher oder – wie ein chinesischer Hersteller von elektronischen Heimgeräten – die Produkte recyclingfähig machen. Und der Schweizer Lebensmittelkonzern Nestlé hat sich verpflichtet, dass sich alle seine Verpackungen spätestens ab dem Jahr 2025 rezyklieren oder wiederverwerten lassen.

Damit der Kreislauf funktioniert, braucht es Sammelsysteme [Nachr. Chem. 2019, 67(10), 24]. In Deutschland gibt es etwa Pfandsysteme für Flaschen aus Polyethylenterephthalat (PET) sowie Modelle, die Industrie und Handel am Einsammeln gebrauchter Verpackungen finanziell beteiligen. Ein Problem ist die oft uneinheitliche Rezyklatqualität durch gemischtes Sammeln. Standards für Rezyklate fordert deshalb der Fachverband Kunststoff- und Gummimaschinen im Verband Deutscher Maschinen- und Anlagenbau.

Beim Produktdesign achten Hersteller bislang vor allem auf Funktionalität und Aussehen. Künftig sollten sie Produkte so entwickeln, dass diese sich leichter recyceln lassen. Das funktioniert gut, wenn sich die Kunststoffsorten im Abfall voneinander trennen lassen. Eine Methode dafür ist das automatische Sortieren nach dem Scannen im nahen Infrarot (NIR). Im Spektralbereich zwischen 0,7 und 2,5 μm treten Absorptionsbanden auf, mit denen sich Kunststoffe identifizieren



Im Rahmen der Sonderschau „Plastics shape the future“ verknüpfte die offene Werkstatt Fablab Lübeck additive Fertigung, Robotik und Werkstoffe. Die Forscher zeigten ihre Arbeiten an einem humanoiden Roboter.

Fotos: Messe Düsseldorf / cillmann



Das österreichische Familienunternehmen Engel verarbeitet mit einer Victory-Spritzgießmaschine Post-Consumer-Abfälle zu Transportboxen. Der Rezyklatanteil beträgt etwa 50 Prozent. Wichtig ist die Sortenreinheit, hier ausschließlich Polypropylen. Das Rezyklat kommt aus Post-Consumer-Sammlungen vom Grünen Punkt, dem Dualen System Deutschland (DSD).

lassen. Bei mit Ruß (Carbon Black) schwarz gefärbten gelingt das aber zurzeit nicht. Mit einem Partner, der NIR-Scanner herstellt, hat der Schweizer Spezialchemiekonzern Clariant nun Farbmittel entwickelt, die Kunststoffe derart schwarz färben, dass sie sich mit NIR-Sortiergeräten unterscheiden lassen.

Recyclingkonzepte

PET-Flaschen gehören zu den Verpackungsartikeln, die sich gut rezyklieren lassen. In Europa betrug die Recyclingmenge im Jahr 2017 durchschnittlich 58 Prozent; Deutsche und Finnen erreichten Rückführquoten von je bis zu 95 Prozent, Einwohner von Mittelmeerlandern teilweise nur 40 Prozent. Im Jahr 2018 wurden dem Verband Plasticseurope zufolge 9,4 Millionen Tonnen Post-Consumer-Abfallkunststoffe gesammelt, um innerhalb (etwa zu 80 Prozent) oder außerhalb der EU recycelt zu werden. Das sind knapp 33 Prozent des gesamten Post-Consumer-Kunststoffabfalls, etwa 25 Prozent landeten auf Deponien, und der Rest wurde verbrannt.

Coca-Cola will PET-Verpackungen chemisch rezyklieren und dann wieder für neue Flaschen nutzen. Eine PET-Recycling-Anlage dafür entsteht gemeinsam mit dem nie-

derländischen Start-up Ionika Technologies in Eindhoven.

Der österreichische Mineralbrunnen Vöslauer hat seine Flaschen auf 100 Prozent recyceltes Material (r-PET-Flaschen) umgestellt. Dabei sei es gelungen, den Materialverbrauch um ein Viertel zu reduzieren.

Die Partner um das Projekt Upcyclepet beim Fraunhofer-Institut für Betriebsfestigkeit und Systemzuverlässigkeit forschen an langglasfaserverstärktem PET aus geschredderten Flaschen. Es soll etwa in Automobilen Neuwerekunststoffe wie Polyamid und Polybutylenterephthalat ersetzen. Schwierig ist dabei die Rezyklatqualität, denn die Flakes enthalten etwa Fremdstoffe wie Pigmente, und vor allem sind sie für andere Anwendungen additiviert – hier etwa für Flaschen.

Der britische Hersteller von Automatenbechern, RPC Tedeco-Gizeh, und das Schwesterunternehmen BPI Recycling bieten Getränkeautomatenbetreibern einen Bechersammel- und -abholservice an. Aus den gesammelten Bechern machen sie neue.

Deutsche Kunststoffprofilhersteller schlossen sich im Jahr 2015 zur Rewindo-Initiative zusammen. Seitdem gelangten mehr als 27 000 Tonnen Polyvinylchlorid(PVC)-Rezyklat aus Altfenstern,

Rollladen und Türen in den Produktionsprozess. Zusammen mit Kunststoffprofilverschnitt, der bei der Fertigung neuer Kunststofffenster anfällt, kamen so bisher mehr als 100 000 Tonnen aufbereitetes PVC auf den Markt.

Produktionsabfälle werden im Allgemeinen entweder direkt in die laufende Produktion zurückgeführt oder spezialisierten Aufbereitern gegeben. Einer von denen ist Hoffmann + Voss aus Viersen. Das Unternehmen erstellt aus technischen Kunststoffabfällen Recompounds, die anstelle von Neuwere in die Automobilindustrie gehen.

Schwierig bleibt die Aufbereitung immer dann, wenn es um gemischte Kunststoffabfälle geht. Ein Konzept für solche Abfälle hat Hahn Kunststoffe. Etwa 50 000 Tonnen Mischfraktion verarbeitet das Unternehmen pro Jahr zu Geländern, Lärmschutzwänden, Pfosten, Pollern, Blumenkübeln, Abfallbehältern oder Spielplatz- und Stadtmobiliar. Für hochwertigere Anwendungen ist das Mischmaterial nicht geeignet.

Chemisches Recycling

Der im Januar gegründete Verband Chemical Recycling Europe (ChemrecEurope) versteht unter chemischem Recycling von Polymerabfäl-



In Sachen Mobilität setzten viele Aussteller der Kunststoffmesse K 2019 auf zwei statt auf vier Räder, wobei es wie in früheren Jahren vor allem um Leichtbau ging, etwa auf dem Science Campus. Foto: Messe Düsseldorf / ctilmann

len jede Wiederaufbereitungstechnik, die Polymere in Monomere, Grundchemikalien oder andere wertschöpfende Materialien umwandelt, nicht aber verbrennt oder deponiert.

Zum Verband gehört das niederländische Unternehmen Ioniqa, das seit Juli eine 10-Kilotonnen-PET-Recyclinganlage betreibt. Ein anderes Verbandsunternehmen, Plastic Energy aus dem Vereinigten Königreich, will petrochemische Prozesse des saudiarabischen Chemiekonzerns Sabic in Europa mit dem Rohstoff Tacoil beliefern. Das Öl entsteht aus Mischkunststoffabfällen, die anaerob thermochemisch zerlegt werden. Die Anlage soll den kommerziellen Betrieb im Jahr 2021 aufnehmen.

Bei BASF läuft chemisches Recycling im Chemcycling-Projekt, in dem Pilotprodukte basierend auf chemisch recycelten Kunststoffabfällen entstehen. BASF beteiligt sich zudem am Polystyrene-Loop-Projekt: Eine lösungsmittelbasierte Recyclingtechnik soll Dämmstoffe aus expandiertem Polystyrol (EPS) aufarbeiten. Das Flammschutzmittel Hexabromocyclododecan (HBCD), das darin bis zum Jahr 2015 verwendet

wurde, wird dabei herausgefiltert und chemisch zerlegt. Das Brom lässt sich ebenfalls wiedergewinnen. Das Auflösungsverfahren beruht auf selektiver Extraktion nach dem Creasolv-Prozess vom Fraunhofer-Institut für Verfahrenstechnik und Verpackung in Freising.

Rezyklate finden

Das EU-Parlament stimmte im März der Richtlinie zur Strategischen Umweltprüfung (SUP) zu. Diese ergab die zehn Objekte, die am häufigsten an EU-Stränden vorkommen, und sie verbietet Einwegkunststoffprodukte, wenn der Markt Alternativen bietet. Nach der SUP-Richtlinie sollen 77 Prozent aller Kunststoffflaschen ab dem Jahr 2025 getrennt gesammelt werden, 90 Prozent ab 2029. Zudem sollen ab 2025 PET-Flaschen zu 25 Prozent aus recyceltem Material bestehen, und ab dem Jahr 2030 sollen alle Plastikflaschen 30 Prozent Recyclingmaterial enthalten.

Studien des europäischen Verbands der Plastikverarbeiter (European Plastic Converters, EuPC) zufolge ist es für Kunststoffverarbeiter schwierig, eine Bezugsquelle für recycelte Polymere zu finden. Die EU verlangt, dass die Industrie in den Jahren 2025 bis 2030 jährlich 10 Millionen Tonnen recycelte Polymere verwendet. Damit die Industrie diese findet, entwickelt der EuPC die Onlineplattform More (Monitoring Recyclates for Europe).

Der Kreislaufwirtschaftsexperte beim Wuppertal-Institut für Klima, Umwelt und Energie, Henning Wilt, sagt: „Das Haupthindernis für eine funktionierende Kreislaufwirtschaft sind die unterschiedlichen Akteure.“ Die Prozesse Sammeln, Sortieren, Rezyklieren und Produzieren müssten über Unternehmensgrenzen hinweg verknüpft werden. Sonst wisse ein Produzent zum Beispiel nicht, welchen Kunststoff der Recycler gerade verarbeitet und welche Mengen er bekommen kann.

Eine K-2019-Pressemeldung der Minger Kunststofftechnik aus Appenzell etwa beginnt mit: „Sie haben Kunststoffabfälle? Wir nehmen das, was für andere Abfall ist, sehr gerne als Rohstoff an. Wir sind ständig auf der Suche nach Fluorkunststoffen, Polyamiden, Polyethylen, Polypropylen ...“

Rohstoffhersteller rüsten auf

Der saudiarabische Chemiekonzern Sabic errichtet mit Plastic Energy aus London in den Niederlanden eine Anlage, die gemischte Kunststoffabfälle zu Öl aufbereiten soll, das dann wiederum Ausgangsmaterial für neue Kunststoffe sein soll.

Gemeinsam mit dem französischen Entsorgungsunternehmen Suez übernahm Lyondell Basell im vergangenen Jahr den Aufbereiter QCP im niederländischen Geleen. Dort entstehen in einer Anlage mit einer Kapazität von 35 000 Jahrestonnen aus Post-Consumer-Verpackungen Recompounds aus Polyethylen und Polypropylen.

Ebenfalls im Jahr 2018 kaufte das Hamburger Unternehmen Albis Plastic den Aufbereiter Wipag aus Neuburg an der Donau. Dieses Unternehmen ist auf die Automobilbranche spezialisiert und hat ein Verfahren entwickelt, damit sich kohlenstofffaserverstärkter Kunststoff wiederverwenden lässt.

Im Jahr 2016 übernahm der österreichische Kunststoffhersteller Borealis die thüringischen Unternehmen MTM Plastics und MTM Compact. Dort entstehen jetzt aus gemischten Kunststoffabfällen etwa 30 000 Jahrestonnen Repolyolefine. Vergangenes Jahr kam der Kunststoffrecycler Ecoplast aus der Steiermark hinzu. Für einfacheres Recycling entwickelte Borealis etwa Full-PE-Laminat und ein Monomaterial für flexible Verpackungen auf PE-Basis, die sich Unternehmensangaben zufolge gut recyceln lassen.



Maren Bulmahn

Materialien

Gefrorene Luft macht alles leichter

Jedes Gel lässt sich in ein Aerogel verwandeln. Das funktioniert sogar bei gekochten Eiern.

Das europäische Forschungsprojekt Cost Action Aerogel wird nun Anwendungen für Umwelt- und Lebenswissenschaften untersuchen lassen.

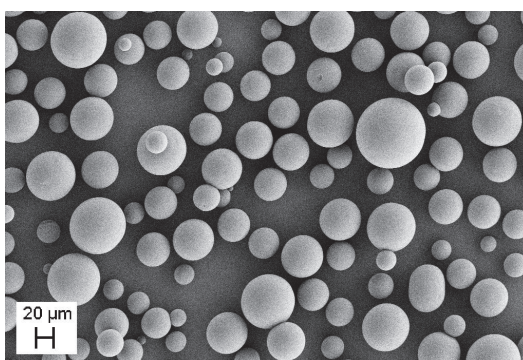
Aerogele sind hochporöse Festkörper mit geringen Dichten. Da die leichtesten Aerogele kaum schwerer als Luft sind, spricht man hier von „gefrorener Luft“. Es gibt keine allgemein gültige Definition eines Aerogels, allerdings sind alle Aerogele offenporig. Die Porengröße liegt typischerweise im Mesoporenbereich, also zwischen 5 und 50 Nanometern.

Die Struktur bestimmt die Eigenschaften der Aerogele, darunter ausgezeichnete Wärmeisolation – die Wärmeleitfähigkeit ist kleiner als die von Luft –, große innere Oberflächen von 300 bis 1000 Quadratmetern pro Gramm und gute Schallabsorption.¹⁾

Anwendungen von Aerogelen

Aerogele werden als leichte Isolationsmaterialien genutzt, die wegen der offenporigen Struktur Feuchtigkeit transportieren können. Zudem dienen metallbasierte Aerogele als Katalysatoren, silica- und biopolymerbasierte Aerogele sind Träger von aktiven Substanzen in den Lebenswissenschaften und Kohlenstoffaerogele sind Superkondensatoren.

Außerdem lassen sich Aerogele als Sorbentien für Gase und Flüssigkeiten nutzen, etwa um Öl aus Wasser zu absorbieren, und mehr Anwendungen sind möglich.^{2,3)} So gibt es essbare Aerogele, die sich eventuell als Geschmacksträ-



Essbare Aerogele aus Biomaterialien. Oben: Molkenproteinaerogel als Pulver; rechts: das Aeroegg, ein überkritisch getrocknetes gekochtes Ei. Fotos: TUHH



ger, Füllstoffe oder Verpackungsmaterialien in der Lebensmittelindustrie nutzen lassen (Abbildungen oben).^{4,5)}

Da jede Anwendung besondere Randbedingungen hat, müssen Chemiker und Verfahrenstechniker gemeinsam die Aerogeleigenschaften anpassen. Grundlagenforschung und Prozessentwicklung erschließen neue Aerogelklassen und nachwachsende Rohstoffe als alternative Gelbildner; die Hydrophobizität ist einzustellen oder mechanische Eigenschaften sind anzupassen. Ingenieurwissenschaftler müssen entsprechende Prozessschritte modellieren und optimieren, Strukturen auf molekularer Ebene beschreiben oder Struktur-Eigenschaftsbeziehungen vorhersagen.⁷⁾ Das Anwendungspotenzial von Aerogelen ist noch bei weitem nicht ausgeschöpft.

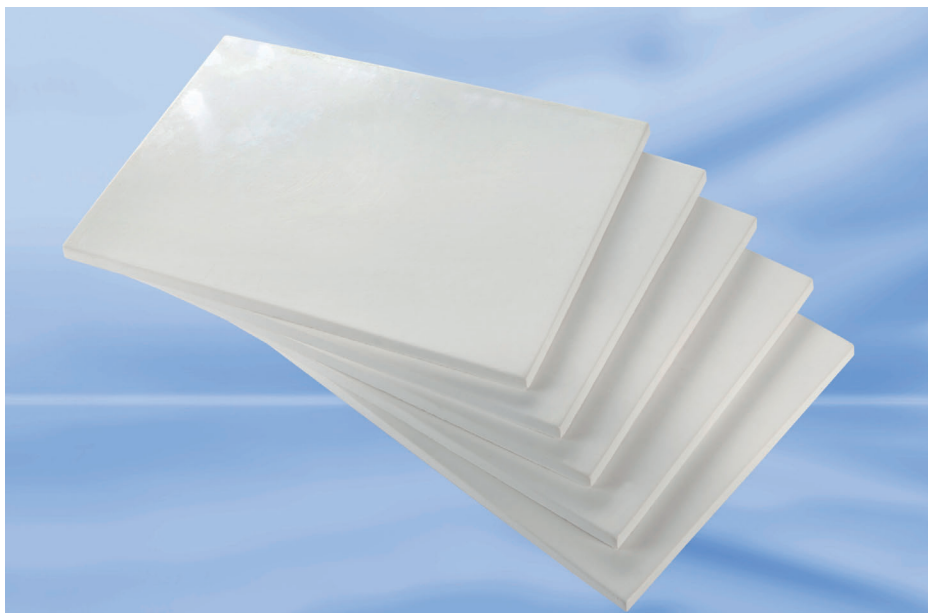
Herstellung von Aerogelen

Der erste chemische Schritt, um Aerogele herzustellen, ist die Gelbildung. Sie bestimmt die physikochemischen und mechanischen Eigenschaften eines Aerogels.

Gele entstehen als dreidimensionale, poröse Netzwerke in einem Lösungsmittel. Die Gele können organischer oder anorganischer Natur sein. Typische Beispiele sind Metalloxidgele (TiO_2 , Al_2O_3), Silicagele, polysaccharidbasierte Gele etwa aus Alginat, Cellulose, Stärke, Pektin oder Chitosan so-

Irina Smirnova leitet das Institut für Thermische Verfahrenstechnik der Technischen Universität Hamburg und ist stellvertretende Vorsitzende der EU Cost Action zu Aerogelen. Zuvor hatte sie das EU-Projekt Nanohybrids koordiniert.
irina.smirnova@tuhh.de





Ein polyurethanbasiertes Aerogel in Plattenform. Foto: BASF

wie Gele aus synthetischen Polymeren, etwa Polyurethane. Zudem sind Gele aus reinen Metallen, etwa Platin oder Silber, und deren Kombinationen bekannt.¹⁾

Verschiedene gelbildende Matrizen lassen sich miteinander kombinieren, um so hybride Gele zu erzeugen, deren Eigenschaften für die jeweilige Anwendung maßgeschneidert sind. Während der Gelbildung lassen sich die Gele formen, etwa in einer Form oder durch Partikelbildung.

Der zweite Schritt entfernt das Lösungsmittel, in dem die Gelbildung stattfand. Da das Verhältnis Feststoff zu Lösungsmittel die Dichte des Aerogels bei der Gelbildung bestimmt und in der Regel

besonders kleine Dichten von unter 0,1 Gramm pro Kubikzentimeter angestrebt werden, müssen gewöhnlich große Lösungsmittelmengen, die bis zu 99 Prozent des Gelvolumens betragen können, aus dem Material entfernt werden. Die Porenstruktur des Gels muss während dieses Prozesses erhalten bleiben. Denn während die Gele trocknen, werden Phasengrenzen überschritten, wobei sich Kapillarkräfte entwickeln. Diese können die Poren zerstören, und das Material schrumpft.

Um intakte Aerogele zu erhalten, wird das Lösungsmittel mit überkritischem Kohlendioxid aus den Poren extrahiert. Das CO₂ wird anschließend bei der Temperatur oberhalb seines kritischen Punkts von 31°C isotherm entspannt, sodass keine Kapillarkräfte entstehen. Denn im überkritischen Bereich gibt es keine Phasengrenze zwischen Gas und Flüssigkeit, daher keine Oberflächenspannung und keine Kapillarkräfte; die isotherme Druckabsenkung umgeht das Flüssigphasengebiet. Dieser Prozess heißt häufig überkritische Trocknung und wurde in den letzten Jahren untersucht, um die Trocknungszeit zu minimieren und so die Wirt-

schaftlichkeit des Prozesses zu verbessern.⁶⁾

Die Trocknungszeit wird maßgeblich durch die charakteristische Länge des Gels (Durchmesser einer Kugel oder Dicke einer Platte) beeinflusst, daher sollte die für die jeweilige Anwendung gewünschte Größe und Form bereits bei der Gelbildung eingestellt werden. Während es mehrere Stunden dauert, eine 2 cm dicke Platte für Wärmedämmwendungen zu trocknen, dauert dieser Vorgang bei kleinen Partikeln etwa für Sorption oder für Life-Science-Anwendungen nur wenige Minuten.⁶⁾ Dabei müssen Prozessführung und Trocknungsbedingungen jeweils optimiert werden. Die Versuche dazu sind soweit gedingen, dass sich mit Sicherheit sagen lässt: Jedes Gel, unabhängig von seiner chemischen Natur, kann in Aerogel überführt werden, und zwar effizient.

Aus dem Labor in die Industrie überführen

Nahezu jedes Material lässt sich leichter machen, wenn es in Aerogelform überführt wird. Die innere Oberfläche erhöht sich dabei, und die Dichte lässt sich variieren, um den optimalen Kompromiss zwischen der Porosität und den mechanischen Eigenschaften zu finden.

Es sind flexible Aerogele⁷⁾ und mechanisch robuste Aerogele mittlerer Dichte bekannt wie Airloy vom Bostoner Unternehmen Aerogel Technologies. Die Herstellung von Aerogelen ist nicht auf den Labormaßstab beschränkt, Aerogele sind kommerziell erhältlich.

Vor allem bei Silica-Aerogelen haben sich einige Produzenten etabliert, darunter Aspen Aerogel, Cabot Aerogel, Nanotech und Jios. Organische Aerogele hat kürzlich BASF unter dem Namen Slentite auf den Markt gebracht (Abbildung oben).

AUF EINEN BLICK

Aerogele sind hochporöse Festkörper und die leichtesten Feststoffe der Welt.

Jedes stabile Gel lässt sich unabhängig von seiner chemischen Natur in ein Aerogel überführen.

Ausgezeichnete Wärmeisolation, große innere Oberflächen und gute Schallabsorption machen Aerogele zu Superisolatoren, Katalysatoren, Sorptionsmitteln und Trägern von aktiven Substanzen in der Lebensmittel- und Pharmatechnik.

Eine Übersicht über Aerogelproduzenten und Hinweise zum Kauf von Aerogelen für Testzwecke gibt die Website buyaerogel.com.

Forschung und Entwicklung international

Die Aerogel-Community wächst. Mittlerweile treffen sich bei den Konferenzen, etwa International Seminars of Aerogels, alle zwei Jahre mehr als 250 Teilnehmer.

In Deutschland ist der Cluster des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie „Aerogele für Energieeffizienz“ aktiv.⁹⁾

Auf europäischer Ebene ist kürzlich das Projekt Advanced Engineering and Research of Aerogels for Environment and Life Sciences (Aerogels) gestartet, vor allem für Anwendungen in Umwelt und Lebenswissenschaften.¹⁰⁾ Die Europäische Zusammenarbeit auf dem Gebiet der wissenschaftlichen und technischen Forschung (European Cooperation in Science and Technology, Cost) fördert das Projekt. Weltweit gibt es Aerogel-Plattformen wie www.aerogel.org/community/. «

- 1) *Aerogels Handbook*, Hrg.: M. A. Aegerter, N. Leventis, M. M. Koebel, 2011, Springer New York
- 2) I. Smirnova, P. Gurikov, Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng. 2017, 8, 307–334
- 3) H. Maleki, L. Durães, C. A. García-González et al., Adv. Colloid Interface Sci. 2016, 236, 1–27
- 4) K.S. Mikkonen, K. Parikka, A. Ghafar, M. Tenkanen, Trends Food Sci. Technol. 2013, 34(2), 124–36
- 5) C. Kleemann, I. Selmer, I. Smirnova, U. Kulozik, Food Hydrocolloids 2018, 83, 365–374
- 6) I. Selmer, A. Behnecke, J. Quiño et al., J. Supercrit. Fluids 2018, 140, 415–430
- 7) I. Smirnova, P. Gurikov, J. Supercrit. Fluids 2018, 134, 228–233
- 8) <https://technology-grc.ndc.nasa.gov/featurestory/polyimide-aerogels>
- 9) BMWI-Cluster „Aerogele für Energieeffizienz“, <https://aerogelcluster.rz.tuHH.de/>
- 10) Cost Action CA18125 – Advanced Engineering and Research of aerogels for Environment and Life Sciences COST Action, <https://cost-aerogels.eu/>

Blick nach China

Energie gewinnen 1 | Aus der Potenzialdifferenz von Salz- und Süßwasser lässt sich theoretisch über umgekehrte Elektrodialyse elektrische Energie gewinnen (Osmosekraftwerk). Bisher gibt es keine wirtschaftlich arbeitenden Anlagen dafür. Liping Wen und Kollegen vom Institut für Physik und Chemie der chinesischen Wissenschaftsakademie haben nun eine nanoporige Kompositmembran aus Seide-Nanofibrillen und Aluminiumoxid als Trägersubstrat hergestellt. Die negativ geladene Oberfläche des Fibrins sorgt dabei für Ionentransport, das amphotere Aluminiumoxid für Stromfluss. Je nach Salzkonzentration ergaben sich Energiedichten von bis zu $2,86 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$, was zu einer wirtschaftlich arbeitenden Anlage führen könnte.

Nature Commun. 2019, 10, 3876

Energie gewinnen 2 | Eine Arbeitsgruppe am Institut für Mikrobiologie der chinesischen Wissenschaftsakademie beschreibt eine mikrobielle Brennstoffzelle. Darin assimilieren gentechnisch veränderte Cyanobakterien im sichtbaren Licht CO_2 und bilden daraus D-Milchsäure, die sie ins Medium ausscheiden. Ein zweiter Mikroorganismus, *Shewanella*-Bakterien, oxidiert die D-Milchsäure und leitet die dabei entstehenden Elektronen über einen Membranproteinkomplex auf eine Elektrode. Das bakterielle Konsortium produzierte 40 Tage lang eine bisher unerreichte durchschnittliche Energiedichte von $135 \text{ mW} \cdot \text{m}^{-2}$.

Nature Commun. 2019, 10, 4282

Klimawandelfolgen untersuchen | Chinas Satellit BNU-1 (Eispfadfinder) soll zwei Jahre lang in einer sonnensynchronen Umlaufbahn Klima und Umwelt von Arktis und Antarktis aus 730 km Höhe analysieren. Er wiegt 16 kg und trägt eine hochauflösende Kamera, eine Multispektralkamera und ein Identifikationssystem für Schiffe.

Grundlagenforschung finanzieren

Nach amtlichen Angaben wurden in China im Jahr 2018 knapp 2 Trill. CNY (umgerechnet 256 Mrd. Euro) für Forschung und Entwicklung ausgegeben. Davon gingen etwa 15,7 % mehr als im Vorjahr in die Grundlagenforschung – zu wenig nach Meinung der chinesischen Regierung.

Rolf Schmid, www.window-to-china.eu

Start me up

Labor 4.0 | Das Unternehmen Trion Dynamics aus Weitnau setzt auf künstliche Intelligenz, um Abläufe im Labor zu automatisieren. Damit lassen sich optische Messmethoden auswerten, große Datenmengen erfassen und überwachen sowie sich selbst verwaltende Systeme erstellen. Geschäftsführer ist Noah-Marcel Fath (Eintrag im Handelsregister am 9.3.2019).

Thermoplaste | Die Dresdener Herone hat eine Technik entwickelt, um maßgeschneiderte thermoplastische Faserverbundprofile in Serie zu produzieren. Die Technik senkt die Prozesszeit, minimiert die Porosität der Composite und verhindert Materialschäden während der Verarbeitung. Geschäftsführer sind Christian Garthaus und Daniel Barfuß. (24.7.2018)

Bipolymere | Die Produkte des Düsseldorf Unternehmens Poligy wandeln Wärme in Strom um, denn die Bipolymere biegen sich bei Temperaturänderungen. Weitere Einsatzgebiete sind Medizin- und Textiltechnik. Geschäftsführer sind Martin Huber und Artur Steffen. (3.12.2018)

Peptide reinigen | Die Berliner Belyntic hat eine Technik entwickelt, um Peptide HPLC-frei zu reinigen. Die Methode benötigt weniger Lösemittel und durch die parallele Aufbereitung der Peptide weniger Zeit als etablierte Methoden. Die Geschäftsführer sind Andreas Regnery, Oliver Reimann, Dominik Sarma und Robert Zitterbart. (17.5.2018)

Holger Bengs, European Chemistry Partnering, schaut für die Nachrichten aus der Chemie ins Handelsregister.

Digitalisierung

Eine neue Aufgabe für Laborgeräte

Probengeber, Spektrometer, Chromatographen, Thermostate und Datenbanken sollen untereinander so kommunizieren wie Menschen und dabei so präzise und effektiv arbeiten wie Roboter. Damit dies gelingt, müssen sich Anwender und Hersteller dafür öffnen, Daten und Know-how in eine gemeinsame digitale Infrastruktur einzubringen.



Eine Laborantin bestückt in einem BASF-Testlabor einen Hochdurchsatzroboter. Foto: BASF

Der Konzern BASF hat in ihren Analyselaboren bereits Verfahrensschritte und ganze Verfahren automatisiert. Aber auch in einem großen Unternehmen stößt die Digitalisierung an Grenzen, und zwar dort, wo unterschiedliche Systeme miteinander kommunizieren müssen oder die Aufgaben komplex sind.

Beispiel NMR-Spektroskopie und Elementanalytik

Für NMR-Messungen greift schon heute ein Roboter selbstständig Probe um Probe, pipettiert ein bestimmtes Volumen in deuteriertes Lösungsmittel und startet die Messung. Das NMR-Spektrum gelangt über das hauseigene Laborinformations-Management-System (LIMS)

als PDF-Datei per E-Mail an den internen oder externen Kunden. Input bekommt das System über einen Barcode auf der Probe.

Bei der Auswertung endet die Automatisierung. Hier könnten die chemischen Verschiebungen noch automatisch mit NMR-Datenbanken abgeglichen und Strukturinformationen abgeleitet werden.

In der Analytik von Schwermetallen in organischen Proben ist die Situation ähnlich wie in der NMR: Die Probe wird automatisch homogenisiert; Roboter schließen sie auf, um organische Komponenten zu entfernen. Die Schwermetalle transferiert das System automatisch zum ICP-OES. Die Ergebnisse werden in das LIMS eingespeist – über Nacht bis zu 400 Proben bei Bestimmung von 30 Elementen in jeder Probe.

Automatisierung endet bei der Methodenentwicklung

In der Chromatographie analysieren Roboter die Proben nach vorgegebenen Methoden. Das schließt die Probenvorbereitung ein, zum Beispiel Derivatisierungsschritte.

An Grenzen stößt die Automatisierung dort, wo es um die Methodenentwicklung geht: Die Peaks zweier Substanzen sind nicht vollständig getrennt. Was tun: Zusammensetzung des Eluenten ändern? Andere Derivatisierung? Den Detektor wechseln? An dieser Stelle ist immer noch menschliches Denken gefragt, auch wenn Experten hier an automatisierten Workflows arbeiten.

Solche komplexen Aufgaben kann kein Unternehmen in absehbarer Zeit allein lösen – auch keines der großen. Stattdessen ist Kooperation gefragt. Chemieriesen wie spezialisierte Anbieter von Labor- und Analysetechnik müssen hier zusammenarbeiten.

Automatisierung des chemischen Labors bleibt eine der schwersten Aufgaben. Ein Hauptgrund ist das heterogene Equipment: Autosampler, HPLC-Säulen, Detektoren und Greifroboter und andere sind im Einzelnen zwar ausgereift, doch zwischen ihnen herrscht Sprachverwirrung.

Kommunizieren können

Für Automatisierung und Digitalisierung müssen Laborsysteme lernen, miteinander zu kommunizieren.

ren, sich voneinander abzugrenzen, zu sagen, in welchen Zustand sie sich befinden (Maschinendiagnose). Sie müssen weitergeben, in welchem Format sie Daten liefern und aufnehmen. Zurzeit stehen dafür keine ausreichend standardisierten Sprachen, Schnittstellen und Inhalte zur Verfügung. Sie sind auch nicht in Sicht – obwohl man schon seit Jahrzehnten gemeinsam daran arbeitet.

Ein grundlegender Zielkonflikt wirkt hier hinderlich: Laborgerätehersteller möchten ihre Produkte verkaufen. Sie haben ein Interesse daran, selbst den Standard zu setzen, den Anwender mit einem geschlossenen System an sich zu binden und das eigene Know-how keinesfalls Anwendern oder gar Wettbewerbern preiszugeben. Teilen? Lieber nicht.

Das führt allerdings dazu, dass die Systeme geschlossen sind. Sie können zum Beispiel pipettieren, Flüssigkeit erwärmen oder kühlen, aber kein Massenspektrometer steuern. Daher ist in der heutigen, nichtstandardisierten Welt extrem viel Anpassungsprogrammierung zu leisten, um alle Geräte miteinander kommunikationsfähig zu machen. Das beginnt schon bei Temperatureinheiten (Grad Celsius oder Fahrenheit).

Dem stehen Ideen gegenüber, wie etwa diese: Proben kommen in einer anderen Reihenfolge an. Der Autosampler registriert dies, steuert entsprechende HPLC-Methoden um und gibt Detektor sowie Auswerteprogrammen die nötigen Anweisungen.

Schnittstellenmanagement

Mit entsprechendem Aufwand lassen sich technisch heute alle Laborgeräte in Netzwerke einbinden – selbst die analogen. Als Werkzeuge stehen Analog-Digital-Wandler zur Verfügung. Darüber hinaus gibt es zumindest für Touchscreen-Geräte die vom Verein Deutscher Ingenieure, VDI, favorisierte OPC-Schnittstelle oder die weit verbreitete serielle Schnittstelle RS232, gegebenfalls aufgerüstet mit einem Moxa-Adapter. Eventuell ist noch ein Treiber zu programmieren, und dann funktioniert die Kommunikation.

Besonders gut gelingt das Auslesen von Daten aus Laborgeräten, weniger zufriedenstellend die Umwandlung zu lesbarer Information (zum Beispiel von Graphiken) für die Laborbücher. Kompliziert machen diesen Schritt im Pharmabereich die Forderungen der Zulassungsbehörden FDA (U.S. Food and Drug Administration) und EMA (European Medicines Agency) nach unveränderbaren Daten, auch bei Transformationsschritten.

Die Kommunikation in die andere Richtung, also Steuerungsbefehle direkt aus elektronischen Laborbüchern an Laborsysteme, funktioniert heute noch nicht.

Die Kommunikation in die andere Richtung, also Steuerungsbefehle direkt aus elektronischen Laborbüchern an Laborsysteme, funktioniert heute noch nicht.

So einfach wie möglich

Ein Lösungsweg – der vielleicht zum Trend wird – setzt auf möglichst simple Geräte. Statt eines integrierten Computers schrumpft das Messsystem bis fast zu einem Sensor, während die Software-Funktionalitäten in eine Cloud verlagert werden. „Sie müssen dort in einer separaten Ebene angeordnet sein, getrennt von der Datenebene“, betont Burkhard Feigel, Geschäftsführer Deutschland von Infors HT, Stuttgart, das Steuerungs- und Vernetzungssysteme für Labore anbietet. Die separaten Ebenen würden verhindern, dass Daten versehentlich hochgeladen und dann von Industriespionen kopiert werden könnten.

Wenn die Kommunikationsfähigkeit entscheidend ist: Werden die großen Anwender denn proprietäre Laborlösungen einfach nicht mehr kaufen, selbst wenn sie umfangreich sind und sich für viele Anwendungen eignen? „Über kurz oder lang wird es so kommen“, prophezeit Joachim Richert, Vorsitzender der Fachgruppe Analytische Chemie der

GDCh. „Als Anwender möchte ich mir mein Gerät frei aussuchen und seine Interoperabilität und komfortable Netzanbindung einfach voraussetzen können.“ Also: Plug & play, wie von der Unterhaltungselektronik gewohnt.

Vorbildfunktion hat die Prozesstechnik für Großanlagen, denn hier setzen die Namur (Normenarbeitsgemeinschaft für Mess- und Regeltechnik in der Chemischen Industrie) und die daraus hervorgegangenen DIN-Normung (DIN EN 60947-5-6) allgemein akzeptierte Standards. Günstig dabei ist, dass der Nutzerverband Namur auf Herstellerseite mit dem Zentralverband Elektrotechnik und Elektronikindustrie ZVEI einen Gesprächspartner hat.

Sollte sich der Markt für Labor- und Analysentechnik in diese Richtung entwickeln, ist ein Verdrängungswettbewerb unter den Herstellern absehbar: Die Nase vorn werden robuste und komfortable Geräte haben, die sich in jede vorgegebene digitale Infrastruktur einfügen. Wer schnell ist und offene Systeme anbietet, läuft womöglich dem Hersteller ausgefeilter geschlossener Systeme den Rang ab, selbst wenn diese in der Praxis Vorteile bieten.

Neue Geschäftsmodelle eröffnen sich dann durch das Cloud-Computing: Wenn etwa der Anbieter von Labor- und Analysentechnik auch die Instandhaltung der Geräte organisiert oder ein externer Dienstleister die Laborchemikalien verwaltet. <<

Christian Ehrensberger ist freier Mitarbeiter der Nachrichten aus der Chemie.

AUF EINEN BLICK

Unterschiedliche Laborgeräte oder Geräte unterschiedlicher Hersteller verstehen sich in der Regel nicht.

Eine über Insellösungen hinausgehende Laborautomatisierung erfordert eine übergreifende digitale Infrastruktur.

Ein Lösungsweg könnten möglichst einfache Geräte ohne internen Computer sein, angeschlossen an eine externe Steuerung.

Analysentechnik

Komponenten sicher zuordnen

Bei der Identifikation zinnorganischer Verbindungen erhöhen Multiple-Reaction-Monitoring-Massenspektren sowie der Abgleich mit entsprechenden Bibliotheken die Nachweissicherheit.

Zinnorganische Verbindungen (Zinnorganyle) finden sich in zahlreichen Anwendungen, etwa als Anti-Fouling-Mittel in den Farbanstrichen für Boote oder als stabilisierendes Additiv in PVC. In der Umwelt sind sie inzwischen überall nachweisbar. Die Substanzen dieser Stoffklasse sind giftig, ihre Toxizität hängt von Art und Anzahl der Substituenten ab.

Ähnliche Massenübergänge

Organozinnverbindungen werden in der Regel mit Gaschromatographie-Massenspektrometern (GC-MS) nachgewiesen. Hier haben sich aufgrund ihrer Sensitivität und Selektivität Triple-Quadrupol-Massenspektrometer (TQ) durchgesetzt. Dennoch besteht die Gefahr, bei der Bestimmung von Zinnorganylen falsch positive oder falsch negative Ergebnisse zu erhalten, da die Substanzen untereinander sehr ähnliche Massenübergänge aufweisen. Das macht es schwierig, die Einzelverbindungen über das Massensignal zu unterscheiden. Ein vielversprechender Ansatz ist daher, mehrere Multiple-reaction-

monitoring-Übergänge (MRM) pro Komponente aufzuzeichnen.

Aktuelle GCMS-Geräte nehmen problemlos bis zu zehn Massenübergänge pro Komponente auf. Diese zehn Signale werden beim MRM-Spektrum-Modus genutzt, um diese mit zuvor aufgezeichneten Standardspektren abzugleichen. Diese Vorgehensweise ist vergleichbar mit der Spektrensuche über eine Elektronenstoßionisation (EI) bei einem GC-MS-Single-Quadrupol (SQ), mit dem Unterschied, dass die MRM-Signale erst nach Kollision der Fragmente mit einem Stoßgas erhalten werden. Solche MRM-Bibliotheken sind aktuell nicht kommerziell erhältlich, der Anwender muss sie über das Messen von Standardsubstanzen selbst erstellen.

MRM-Optimierung

Als Beispiele für die Analytik von Organozinnverbindungen dienen Tetra-n-propylzinn und Tetrapentylzinn. Sie wurden mit je neun MRM-Übergängen auf einem Shimadzu-GCMS-TQ8050 NX vollautomatisch optimiert. Dieses Gerät kann bei einer Injektion die Kollisionsenergie

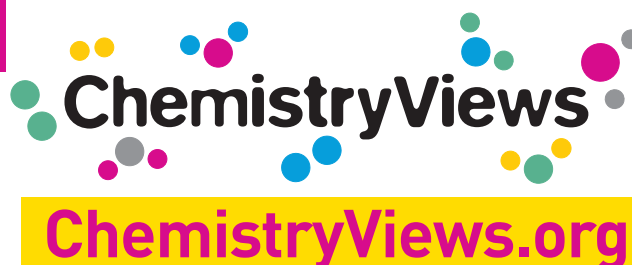
mehrerer Komponenten gleichzeitig optimieren. Das Gerät war mit dem Flüssigprobengeber AOC20i und PTV-Injektor Optic 4 ausgestattet. Als Trennsäule diente eine SH-Rxi-5MS-Kapillarsäule. Alle weiteren Methodendetails wie Temperaturprogramm, verwendeter Liner, Smart-DB, MRM-Bibliothek (beispielhaft) oder Injektionsmodus sind über den Autor erhältlich.

Um zu klären, wie die Aufnahme einer höheren Zahl von MRM-Übergängen die Signalstärke beeinflusst, wurden die untersuchten Komponenten mit drei, sechs und neun MRM-Übergängen vermessen (Abbildungen 1 und 2 am Beispiel Tetrapentylzinn). Bei diesen Messungen wurden gleich hohe Signale und identische Peakflächen registriert. Die Empfindlichkeit der Messung hängt also nicht von der Zahl der MRM-Übergänge ab, ebenso war die Korrelation der Kalibrationen mit 0,999 identisch.

Das MRM-Spektrum

Durch die Messung von mehreren MRM-Übergängen erhält man ein

Spot your favorite content!



MRM-Spektrum, das – ähnlich wie ein Full-scan-Spektrum – zur Datenbanksuche dienen kann. Voraussetzung hierfür ist eine MRM-Bibliothek. Ist sie vorhanden, so gleicht die Software die Spektren vollautomatisch ab und liefert als Ergebnis die spektrale Übereinstimmung zum Standard. Das erhöht die Sicherheit bei der Zuordnung der Komponenten.

Tetrapentylzinn wurde mit sechs MRM-Übergängen von $0,2 \text{ ng}\cdot\text{mL}^{-1}$ kalibriert. Auch bei dieser kleinsten Konzentration werden noch alle sechs Übergänge sicher erfasst (Abbildung 3). Die MRM-Verhältnisse befinden sich alle in einem Bereich von $\pm 30\%$ Abweichung zur Standardoptimierung. Das Signal-zu-Rauschen-Verhältnis liegt bei dieser Konzentration noch über 8000.

Fazit

Die Sicherheit der Analytik steigt, wenn mehrere MRM-Übergänge erfasst werden, pro Komponente sind bis zu zehn möglich. Die Empfindlichkeit der Messung sinkt nicht dadurch. Ebenso bleiben die Linearität und die Qualität der Korrelation unberührt.

Allerdings eignet sich nicht jede chemische Verbindung dazu, mehrere MRM-Übergänge zu registrieren, da sich die Signalintensitäten zum Teil stark unterscheiden. Zinnorganyle bieten aufgrund ihrer Struktur viele MRM-Übergänge und sind somit nachweisstark detektierbar. Die Methode sollte aber für jede Komponente dynamisch entwickelt werden, um die unterschiedlichen Nachweisstärken zu berücksichtigen.

Mit dem Abgleich über eine MRM-Bibliothek sinkt die Zahl falsch positiver und falsch negativer Resultate. <<

Stephan Schröder hat Biotechnologie an der TU-Berlin studiert und an der Universität Bonn promoviert. Seit 2007 ist er Produktspezialist für GC/GCMS bei Shimadzu Deutschland in Duisburg.

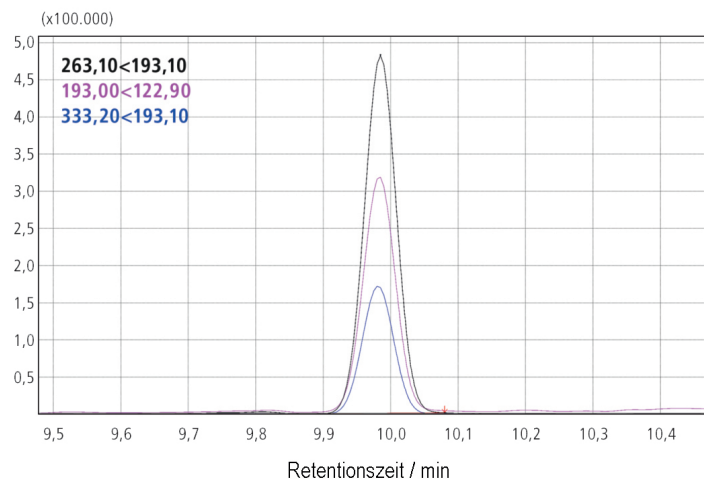


Abb. 1. Drei Multiple-Reaction-Monitoring(MRM)-Übergänge von Tetrapentylzinn (m/z -Werte oben links).

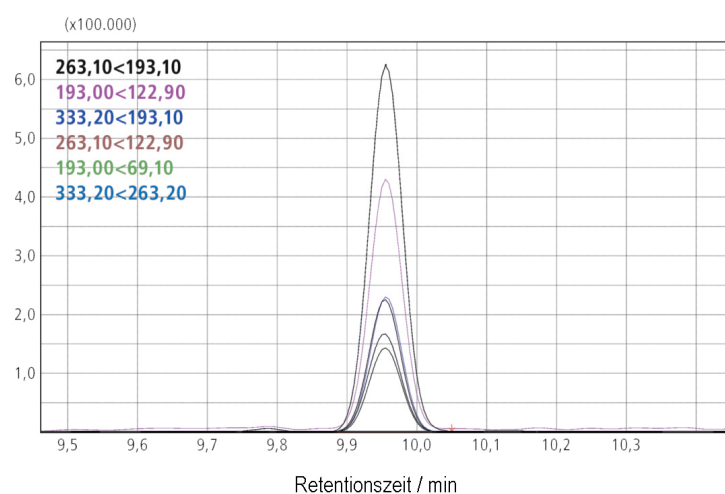


Abb. 2. Neun MRM-Übergänge von Tetrapentylzinn (m/z -Werte oben links).

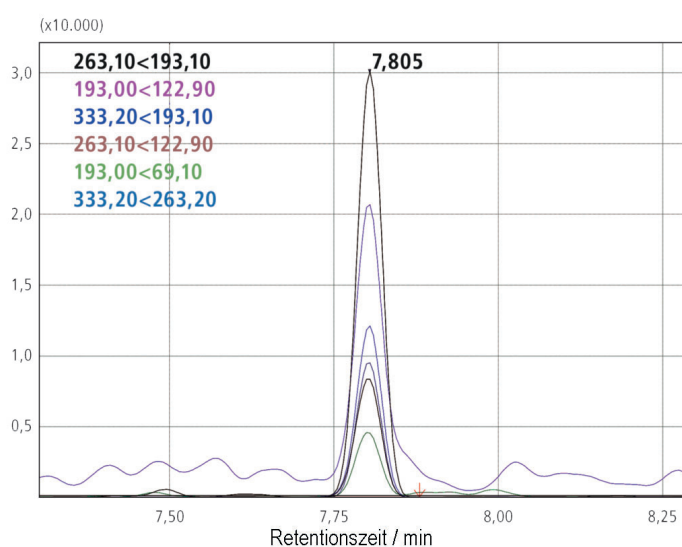
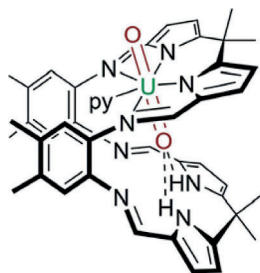


Abb. 3. Signale von Tetrapentylzinn mit einer Konzentration von $0,2 \text{ ng}\cdot\text{mL}^{-1}$ mit sechs MRM-Übergängen (m/z -Werte oben links).

Notizen aus der Chemie



Uranyl in der Klemme | In wässriger Umgebung liegt Uran in der Regel als reaktionsträges UO_2^{2+} vor. Komplexierung mit einem Polypyrrol-Makrocyclus stabilisiert die ungewöhnliche Oxidationsstufe +5: Eines der beiden Sauerstoffatome sitzt in einer Tasche („Pacman“-Molekül), während das andere Reduktionsmitteln zugänglich bleibt. So lässt sich Uranyl mit Ti^{II} , Ti^{III} , Zr^{IV} , Zink oder Alkalimetallen in den fünfwertigen Zustand überführen und charakterisieren. Selbst ein Cäsium-Uranyl^V-Ring lässt sich synthetisieren.

ES

Chem. Sci. 2019, doi: 10.1039/c8sc05717f

Metalle im Motoröl | Art und Konzentration der durch Abrieb entstandenen Metallpartikel in Schmieröl werden meist nach Verdünnung mit organischen Lösungsmitteln mit ICP-OES ermittelt. Dabei machen stark kohlenstoffhaltige Proben wegen Rußablagerungen Probleme. García und Mitarbeiter nutzen daher einen speziellen Multizerstäuber, der gleichzeitig organische und wässrige Lösungsmittel über zwei parallele Probenzuführungen einträgt. Somit lassen sich die Matrices als Aerosol mischen, und der Anteil an Kohlenstoff im System sinkt. Die Autoren kombinieren den Zerstäuber mit einem On-line-System, das eine automatisierte Standardaddition sowie Korrektur über internen Standard ermöglicht.

Im Vergleich zu herkömmlichen Systemen hat das neue System einen doppelt so hohen Probendurchsatz, bedeutet weniger Arbeitsaufwand und führt zu ähnlichen Nachweis- und Bestimmungsgrenzen für relevante Elemente (Cd, Cr, Cu, Fe, Mn, Ni, Pb).

BM

J. Anal. At. Spectrom. 2019, doi: 10.1039/C9JA00255C

Vibrieren lassen, bis es fällt | Die Gruppe von Robb spaltet mechanisch schwache Bindungen einer makromolekularen Kette, um kleine Moleküle freizusetzen. Dazu berechneten sie zunächst eine metastabile Furfurylcarbonatstruktur, die sich über Stunden in protisch polaren Medien wie Wasser oder Methanol abbaut und dabei Kohlenstoffdioxid und eine Alkoholverbindung freisetzt. Wird ein Maleimidaddukt dieser Struktur in ein Polyacrylat eingebaut, lässt sich das Addukt mit Ultraschall abspalten. Dadurch wird ein Furfurylcarbonat entschützt, und ein Fluorophor wird frei. Mögliche Anwendungen sind Drug Delivery oder Spannungsdetektion.

GD

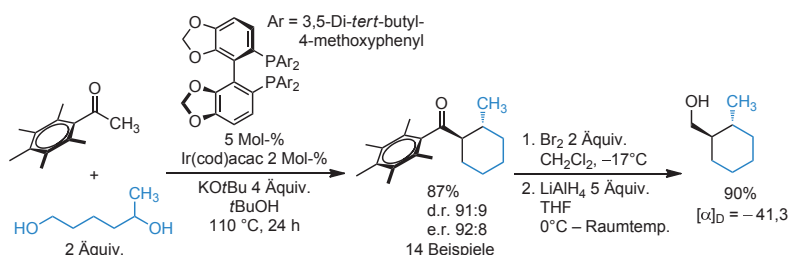
J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 15018

Tellur-Nanopartikel aus dem Bakterium

Die Gruppen Wu, Zhang und Wang nutzen das Bakterium *Bacillus selenitireducens*, um aus Tellurationen TeO_4^{2-} und Lactat Nanopartikel aus elementarem Tellur herzustellen. Nach der Passivierung der Nanopartikel mit einem Polymer eignen diese sich für optische Anwendungen wie Infrarotlaser.

JH

Nat. Commun. 2019, 10, 3985



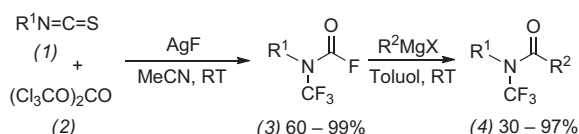
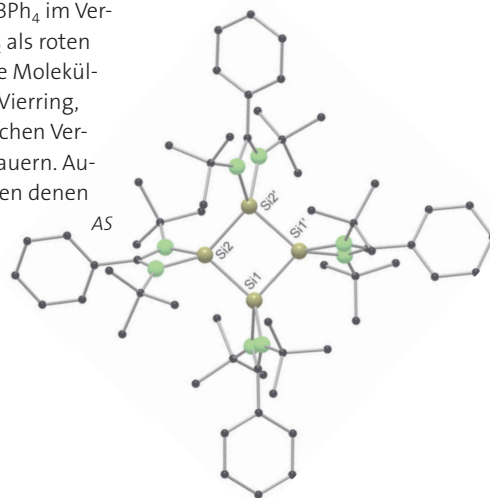
Cyclohexane mit geborgtem Wasserstoff | Donohoe und Mitarbeiter alkylieren Pentamethylacetophenon mit 1,5-Diolen zu enantioselektiv substituierten Cyclohexanen. Der Iridiumkatalysator dehydriert zunächst den Alkohol zur Carbonylfunktion. Diese geht eine Aldolkondensation mit dem Acetophenon ein, und ein Iridiumhydridokomplex hydriert das gebildete Enon enantioselektiv. Die Pentamethylphenylgruppe lässt sich durch *ipso*-Substitution in andere funktionelle Gruppen umwandeln.

CCT

Angew. Chem. Int. Ed. 2019, 58, 12558

Aromatisches $[\text{Si}_4\text{R}_4]^{2+}$ | Roesky und Mitarbeiter haben ein Siliciumhomolog des Cyclobutadien-Dikations $[\text{Si}_4\text{L}^{\text{Ph}}_4]^{2+}$ (**1**) ($\text{L}^{\text{Ph}} = \text{PhC}(\text{NtBu})_2$) hergestellt. Dazu setzten sie eine Mischung aus $\text{L}^{\text{Ph}}\text{SiSiL}^{\text{Ph}}$, $\text{L}^{\text{Ph}}\text{SiCl}$ und NaBPh_4 im Verhältnis 2:1:2 in THF um und erhielten **1** als roten mikrokristallinen Feststoff in 14 % Ausbeute. Die Molekülstruktur von **1** enthält einen fast planaren Si_4 -Vierring, daher gehen die Autoren von einer 2π -aromatischen Verbindung aus, was negative NICS-Werte untermauern. Außerdem liegen die Si-Si-Bindungsängen zwischen denen einer Einfach- und einer Doppelbindung.

J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 134987



N-Trifluormethylamide und Verwandte | Eine neue zweistufige Synthese liefert die bisher schwer zugänglichen und daher kaum genutzten N-(Trifluormethyl)amide und verwandte Kohlen säurederivate. Zunächst werden Isothiocyanate (**1**) mit einem Überschuss AgF und Triphosgen (**2**) zu den N-(Trifluormethyl)carbamoylfluoriden (**3**) umgesetzt, die dann mit Grignard-Reagenzien zu den Amiden (**4**) reagieren. Amine, Aminosäurederivate, Alkohole oder Thiolate statt Grignard-Reagenzien ergeben Harnstoffe, Carbamate oder Thiocarbamate. Die synthetisierten Trifluormethylamide sind unter sauren und basischen Bedingungen stabiler als tertiäre N-Methylamide oder sekundäre Amide und neigen weniger dazu, Rotamere zu bilden.

Nature 2019, 573, 102

Kasha-Regel verletzt? Fluoreszenz eines Radikalemitters

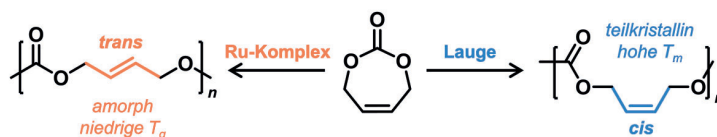
Heil und Marian haben mit einem DFT/MRCI-Hybridansatz die Absorptions- und Fluoreszenzeigenschaften eines Zn^{II} -Tripyrrindion-Komplexes untersucht.

Da der 0-0-Übergang der D1→D0-Bande auf Basis der quantenchemischen Rechnungen bei 900 nm liegen sollte, ist eine Emission gemäß der Kasha-Regel aus dem untersten angeregten Zustand D1 mit dem experimentell ermittelten Emissionsmaximum bei 644 nm nicht vereinbar. Eine Emission aus dem D3-Zustand bei berechneten 622 nm halten die Autoren für die plausibelste Ursache. Somit könnte eine dominierende nicht-Kasha-Emission die interne Quanteneffizienz des Radikalkomplexes beeinträchtigen, da die energetisch niedriger liegenden D1- und D2-Zustände als Exciton-Fallen agieren.

Phys. Chem. Chem. Phys. 2019, 21, 19857

B_2X_6 -Dianionen | Braunschweig und Mitarbeiter stellen eine neue Verbindungsklasse vor, die binären Hexahalogenidborat-Dianionen $[\text{B}_2\text{X}_6]^{2-}$ ($\text{X} = \text{F}$ (**1**), Cl (**2**), Br (**3**), I (**4**)). Zur Synthese setzten sie die neutralen B_2X_4 -Halogenide mit entsprechenden Halogenidquellen um und erhielten die Dianionen in kristalliner Form. Alle $[\text{B}_2\text{X}_6]^{2-}$ -Ionen zeigen eine gestaffelte, annähernd D_{3d} -symmetrische Anordnung mit kurzer B-B-Einfachbindung von zirka 170 pm. Alle Salze sind als Feststoff bei -30°C unbegrenzt haltbar. Einkristalle von (**2**) und (**3**) sind sogar über Monate bei Raumtemperatur stabil.

Angew. Chem. Int. Ed. 2019, 58, 14270



Ein Monomer, zwei Polymere | Buchard und Mitarbeiter haben ein bifunktionelles cyclisches Monomer synthetisiert, das sich über zwei verschiedene Ringöffnungsmechanismen polymerisieren lässt. Jeder Weg ergibt ein anderes Isomer des selben ungesättigten Polyesters: Das cis-Isomer ist hart und teilkristallin, das trans-Isomer weich und amorph. Die Autoren haben zudem die Polymerisationsschritte, die über unterschiedliche Mechanismen ablaufen, so kombiniert, dass ein Produkt entsteht, das streng genommen ein Homopolymer ist, jedoch Blockcopolymergeigenschaften hat. Diese Polymere eignen sich sowohl als Duroplaste wie als thermoplastische Elastomere.

J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 13301

[Ga₅(dmap)₁₀]⁵⁺ | Krossing und Mitarbeiter haben das molekulare Pentakation [Ga₅(dmap)₁₀]⁵⁺ (**1**) synthetisiert, das als 5:1-Salz kristallisiert. Die Verbindung entsteht aus Ga(PhF)₂[Al(OR^F)₄] (R^F = C(CF₃)₃) mit dmap (4-N,N-dimethylaminopyridin) in ortho-Difluobenzol bei –25 °C; nach mehreren Wochen bilden sich orangefarbene Kristalle der Zusammensetzung [Ga₅(dmap)₁₀]⁵⁺[Al(OR^F)₄]₅. Die Galliumatome in (**1**) sind als planarer Fünfring angeordnet, mit Ga-Ga-Abständen zwischen 249 und 250 pm. Die positive Ladung ist gemäß Rechnungen auf die dmap-Liganden verschmiert, wodurch sich die Coulombabstoßung verringert. Daher sind die Kristalle unter Inertbedingungen bis –20 °C stabil.

AS

Angew. Chem. Int. Ed. 2019, 58, 14162

Reaktionsmechanismen on-chip aufklären | Pahl und Mitarbeiter kombinieren chipbasierte Reaktionssysteme on-line mit Infrarot-Photodissoziations-spektroskopie (IRPD). Hierbei werden die Reaktanden auf einem Chip gemischt, die Reaktionslösung durch Elektrospray in die Gasphase überführt, in einem Massenspektrometer werden relevante Massen abgetrennt und diese in der Gasphase mit IR-Spektroskopie untersucht.

Anhand einer bekannten Reaktion testeten die Autoren die Leistungsfähigkeit ihres Systems: Mit ihm lässt sich zwischen mehreren isomeren Intermediaten unterscheiden. On-chip-Systeme mit nachgeschalteter IRPD-Analyse können zukünftig dabei helfen, Reaktionskinetik und -mechanismen aufzuklären und somit chemische Reaktionen zu optimieren, etwa für den großtechnischen Einsatz. *BM Anal. Chem.* 2019, 91, 3199

ELEMENTERÄTSEL

Etwa 38 Prozent der Menge, welche die Industrie im Jahr 2000 von mir produziert hatte, sind in Flammenschutzmittel gegangen.

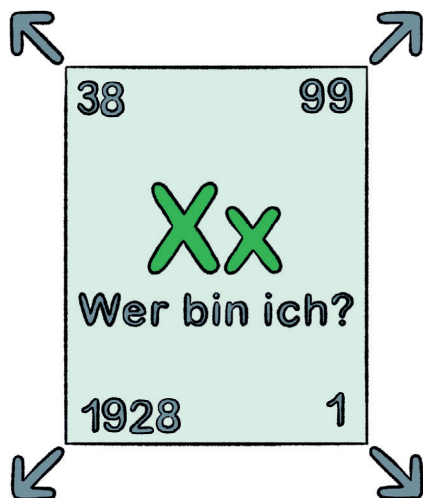
Nur keine Angst, eine meiner kann Verbindungen helfen.

Im Jahr 1928 wurde eins von fünf Rezepten in den USA für Medikamente ausgestellt, die Verbindungen mit mir enthielten.

Etwa 99 Prozent der Menge, die es von mir auf der Erde gibt, ist wohl in Ozeanen zu finden.

Im Jahr 1824 stellte Justus von Liebig mich her, ohne es zu wissen.

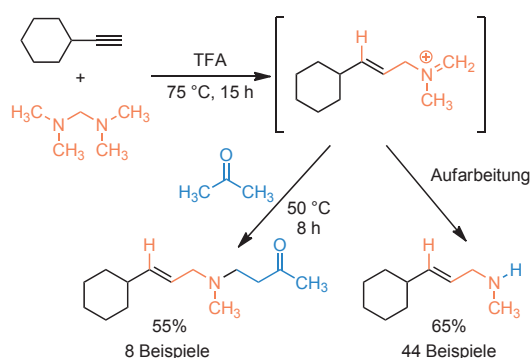
Meine Verbindungen machen etwa 1 Prozent des Toten Meers aus.



Welches Element ist gesucht? Senden Sie Ihre Antwort bis zum 25. November an nachrichten@gdch.de; unter den richtigen Einsendungen lösen wir eine siegreiche aus und beantworten sie. Gewinne sind ein GDCh-Periodensystem als DIN-A0-Poster oder Mousepad oder die GDCh-Tasse mit dem Erlenmeyerkuchen. Das Erlenmeyerkuchen gibt's auch ohne Tasse in Plüsch. Die Auflösung steht im Dezemberheft im Interskriptum.

Illustration: Maike Hettinger





Amine aus Alkenen oder Alkinen | Maulide und Mitarbeiter hydroaminomethylieren Alkene und Alkine säurevermittelt ohne Metallkatalysator. Ein in situ entstandenes Iminiumion addiert an die C-C-Mehrfachbindung. Das entstandene Carbokation lagert durch [1,5]-Hydridverschiebung zu einem neuen Iminiumion um, das sich zum sekundären Amin hydrolysieren oder mit einem Nukleophil zu einem tertiären Amin umsetzen lässt. CCT

Angew. Chem. Int. Ed. 2019, 58, 14639

Synthetische Biologie hochmodifizierter Peptide

Polytheonamid, ein ribosomales cytotoxisches Peptid in marinen Schwämmen, lässt sich nur vollsynthetisch herstellen, da der natürliche Produzent im Labor nicht überlebt. Piel und Mitarbeiter haben jetzt einen Bakterienstamm entdeckt, der ähnliche Peptide produziert, kultivierbar ist und als Plattform für synthetische Biologie dienen könnte. Aus dem Bakterium *Microvirgula aerodenitrificans* isolierten sie Aeronamid A, das 21 Epimerisierungen, 7 C-Methylierungen, 5 N-Methylierungen und eine Dehydratisierung aufweist. Wie Polytheonamid wirkt Aeronamid A cytotoxisch durch Porenbildung und H⁺/Na⁺-Transport. Ähnliche Peptide lassen sich im gleichen Bakterium heterolog produzieren. HK

Nat. Chem. 2019, 11 (10), 931

Allosterie im Enzymkino | Fluoroacetatdehalogenase bildet Homodimere, in denen zu einer Zeit immer nur ein Zentrum aktiv ist. Mehrabi und Mitarbeiter haben mit zeitaufgelöster Röntgenkristallographie über 30 s die katalytischen Prozesse mit 1,7 bis 1,9 Å Auflösung aufgezeichnet. Mit einem UV-Puls spalteten sie eine Schutzgruppe vom Fluoroacetatsubstrat ab, sodass die Reaktion über den gesamten Proteinkristall hinweg synchron ablief. Das molekulare Video zeigt nacheinander die Substratbindung, ein kovalentes Intermediat, Positionierung eines hydrolytischen Wassermoleküls und Freisetzung des Produkts. Außerdem ist erkennbar, wie Wassernetzwerke an der Kontaktfläche und Atmungsbewegungen der Proteinstruktur die allosterische Kommunikation im Dimer ermöglichen. HK

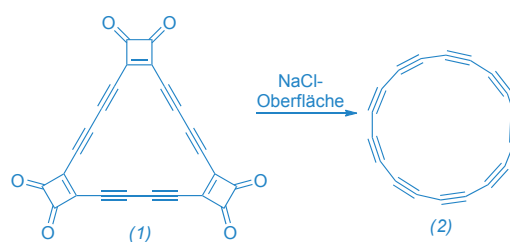
Science 2019, 365 (6458), 1167

Schema F beim maschinellen Lernen

Sich an bekannten Methoden und Erfahrungen zu orientieren, kann zur Wahl tendenziöser Reaktionsbedingungen führen und nicht zu einer solchen, die von sachlichen Überlegungen geleitet ist.

Wie die Gruppen Friedler, Norquist und Schrier zeigen, kommt es bei der Synthese von Metalloxiden mit organischen Aminen zu solch einer verzerrten Auswahl: Die populärsten Amine aus vielen publizierten Verbindungen sind nicht zwingend in anderen unabhängigen Reaktionsserien am erfolgreichsten. Dies hat Implikationen für maschinelles Lernen bei der Synthese neuer anorganischer Materialien: Ein Trainingsdatensatz aus Reaktionen, die innerhalb sinnvoller physikalischer Parameter zufällig ausgewählt wurden, lieferte bessere Ergebnisse als ein Datensatz aus den Reaktionsserien mehrerer Forscher im gleichen System. JH

Nature 2019, 573, 251



Cyclo[18]kohlenstoff | Eine interdisziplinäre Gruppe aus Zürich und Oxford hat das cyclische Kohlenstoffallotrop C₁₈ hergestellt. Diese gespannten, hochreaktiven Moleküle entzogen sich bisher jeglicher Charakterisierung. Zur Synthese sublimierten die Autoren den Hexatrien-Vorläufer (1) auf eine NaCl-modifizierte Cu(111)-Oberfläche und decarbonylierten es in einem kombinierten Rastertunnel-Rasterkraftmikroskop (STM-AFM) bei 5 K durch spannungsinduziertes nichtelastisches Elektronentunneln. Die Aufnahmen des Cyclo-C₁₈ (2) lassen auf eine Polyinstruktur mit neun Dreifachbindungen schließen, nicht aber auf eine kumulierte Struktur. UJ

Science 2019, 365, 1299

Guillaume Delaittre, Aachen/Krefeld
Johanna Heine, Marburg
Ullrich Jahn, Prag
Stefan Knecht, Zürich
Hajo Kries, Jena
Björn Meermann, Berlin
Andreas Schnepf, Tübingen
Erik Strub, Köln
Carl Christoph Tzschucke, Berlin

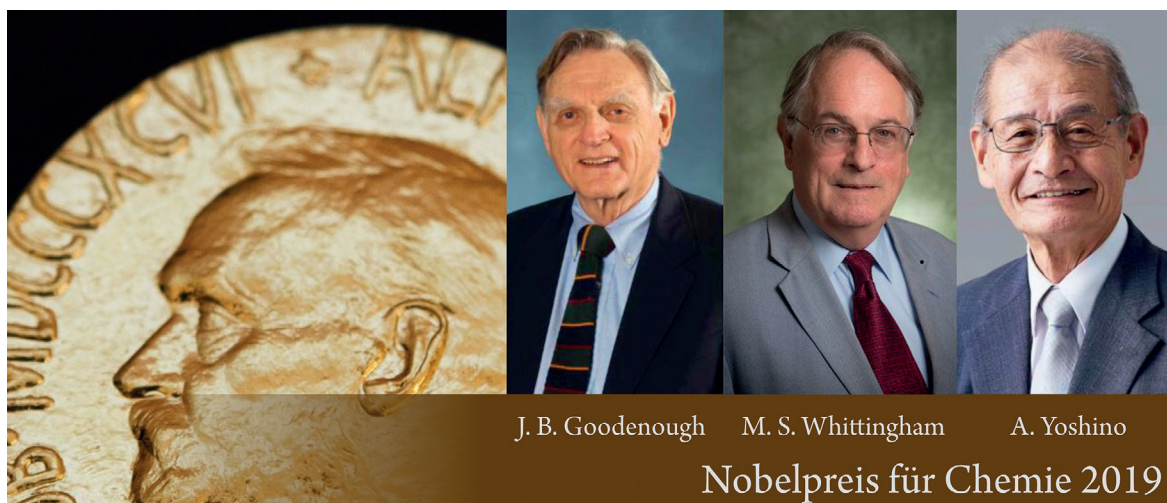


Abb. 1. Der Nobelpreis für Chemie – dieses Jahr für die Entwicklung von Lithium-Ionen-Batterien – geht an John B. Goodenough, Michael Stanley Whittingham und Akira Yoshino. Sie haben mit Grundlagenforschung und anwendungsorientierter Entwicklungsarbeit den Weg für moderne Batterien bereitet. Quellen: Medaille dpa, picture-alliance, Fotos: University of Texas at Austin, Binghamton University, Japan Prize Foundation

Nobelpreis 2019

Niederdimensionale Materialien für die ersten Li-Ionen-Batterien

Der diesjährige Chemienobelpreis ist dreigeteilt und wird an die Materialwissenschaftler John Bannister Goodenough, Michael Stanley Whittingham und Akira Yoshino verliehen werden. Sie erhalten den Preis als Würdigung für Pionierarbeiten, die zur Entwicklung eines neuen Batterietyps geführt haben.

Den Batterietyp, zu dem die Arbeiten der diesjährigen Nobelpreisträger (Abbildung 1) beigetragen haben, kennen wir alle. Die meisten von uns verwenden ihn nahezu täglich und tragen ihn bei sich: Es sind leistungsfähige Batterien, die Lithium als ionischen Ladungsträger nutzen, der die Stromversorgung in Mobiltelefonen und tragbaren Computern sicherstellt.

Li-Ionen-Batterien haben unsere Art zu kommunizieren und weltweit Informationen auszutauschen völlig verändert. Mitte der 1970er Jahre – auf diese Zeit blickt der Chemienobelpreis 2019 teilweise

zurück – sah die Welt noch anders aus.

Stanley Whittingham, der im Jahr 1968 seinen Titel Dr. phil. in Oxford bekam, dann als Postdoc in Stanford forschte und später Professor an der Universität Binghamton in New York war, arbeitet für die Exxon Research & Engineering Company. Konfrontiert mit der Ölkrise ist er damit beschäftigt, die elektrochemische Interkalation von Li-Ionen in das schichtstrukturierte Übergangsmetallsulfid TiS_2 zu untersuchen.^{1,2)} Im Jahr 1976 veröffentlicht er einen kurzen Aufsatz im Fachjournal *Science* und betont in den ersten Zeilen seine Entwicklung einer neuen

Li-Batterie. Diese enthält TiS_2 als Kathodenmaterial und metallisches Lithium als Anode.³⁾

Schichtstrukturierte Ionenleiter wie TiS_2 , das in der CdI_2 -Struktur kristallisiert, lagern reversibel Li-Ionen in ihre Van-der-Waals-Lücke ein. Die Li-Ionen in Li_xTiS_2 ($0 < x < 1$) besetzen die Oktaederlücken zwischen den TiS_2 -Schichten und unterliegen einem zweidimensionalen Bewegungsprozess (Abbildung 2), der bei $x = 0,7$ über einen großen Temperaturbereich Arrhenius-Verhalten folgt. TiS_2 , vielleicht die Drosophila der niederdimensionalen Ionenleiter, ist eine fantastische Modellschichtsubstanz.

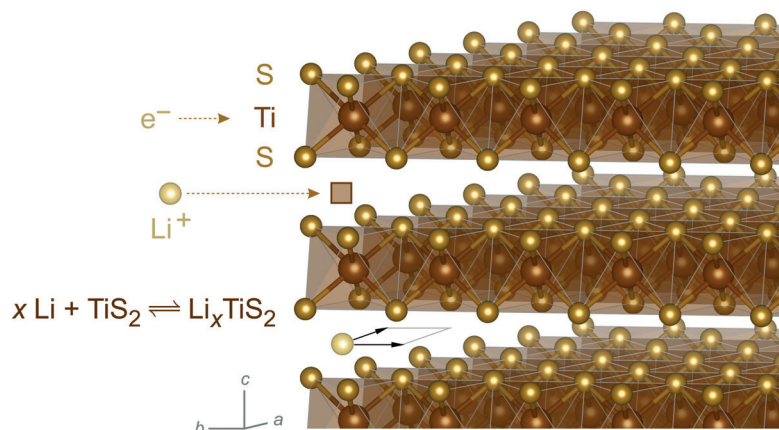


Abb. 2. Hochreversibler elektrochemischer Li-Einschub und niederdimensionale Li⁺-Diffusion in TiS₂; Whittinghams erste Schritte in Richtung Li-Ionenbatterie mit Li-Insertionsverbindungen.

Ich selbst verbinde mit TiS₂ viele Lithium-Kernresonanzmessungen, mit denen sich der 2-D-Diffusionsprozess über ein großes dynamisches Fenster mit Li-Sprungraten vom Hz- bis in den GHz-Bereich bestimmen ließ.

Whittinghams Entdeckung, Goodenoughs Weiterentwicklung

Die Whittingham-Batterie liefert dank der stabilen Wirtsstruktur von TiS₂ und der Einphasenreaktion $x \text{ Li} + \text{TiS}_2 \rightarrow \text{Li}_x\text{TiS}_2$ über hunderte Lade- und Entladezyklen zuverlässig eine Spannung von 2,5 V. Das Insertionspotenzial gegenüber metallischem Lithium ist aber zu gering für heutige Anwendungen. Im Jahr 1979 änderte sich dies mit John B. Goodenoughs Li_xCoO₂. Die resultierende Zellspannung stieg auf zirka 4 V.³⁾ Goodenough promovierte in Chicago und war zunächst Professor in Oxford, später an der University of Texas in Austin. Er hat seine Arbeiten, zu denen LiFePO₄ als Kathodenmaterial gehört,⁴⁾ in einem persönlichen Rückblick im *Journal of Power Sources* zusammengefasst.⁵⁾

Das Übergangsmetalloxid war ein Meilenstein für die Batterieentwicklung: Das Unternehmen Sony entwickelte im Jahr 1991 damit die erste kommerzielle Li-Io-

nenbatterie, deren Prinzip sich bis heute nicht geändert hat (Abbildung 3).⁶⁾

Da die weltweiten Co-Reserven kritisch sind und Co nicht immer unter menschenwürdigen Bedingungen gewonnen wird, arbeiten Wissenschaftler intensiv daran, den Co-Anteil gängiger Kathodenmaterialien zu senken. Die heutigen Li-Ionenbatterien nutzen beispielsweise schichtstrukturierte Ni-Co-Mn-Oxide, Mn-Spinelle oder beides und LiFePO₄.

Die Sony-Batterie verwendet aber anders als die Vorgängervarianten kein metallisches Li. Schon früh

studierte der französische Chemiker Michel Armand Graphit kombiniert mit einem Polymerelektrolyten als negatives Elektrodenmaterial,⁷⁾ da die Entstehung von Li-Dendriten in der Exxon-Variante der TiS₂-Batterie ein Sicherheitsrisiko war. Zudem neigen die verwendeten nichtwässrigen Elektrolyte dazu, Lösungsmittelmoleküle zu cointerkalieren, und verursachen Exfoliation der Graphitschichten.

Der japanische Ingenieur Akira Yoshino, der nach seiner Promotion zum Dr.-Ing in Osaka für den Chemiekonzern Asahi Kasei arbeitete, verwendete als Anodenmaterial zuerst Polyacetylen und später Petrolkoks mit Graphitanteilen.⁸⁾ Damit trug er entscheidend zum kommerziellen Erfolg der von Armand benannten Rocking-chair-Li-Ionenbatterie bei.

Heute bewirken Passivierungsschichten, gebildet durch die Zersetzungsprodukte aprotischer Elektrolyte und Leitsalze, dass Graphit mit einem kleinen Anteil Silicium (5 bis 10 Prozent bezogen auf die Elektrodenmasse) als Anodenmaterial tatsächlich in fast allen Systemen anzutreffen ist.⁹⁾ Andere Materialien wie Ni-Metallhydrid- oder Ni-Cd-Systeme wurden damit völlig verdrängt.

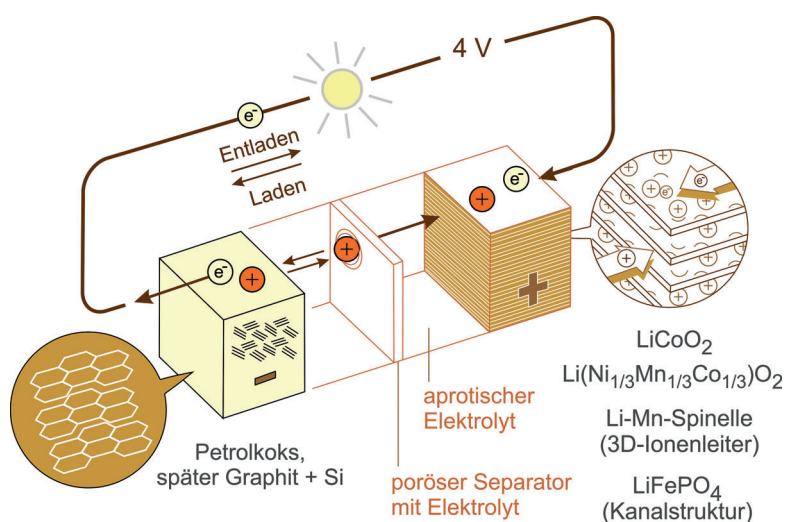
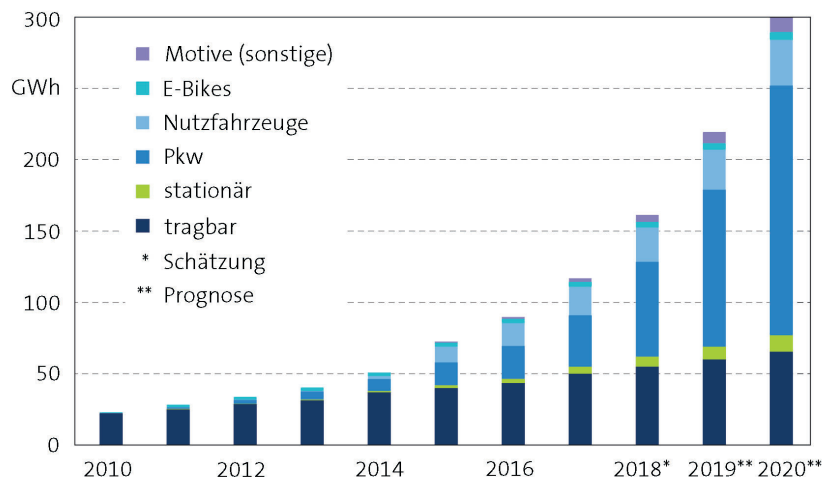


Abb. 3. Prinzip der Li-Ionenbatterie mit schichtstrukturierten Li-Interkalationsverbindungen wie Li_xCoO₂ als positives Elektrodenmaterial und Graphit als negatives Elektrodenmaterial. Abbildung adaptiert nach J. Jarnestad, Königlich Schwedische Akademie der Wissenschaften



In den letzten zehn Jahren wuchs die Nachfrage nach Lithiumionenbatterien exponentiell. Auf dem Markt sind sie seit 1991. Aus dem Energiemonitoring 2018 des Fraunhofer-Instituts für System- und Innovationsforschung, <https://gdch.link/2n>

Aktuelle Forschung

Obwohl Li-Ionenbatterien erwachsen geworden sind, ist ihre Entwicklung längst nicht abgeschlossen. Sicherheit, Energiedichte und Leistung der Systeme werden stetig verbessert. Gegenwärtig wird weltweit intensiv an weiteren Batterietypen geforscht; diese Forschungsarbeiten gründen auf den ersten Schritten, die Whittingham, Goodenough und Yoshino unternahmen.

In Festkörperbatterien sollen leitfähige Polymere oder Keramiken die entflammbaren aprotischen Elektrolyte ersetzen. Mit hochleitfähigen Li-haltigen Oxiden und Thio-phosphaten sind in den letzten Jahren enorme Erfolge erzielt worden. Li-Metall zu nutzen, wird der Energiedichte den nötigen Schub geben.

Wir erleben zurzeit eine Renaissance von metallischem Li als negativem Elektrodenmaterial, das erinnert ein wenig an den Untertitel von J. R. R. Tolkiens „Der Hobbit“: there and back again. Dabei dreht

man sich aber keineswegs im Kreis, alles hat und braucht seine Zeit.

Die Reihenfolge der Laureaten – Whittingham, Goodenough, Yoshino – zeichnet den Anfang der Evolution des Systems Li-Batterie nach Lit.¹⁰⁾ nach. Ihr Anfang ist aktueller denn je. Der Preis ist stellvertretend als Auszeichnung an alle zu verstehen, die wichtige Beiträge zur Verwirklichung von Li-Ionenbatterien geleistet haben. Es wäre ein Leichtes, diese kurze Liste mit einer Reihe von Wissenschaftlern fortzusetzen, die vergleichbare Forschungs- und Denkleistungen erbracht haben, um Li-Ionenbatterien zu etablieren.^{6,11)}

Nicht nur Lithium

Zur Batterieforschung gehören mittlerweile nicht mehr nur Batterien mit Li als Ladungsträger. Lithium, das neben Wasserstoff und Helium leichteste Element, ist als kleines Kation in Festkörpern sehr mobil. Batterien mit Li sind daher besonders leistungsstark und haben eine hohe gravimetrische Energiedichte. Systeme mit dem in der Erdkruste viel häufiger vorkommenden Natrium werden aber ebenfalls intensiv studiert. Auch andere Ladungsträger wie Fluor oder Calcium sind Thema auf Batteriekonferenzen.

Zukünftige Batterietechnologien schließen Li-Sauerstoff-, Na-Sauerstoff- und Li-Schwefelbatterien mit ein. In Li-Sauerstoffbatterien wird elementares Lithium mit O₂, je nach Reaktionsbedingungen, zu Lithiumperoxid umgesetzt. Parasitäre Reaktionen zu unterdrücken und die Reaktion reversibel zu gestalten, bedarf aber noch der Grundlagenforschung. Zum Beispiel ist Li₂O₂ ein schlechter ionischer und elektronischer Leiter, und unser Wissen über die zugrundeliegende Defektchemie und Ionentransporteigenschaften der Per- oder Superoxide von Li und Na ist bis auf wenige Publikationen¹²⁾ eher terra incognita. Ganz zu schweigen von der exakten Beschreibung der elektronischen und dielektrischen Eigenschaften dieser Materialien. In den nächsten Jahren werden uns daher Li-Batterien ähnlich dem Typus begleiten, wie wir ihn jetzt nutzen.

Forschung, Klima, Forschungsklima

Der diesjährige Nobelpreis für Chemie an einige Batteriepioniere ist schon lange gefordert worden. Er verleiht den Materialwissenschaftlern und Elektrochemikern die notwendige Motivation, sich weiterhin mit viel Engagement nachhaltigen und ökologisch unbedenklichen Energiespeichersystemen zu widmen. Er ist auch ein Zeichen an die Wissenschaftsnationen, die Disziplin Elektrochemie und Festkörperelektrochemie an den Universitäten und Forschungsinstituten zu stärken.

Der Preis wird auch den Arbeitsgruppen guttun, meine eingeschlossen, die nicht an den hot topics der Batterieforschung arbeiten, sondern sich eher Randthemen und festkörperphysikalischen Fragen widmen, bei denen sich eine Anwendung nicht direkt erschließt. Dies betrifft zum Beispiel grundlegende Untersuchungen zur Kopplung von elektronischem mit ionischem Ladungstransport oder Studien zur Beziehung zwischen translatorischer und rotatorischer Dynamik in Li-Ionenleitern.



Martin Wilkening, Jahrgang 1977, ist seit 2016 Direktor des Instituts für Chemische Technologie von Materialien der TU Graz. Er bearbeitet Grundlagenfragen zur Na-, Li-, und F-Ionendynamik in metastabilen, nanostrukturierten Elektrolyten und (biosynthetisierten) Aktivmaterialien. wilkening@tugraz.at

Dass der Nobelpreis gerade in diesem Jahr für Batterieforschung vergeben wird, spiegelt die gegenwärtigen klimapolitischen Diskussionen. Steigende Bevölkerungszahlen und ein zunehmender Pro-Kopf-Energiebedarf bedürfen mehr als nur prestigeträchtiger Alibi-Einzellösungen, sondern einer echten Veränderung, einer Umkrempelung unserer Art zu leben. In einiger Zukunft werden fossile Brennstoffe unsere Wirtschaft nicht mehr bestimmen. Klimaneutrale Möglichkeiten zu Energiekonversion auszubauen, wird unsere Volkswirtschaften verändern und sie von einer zentralen zu einer dezentralen Energieversorgung führen. Leistungsfähige stationäre Energiespeicher, inklusive der Batterien in E-Fahrzeugen, sind dazu dringend nötig, denn sie müssen die Elektrizität aus Sonnenenergie und Windkraft speichern. In diesem Sinne hat auch das Nobelpreiskomitee folgerichtig erwähnt: Die Preisträger haben dazu beigetragen, uns in eine Zukunft frei von fossilen Brennstoffen zu führen.

Aber Vorsicht. Wir müssen auf umweltfreundliche, gut verfügbare Materialien setzen, nachhaltige Recyclingprozesse entwickeln und Kreislaufwirtschaft etablieren, um uns vor ungewollten und versteckten CO₂-Emissionen zu schützen. Ein solches Material ist übrigens auch Goodenoughs LiFePO₄. In meiner Arbeitsgruppe entwickeln wir biologisch eine energiesparsame Synthesemethode für dieses Kathodenmaterial, nämlich mit Viren. Mit LiFePO₄ lassen sich zwar keine Batterien mit einer Spannung größer 4 V bauen, und auch die Energiespeicherdichte ist geringer als bei anderen Kathodenmaterialien. Aber für nachhaltige, stationäre Speicher ist LiFePO₄ ebenso wie Na-haltige Elektrodenmaterialien eine Überlegung wert.

Es gibt also Hoffnung für die Menschen. Denn die Abkehr von fossilen Brennstoffen und der dazugehörigen Weltwirtschaft hat längst begonnen. Der Chemienobelpreis dieses Jahres ist ein weiteres Zeugnis dieses Wandels, dessen elektrochemischer Start in den 1970er Jahren liegt. <<

- 1) M. S. Whittingham, F. R. Gamble, *Mater. Res. Bull.* 1975, 10, 363–371; B. G. Silbernagel, M. S. Whittingham, *J. Chem. Phys.* 1976, 64, 3670; M. S. Whittingham, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1974, 328–329; M. S. Whittingham, Batterie à Base de Chalcogénures, Belgian patent no. 819672, 1975
- 2) M. S. Whittingham, *Science* 1976, 192, 1126–1127
- 3) J. B. Goodenough, K. Mizushima, Fast Ion Conductors. US patent no. 4,357,215, 1982; K. Mizushima, P. C. Jones, P. J. Wiseman, J. B. Goodenough, *Mater. Res. Bull.* 1980, 15, 783–789
- 4) A. K. Padhi, K. S. Nanjundaswamy, J. B. Goodenough, *J. Electrochem. Soc.* 1997, 144, 1188–1194
- 5) J. B. Goodenough, *J. Power Sources* 2007, 174, 996–1000
- 6) Y. Nishi, *Chem. Rec.* 2001, 1, 406–413
- 7) M. B. Armand, Intercalation Electrodes, *Materials for Advanced Batterie* [Hrsg.: D. W. Murphy, J. Broadhead, B. C. H. Steele] *NATO Conf. Ser. (VI Mater. Sci.)*, Springer, Boston, USA, 1980, 2, 145–161; M. Armand, P. Touzain, *Mater. Sci. Eng.* 1977, 31, 319–329
- 8) A. Yoshino, K. Sanechika, T. Nakajima, US patent, no. 4,668,595, 1987; A. Yoshino, K. Sanechika, T. Nakajima, Japanese patent, no. 1989293, 1985; A. Yoshino, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2012, 51, 5798–5800
- 9) E. Peled, *J. Electrochem. Soc.* 1979, 126, 2047–2051; R. Fong, U. von Sacken, J. R. Dahn, *J. Electrochem. Soc.* 1990, 137, 2009–2013
- 10) O. Ramström, Lithium-Ion Batteries, *Scientific Background on the Nobel Prize in Chemistry* 2019
- 11) M. Winter, B. Barnett, K. Xu, *Chem. Rev.* 2018, 118, 11433–11456
- 12) O. Gerbig, R. Merkle, J. Maier, *Adv. Mater.* 2013, 25, 3129–3133



Die Physiologie-Nobelpreisträger 2019: William G. Kaelin Jr., Sir Peter J. Ratcliffe und Gregg L. Semenza.

NOBELPREIS IN PHYSIOLOGIE ODER MEDIZIN: Tief durchatmen

Der Nobelpreis für Physiologie oder Medizin 2019 geht an zwei Amerikaner und einen Briten: William Kaelin, Gregg Semenza und Peter Ratcliffe haben „die Basis geschaffen für unser Verständnis darüber, wie Sauerstoff unseren Zellstoffwechsel und physiologische Funktionen beeinflusst“, begründet das Nobelkomitee seine Entscheidung. „Ihre Entdeckungen haben den Weg geebnet für neue Strategien im Kampf gegen Blutarmut, Krebs und viele andere Krankheiten.“

Liegt der Sauerstoffgehalt der Luft unter 18 Prozent, fühlen wir Menschen uns unwohl. Zellen spüren

unterschiedliche Sauerstoffkonzentrationen nicht nur, sondern reagieren auch darauf. So entsteht in der Niere immer dann viel des Hormons Erythropoetin, kurz Epo, wenn zu wenig Sauerstoff im Blut vorhanden ist. Wie der Körper diesen Mangel feststellt, haben Semenza und Ratcliffe erforscht. Sie haben Abschnitte im Erbgut entdeckt, welche die Aktivität des Epo-Gens regulieren, und Proteine, die diese Abschnitte steuern. Wie Kaelin zeigte, entscheidet bei bestimmten vererbten Tumorerkrankungen die Sauerstoffkonzentration mit, ob sich Krebszellen vermehren oder nicht.

Trendbericht

Theoretische Chemie

Multiskalenansatz für molekulare Mechanismen energieumwandelnder Enzyme; relativistische quantenchemische Berechnungen: effizient durch lokale und nichtlokale zwei- und vierkomponentige Vielteilchen-Hamiltonoperatoren; Schwingungsspektroskopie mit Ab-initio-Molekulardynamik.

Molekulare Mechanismen der biologischen Energieumwandlung

Biologische Systeme benötigen konstant Energie, um Stoffwechsel, Wachstum und andere Funktionen aufrechtzuerhalten. Dazu hat die Natur ein System aus Proteinen entwickelt, das chemische und Lichtenergie einfängt und in andere Energieformen umwandelt, welche die Zelle nutzt.¹⁾ Die Fortschritte in der Strukturbiochemie, insbesondere die Entwicklung der Kryoelektronenmikroskopie (Kryo-EM), haben ermöglicht, diese molekularen Maschinen in atomarer Auflösung abzubilden. Zusammen mit biochemischen, biophysikalischen und computergestützten Experimenten lässt sich damit ein detail-

liertes molekulares Verständnis über den Mechanismus des biologischen Energietransfers erreichen. Dieses hilft nicht nur, biochemische und biomedizinische Fragen zu beantworten, sondern wird in Zukunft künstliche Proteine ermöglichen. Diese könnten etwa für Energietechnik relevant sein.

Enzyme in Atmungskette und Photosynthese

Ein Fokus unserer Forschungsgruppe liegt auf Maschinen zur biologischen Energieumwandlung, die durch Ladungs- und protonenge-

koppelte Elektronentransferreaktionen (charge transfer, CT, beziehungsweise proton-coupled electron transfer, PCET) angetrieben werden. Diese Reaktionen bilden die chemische Grundlage für Enzyme der Atmungskette und Photosynthese. Gegenstand aktueller Forschung ist, wie Konformationsänderungen und elektrostatische Effekte diese PCET-Reaktionen über Entfernungen größer als 300 Å beeinflussen und wie molekulare Schalter diese Prozesse effizient machen.

Um die Funktion dieser Systeme zu klären, entwickeln und nutzen wir computergestützte Methoden für verschiedene Zeitskalen und Systemgrößen, die Multiskalenmodelle. Derzeit eingesetzte Methoden sind quantenchemische Ab-initio-Techniken und Hybride-Quantenmechanik/molekulare-Mechanik(QM/MM)-Rechnungen bis hin zu klassisch atomistischen Molekulardynamik(MD)-Simulationen inklusive Freie-Energie-Methoden, grobkörnige (coarse-grained) MD-Simulationen und Kontinuumsansätze. Dadurch lassen sich die Eigenschaften von Systemen mit bis zu Millionen von Atomen auf Zeitskalen von 10^{-15} bis 10^{-6} Sekunden studieren (Abbildung 1). Diese Ansätze ergänzen experimentelle Techniken und dienen als



DREI FRAGEN AN DEN AUTOR: Ville Kaila

Welcher Trend ist im letzten Jahr aufgekommen, den Sie so nicht erwartet haben?

Der Aufstieg der Kryoelektronenmikroskopie für die Bestimmung von hochaufgelösten Proteinstrukturen.

Welche Erkenntnis des letzten Jahres war für Ihre Forschung besonders wichtig?

Die Möglichkeit, große biologische Systeme mit Hilfe von multi-scale

Methoden mit verschiedenen Zeit- und Größenskalen zu untersuchen.

Ihre Forschung in 140 Zeichen?

Wir untersuchen molekulare Mechanismen von Enzymen, die für die biologische Energieübertragung verantwortlich sind.

Ville R. I. Kaila ist seit 2019 Professor am Lehrstuhl für Biochemie an der Universität Stockholm.

Werkzeuge, um mechanistische Hypothesen auf molekularer Ebene aufzustellen und zu prüfen.

Protonen-Elektronen-Übertragungsmechanismen

Energieumwandlung erfolgt in der Natur durch den gekoppelten Transfer von Protonen und Elektronen (PCET-Prozesse). Während sich diese Reaktionen in vielen chemischen Systemen häufig innerhalb weniger Bindungen abspielen, haben biologische PCET-Reaktionen größere Reichweiten. Diese Prozesse bauen über eine biologische Membran einen elektrochemischen Ionengradienten auf, den die Zelle zum Betreiben ihrer energieverbrauchenden Prozesse nutzt. Derartige PCET-Reaktionen zu modellieren ist jedoch schwierig, da sie sowohl eine genaue Beschreibung der Prozesse zum Lösen und Bilden chemischer Bindungen erfordert als auch die genaue Abbildung der Konformationsdynamik des Proteins und seiner Umgebung.

In den letzten Jahren haben wir uns auf eines der größten Enzyme in Mitochondrien und Bakterien konzentriert: Den 1 MDa großen Komplex I der Atmungskette (NADH: Ubichinonoxidoreduktase). Diese redoxgetriebene Protonenpumpe fungiert als Einstiegspunkt für Elektronen in aerobe Atmungsketten. Komplex I empfängt Elektronen von Nikotinamidadenindinukleotid (NADH), einem biologischen Elektronenträger, und überträgt sie durch quantenmechanische Tunneleffekte über eine 100 Å lange Kette von Eisen-Schwefel-Zentren (FeS) auf Ubichinon (Q). Das Enzym koppelt die freigesetzte Energie aus der Reduktion von Ubichinon zu Ubichinol (QH₂) an den Transport von Protonen, die bis zu 200 Å vom aktiven Zentrum entfernt sind. Obwohl die Molekülstrukturen von Komplex I aus verschiedenen Organismen bestimmt wurden, ist der Ursprung dieses Fernwirkungseffekts noch unklar.

Mit klassischen atomistischen MD-Simulationen haben wir die Dynamik von Komplex I auf der Mikrosekunden-Zeitskala in ver-

schiedenen Protonierungs- und Redoxzuständen untersucht.¹⁻⁴⁾ Um die Simulationszeitskala in Richtung Millisekunden zu verschie-

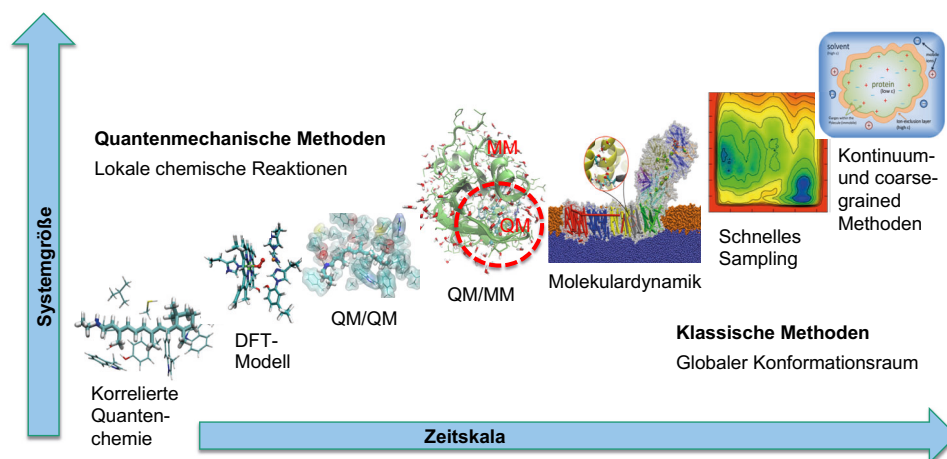


Abb. 1. Mit molekularen Multiskalensimulationen lassen sich Struktur, Energie und Dynamik biomolekularer Systeme in einem breiten Spektrum von Zeitskalen und räumlichen Auflösungen untersuchen.

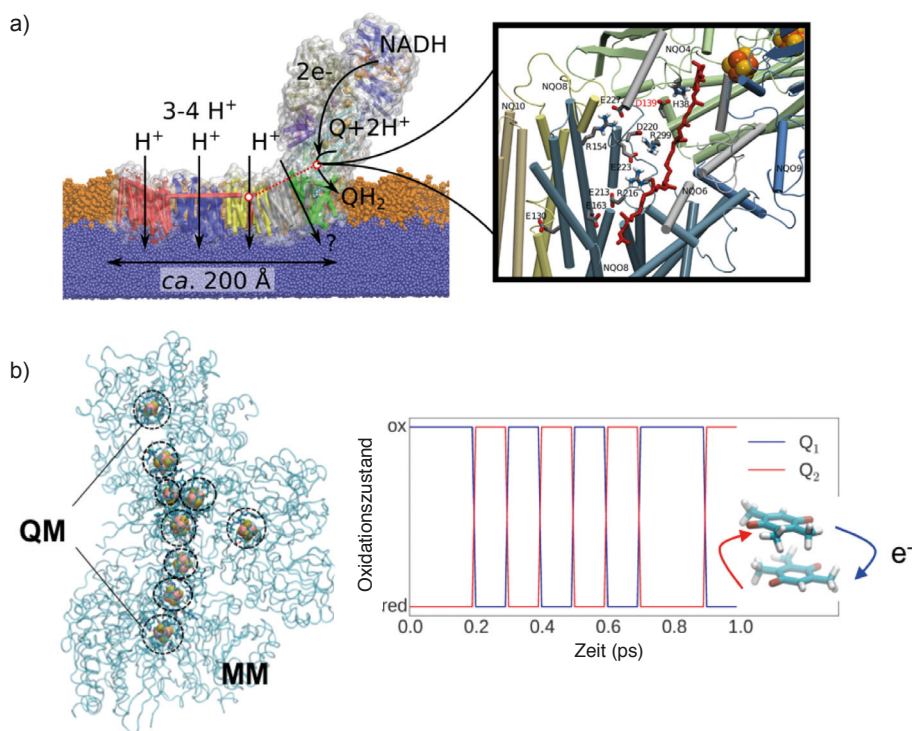


Abb. 2. Biologische Energieumwandlung im Komplex I der Atmungskette.

a) Struktur und Funktion von Komplex I. Links: Elektronentransfer in der hydrophilen Domäne von Komplex I führt zur Reduktion von Chinon (Q) zu Chinol (QH₂), das durch langreichweitige Effekte an das Pumpen von Protonen (H⁺) über die Membrandomäne gekoppelt ist. Rechts: Die Reduktion von Chinon (rot) führt zu einer lokalen Ladungsänderung, die durch eine kombinierte Seitenketten- und Ladungsverschiebung die Konformationen in der Membrandomäne ändert. Dargestellt ist die Kette geladener Aminosäuren (hauptsächlich Glutamate und Arginine), die für den Kopplungseffekt verantwortlich ist.²⁾

b) Links: QM/MM-Simulationen mit mehreren quantenmechanischen Bereichen. Rechts: Elektronenaustausch zwischen Chinon und Semichinon aus einer QM/QM-MD-Trajektorie mit nicht-adiabatischem Surface Hopping.

ben, nutzen wir grobkörnige MD-Simulationen, mit denen wir Konformationsänderungen und Wechselwirkungen des Proteins mit der umgebenden biologischen Membran erforschen.⁵⁾ Um seltene Ereignisse wie die Dissoziation eines Substrats vom aktiven Zentrum des Enzyms oder großräumige Konformationsübergänge in der Proteinstruktur zu erforschen, die durch konventionelle MD-Simulationen nicht zugänglich sind, wenden wir Freie-Energie-Methoden an.

Um bestimmte chemische Reaktionsschritte zu betrachten, setzen

wir QM/MM-Simulationstechniken ein. Hierbei wird mit Dichtefunktionaltheorie (DFT) der reaktive Bereich quantenmechanisch modelliert, während die biologische Umgebung mit einem klassischen Kraftfeld dargestellt wird. Unsere klassischen MD-Simulationen dienen dafür als Ausgangspunkt, um die molekulare Struktur von Zwischenzuständen abzuleiten.^{3,4,6)} Die hierüber erhaltenen Einblicke verwenden wir dann in QM/MM-Simulationen, um Energetik und Dynamik wichtiger katalytischer Schritte zu charakterisieren.

Oft sind QM/MM-Simulationen auf eine quantenmechanische Region begrenzt. Daher entwickeln wir Methoden, mit denen sich mehrere klassisch eingebettete quantenmechanische Regionen gleichzeitig modellieren lassen. So ließ sich unser Ansatz bereits um einen Surface-Hopping-Algorithmus erweitern, der Elektronen- und Ladungstransferprozesse behandelt (Abbildung 2, S. 53). Dies ermöglicht ebenso, erweiterte Systeme wie die 100 Å lange Elektronentransferkette in Komplex I zu untersuchen.

Unsere Multiskalen-Simulationen charakterisieren Reaktionsschritte im Ladungstransferprozess über 300 Å in Komplex I. Damit können wir den Hydridtransfer an der NADH-Bindestelle zum nachfolgenden Elektronentransferprozess über die 100 Å lange FeS-Kette bis hin zur Ubichinon-Reduktion,^{3,6,7)} welche die Protonenpumpe in der Membrandomäne aktiviert, berechnen.²⁻⁴⁾ Komplex I reguliert durch globale Konformationsänderungen, eine Serie von gekoppelten elektrostatischen Schaltern und Änderungen in der Hydratation den Protonentransfer (Abbildung 2).¹⁻⁷⁾ Die zentralen funktionellen Motive sind in der Komplex-I-Superfamilie konserviert. Sie lassen sich in künstliche Proteine integrieren, um generische mechanistische Prinzipien zu isolieren und zu entschlüsseln.

Außer Komplex I untersuchen wir andere PCET-Maschinen wie Cytochrom-c-Oxidase (CcO)⁸⁻¹⁰⁾ und Photosystem II.¹¹⁾ In CcO dient die durch Sauerstoffaktivierung und -reduktion freigesetzte Energie dazu, Protonen gegen ein Membranpotenzial von zirka 0,2 V über eine biologische Membran zu pumpen. Ähnlich wie bei Komplex I sind nach unseren Simulationen elektrostatische Effekte und Hydratationseffekte wichtige Funktionselemente in diesem PCET-Prozess (Abbildung 3).¹²⁾ Ziel unserer Arbeit am Photosystem II (PSII) ist es zu verstehen, wie die chlorophyllbasierte Photochemie den

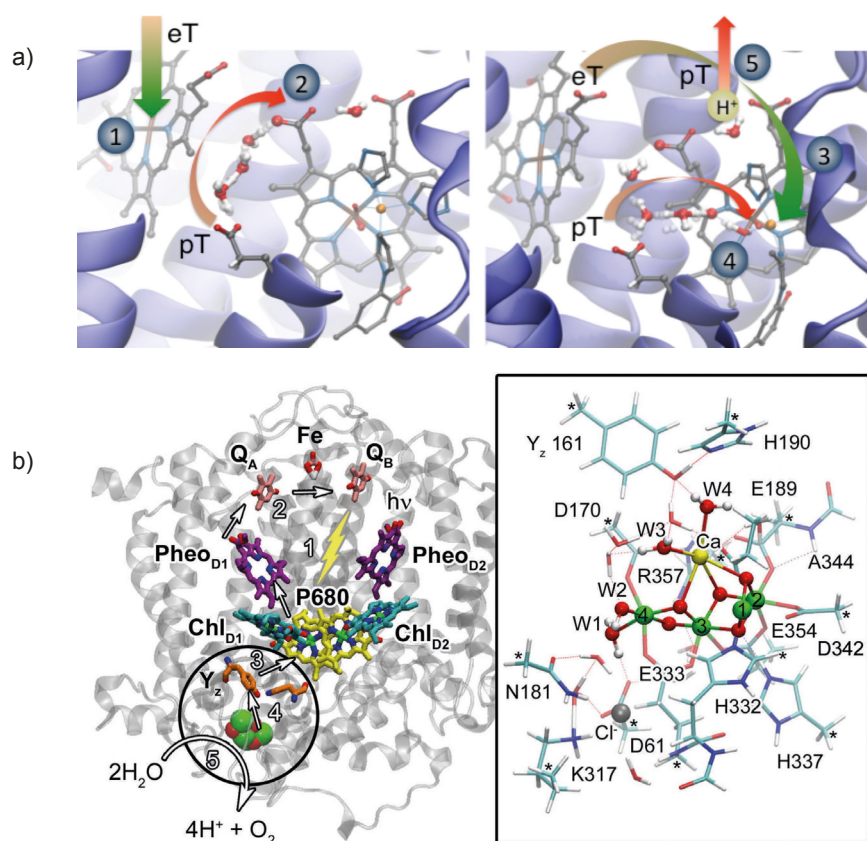


Abb. 3. Biologische Energieumwandlung in Cytochrom-c-Oxidase und Photosystem II.

a) Die Cytochrom-c-Oxidase verwendet durch starke Wasserstoffbrücken verbundene Wassermoleküle, um die Barrieren für Protonentransferreaktionen (pT) in der Nähe des aktiven Zentrums zu modulieren. Die Wasserketten ordnen sich nach der Variation des elektrischen Feldes aufgrund des Elektronentrfers (eT) zwischen den beiden in der Abbildung gezeigten Häm-Gruppen an. (1) Die Reduktion von Häm a (2) senkt die pT-Barriere zur Pumpstelle, und (3) die Protonierung der Pumpstelle (4) senkt die pT-Barriere zum aktiven Zentrum. (5) Die Protonierung des aktiven Zentrums führt zum Ausstoß des gepumpten Protons durch die Membran.⁹⁾

b) Struktur und Funktion von Photosystem II. Links: Lichtabsorption an einer zentralen Chlorophyllstelle (P680) löst Ladungstrennung und Reduktion von Chinonen (QA/QB) aus. Das kationische Loch an P680 wird durch Wasseroxidation am aktiven Zentrum am Mn₄O₅Ca-Cluster wieder reduziert. Rechts: Strukturmodell zur Untersuchung des Wasserspaltungsmechanismus von PSII mithilfe von DFT-Berechnungen. Jüngste Daten legen nahe, dass die Reorganisation des Wassermoleküls W3 vom Calcium zu einem Mangan in hoher Oxidationsstufe den Wasseroxidationsprozess antreibt.¹¹⁾

Abb. 4. Charakterisierung von am Computer vorhergesagten Photozyklus-Intermediaten der lichtgetriebenen Na^+ -Pumpe KR2. Dazu wurden mit μs -MD-Simulationen Strukturen für die einzelnen Zwischenzustände abgeleitet. Auf deren Grundlage wurden durch Coupled-Cluster-Theorie Hybrid-QM/MM-Berechnungen Absorptionsspektren aus den Trajektorien bestimmt. Die berechneten Spektren stimmen gut mit den experimentellen Absorptionsspektren überein.¹⁴⁾

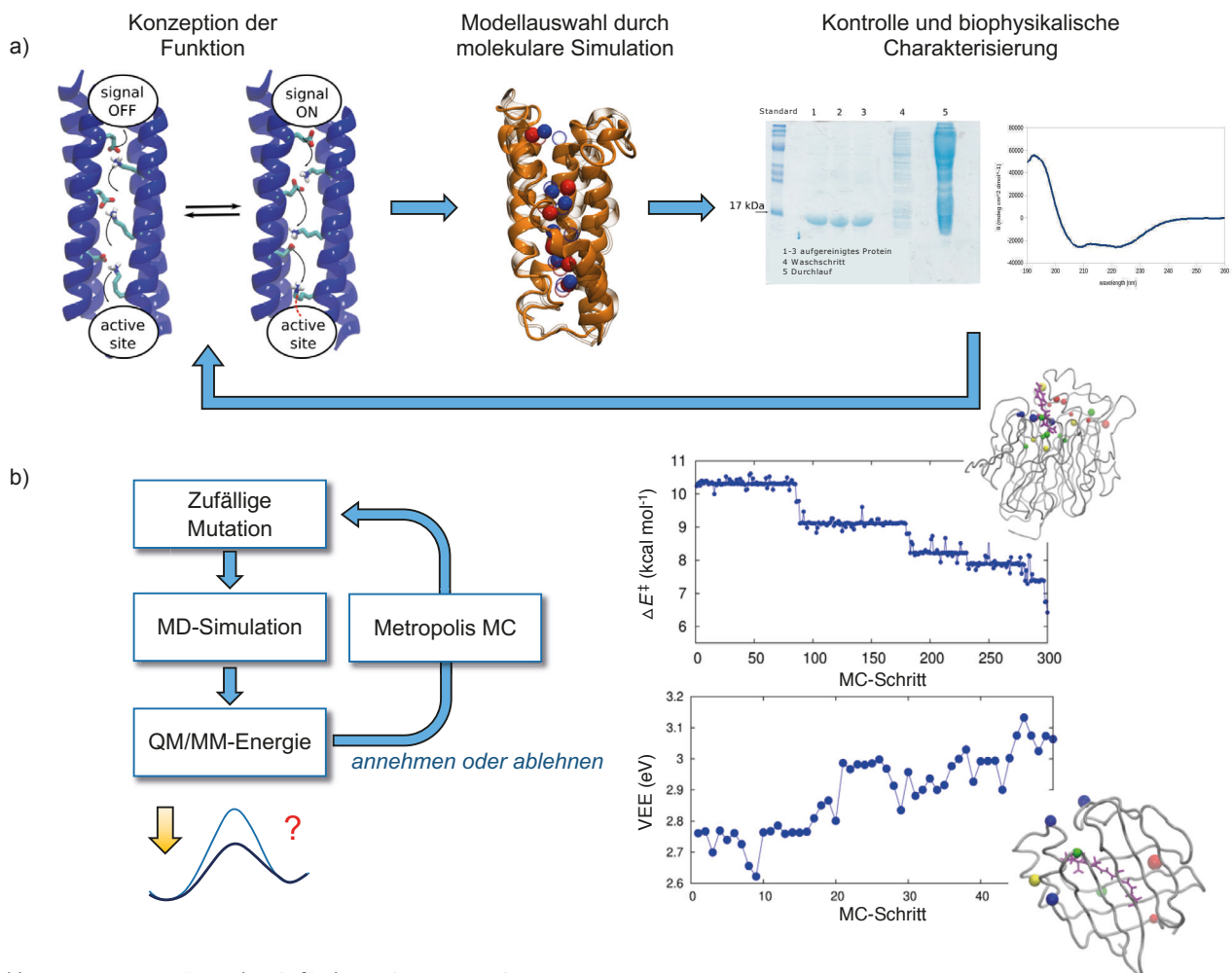
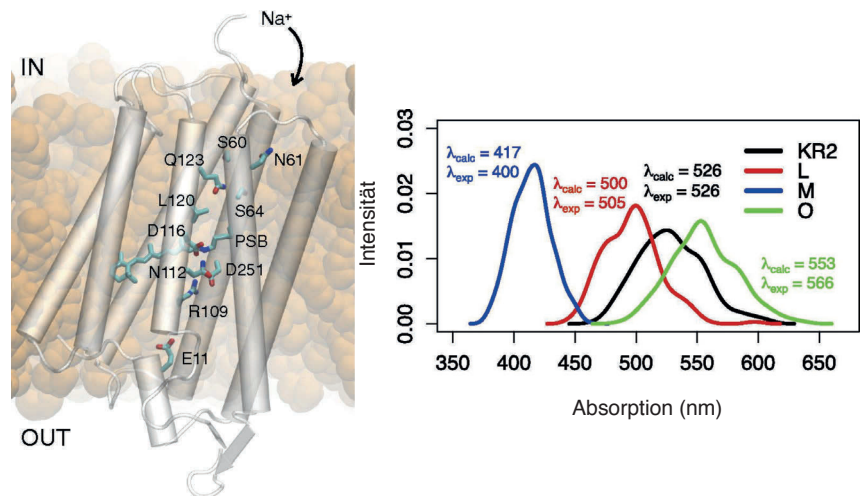


Abb. 5. Computergestützte Chemie für das Design von Proteinen.

a) Links: Molekulare Motive in Proteinen, die für eine weitreichende Kopplung verantwortlich sind, werden am Computer in künstliche Helixbündelproteine eingeführt, um einen ferngesteuerten Proteinschalter zu konstruieren. Mitte: Verschiedene Modelle werden durch explizite molekulare Simulationen ausgewählt. Rechts: Die in silico designten Proteine werden in *E. coli* exprimiert und experimentell charakterisiert.²⁰⁾

b) Links: Optimierung von katalytischen und Lichtabsorptions-Eigenschaften durch eine QM/MM-Monte-Carlo-Methode. Zufällige Mutationen werden eingeführt, gefolgt von klassischer Relaxation, QM/MM-Energieberechnung und Zurückweisung oder Akzeptanz der eingeführten Mutation basierend auf einem Metropolis-Monte-Carlo-Kriterium. Rechts: Optimierung der katalytischen Aktivität durch Senkung der Reaktionsbarriere für eine künstliche Diels-Alderase und Veränderung der Absorptionsenergie in einem künstlichen Retinalprotein.

Wasserspaltungsprozess im aktiven $\text{Mn}_4\text{O}_5\text{Ca}$ -Zentrum des Enzyms steuert (Abbildung 3b, S. 54).

PSII ist das einzige natürliche System, das Oxidation und Spaltung von H_2O katalysiert. Es ist damit ein ideales Modell, um biomimetische Katalysatoren zu entwerfen. Möglicherweise treibt eine redoxgetriebene Reorganisation der Wassernetzwerkstruktur in der Nähe des sauerstoffentwickelnden PSII-Zentrums den Wasseroxidationsprozess an und dient als Substratquelle für die Sauerstoffbildung.⁸⁾

Lichteinfangmechanismen in photobiologischen Systemen

Wie Lichtenergie in biologische Systeme aufgenommen wird, ist Grundlage etwa für die Photosynthese. Die zentrale Frage ist: Wie wirken verschiedene biologische Umgebungen auf die Lichteinfangseigenschaften von Molekülen, indem sie die Biochromophore und die biologische Umgebung elektrostatisch, mechanisch, durch exzitatorische Kopplung oder durch Polarisierung beeinflussen?^{12–17)}

Photobiologische Systeme untersuchen wir mit korrelierten quantenchemischen Ab-initio-Methoden, mit denen sich elektronisch angeregte Zustände genau analysieren lassen.^{12–15)} Die systematische Reduktion des virtuellen Raums kombiniert mit anderen rechnerischen Näherungen wie Laplace-Transformations-Methoden hat ermöglicht, Systeme mit mehreren hundert Atomen mit großen Basisätzen zu behandeln.^{12–15)} Solche Methoden sind nötig, um lichtgetriebene Energieumwandlungssysteme quantitativ zu behandeln (Abbildung 4). Unsere Berechnungsmethode eignet sich, um die Lichteinfangmechanismen von Rhodopsinen und künstlich hergestellten Retinalbindungsproteinen,^{13,15,16)} Typ-I- und -II-Photosystemen,¹⁴⁾ das Hummerprotein Crustacyanin¹²⁾ und das photoaktive gelbe Pro-

tein¹⁷⁾ zu untersuchen. Neueste Analysen betreffen die Charakterisierung der optischen Eigenschaften lichtgetriebener Ionenpumpen in verschiedenen Photozyklusstadien, die sich aus klassischen Simulationen ableiten.¹³⁾

Mechanismen globaler Kopplungseffekte und Proteindesign

Die grundlegenden Prinzipien der biophysikalischen Kraftausbreitung lassen sich mit künstlichen Proteinen ermitteln. Nach der Maquette-Methode¹⁹⁾ konzipierte Proteine haben eine ähnliche Funktionalität wie natürliche Proteine, aber ein anderes Gerüst. Hier lässt sich beispielsweise ein elektrostatischer Schalter konstruieren, der durch Konformationsänderungen katalytische Aktivität moduliert ähnlich wie in Komplex I oder dem molekularen Chaperon Hsp90. Als Grundlage dienen einfach helikale Gerüste, die funktionelle Motive enthalten (Abbildung 5a).

Zudem optimieren wir die katalytischen Eigenschaften von Enzymen und modulieren die Lichtabsorption proteingebundener Chromophore. Dafür eignen sich computergestützte De-novo-Proteindesign-Methoden und QM/MM-Methoden kombiniert mit Monte-Carlo-Optimierungs-Algorithmen (Abbildung 5b). Die am Computer konstruierten Proteine werden in vitro untersucht und experimentell charakterisiert, wofür wir ein biochemisches Protokoll entwickelt haben.

In der computergestützten Chemie gibt es leistungsstarke Methoden, die biologische Fragen beantworten. Unser Multiskalen-Ansatz lässt uns molekulare Mechanismen von energieumwandelnden Enzymen auf breiten Zeitskalen und Systemgrößen aufklären. <<

Bei diesem Beitrag wurde Ville Kaila unterstützt von seinen Doktoranden Sophie L. Mader und Alexander Jussupow, seiner Postdoktorandin Patricia Saura sowie Ana P. Gamiz-Hernandez, wissenschaftliche Rätin an der Universität Stockholm.

- 1) V. R. I. Kaila, J. Roy. Soc. Interface 2018, 15
- 2) V. Sharma, G. Belevich, A. P. Gamiz-Hernandez et al., Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2015, 112, 11571
- 3) A. P. Gamiz-Hernandez, A. Jussupow, M. P. Johansson, V. R. I. Kaila, J. Am. Chem. Soc. 2017, 139, 16282
- 4) A. Di Luca, A. P. Gamiz-Hernandez, V. R. I. Kaila, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2017, 114, E6314
- 5) A. Jussupow, A. Di Luca, V. R. I. Kaila, Sci. Adv. 2019, 5, eaav1850
- 6) P. Saura, V. R. I. Kaila, J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 5710
- 7) J. Warnau, V. Sharma, A. P. Gamiz-Hernandez et al., Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2018, 115, E8413
- 8) V. R. I. Kaila, M. I. Verkhovsky, M. Wikström, Chem. Rev. 2010, 110, 7062
- 9) S. Supekar, A. P. Gamiz-Hernandez, V. R. I. Kaila, Angew. Chemie Int. Ed. 2016, 55, 11940
- 10) S. Supekar, V. R. I. Kaila, Chem. Sci. 2018, 9, 6703
- 11) I. Ugur, A. Rutherford, V. R. I. Kaila, Biochim. Biophys. Acta – Bioenergetics 2016, 1857, 740
- 12) P. Saura, D. M. Frey, A. P. Gamiz-Hernandez, V. R. I. Kaila, Chem. Commun. 2019, 55, 6078
- 13) A. P. Gamiz-Hernandez, A. Neycheva, R. Send, D. Sundholm, V. R. I. Kaila, Angew. Chem. Int. Ed. 2015, 54, 11564
- 14) C. M. Suomivuori, A. P. Gamiz-Hernandez, D. Sundholm, V. R. I. Kaila, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2017, 114, 7043
- 15) C. M. Suomivuori, N. O. C. Winter, C. Hättig, D. Sundholm, V. R. I. Kaila, J. Chem. Theory Comput. 2016, 12, 2644
- 16) C. M. Suomivuori, L. Lang, D. Sundholm, A. P. Gamiz-Hernandez, V. R. I. Kaila, Chem. Eur. J. 2016, 22, 8254
- 17) X. Zhou, D. Sundholm, T. Wesolowski, V. R. I. Kaila, J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 2723
- 18) A. P. Gamiz-Hernandez, V. R. I. Kaila, Phys. Chem. Chem. Phys. 2015, 18, 2802
- 19) D. E. Robertson, R. S. Farid, C. C. Moser et al., Nature 1994, 368, 425
- 20) Baumgart et al., unveröffentlicht

Relativistische Quantenchemie

Die von Albert Einstein zu Beginn des vorigen Jahrhunderts herausgearbeitete spezielle Relativitätstheorie lieferte den entscheidenden, einheitlichen theoretischen Rahmen, um allgemeingültige Bewegungsgleichungen makroskopischer Objekte zu entwickeln – und zwar unabhängig davon, ob diese sich mit niedriger Geschwindigkeit oder nahezu mit Lichtgeschwindigkeit bewegen.¹⁾ Indem Paul A. M. Dirac die von Einstein postulierten Prinzipien der speziellen Relativitätstheorie in der Entwicklung seiner relativistischen quantenmechanischen Theorie aufgriff,²⁾ schuf er einen theoretischen Rahmen, der bis heute das Fundament der relativistischen Quantenchemie darstellt.^{3–5)}

Konzepte und Beispiele

Das Konzept relativistischer Effekte geht gemäß der Diracschen Theorie auf die Differenz zwischen berechneten Daten zurück, die aus relativistischen quantenchemischen Berechnungen mit endlicher Geschwindigkeit und unendlicher Lichtgeschwindigkeit erhalten wurden. Letztgenannter Fall ist dabei äquivalent zu einer nichtrelativistischen Betrachtung im Rahmen der Schrödingerschen Quantenmechanik.⁶⁾ Im Allgemeinen werden relativistische Effekte in kinematische Beiträge – auch als skalarrelativistische Beiträge bekannt – und magnetische Beiträge, insbesondere die Spin-Bahn-Wechselwirkung, unterschieden. Deren Signifikanz in Atomen steigt in etwa proportional zum Quadrat der Kernladungszahl Z .⁷⁾ Während eine skalarrelativistische Betrachtung nur kinematische relativistische Effekte berücksichtigt, also solche, die auf Korrekturterme für den kinetischen Teil des Hamiltonoperators zurückzuführen sind, berücksichtigt, werden in einem vollrelativistischen Ansatz sowohl kinematische als auch magne-

tische Effekte betrachtet. Der dominante magnetische Effekt ist dabei insbesondere für schwere Elemente die Spin-Bahn-Wechselwirkung. Diese ergibt sich, vereinfacht gesagt, aus der Kopplung des Elektronenspins mit einem induzierten Magnetfeld, welches aus der Bahnbewegung des Elektrons im Feld der Kerne und Elektronen resultiert.

Relativistische Effekte sind allgegenwärtig in der Chemie schwerer Elemente.^{3,4,7–14)} So ist etwa der flüssige Zustand von Quecksilber bei Raumtemperatur eine direkte Konsequenz relativistischer kinematischer Effekte, die eine Schmelzpunktniedrigung um 161 K bedingen.^{15,16)} Darüber hinaus sind kinematische relativistische Effekte dafür verantwortlich, dass Bleiakkumulatoren, also gängige Startbatterien in Autos, die notwendige Spannung für diesen Startvorgang liefern.¹⁷⁾

Neben kinematischen Effekten sind Spin-Bahnwechselwirkungseffekte im Hinblick auf die chemische Bindung und Reaktivität von Schwer-elementkomplexen wichtig.^{18,19)} Wie Beispiele in Studien zur theoretischen Untersuchung von katalytischen Aktivitäten später Übergangsmetall- und f-Elementkomplexe zeigen, sind letztlich Spin-Bahnwechselwirkungen

die treibende Kraft hinter den experimentell beobachteten Reaktionsmechanismen.^{20–22)}

Untersuchungen der chemischen Bindung an Schwer-elementsystemen mit Fokus auf Actinoidenverbindungen – insbesondere Uran – haben in den letzten zwanzig Jahren mit Hilfe relativistischer quantenchemischer Methoden an Bedeutung gewonnen.^{19,23–43)} Was macht dabei die frühen Actinoide, allen voran Uran, so einzigartig – und zwar nicht nur verglichen mit Übergangsmetallen, sondern auch verglichen mit Lanthanoiden? Die zentralen elektronischen Valenzschalen des Urans, die zur Ausbildung einer Bindung zur Verfügung stehen, umfassen neben dem 7s- auch die sieben 5f- und die fünf 6d-Atomorbitale, die in der elektronischen Grundzustandskonfiguration des Uranatoms alle (teilweise) besetzt sind. Wie in Abbildung 1 (S. 58) angedeutet, ist dies eine Folge des Zusammenspiels aus skalarrelativistischen Effekten und Spin-Bahn-Wechselwirkung.

In Anbetracht der Skalierung relativistischer Effekte mit der Kernladungszahl Z^2 für Atome läge es nahe anzunehmen, dass relativistische Effekte für Moleküle, die sich ausschließlich aus leichten Elementen zusammensetzen, vernachläss-



DREI FRAGEN AN DEN AUTOR: Stefan Knecht

Welcher Trend ist im letzten Jahr aufgekommen, den Sie so nicht erwartet haben?

Mich hat die Vielseitigkeit der Maschinellen-Lernen-Ansätze positiv überrascht, die von der Molekulardynamik bis zur Photochemie aufgekommen sind.

Ihre Forschung in 140 Zeichen?

Wir entwickeln quantenchemische Verfahren zur Anwendung auf Elektronenstrukturprobleme in Molekülen aus Elementen des gesamten PSE.

Welche Erkenntnis des letzten Jahres war für Ihre Forschung besonders wichtig?

Die Genauigkeit und Effizienz relativistischer quantenchemischer Rechenverfahren lässt es mittlerweile zu, nicht nur periodische Trends zu erklären, sondern auch Anomalien im PSE. Das eröffnet neue Perspektiven, die Chemie der (super-)schweren Elemente zu verstehen.

Stefan Knecht ist seit 2018 Privatdozent für Theoretische Chemie an der ETH Zürich.

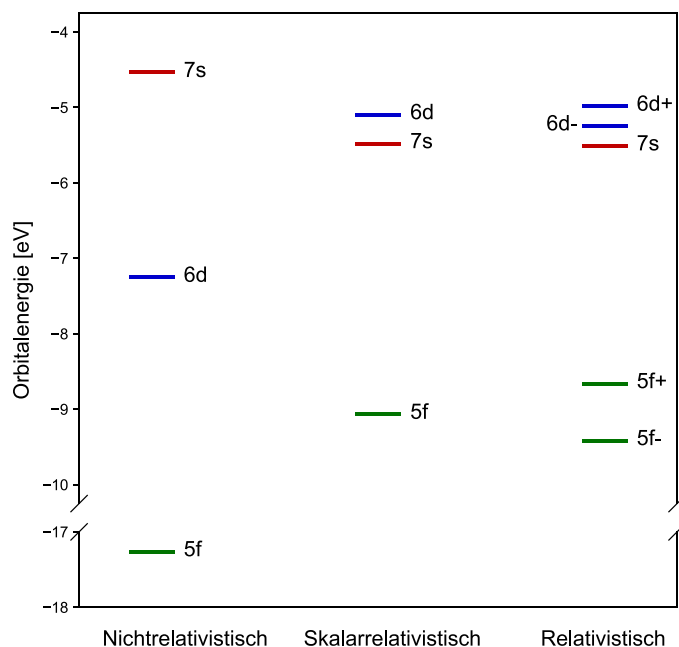


Abb. 1. Valenzatomorbitale des Uranatoms aus nichtrelativistischen (links), skalar- (Mitte) und relativistischen Hartree-Fock-Berechnungen (rechts).

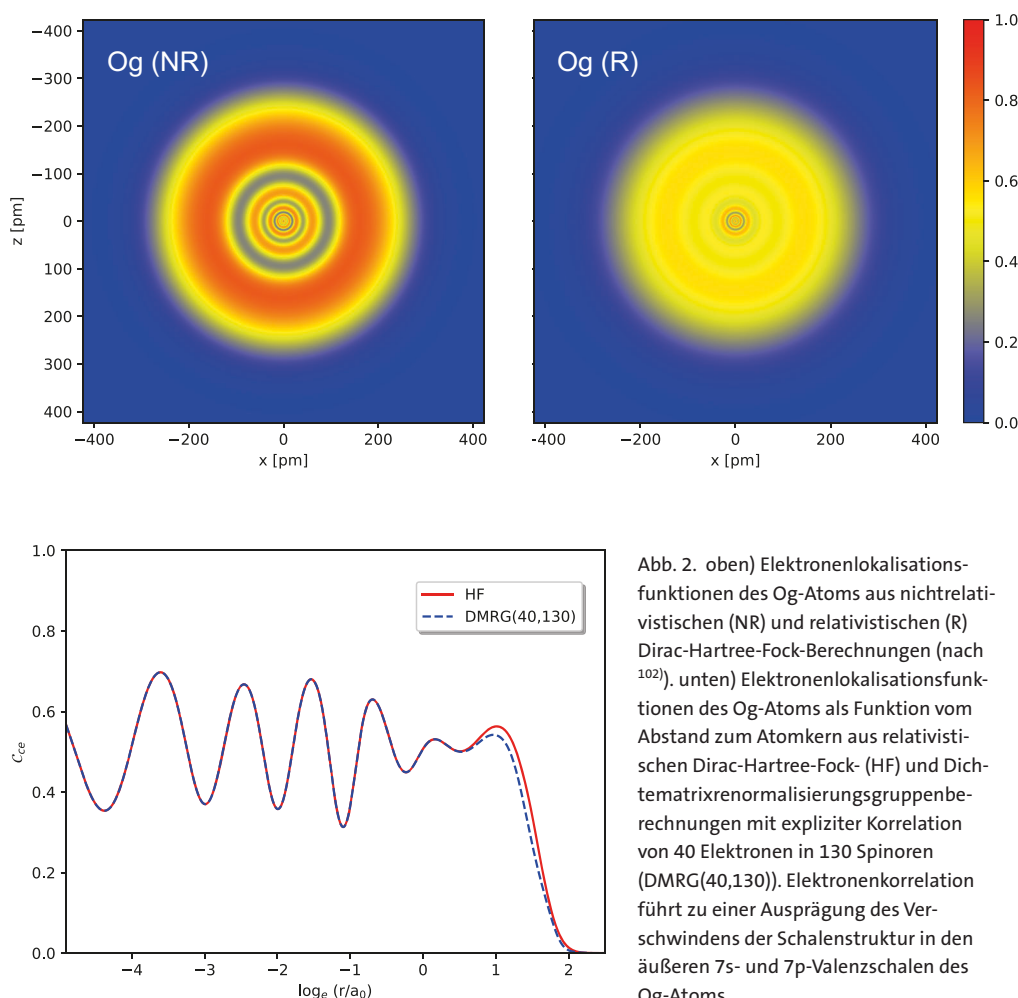


Abb. 2. oben) Elektronenlokalisationsfunktionen des Og-Atoms aus nichtrelativistischen (NR) und relativistischen (R) Dirac-Hartree-Fock-Berechnungen (nach ¹⁰²), unten) Elektronenlokalisationsfunktionen des Og-Atoms als Funktion vom Abstand zum Atomkern aus relativistischen Dirac-Hartree-Fock- (HF) und Dichtematrixrenormalisierungsgruppenberechnungen mit expliziter Korrelation von 40 Elektronen in 130 Spinoren (DMRG(40,130)). Elektronenkorrelation führt zu einer Ausprägung des Verschwindens der Schalenstruktur in den äußeren 7s- und 7p-Valenzschalen des Og-Atoms.

sigbar sind – also vereinfacht gesagt für die obere Hälfte des Periodensystems. Dies ist im Allgemeinen jedoch nicht der Fall. Denn bereits eine qualitative Betrachtung der Photochemie^{44,45)} wie auch der Moleküldynamik in elektronisch angeregten Zuständen organischer Systeme und leichter Übergangsmetallkomplexe^{46–48)} erfordert es, relativistische Effekte einzubeziehen, allen voran die Spin-Bahn-Wechselwirkung. Analog dazu ist das Ziel, chemische Genauigkeit in quantenchemischen Berechnungen der Thermochemie leichter Elemente zu erreichen, nur zu realisieren, indem sowohl Elektronenkorrelations- als auch relativistische Effekte berücksichtigt werden.⁴⁹⁾

Methoden

Es gibt mehrere Grundlagen für in der Praxis effiziente relativistische quantenchemische Berechnungen, die auf solche Moleküle anwendbar sind, die sich aus beliebigen Elementen des Periodensystem⁵⁰⁾ zusammensetzen: lokale und nichtlokale zwei-^{51–59)} und vierkomponentige Vielteilchen-Hamiltonoperatoren^{60,61)} sowie relativistische effektive Kernpotenziale⁶²⁾. Eine Elektronenstrukturtheorie, die mindestens auf qualitativ zuverlässige Vorhersagen über die Chemie (super-)schwerer Elemente abzielt, sollte wenigstens die relativistische Kinematik von kernnahen und Valenzelektronen berücksichtigen (Abbildung 2 oben).¹⁴⁾ Derzeit ist Oganesson mit der Kernladungszahl $Z=118$ das letzte Element im Periodensystem. Allerdings wurde auf Basis relativistischer quantenchemischer Berechnungen bereits ein erweitertes Periodensystem vorgeschlagen, das bis zur Kernladungszahl $Z=172$ reicht.⁶³⁾

Relativistische quantenchemische Untersuchungen der elektronischen Struktur und Moleküleigenschaften von Schwerelementsystemen basieren überwiegend auf Dichtefunktionaltheorie (DFT). Neben originellen Entwicklungen und formalen Ana-

lysen im Rahmen der relativistischen DFT^{64,65)} stehen hier auch hocheffiziente parallele Implementierungen zur Verfügung, etwa für relativistische Allelektronenberechnungen innerhalb des Kohn-Sham-Formalismus der DFT.⁶⁶⁾

Um elektronisch angeregte Zustände zu berechnen, dominierten bisher in der DFT störungstheoretische Ansätze, die auf einem zeitabhängigen Formalismus der Antworttheorie basieren.⁶⁷⁾ Bei der Berechnung wird angenommen, dass die Materie mit schwachen elektromagnetischen Feldern wechselwirkt. Neue Entwicklungen umfassen jedoch auch eine explizite Propagation der Kohn-Sham-Gleichungen in Echtzeit.^{68–70)} Sie ermöglichen es etwa, molekulare (Schwerelement-)Systeme in starken Laserfeldern zu betrachten, wie sie unter anderem in der Femto- und Attosekundenlaserspektroskopie zum Einsatz kommen.

Modellierung

In der Modellierung der elektronischen Struktur von Oberflächen und Festkörpern stehen unter Verwendung von Superzellen und periodischen Randbedingungen seit kurzem nicht nur solche Implementierungen zur Verfügung, die auf Ebene-Wellen-Basisätzen basieren. Es gibt nun auch effiziente Formulierungen mit atomzentrierten gaussfunktionsbasierten Basisätzen.⁷¹⁾

Obschon relativistische DFT-Berechnungen für viele Systeme zuverlässig elektronische Strukturen und molekulare Eigenschaften liefern, sind sehr genaue Vorhersagen magnetischer Eigenschaften ein Problem, etwa chemische Verschiebungen in der NMR-Spektroskopie^{72–74)} oder g-Tensoren in der ESR-Spektroskopie^{75,76)}. Denn die Dichtefunktionalnäherungen – besonders bei Betrachtung offenschaliger Systeme – lassen sich nur bedingt systematisch verbessern.⁶⁴⁾

Wellenfunktionsbasierte relativistische Elektronenkorrelationsmethoden⁷⁷⁾ lassen es zu, Elektro-

nenkorrelation und relativistische Effekte gleichzeitig und gleichwertig zu betrachten.⁷⁸⁾ Zudem erlauben sie eine adäquate und systematisch verbesserbare Beschreibung der oft komplexen Elektronenstruktur (offenschaliger) Schwerelementkomplexe in elektronischen Grund- und angeregten Zuständen. Dazu dienen spezialisierte Single-Referenzmethoden in der Regel basierend auf einem Coupled-Cluster- oder Coupled-Cluster-artigem Ansatz,^{79–82)} effiziente und parallele Multireferenz-Störungstheorie sowie Multireferenz-Konfigurationswechselwirkungsmethoden.^{83,84)}

Erfolg versprechen Formulierungen und Implementierungen neuer relativistischer Wellenfunktionsmethoden wie die Dichtematrixrenormalisierungsgruppe (DMRG)^{85–87)} oder die Heat-Bath-Konfigurationswechselwirkungsmethode.⁸⁸⁾ Diese haben sich im letzten Jahrzehnt bereits in der nichtrelativistischen Quantenchemie etabliert und werden sich, verbunden mit einem Algorithmus zur Molekülorbitaloptimierung, voraussichtlich als Alternative zu traditionellen Multikonfigurationsansätzen entwickeln, zumindest im Rahmen der selbstkonsistenten Optimierung des aktiven Orbitalraums.^{89–92)}

Multikonfigurationsansätze sind in ihrer Anwendung auf stark korrelierte Systeme beschränkt, da der Rechenaufwand exponentiell mit Größe und Zahl der Elektronen innerhalb des aktiven Orbitalraums steigt. Die anderen genannten Methoden wie DMRG skalieren im gleichen Bezugsrahmen nur polynomial. Somit werden große aktive Orbitalräume (bis zu 100 Raumorbitale) zur expliziten Elektronenkorrelationsbetrachtung und Berechnung von Eigenschaften zugänglich (Abbildung 2 unten); sie übertreffen dabei traditionelle Methoden um ein Vielfaches. Ein wesentlicher Aspekt relativistischer Einschnitt-Elektronenkorrelationsmethoden, unter welche die obigen Ansätze fallen, ist, Elektronenkorrelation und Relativistik simultan zu beschreiben.

Multikonfigurationsansätze

Unter der Annahme, dass sich die Spin-Bahnwechselwirkung näherungsweise als (kleine) Störung einer korrelierten skalarrelativistischen Theorie betrachten lässt, bieten zum Beispiel Multikonfigurationsansätze einen alternativen Ansatz. Sie erlauben es, nichtorthogonale Wellenfunktionen a posteriori unter dem Einfluss eines Spin-Bahnwechselwirkungsoperators zu spin-bahnwechselwirkungsgekopelten Funktionen zu mischen.^{93,94)} Wie zuverlässig ein solches Zweischrittverfahren ist, wird jedoch im Allgemeinen abhängen von der Konvergenz der resultierenden Spin-Bahnwechselwirkungsfunktionen bezogen auf die Zahl der spinfreien Zustände, die zur Zustandswechselwirkung in Betracht gezogen werden. Die Fehleranfälligkeit zeigt sich beispielsweise in der Revision einer ursprünglich propagierten Fünffachbindung im Urandimer, die auf Basis eines Zweischritt-Spin-Bahnwechselwirkungsverfahrens ermittelt wurde.²³⁾ Sie entstand infolge eines falsch identifizierten elektronischen Grundzustands in U_2 und durch die unvollständige, störungstheoretische Betrachtung der Spin-Bahnwechselwirkung zwischen den beiden Uranzentren. Letztendlich handelte es sich lediglich um eine Vierfachbindung, wie eine Analyse analoger Daten aus vollrelativistischen Multikonfigurationsberechnungen zeigte.⁴²⁾

Darüber hinaus lässt sich die Berechnung molekularer Eigenschaften in relativistischen korrelierten Ansätzen oft als einfacher Erwartungswert eines quantenmechanischen Operators formulieren.^{95–98)} Das vereinfacht beispielsweise Betrachtungen des g-Tensors in variationellen (Einschritt-)Spin-Bahnwechselwirkungsverfahren im Vergleich zu störungstheoretischen (Zweischritt-)Ansätzen. Die in der Regel komplexwertigen Wellenfunktionen auf Basis der zugrundeliegenden Eielektronenfunktionen zu analysieren, erfordert bei der relativistischen Quantenche-

mie im Gegensatz zur nichtrelativistischen spezielle Bildgebungsverfahren, die der komplexen Phase der Wellenfunktion Rechnung tragen.⁹⁹⁾

Ausblick

Im letzten Jahrzehnt sind effiziente relativistische zwei- und vierkomponentige quantenchemische Berechnungen sowohl mit DFT- als auch wellenfunktionsbasierten Methoden für solche molekularen Systeme Realität geworden, deren Größenordnungen sogar in der experimentellen Spektroskopie und Katalysechemie relevant sind. Relativistische Elektronenkorrelationstheorien mit selbstkonsistenten Ansätzen zu verknüpfen und dabei sowohl starke externe Magnetfelder^{87,91,100)} als auch starke Laserfelder zu berücksichtigen, wie es bereits für nichtrelativistische Theorien der Fall ist,¹⁰¹⁾ werden neue Wege eröffnen: Die Wechselwirkung von Materie mit (starken) externen Störungen in einem allgemeingültigen Theorierahmen, der alle Elemente des Periodensystems einschließt, wird sich dadurch zielgerichtet modellieren lassen. Weitere Perspektiven für die molekulare relativistischen Quantenchemie ist die Betrachtung sowohl nichtadiabatischer als auch quantenelektrodynamischer Effekte. <<

- 1) A. Einstein, Z. Ann. Phys. 1905, 17, 891
- 2) P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A 1928, 117, 610
- 3) K. G. Dyall, K. Fægri: Introduction to relativistic quantum chemistry. Oxford University Press, Oxford, 2007
- 4) M. Reiher, A. Wolf: Relativistic quantum chemistry: the fundamental theory of molecular science. Wiley-VCH, Weinheim, 2009
- 5) W. Liu (Hrsg.): Handbook of relativistic quantum chemistry. Springer, Berlin Heidelberg, 2017
- 6) E. Schrödinger, Phys. Rev. 1926, 28, 1049
- 7) P. Pyykkö, Chem. Rev. 1988, 88, 563
- 8) P. Pyykkö, Adv. Quantum Chem. 1978, 11, 353
- 9) K. S. Pitzer, Acc. Chem. Res. 1979, 12, 271
- 10) P. Pyykkö, J.-P. Desclaux, Acc. Chem. Res. 1979, 12, 276
- 11) L. Belpassi, L. Storch, H. M. Quiney, F. Tarantelli, Phys. Chem. Chem. Phys. 2011, 13, 12368
- 12) P. Pyykkö, Ann. Rev. Phys. Chem. 2012, 63, 45
- 13) J. Autschbach, J. Chem. Phys. 2012, 136, 150902
- 14) P. Pyykkö, Chem. Rev. 2012, 112, 371–384
- 15) F. Calvo, E. Pahl, M. Wormit, P. Schwerdtfeger, Angew. Chem. Int. Ed. 2013, 52, 7583
- 16) K. G. Steenbergen, E. Pahl, P. Schwerdtfeger, J. Phys. Chem. Lett. 2017, 8, 1407
- 17) R. Ahuja, A. Blomqvist, P. Larsson, P. Pyykkö, P. Zaleski-Ejgierd, Phys. Rev. Lett. 2011, 106, 018301
- 18) S. Cotton, Lanthanide and actinide chemistry, John Wiley & Sons, Ltd, 2006
- 19) P. Schwerdtfeger in The chemical bond: fundamental aspects of chemical bonding (Hrsg. G. Frenking, S. Shaik), Seiten 383–404, Wiley VCH, 2014
- 20) C. A. Gagliardi, L. Belpassi, F. Tarantelli et al., Chem. Sci. 2016, 7, 7034
- 21) T. B. Demissie, B. D. Garabato, K. Ruud, P. M. Kozłowski, Angew. Chem. Int. Ed. 2016, 55, 11503
- 22) L. Wu, X. Cao, X. Chen, W. Fang, M. Dolg, Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 11812
- 23) L. Gagliardi, B. Roos, Nature 2005, 433, 848
- 24) B. O. Roos, P.-Å. Malmqvist, L. Gagliardi, J. Am. Chem. Soc. 2006, 128, 17000
- 25) N. Kaltsoyannis, P. J. Hay, J. Li, J.-P. Blaudeau, B. E. Bursten in The chemistry of the actinide and transactinide elements (Hrsg. L. R. Morss, N. M. Edelstein, J. Fuger), Seiten 1893–2012. Springer Netherlands, 2006
- 26) M. L. Neidig, D. L. Clark, R. L. Martin, Chem. Rev. 2013, 257, 394
- 27) A. Kerridge, Dalton Trans. 2013, 42, 16428
- 28) N. Kaltsoyannis, Inorg. Chem. 2013, 52, 3407
- 29) T. W. Hayton, Chem. Commun. 2013, 49, 2956
- 30) T. W. Hayton, Nat. Chem. 2013, 5, 451
- 31) H. S. La Pierre, A. Scheurer, F. W. Heinemann, W. Hieringer, K. Meyer, Angew. Chem. Int. Ed. 2014, 53, 7158
- 32) N. Kaltsoyannis A. Kerridge in The chemical bond: chemical bonding across the periodic table (Hrsg. G. Frenking, S. Shaik), Seiten 337–355. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany, 2014.
- 33) M. J. Polinski, E. B. Garner III, M. Rémi et al., Nat. Chem. 2014, 6, 387
- 34) E. R. Batista, R. L. Martin, P. Yang in Computational methods in lanthanide and actinide chemistry (Hrsg. M. Dolg), Seiten 375–400. John Wiley & Sons Ltd, 2015
- 35) S. K. Cary, M. Vasiliev, R. E. Baumbach et al., Nat. Commun. 2015, 6, 1
- 36) M. S. Dutkiewicz, J. H. Farnaby, C. Apostolidis et al., Nat. Chem. 2016, 8, 797
- 37) M. G. Ferrier, J. M. Berg, E. R. Birnbaum et al., Nat. Commun. 2016, 7, 1
- 38) N. H. Anderson, J. Xie, D. Ray et al., Nat. Chem. 2017, 9, 850
- 39) R. E. Wilson, S. De Sio, V. Vallet, Nat. Commun. 2018, 9, 622
- 40) M. Falcone, L. Barluzzi, J. Andrez et al., Nat. Chem. 2019, 11, 154
- 41) M. C. Heaven, K. A. Peterson in Experimental and Theoretical Approaches to Actinide Chemistry (Hrsg. J. K. Gibson, W. A. de Jong), Seiten 1–52. John Wiley & Sons Ltd, 2018.
- 42) S. Knecht, H. J. Aagaard Jensen, T. Saue, Nat. Chem. 2019, 11, 40
- 43) S. L. Staun, D.-C. Sergentu, G. Wu, J. Autschbach, T. W. Hayton, Chem. Sci. 2019, 10, 6431
- 44) C. M. Marian, WIREs Comput. Mol. Sci. 2012, 2, 187
- 45) J. N. Harvey, WIREs Comput. Mol. Sci. 2013, 4, 1
- 46) S. Mai, P. Marquetand, L. González, Int. J. Quantum Chem. 2015, 115, 1215
- 47) C. Daniel, Coord. Chem. Rev. 2015, 282–283, 19
- 48) T. J. Penfold, E. Gindensperger, C. Daniel, C. M. Marian, Chem. Rev. 2018, 118, 6975
- 49) K. Peterson, D. Feller, D. A. Dixon, Theor. Chem. Acc. 2012, 131, 1079
- 50) L. Öhrström, J. Reedijk, Pure Appl. Chem. 2017, 88, 1
- 51) W. Kutzelnigg, W. Liu, J. Chem. Phys. 2005, 123, 241102
- 52) M. Reiher, Theor. Chem. Acc. 2006, 116, 241
- 53) W. Liu, D. Peng, J. Chem. Phys. 2006, 125, 044102
- 54) M. Iliaš, T. Saue, J. Chem. Phys. 2007, 126, 064102
- 55) D. Peng, W. Liu, Y. Xiao, L. Cheng, J. Chem. Phys. 2007, 127, 104106
- 56) J. Sikkema, L. Visscher, T. Saue, M. Iliaš, J. Chem. Phys. 2009, 131, 124116
- 57) D. Peng, M. Reiher, J. Chem. Phys. 2012, 136, 244108
- 58) J. Seino, H. Nakai, J. Chem. Phys. 2012, 136, 244102
- 59) D. Peng, N. Middendorf, F. Weigend, M. Reiher, J. Chem. Phys. 2013, 138, 184105
- 60) T. Saue, ChemPhysChem 2011, 12, 3077.
- 61) W. Liu, Phys. Rep. 2014, 537, 59
- 62) M. Dolg, X. Cao, Chem. Rev. 2012, 112, 403
- 63) P. Pyykkö, Phys. Chem. Chem. Phys. 2011, 13, 161
- 64) C. R. Jacob, M. Reiher, Int. J. Quantum Chem. 2012, 112, 3661
- 65) E. Engel in Handbook of Relativistic Quantum Chemistry (Hrsg. Wenjian Liu), Seiten 547–578. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2017
- 66) S. Rampino, L. Belpassi, F. Tarantelli, L. Storch, J. Chem. Theory Comput. 2014, 10, 3766
- 67) W. Liu, Y. Xiao, Chem. Soc. Rev. 2018, 47, 4481
- 68) M. Repisky, L. Konecny, M. Kadek et al., J. Chem. Theory Comput. 2015, 11, 980
- 69) L. Konecny, M. Kadek, S. Komorovsky et al., J. Chem. Theory Comput. 2016, 12, 5823
- 70) J. Goings, J. M. Kasper, F. Egidi, S. Sun, X. Li, J. Chem. Phys. 2016, 145, 104107
- 71) M. Kadek, M. Repisky, K. Ruud, Phys. Rev. B 2019, 99, 205103
- 72) M. Repisky, S. Komorovsky, R. Bast, K. Ruud, in Gas Phase NMR, Seiten 267–303. Royal Soc. Chem., 2016

- 73) G. A. Aucar, I. A. Aucar, in *Annual Reports on NMR Spectroscopy* (Hrsg.: Graham A. Webb) Volume 96, Seiten 77–141, Academic Press, 2019
- 74) Y. Franzke, F. Weigend, *J. Chem. Theory Comput.* 2019, 15, 1028
- 75) M. Repisky, S. Komorovsky, E. Malkin, O. L. Malkina, V. G. Malkin, *Chem. Phys. Lett.* 2010, 488, 94
- 76) P. Verma, J. Autschbach, *J. Chem. Theory Comput.* 2013, 9, 1932
- 77) T. Fleig, *Chem. Phys.* 2012, 395, 2
- 78) A. Almoukhalati, S. Knecht, H. J. Aa. Jensen, K. Dyall, T. Saue, *J. Chem. Phys.* 2016, 145, 074104
- 79) M. Pernpointner, *J. Chem. Phys.* 2014, 140, 084108
- 80) M. Pernpointner, L. Visscher, A. B. Trofimov, *J. Chem. Theory Comput.* 2018, 14, 1510
- 81) A. Shee, T. Saue, L. Visscher, A. S. Pereira Gomes, *J. Chem. Phys.* 2018, 149, 174113
- 82) A. Asthana, J. Liu, L. Cheng, *J. Chem. Phys.* 2019, 150, 074102
- 83) S. Knecht, H. J. Aa. Jensen, T. Fleig, *J. Chem. Phys.* 2010, 132, 014108
- 84) T. Shiozaki, W. Mizukami, *J. Chem. Theory Comput.* 2015, 11, 4733
- 85) S. Knecht, Ö. Legeza, M. Reiher, *J. Chem. Phys.* 2014, 140, 041101
- 86) S. Battaglia, S. Keller, S. Knecht, *J. Chem. Theory Comput.* 2018, 14, 2353
- 87) S. Knecht, Relativistic second-order density-matrix renormalization group self-consistent field 2019. *Manuskript in Vorbereitung.*
- 88) B. Mussard, S. Sharma, *J. Chem. Theory Comput.* 2018, 14, 154
- 89) J. Thyssen, T. Fleig, H. J. Aa. Jensen, *J. Chem. Phys.* 2008, 129, 034109
- 90) J. E. Bates, T. Shiozaki, *J. Chem. Phys.* 2015, 142, 044112
- 91) R. D. Reynolds, T. Yanai, T. Shiozaki, *J. Chem. Phys.* 2018, 149, 014106
- 92) A. J. Jenkins, H. Liu, J. M. Kasper, M. J. Frisch, X. Li, *J. Chem. Theory Comput.* 2019, 15, 2974
- 93) P.-Å. Malmqvist, B. O. Roos, B. Schimmelpfennig, *Chem. Phys. Lett.* 2002, 357, 230
- 94) S. Knecht, S. Keller, J. Autschbach, M. Reiher, *J. Chem. Theory Comput.* 2016, 12, 5881
- 95) T. Fleig, M. K. Nayak, M. G. Kozlov, *Phys. Rev. A* 2016, 93, 012505
- 96) A. Shee, L. Visscher, T. Saue, *J. Chem. Phys.* 2016, 145, 184107
- 97) M. S. Vad, M. N. Pedersen, A. Nørager, H. J. Aa. Jensen, *J. Chem. Phys.* 2013, 138:214106
- 98) R. D. Reynolds, T. Shiozaki, *J. Chem. Theory Comput.* 2019, 15, 1560
- 99) R. Al-Saadon, T. Shiozaki, G. Knizia, *J. Phys. Chem. A* 2019, 123, 3223
- 100) R. D. Reynolds, T. Shiozaki, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2015, 17, 14280
- 101) M. Ruggenthaler, N. Tancogne-Dejean, J. Flick, H. Appel, A. Rubio, *Nat. Rev. Chem.* 2018, 2, 0118
- 102) P. Jerabek, B. Schuetttrumpf, P. Schwerdtfeger, W. Nazarewicz, *Phys. Rev. Lett.* 2018, 120, 053001

Schwingungsspektroskopie mit Ab-initio-Molekulardynamik

Schwingungsspektroskopie ist essenzieller Bestandteil der täglichen Arbeit in der Chemie und angrenzenden Gebieten. Durch bessere Methoden und Computerausstattung wird Modellierung immer bedeutender. Infrarot(IR)- und Ramanpektren beispielsweise werden heutzutage routinemäßig berechnet. Hierzu wird in der Regel die Geometrie des Systems, das untersucht werden soll, optimiert – man nimmt also eine Temperatur von 0 K an – und eine Normalmodenanalyse durchgeführt. Diese beruht auf der harmonischen Näherung, es sind aber auch darüber hinausgehende, computerintensivere statische Ansätze möglich.

Eine Alternative dazu sind dynamische Methoden wie Ab-initio-Molekulardynamik (AIMD). Sie beruht auf einer klassischen Beschreibung der Atomkerne, die mit Newtonscher Bewegungsgleichung propagiert werden. Dabei werden die mit einer quantenchemischen Elektronenstrukturmethode berechneten Kräfte berücksichtigt. Verwendet werden heutzutage meist die Car-Parrinello-

und Born-Oppenheimer-MD-Varianten.¹⁾

Aufgrund des guten Kompromisses zwischen Genauigkeit und Rechengeschwindigkeit ist (Kohn-Sham-)Dichtefunktionaltheorie (DFT) der De-facto-Standard für die verwendete Elektronenstrukturmethode auf diesem Gebiet (DFT-MD). Diese erfordert allerdings einen deutlich höheren Rechenaufwand als die allgemein übliche statische Normalmodenanalyse. Besondere Herausforderungen sind deshalb effiziente Methoden, um Spektren zu berechnen und Computereinrichtungen ideal zu nutzen.

Im Gegensatz zu den statischen Ansätzen liefert die Molekulardynamik Schwingungsspektren durch Zeitkorrelationsfunktionen bestimmter Eigenschaften. Das System lässt sich für Umgebungsbedingungen des Experiments modellieren, etwa Raumtemperatur und Atmosphärendruck, was eine realistischere Beschreibung erlaubt. Darüber hinaus sind bestimmte anharmonische Effekte berücksichtigt, da keine harmonische Form der Potenzialenergieoberfläche angenommen wird.²⁾

DREI FRAGEN AN DIE AUTORIN: Sandra Luber

Welcher Trend ist im letzten Jahr aufgekommen, den Sie so nicht erwartet haben?

Ich hatte erwartet, dass es Fortschritte hinsichtlich der Verbindung von künstlicher Intelligenz mit theoretischer Chemie geben wird, aber nicht in einem so großen Ausmaß.

Welche Erkenntnis des letzten Jahres war für Ihre Forschung besonders wichtig?

Interdisziplinäre Ansätze wie die Verknüpfung periodischer Methoden für Festkörper mit nichtperiodi-

schen Ansätzen für Moleküle oder der Computerchemie mit maschinellem Lernen haben großes Potenzial.

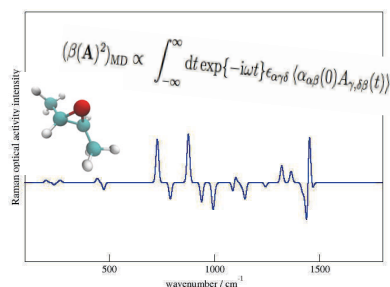
Ihre Forschung in 140 Zeichen?

Methoden entwickeln, vor allem für Spektroskopie und für die bessere Untersuchung von Molekülen und Materialien, etwa für die Katalyse.

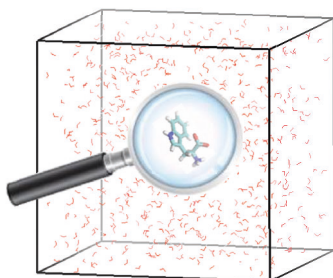
Sandra Luber ist seit 2017 Professorin an der Universität Zürich, gefördert vom Schweizerischen Nationalfonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (SNF).



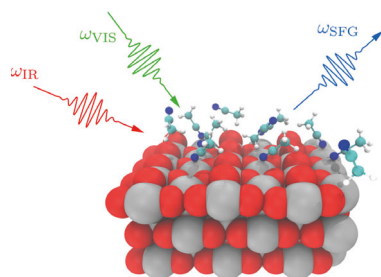
Chirale Systeme



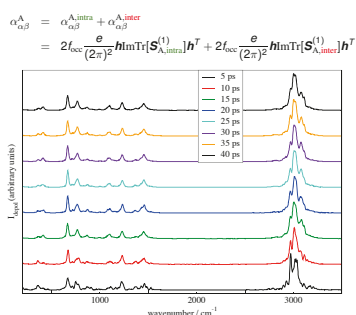
Neue Analysemethoden



Grenzflächen



Effiziente Berechnungsmethoden



Ausgewählte Forschungsrichtungen für AIMD-basierte Schwingungsspektroskopie.

Von der Gasphase zur kondensierten Phase mit AIMD

Abgesehen von Molekülen in der Gasphase sind oft kondensierte Phasen wie Flüssigkeiten und Festkörper von Interesse. Statische Ansätze vernachlässigen Lösungsmiteffekte oft komplett oder berücksichtigen diese in Form approximativer Kontinuumsmodelle oder durch wenige explizite Lösungsmittelmoleküle. Hier hat die AIMD einen entscheidenden Vorteil: Sie beschreibt die Dynamik des Systems und dessen Umgebung. So lässt sich mit AIMD nicht nur die Konformationsflexibilität eines Substrats untersuchen, sondern auch die (Lösungsmittel-)Umgebung sowie beispielsweise Wasserstoffbrückenbindungen und deren Netzwerke.

Ein weiterer Vorteil des AIMD-Ansatzes ist, dass er direkt die Bandform im Spektrum liefert. Diese enthält wertvolle Informationen über das System, während der statische Ansatz erstmal nur ein diskretes Linienspektrum liefert.

Um die kondensierte Phase angemessen darzustellen, werden normalerweise periodische Randbedingungen verwendet – das erschwert es verglichen mit einem nichtperiodischen Ansatz, bestimmte Schwingungsspektren zu berechnen.

IR- und Ramanspektroskopie

IR-Spektren mit AIMD zu berechnen, ist relativ weit verbreitet und erfordert keine rechenzeitintensive Bestimmung von Eigenschaften, da die Autokorrelationsfunktion des elektrischen Dipolmoments benötigt wird. So werden etwa Spektren in der Gasphase berechnet sowie IR- oder THz-Spektren in Flüssigkeiten.³⁾ Zudem wurden kürzlich Ansätze für die annähernde Simulation von Anregungs-Abfrage-Spektroskopie vorgeschlagen.⁴⁾

Für Ramanspektren wird der Elektrische-Dipol-elektrische-Dipol-Polarisierbarkeitstensor gebraucht. Diesen liefert die Response-Theorie (üblicherweise mit Dichtefunktionalstörungstheorie^{5,6)}), was genauer

und weniger rechenintensiv ist als Ansätze, die auf finiten Differenzen beruhen. Der Störungstheorie-basierte Ansatz wurde kürzlich in das CP2K-Programm implementiert.⁶⁾

Neue Analysemethoden für lokale Eigenschaften

Abgesehen von der Analyse des Spektrums für das gesamte Modellsystem liefert eine tiefere Auswertung noch mehr Informationen, etwa die Beiträge einzelner Bestandteile des berechneten Systems wie bestimmte funktionelle Gruppen oder einzelner Moleküle in einer Flüssigkeit. Für IR-Spektren sind demnach lokale elektrische Dipolmomente sehr hilfreich.

Da der Positionsoperator für periodische Randbedingungen nicht klar definiert ist, ist der Standardweg in diesem Fall, maximal lokalisierte Wannierfunktionen zu verwenden.⁷⁾ Dies kann jedoch zu erheblichem zusätzlichen Rechenaufwand führen und – für manche Systeme – zu Artefakten. Als Alternative, um lokale Eigenschaften zu bestimmen, wurde (periodische) Subsystem-DFT (DFT-Einbettung) vorgeschlagen.⁸⁾

Bei dieser Technik wird die elektronische Dichte des gesamten Systems als Summe der elektronischen Dichten von Teilsystemen dargestellt, was einen attraktiven Zugang zu deren lokalen Eigenschaften wie lokalen elektrischen Dipolmomenten eröffnet. Für die Subsysteme wird die weit verbreitete Kohn-Sham-Formulierung von DFT verwendet; die Interaktion zwischen den Subsystemen hingegen wird mit Hohenberg-Kohn-DFT beschrieben.

Ein anderer Weg zu lokalen elektrischen Dipolmomenten ist die Voronoi-Zerlegung der elektronischen Dichte.⁹⁾ Abgesehen davon wurde im Rahmen der Dichtefunktionalstörungstheorie ein Weg zu lokalen Polarisierbarkeiten vorgestellt, der ohne maximal lokalisierte Wannierfunktionen auskommt.⁶⁾

Spektroskopie für chirale Systeme

Schwingungszirkulardichroismus (vibrational circular dichroism, VCD) und Raman-optische Aktivität (ROA) sind die chiralen Varianten der IR- beziehungsweise Raman-spektroskopie und gängige Methoden, um chirale Systeme zu untersuchen. VCD-Spektren mit AIMD zu berechnen, erfordert außer dem elektrischen das magnetische Dipolmoment. Diese lassen sich basierend auf der Voronoi-Zerlegung elektronischer Dichten aus AIMD-Simulationen approximativ via klassischer Näherung berech-

nen.¹⁰⁾ Eine vollständig ab-initio-basierte Berechnung von VCD-Spektren mit AIMD gelingt außerdem mit Störungstheorie.¹¹⁾

Für die Modellierung von ROA benötigt man zusätzlich zu dem für Raman berechneten Polarisierbarkeitstensor weitere Tensoren, die elektrische Quadrupol- und magnetische Dipolwechselwirkungen enthalten. Wie bei der Vorgehensweise für VCD wurden diese näherungsweise erhalten, basierend auf einer Voronoi-Zerlegung über einen klassischen Ansatz mit finiten Differenzen.¹²⁾

Im Gegensatz dazu wurde Störungstheorie verwendet, um eine

gänzlich auf Ab-initio-Ansätzen beruhende Methode für die Berechnung von ROA für AIMD zu entwickeln,¹³⁾ auch für die kondensierte Phase.¹⁴⁾ AIMD-Simulationen haben sich zum Beispiel als äußerst hilfreich erwiesen, um die ersten optischen Aktivitätsspektren einer ionischen Flüssigkeit zu erforschen. Dabei wurde eine induzierte Chiralität des im Prinzip achiralen Gegenions gefunden.¹⁵⁾

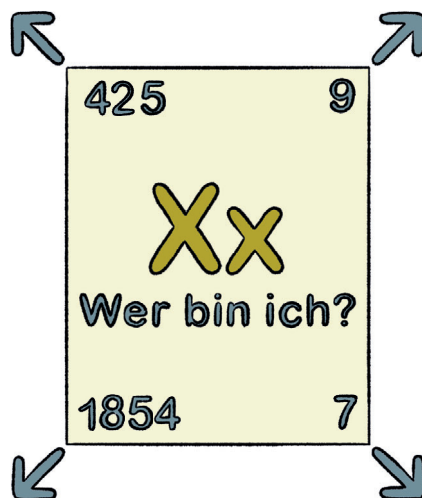
Eine neue Analyse-methode basiert auf lokalisierten Molekülorbitalen und erleichtert es, das Zusammenspiel verschiedener Teilsysteme in einem System zu untersu-

ELEMENTERÄTSEL

In 100 Gramm Hafer sind etwa 425 Milligramm von mir.

Wenn ich rein bin, ritze ich Glas, und ich bin wichtig, um Stahl zu beruhigen.

Erstmals rein dargestellt wurde ich im Jahr 1854 von einem französischen Chemiker über Elektrolyse.



Mit dem Urin scheiden Menschen ungefähr 9 Milligramm pro Tag von mir aus.

Flüssig bin ich dichter als fest.

Manche meiner Verbindungen haben eine E-Nummer als Nahrungsergänzungsmittel, aber immer ohne 7.

Welches Element ist gesucht? Senden Sie Ihre Antwort bis zum 25. November an nachrichten@gdch.de; unter den richtigen Einsendungen lösen wir eine siegreiche aus und beantworten sie. Gewinne sind ein GDCh-Periodensystem als DIN-A0-Poster oder Mousepad oder die GDCh-Tasse mit dem Erlenmeyerchen. Das Erlenmeyerchen gibt's auch ohne Tasse in Plüsch. Die Auflösung steht im Dezemberheft im Interskriptum.

Illustration: Maïke Hettinger



Inhouse-Kurse



Profitieren Sie von unserem langjährigen Know-how!

Ihre Vorteile:

- ✓ Individualität und Effizienz
- ✓ Kosten- und Zeitersparnis
- ✓ Übung an gewohnten Geräten

Tel.: +49 69 7917-364
E-Mail: fb@gdch.de
www.gdch.de/inhouse

chen sowie die damit verbundene Entstehung der Banden im Spektrum.¹⁶⁾

Untersuchung von Grenzflächen

Grenzflächen lassen sich mit schwingungsspektroskopischen Methoden untersuchen. In den letzten Jahren diente dazu vermehrt Summenfrequenzspektroskopie. Sie beruht auf einem nichtlinearen optischen Prozess. Erste AIMD-Ansätze basierend auf maximal lokalisierten Wannierfunktionen wurden etwa für Flüssig-Flüssig- oder Flüssig-Eis-Grenzflächen präsentiert.¹⁷⁾

Darüber hinaus wurde Störungstheorie verwendet, um das Summenfrequenzsignal von Molekülen auf einer Halbleiteroberfläche zu modellieren.¹⁸⁾ Dies ist für viele Anwendungen interessant, etwa in der Katalyse, und bietet zudem ein neues Gebiet für diese Art von Spektroskopie.¹⁹⁾

Zusammenfassung und Ausblick

Durch schnellere Berechnungsmethoden und leistungsfähigere Computer hat sich die Schwingungsspektrensimulation mit AIMD in den letzten Jahren erheblich weiterentwickelt. Neben Ansätzen für die detaillierte Analyse von Spektren, die neue Einblicke in Struktur und Dynamik komplexer Verbindungen sowie deren Subsysteme und Wechselwirkung erlauben, wurden neue Methoden präsentiert, um Spektren zum Beispiel von chiralen Systemen und Grenzflächen zu berechnen.

Es ist zu erwarten, dass Rechengeschwindigkeit und Genauigkeit dieser Methoden stetig steigen werden, etwa durch effiziente Berechnung mit Hybrid-Austauschkorrelationsfunktionalen oder Erweiterung auf Resonanzeffekte über Realzeitpropagierung,²⁰⁾ und dass weitere Schwingungsspektroskopiearten für die AIMD erschlossen werden. Außerdem bietet die Kombina-

tion mit maschinellem Lernen²¹⁾ ein spannendes Feld für weitere Entwicklungen. Dies ebnet den Weg für eine gründliche Untersuchung vielfältiger Systeme, was nicht nur Chemie, sondern auch (Bio-)Physik und Materialwissenschaften bereichern kann. <<

- 1) R. Car, M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. 1985, 55, 2471; D. Marx, J. Hutter, Ab initio molecular dynamics: basis theory and advanced methods, Cambridge University Press, Cambridge 2009
- 2) M. Thomas, M. Brehm, R. Fligg, P. Vöhringer, B. Kirchner, Phys. Chem. Chem. Phys. 2013, 15, 6608
- 3) M.-P. Gaigeot, R. Spezia, Top. Curr. Chem. 2015, 364, 99; P. K. Gupta, A. Esser, H. Forbert, D. Marx, Phys. Chem. Chem. Phys. 2019, 21, 4975
- 4) Y. Nagata, S. Yoshimune, C.-S. Hsieh, J. Hunger, M. Bonn, Phys. Rev. X 2015, 5, 021002; D. Lesnicki, M. Sulpizi, J. Phys. Chem. B 2018, 122, 6604
- 5) A. Putrino, D. Sebastiani, M. Parrinello, J. Chem. Phys. 2000, 113, 7102; Q. Wan, L. Spanu, G. A. Galli, F. Gygi, J. Chem. Theory Comput. 2013, 9, 4124
- 6) S. Luber, M. Iannuzzi, J. Hutter, J. Chem. Phys. 2014, 141, 094503
- 7) N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza, D. Vanderbilt, Rev. Mod. Phys. 2012, 84, 1419
- 8) S. Luber, J. Chem. Phys. 2014, 141, 234110
- 9) M. Thomas, M. Brehm, B. Kirchner, Phys. Chem. Chem. Phys. 2015, 17, 3207
- 10) M. Thomas, B. Kirchner, J. Phys. Chem. Lett. 2016, 7, 509
- 11) A. Scherrer, R. Vuilleumier, D. Sebastiani, J. Chem. Phys. 2016, 145, 084101
- 12) M. Brehm, M. Thomas, J. Phys. Chem. Lett. 2017, 8, 3409
- 13) S. Luber, J. Chem. Theory Comput. 2017, 13, 1254
- 14) S. Luber, Habilitationsschrift 2016, Universität Zürich
- 15) P. Oulevey, S. Luber, B. Varnholt, T. Bürgi, Angew. Chem. Int. Ed. 2016, 55, 11787
- 16) S. Luber, Phys. Chem. Chem. Phys. 2018, 20, 28751
- 17) M. Sulpizi, M. Salanne, M. Sprik, M.-P. Gaigeot, J. Phys. Chem. Lett. 2013, 4, 83; Q. Wan, G. Galli, Phys. Rev. Lett. 2015, 115, 246404
- 18) S. Luber, J. Phys. Chem. Lett. 2016, 7, 5183
- 19) S. Luber, Chimia 2018, 72, 328; S. Luber, Chimia 2018, 72, 508
- 20) J. Mattiat, S. Luber, J. Chem. Phys. 2018, 149, 174108
- 21) M. Gastegger, J. Behler, P. Marquetand, Chem. Sci. 2017, 8, 6924

Analytische Chemie

Einblick in vergangene Zeiten – Farbstoffanalyse mit MS

Viele archäologische Textilfunde erscheinen auf den ersten Blick eher unansehnlich und braun in braun. Eine genauere Untersuchung mit direkten massenspektrometrischen Techniken offenbart jedoch: Die Stoffe waren oft farbenfroh gestaltet. Zudem lassen sich damit über 2000 Jahre alte Fasern analysieren, ohne die Proben dabei zu zerstören.

Vor der Einführung synthetischer Farbstoffe im 19. Jahrhundert wurden Textilien mit Naturfarbstoffen gefärbt. Die Analyse der eingesetzten Farbstoffe hilft dabei, die Handelswege aufzuklären, und erlaubt beispielsweise Aussagen über die Rohstoffverfügbarkeit oder das technische Wissen in der jeweiligen Epoche. Zudem sind Kenntnisse über die Farbstoffe hilfreich, um die Textilien zu konservieren und zu restaurieren.

Probennahme ist bei kulturhistorisch bedeutenden Objekten nur in sehr begrenztem Umfang möglich. Folglich sind zerstörungsfreie oder minimalinvasive Analysestrategien erstrebenswert.

Eine weitere Schwierigkeit bei der Untersuchung historischer Textilien ist der Faser- und Farbstoffabbau durch chemische, photochemi-

sche, physikalische oder mikrobiologische Prozesse. Zudem ist der Anteil des Farbstoffs im Vergleich zum Fasermaterial sehr gering. Aus winzigen und komplexen Proben ein Maximum an Informationen zu gewinnen, stellt hohe Anforderungen an die Analytik.

Viele methodische Ansätze basieren auf (U)HPLC-DAD- oder LC-MS/MS-Kopplungen,¹⁻⁴⁾ wobei das Fasermaterial im Vorfeld zumeist nach einem mehrstufigen Protokoll extrahiert wird.^{5,6)} Im Gegensatz dazu ermöglichen Verfahren wie Maldi-ToF-MS oder ambiente MS-Techniken Farbstoffanalysen direkt von der Faseroberfläche ohne vorausgehende und zeitintensive und teilweise materialintensive Extraktion der färbenden Komponenten.

Ambiente Massenspektrometrie: kostbare Proben erhalten

Mit ambienten Ionisationsmethoden lassen sich komplexe Proben in ihrem natürlichen Zustand schnell und direkt untersuchen, ohne oder mit nur geringfügiger Probenvorbereitung und unter Atmosphärendruck.

Die Desorptions-Elektrospray-Ionisation (Desorption Electrospray Ionization, DESI) wurde im Jahr 2004⁷⁾ eingeführt; seitdem wurden ambiente Ionisationsmethoden permanent weiterentwickelt. Allein seit Anfang des Jahres 2016 wurden mehr als ein Dutzend neue Methoden und methodische Variationen vorgestellt,⁸⁾ die sich nach Kriterien wie dem Desorptions- oder Ionisationsmechanismus einteilen lassen. Diese Methoden wer-

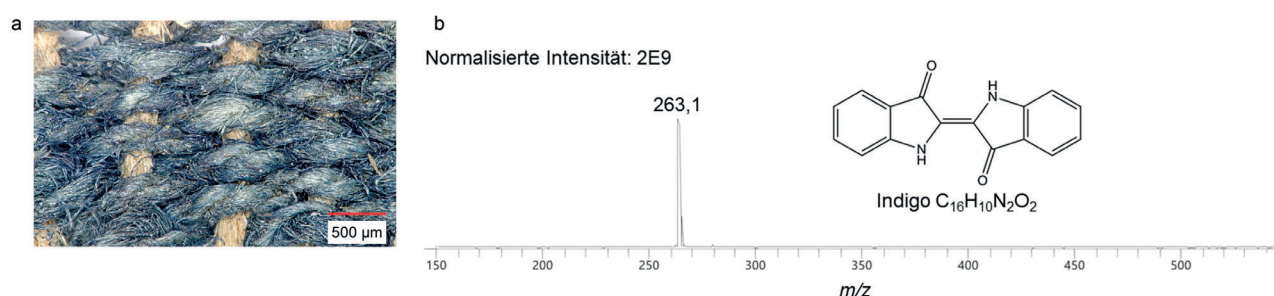


Abb. 1. a) Baumwollgewebe aus der Inka-Kultur, 15. bis 16. Jahrhundert n. Chr. (Sammlung des Ethnologischen Museums – Staatliche Museen zu Berlin); b) ASAP-Massenspektrum der bläulichen Fasern (positiver Modus) und Struktur des blauen Farbstoffs Indigo. Der Farbstoff Indigo wurde als Quasi-Molekülon $[M+H]^+$ detektiert.

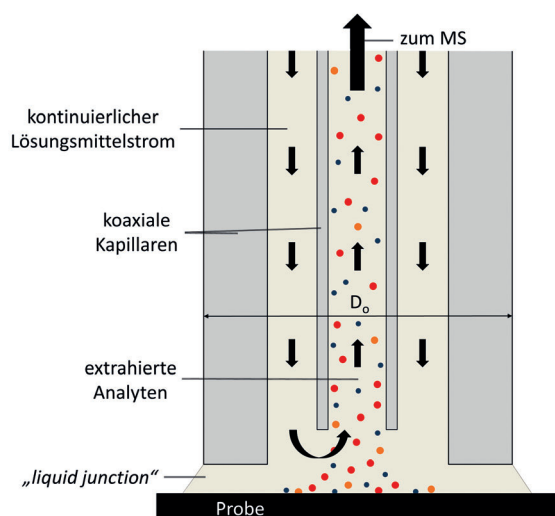


Abb. 2. Aufbau eines Liquid-Microjunction-Surface-Sampling-Probe (LMJ-SSP)-Experiments (Flowprobe-System: Durchmesser der äußeren Kapillare $D_o = 630 \mu\text{m}$).

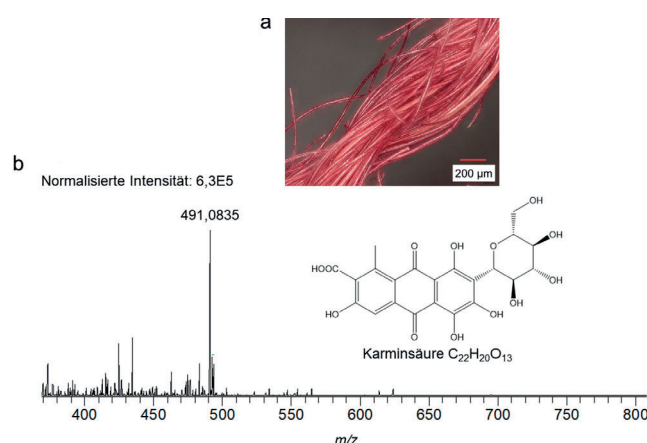


Abb. 3. a) Wollzwirn aus der Chimú-Kultur, Peru, 12. bis 15. Jahrhundert n. Chr. (Sammlung des Ethnologischen Museums – Staatliche Museen zu Berlin); b) Flowprobe-ESI-HRMS-Spektrum der historischen, roten Fasern (negativer Modus) und Struktur des roten Farbstoffs Karminsäure. Der Farbstoff Karminsäure wurde als Quasi-Molekülon $[M-H]^-$ detektiert.

den beispielsweise in Forensik oder Medizin genutzt.

Der Reiz dieser Techniken für Farbstoffanalysen bei historischen Textilien beruht darauf, dass sich mit ihnen Farbstoffe direkt von der Faseroberfläche schnell und minimalinvasiv charakterisieren lassen, eine Probenvorbereitung ist nicht erforderlich. So ermöglichen Atmospheric-Pressure-Chemical-Ionization (APCI)-verwandte Ionisierungstechniken wie Direct Analysis in Real Time (DART)^{9,10} oder Atmospheric Solids Analysis Probe (ASAP)¹¹ Farbstoffanalysen an minimalen Probenmengen. Wenige Fasern reichen aus, um etwa den blauen Farbstoff Indigo mit ASAP-MS nachzuweisen (Abbildung 1, S. 65). Das Farbmittel lässt

sich dabei unabhängig von der Probenbeschaffenheit und vom Fasermaterial charakterisieren. Bei Testreihen wurde der Farbstoff auf verschiedenen Fasermaterialien wie Wolle, Seide oder Baumwolle detektiert. Die Proben waren zudem unterschiedlich verarbeitet und nicht alle gleich gut erhalten.

Für ASAP-MS-Experimente werden die Fasern in einen heißen Stickstoffstrom eingebracht, für den Nachweis von Indigo hat der Stickstoffstrom eine Temperatur von 400°C , sonst 300°C oder 250°C ; dabei verdampfen flüchtige und semiflüchtige Probenbestandteile. In einem koronaentladungs-basierten APCI-Prozess werden die Analyten dann ionisiert. Diese Technik eignet sich dazu, mittel- bis niedere polare Verbindungen zu charakterisieren.¹²⁾

Eine weitere Möglichkeit für direkte Farbstoffanalysen bieten Flüssigextraktionstechniken wie die Flowprobe-Electrospray-Ionization (ESI)-MS-Methode, die auf der Liquid-Microjunction-Surface-Sampling-Probe (LMJ-SSP)-Technik basiert.¹³⁾ Hier werden die Analyten mit einem kontinuierlichen Lösungsmittelstrom aus einer Oberfläche extrahiert, im gelösten Zustand zur Ionenquelle transpor-

tiert und anschließend mit ESI ionisiert. Die Methode beruht also auf Fest-flüssig-Extraktion (Abbildung 2) und eignet sich für kleine Faserbündel oder Gewebefragmente. Neben indigoiden Verbindungen lassen sich damit polare Verbindungen wie das Anthrachinon Karminsäure nachweisen (Abbildung 3). Viele Kulturen nutzten anthrachinoide und indigoide Farbstoffe, um Textilien rot und blau zu färben.

Hochauflösende Massenspektrometer erfassen mit hoher Selektivität und simultan verschiedene Zielstrukturen. Allerdings lassen sich isomere Strukturen bei LMJ-SSP-High-Resolution (HR)-MS-Kopplungen nur über das Fragmentierungsverhalten der jeweiligen Substanzen unterscheiden, da eine chromatographische Trennung fehlt.

Bildgebende Verfahren: historische Muster erkennen

Ein weiteres weiches Ionisierungsverfahren, das den Nachweis von Farbstoffen direkt von der Faseroberfläche erlaubt, ist die MALDI-Technik. Im Gegensatz zu ambienten MS-Methoden werden Probenbestandteile hier im Vakuum desor-



Annemarie Elisabeth Kramell ist Postdoc am Institut für Chemie der Universität Halle-Wittenberg. Sie studierte in Halle Chemie und promovierte im Jahr 2017 über Faser- und Farbstoffanalysen an historischen Textilien bei René Csuk.



René Csuk ist seit 1994 Professor für organische Chemie in Halle. Neben alten Farben untersucht er sekundäre Naturstoffe aus Pflanzen, insbesondere cytotoxische Triterpenderivate. Csuk hat an der TU Graz studiert, promoviert und nach einem Postdoc-Aufenthalt an der ETH Zürich in Heidelberg habilitiert.

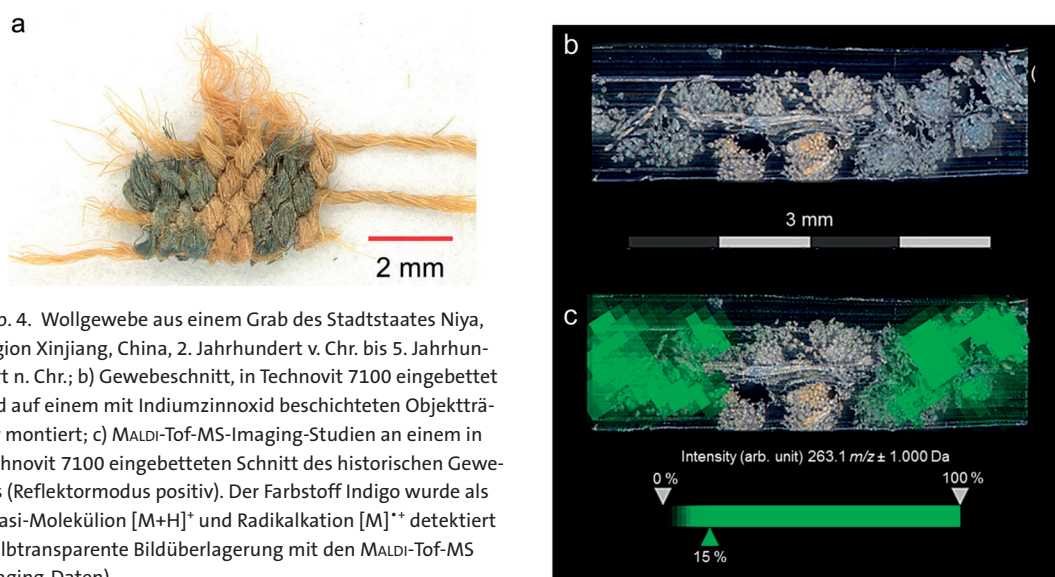


Abb. 4. Wollgewebe aus einem Grab des Stadtstaates Niya, Region Xinjiang, China, 2. Jahrhundert v. Chr. bis 5. Jahrhundert n. Chr.; b) Gewebeschnitt, in Technovit 7100 eingebettet und auf einem mit Indiumzinnoxid beschichteten Objektträger montiert; c) MALDI-ToF-MS-Imaging-Studien an einem in Technovit 7100 eingebetteten Schnitt des historischen Gewebes (Reflektormodus positiv). Der Farbstoff Indigo wurde als Quasi-Molekülion $[M+H]^+$ und Radikalkation $[M]^{•+}$ detektiert (halbtransparente Bildüberlagerung mit den MALDI-ToF-MS Imaging-Daten).

biert und ionisiert. Dies stellt höhere Anforderungen an die Probenmontage. Bei Studien mit MALDI-ToF-MS- und LDI-ToF-MS (Laser-Desorption/Ionisation ohne Matrix) an Einzelfasern kommen etwa selbstgebaute Probenhalter zum Einsatz, welche die Fasern parallel zur Oberfläche des Probenhalters spannen.¹⁴⁾ Auch textile Gewebefragmente, die nur wenige Millimeter groß sind, können mit MALDI-Technik untersucht werden, daraus ergibt sich die räumliche Verteilung der Farbstoffe.

So wurde mit MALDI-ToF-MS-Imaging untersucht, wie sich die Farbstoffe auf einer über 2000 Jahre alten Gewebeprobe verteilen. Dafür wurde die Textilprobe zunächst in Technovit 7100, ein hydrophiles Harz auf 2-Hydroxyethylmethacrylat-Basis (Hema), eingebettet. Anschließend wurden 3 µm dicke Gewebeschnitte erzeugt und auf Objektträger überführt, die mit Indiumzinnoxid beschichtet waren. Darauf wurde dann ein Gemisch aus 2,5-Dihydroxybenzoesäure (DHB) und α -Cyano-4-hydroxyzimtsäure (α -CCA) aufgedampft (Abbildung 4), die als Matrix dienen.¹⁵⁾ Ähnliche Verfahren nutzt zum Beispiel die Medizin, um menschliche Gewebe zu untersuchen.

Bei historischen Textilien lassen sich anhand der so erzeugten Verteilungsbilder Muster auf dem Stoff rekonstruieren. Entsprechende Untersuchungen ermöglichen Aussagen etwa darüber, wie die verschiedenen Farbstoffe eingesetzt und kombiniert wurden und die textilen Zeugnissen unserer Vergangenheit gestaltet waren. <<

Ab dem Jahr 1997 befasste sich Ralph Kluge im Arbeitskreis von René Csuk als wissenschaftlicher Mitarbeiter mit Massenspektrometrie und bioorganischer Chemie und trug auch zu dieser Arbeit bei. Im August dieses Jahres ist Ralph Kluge, der als Mitarbeiter und Kollege hoch geschätzt war, im Alter von 62 Jahren verstorben.

- 1) I. Karapanagiotis, C. Verheeken-Lammens, P. Kamaterou, *Archaeol. Anthropol. Sci.* 2019, 11, 2699–2710
- 2) I. Degano, *Phys. Sci. Rev.* 2019, 4 (5).
- 3) I. Degano, J. La Nasa, *Analytical Chemistry for Cultural Heritage*, Hrsg.: R. Mazzeo, Springer International Publishing, Cham, 2017, 263–290.
- 4) V. Pauk, P. Barták, K. Lemr, *J. Sep. Sci.* 2014, 37, 3393–3410
- 5) A. Manhita, T. Ferreira, A. Candeias, C. B. Dias, *Anal. Bioanal. Chem.* 2011, 400, 1501–1514
- 6) L. Valianou, I. Karapanagiotis, Y. Chrysosoulakis, *Anal. Bioanal. Chem.* 2009, 395, 2175–2189
- 7) Z. Takáts, J. M. Wiseman, B. Gologan, R. G. Cooks, *Science*, 2004, 306, 471–473
- 8) C. L. Feider, A. Krieger, R. J. DeHoog, L. S. Eberlin, *Anal. Chem.* 2019, 91, 4266–4290

- 9) C. Selvius DeRoo, R. A. Armitage, *Anal. Chem.* 2011, 83, 6924–6928
- 10) C. J. Day, C. S. DeRoo, R. A. Armitage, *Archaeological chemistry VIII*, Hrsg.: R. A. Armitage, J. H. Burton, American Chemical Society, Washington, DC, 2013, 69–85
- 11) A. Kramell, F. Porbeck, R. Kluge, A. Wiesner, R. Csuk, *J. Mass Spectrom.* 2015, 50, 1039–1043
- 12) C. N. McEwen, R. G. McKay, B. S. Larsen, *Anal. Chem.* 2005, 77, 7826–7831
- 13) A. E. Kramell, A. O. Brachmann, R. Kluge, J. Piel, R. Csuk, *RSC Adv.* 2017, 7, 12990–12997
- 14) N. Wyplosz, *Laser desorption mass spectrometric studies of artists' organic pigments*, PhD thesis, University of Amsterdam, Amsterdam, 2003
- 15) A. E. Kramell, M. García-Altares, M. Pötsch et al. *Sci. Rep.* 2019, 9, 2331

AUF EINEN BLICK

Mit ambienten MS-Techniken, die unter Umgebungsbedingungen arbeiten, wie ASAP-MS oder Flowprobe-Esi-MS, lassen sich Farbstoffe direkt von der Oberfläche historischer Textilien charakterisieren.

Für Analysen reichen meist wenige Fasern; die Untersuchung der Farbstoffe ist unabhängig von Probenbeschaffenheit und Fasermaterial.

MALDI-MS-Imaging zeigt, wie Farbstoffe auf historischen Textilien verteilt sind. Dies hilft dabei, Muster zu rekonstruieren.

Entstehung des Lebens

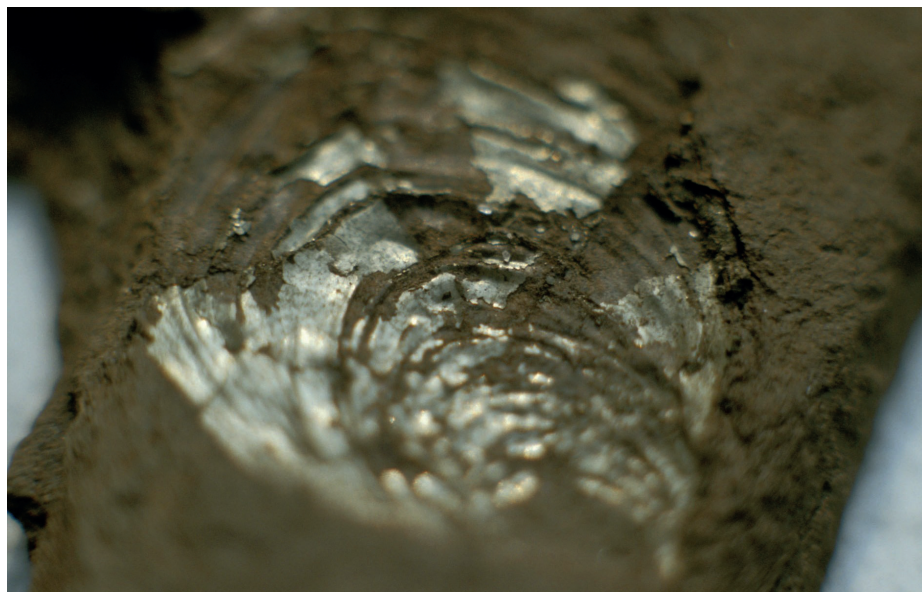
Am Anfang war das Narrengold

Pyrit, also FeS_2 , ist das häufigste Eisen-Schwefel-Mineral in der Erdkruste und wird in Sedimenten laufend neu gebildet. Wie, ist allerdings unklar. Zudem ist es für einige Hypothesen zu einem Urzeitstoffwechsel wichtig und stabilisiert den Sauerstoffgehalt der Atmosphäre. Dass kürzlich Mikroben entdeckt wurden, die Pyrit herstellen, hilft womöglich, alle diese Puzzlesteine zu verbinden.

Ab dem Jahr 1977 entdeckten Forscher heiße Quellen und Hydrothermalschlote am Meeresboden in der Tiefsee. Dies brachte neue Impulse für die spekulative Diskussion um die chemischen Ursprünge des Lebens auf der Erde. Vermutlich entstanden die ersten Zellen nicht in Darwins lauwarmem Tümpel, sondern eher an den extremen Temperatur- und Redoxgefällen, die dort entstehen, wo Hydrothermalschlote überhitzte Schwermetalllösungen ins kalte Meerwasser spritzen.

Die Chemie eines möglichen Urstoffwechsels, der bereits vor dem Erbmateriale und der Zellmembran auf anorganischen Oberflächen – sozusagen in 2-D – existiert haben könnte, trat in den Vordergrund. Eine damals viel beachtete Hypothese war die des Münchner Patentanwalts Günter Wächtershäuser. Er entwarf eine Eisen-Schwefel-Welt, in der Pyrit zentral ist – also Eisendisulfid, das wegen seines goldähnlichen Glanzes auch Narrengold oder Katzensgold genannt wird.

Wächtershäuser schlug einen Redoxzyklus vor, der ähnlich wie der Zitronensäurezyklus in unserem oxidativen Stoffwechsel funktionieren sollte, aber in umgekehrter Richtung, also reduktiv. An diesem Kreislauf sollen die Eisen-Schwefel-Mineralien Troilit (Eisenkies, FeS) und Pyrit (FeS_2) teilnehmen, wobei der in Tiefseequellen reichlich vorhandene Schwefelwasserstoff (H_2S) mit Troilit zu Pyrit reagieren soll.



Pyrit als Muschelabdruck in fossilisiertem, organischem Sedimentmaterial aus einem sauerstofffreien Grundwasserleiter in 17,5 m Tiefe; Bildbreite 23 mm.

Quelle: Koelle, Wikipedia – CC-BY-SA-3.0

Wie Wächtershäuser zusammen mit Claudia Huber von der TU München und Karl-Otto Stetter von der Universität Regensburg zeigte, sind in diesem Milieu präbiotische Reaktionen bis hin zur Synthese bestimmter Aminosäuren plausibel. Andere Vertreter des „Stoffwechsel-zuerst“-Lagers, darunter Bill Martin von der Universität Düsseldorf und Michael Russell am Jet Propulsion Laboratory der NASA, haben diese Forschungsrichtung weiterentwickelt. Doch der Durchbruch blieb aus. Die Eisen-Schwefel-Welt blieb eine von mehreren denkbaren, aber unbewiesenen Hypothesen zum Ursprung des Lebens.

Mikroben machen Narrengold

Erst jetzt wurde eine biologische Funktion von Pyrit nachgewiesen, und zwar von Michael Pesters Arbeitsgruppe am Leibniz-Institut DSMZ (Deutsche Sammlung von Mikroorganismen und Zellkulturen) in Braunschweig sowie Kollegen der Universitäten Konstanz und Tübingen. Sie haben mikrobielle Kulturen angereichert, die aus FeS und Schwefelwasserstoff Pyrit herstellen und von dieser Stoffwechselreaktion abhängen.¹⁾ Die Forscher reicherten unter Sauerstoffausschluss Umweltmikroorganismen aus Sedimenten und Kläranlagen an. Diesen boten sie le-

diglich Eisensulfid, Schwefelwasserstoff und Kohlendioxid als Energiequellen.

Unter diesen Bedingungen setzen sich Mikrobenstämme durch, die aus diesen Verbindungen Pyrit und Methan erzeugen. Diese Reaktion läuft so langsam ab, dass sie sich erst nach Monaten der Inkubation nachweisen ließ. Wie ein Kontroll-experiment zeigte, führen abgetöte-te Bakterien derselben Kulturen die Reaktion nicht mehr durch. Damit ist ausgeschlossen, dass es sich lediglich um eine katalytische Funktion bestimmter Zellkomponenten handelt. Nur lebendige, aktive Mikroben produzieren Pyrit und Methan.

Beide Produkte gehen zudem aus demselben Stoffwechsel hervor. Mit einem Inhibitor, der die Methanproduktion bei Methanogenen hemmt, unterbanden die Forscher gleichzeitig, dass Pyrit entsteht. Auch das Antibiotikum Penicillin hemmt beide Synthesen. Mit hohen Wasserstoffkonzentrationen (79 Volumenprozent) in der Atmosphäre des Experiments und Penicillin zwangen die Forscher die Kulturen auf einen alternativen Stoffwechselweg, der nur Methan liefert und kein Narrengold.

In einer Kultur, die ihre Biomasse nach und nach mehr als verdoppelte, wiesen Genanalysen eine Archäenart nach sowie fünf Bakterienarten. Archäen sind neben Bakterien und Eukaryonten einer der drei Ur-typen lebender Zellen. Sie leben oft in extrem unwirtlichen Umgebungen wie vulkanischem Gestein und Salzseen und sind deshalb für Überlegungen zur Urzeit des Lebens von besonderem Interesse.²⁾ Wie die Archäen mit den Bakterien zusammenarbeiten, um letztendlich Pyrit und Methan zu synthetisieren, müssen weitere Experimente klären. Immerhin gibt es jetzt ein Modellsystem, um die Rolle von Narrengold im geobiochemischen Kreislauf genauer zu untersuchen.

Sedimente und Sauerstoff

Nun könnte man meinen, dass der Ursprung des Lebens auf der Erde ein eher philosophisches Problem ist, da sich auch die besten Theorien kaum beweisen lassen. Die Rolle des Narrengolds in der Geobiochemie beschränkt sich allerdings nicht auf die Urzeit. Etwa fünf Millionen Tonnen Eisensulfid oxidieren pro Jahr in Sedimenten am Meeresboden zu Pyrit, und Pyrit verwittert an der Luft. Beides trägt zur Regulierung des Sauerstoffgehalts der Atmosphäre bei.

Diesem Zusammenhang kamen Itay Halevy vom Weizmann-Institut in Rehovot, Israel, und Kollegen in den USA eher zufällig auf die Spur.³⁾ Sie hatten anhand einer geologischen Datenbank die Schwefelabscheidungen in Sedimenten aus den letzten 550 Millionen Jahren untersucht, also in etwa dem Zeitraum, in dem der Sauerstoffgehalt der Erdatmosphäre auf dem heutigen Niveau von ungefähr 21 Prozent lag.

Vor allem interessierten sich die Forscher für die Abscheidung von Sulfatmineralien wie Gips. Wie sie allerdings zu ihrer Überraschung feststellten, leistet die Oxidation von FeS zu Pyrit einen viel größeren und konstanteren Beitrag zur Bindung von Schwefel in Sedimenten. Während die Abscheidung von Sulfatmineralien aus den Ozeanen schwankte und geringer ausfiel als erwartet, war die Entstehung von Pyrit konstant für 80 Prozent der Gesamtmenge an Schwefel verantwortlich, die den Ozeanen entzogen wurde.

Die Menge an sauerstofffreiem Material, das so aus dem weltweiten Redoxgleichgewicht verschwunden ist, ist so bedeutend, dass es maßgeblich zum gegenwärtigen Sauerstoffgehalt der Atmosphäre beigetragen haben muss. Allerdings handelt es sich nicht um eine Einbahnstraße. Die Umkehrreaktion findet statt, wenn pyrithaltige Sedimente wieder an die Oberfläche gelangen und dort verwittern.

Ob die Pyrite in den Sedimenten rein anorganisch oder mit biologischer Hilfe entstanden sind, beantworten die geologischen Datenbanken nicht. Die Entdeckung von pyritsynthetisierenden mikrobiellen Gemeinschaften bietet allerdings einen Mechanismus, der sich im Laborexperiment weiter testen lässt. Denkbar wäre auch eine Suche nach ähnlichen Mikroorganismen am Meeresboden und in jungen Sedimenten. Auch die Isotopenverteilung des Schwefels in Sedimenten kann weitere Aufschlüsse liefern, wie Halevy und andere Forscher in Israel anhand von Formationen aus der Kreidezeit gezeigt haben.⁴⁾

Sollte sich eine solche Verbindung bestätigen, wäre Pyrit ein weiteres und überaus wichtiges Beispiel für die Wege, auf denen das Leben auf der Erde den Planeten nicht nur besiedelt, sondern verändert hat. <<

Der promovierte Chemiker **Michael Groß** ist freier Wissenschaftsjournalist in Oxford, England. www.michaelgross.co.uk

- 1) J. Thiel, J. M. Byrne, A. Kappler, B. Schink, M. Pester, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2019, 116, 6897–6902
- 2) M. Groß, *Nachr. Chem.* 2018, 66, 722–724
- 3) I. Halevy, S. E. Peters, W. W. Fischer, *Science* 2012, 337, 331–334
- 4) L. Shawar, I. Halevy, W. Said-Ahmad et al., *Geochim. Cosmochim. Acta* 2018, 241, 219–239

AUF EINEN BLICK

Bestimmte Archäen und Bakterien erzeugen aus Eisensulfid, Schwefelwasserstoff und Kohlendioxid zusammen Pyrit und Methan.

Dies lässt sich im Labor nachstellen. Das Modell wird wahrscheinlich helfen, den Ursprung des Lebens zurückzuverfolgen.

Aus 80 Prozent des Schwefels, den die Ozeane in den letzten 550 Millionen Jahren kontinuierlich abgeschieden haben, wurde Pyrit, der Rest zu anderen Mineralien wie Gips. Dies hat zur Regulierung des Sauerstoffgehalts der Atmosphäre beigetragen.

Synthese im Blickpunkt

Stereozentrum wechsle dich

Bei der Totalsynthese von Natur- und Arzneistoffen ist die räumliche Orientierung der Moleküle entscheidend. Die Mitsunobu-Reaktion hat sich bewährt, um chirale, sekundäre Alkohole gezielt in die entsprechenden Enantio- oder Diastereomeren zu invertieren. Eine nebenproduktarme und katalytische Reaktionsführung schien unerreichbar – bis jetzt.

Die Mitsunobu-Reaktion¹⁾ ermöglicht die Veresterung von Carbon- und phosphorigen Säuren mit Alkoholen, die mit Triphenylphosphan (PPh_3) und Diethylazodicarboxylat (DEAD, (3)) aktiviert werden (Abbildung 1a). Unter den Bedingungen lassen sich sowohl primäre als auch sekundäre Alkohole (1) mit Pronukleophilen (2) umsetzen. Da Alkohole ohne Aktivierung nicht mit Pronukleophilen reagieren, sind die Aktivierungsreagenzien in stöchiometrischen Mengen nötig. Als Pronukleophile dienen Carbonsäuren, die zu Carbonsäureestern (4) ($\text{Nu} = \text{OC(O)R}$) reagieren.

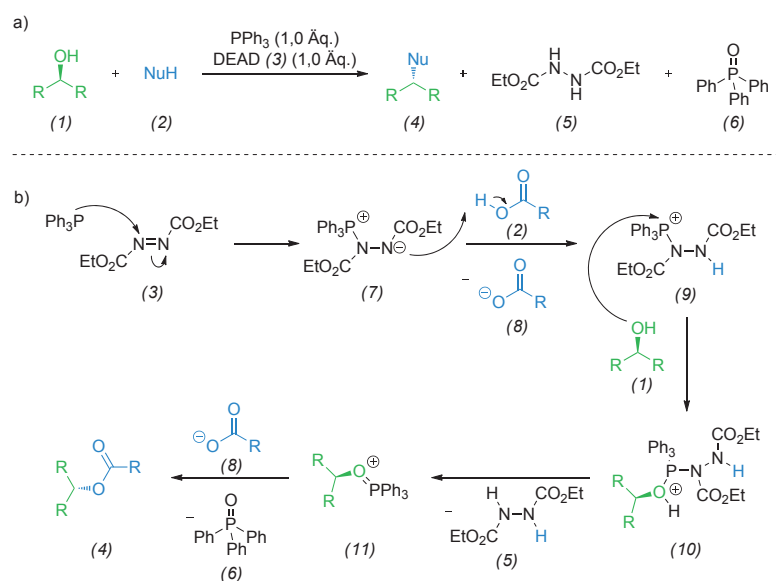


Abb. 1. a) Generelles Schema zur Mitsunobu-Reaktion (DEAD = Diethylazodicarboxylat); b) postulierter Mechanismus.

Das klassische Konzept

Zunächst entsteht durch einen nukleophilen Angriff des Triphenylphosphans (PPh_3) am Stickstoffatom des Diethylazodicarboxylats (3) (DEAD) Betain (7). Dieses deprotoniert zunächst die Carbonsäure (2), das Pronukleophil. Begrenzt wird die Reaktion durch die Azidität der Pronukleophile (2), die vom Betain (7) deprotoniert werden

müssen. Bei Phenolen funktioniert das nicht, weshalb sie sich nicht als Pronukleophile eignen. Die anschließende Reaktion des Intermediats (9) mit Alkohol (1) führt zu (10). Abspalten des Hydrazins (5) generiert die stark aktivierte Spezies (11), die in einer nukleophilen Substitution durch das Carboxylat (8) Triphenylphosphanoxid (6) abspaltet und zum Carbonsäureester (4) reagiert.²⁾

Während der Reaktion wird bei sekundären Alkoholen das Stereozentrum invertiert, da der nukleophile Angriff des Carboxylats (8) nach einem $\text{S}_\text{N}2$ -Mechanismus verläuft (Abbildung 1b). Die Entschüt-

zung des Carboxylats liefert Alkohol (1) mit invertierter Stereochemie.

Diethylazodicarboxylat in katalytischen Mengen

Es sind Syntheserouten etabliert, die katalytisch π -aktivierte Alkohole und Nukleophile verknüpfen, beispielsweise über eine Brønstedt-, eine Lewis-Säure³⁾ oder eine Übergangsmetallkatalyse⁴⁾. Oftmals stabilisieren Carbokationen als Intermediate diese Reaktionsgemische, wodurch racemische Gemische entstehen.

But und Toy haben im Jahr 2006 einen der ersten katalytischen An-



Nina Schützenmeister, Jahrgang 1983, ist seit 2015 Juniorprofessorin für pharmazeutische und medizinische Chemie an der Universität Hamburg. Bei diesem Beitrag wurde sie unterstützt von **Jessica de Vries**.
 schuetzenmeister@chemie.uni-hamburg.de

sätze für die Mitsunobu-Reaktion veröffentlicht.⁵⁾ Sie nutzten Diethylazodicarboxylat (DEAD) (3) in katalytischen Mengen (10 Mol-%, Abbildung 2). Das bei der Reaktion entstehende Hydrazin (5) oxidierten sie mit Diacetoxyiodbenzol (12), das sie in stöchiometrischen Mengen einsetzten. Hinzu kamen stöchiometrische Mengen Triphenylphosphan. Die Ausbeuten der Reaktion lagen für alle Substrate unter den mit klassischen Bedingungen erzielten Ausbeuten: So entstand Verbindung (13) unter stöchiometrischem Einsatz von DEAD (3) in 97 % Ausbeute, unter katalytischen Bedingungen in 76 %. Die Enantiomerenverhältnisse bei der Umsetzung sekundärer Alkohole ähneln denen der klassischen Reaktion (zum Beispiel (14): e.r. = 100:0). Allerdings verschlechtert sich substratabhängig das Enantiomerenverhältnis bei der Umsetzung von 1-Phenylethanol zu Carbonsäureester (15).

Was diese Weiterentwicklung der Mitsunobu-Reaktion trotzdem attraktiv macht: die einfach von der Reaktionslösung zu trennenden Nebenprodukte Phenyljodid und Essigsäure. Zudem entsteht mit substöchiometrischen Mengen DEAD (3) weniger Hydrazin. Trotz mäßiger Ausbeuten erscheint eine teilweise katalytisch durchgeführte Reaktion also zweckmäßig.

Katalysieren mit 1-Phenylphospholan

Im Jahr 2015 publizierten Buonomo und Aldrich eine Mitsunobu-Reaktion mit 1-Phenylphospholan-1-oxid (16) als Präkatalysator. Dieser setzten sie zudem Phenylsilan (18) zur aktiven Spezies, Phospholankatalysator (17), zu reduzieren und im weiteren Verlauf zu rezyklisieren (Abbildung 3a).⁶⁾ Statt DEAD (3) nutzten sie Diisopropylazodicarboxylat (18) (DIAD) in stöchiometrischen Mengen.

Das Phenylsilan (18) reduziert den Phospholankatalysator. Ein Über-

schuss an Silan (18) (6 Äq.) wirkte sich nachteilig auf die Ausbeuten der Reaktion aus (zirka – 30 %), wobei weniger Äquivalente (1,0 Äq.) eine längere Reaktionszeit (48 statt 18 Stunden), aber auch bessere Ausbeuten von bis zu 77 % bedeuten.

Umsetzen lassen sich so primäre Benzyl-, Allyl- und Alkylalkohole mit Ausbeuten zwischen 50 und 84 % sowie sekundäre Alkohole wie (14) und (15) zu 68 beziehungsweise 69 %. Die Enantiomerenverhältnisse betragen >95:5 und 94:6 ((14) beziehungsweise (15), Abbildung 3b). 95 % des Organokatalysators (16) sowie das eingesetzte DIAD (20) ließen sich reisolieren.

Auch in dieser Reaktion ist eine stöchiometrische Menge der Azospezies erforderlich. Jedoch wird die Reaktion ökonomischer und ressourcenschonender, wenn die Aktivierungssagenzien – wie hier möglich – zurückgewonnen werden. Zudem lässt sich die Reaktion durch stöchiometrische Mengen des Oxidationsmittels $\text{H}_2\text{O}_2/\text{NaOCl}$ in Anwesenheit eines Fe-Katalysators auch mit katalytischen Mengen einer Azospezies durchführen. Zwar betragen die Ausbeuten maximal 68 %, dafür verläuft die Reaktion im Hinblick auf die Phosphan- und Azoverbindungen vollständig katalytisch.

Wenn nur noch Wasser entsteht – die ideale Reaktion?

Dass die Mitsunobu-Reaktion auch redoxneutral und organokatalysiert funktioniert, zeigten kürzlich Beddoe und Mitarbeiter.⁷⁾ Bei der Reaktion werden primäre und sekundäre Alkohole nukleophil substituiert, und es entsteht ausschließlich Wasser als Nebenprodukt. Unter den Bedingungen lassen sich stereospezifisch Kohlenstoff-Sauerstoff- und Kohlenstoff-Stickstoff-Verbindungen aufbauen.

Die Methode basiert auf dem Phosphanoxidkatalysator (22). Diesen aktiviert das saure Pronukleophil (2), und nach Ringschluss und Abspaltung von Wasser reagiert

(22) zum Oxyphosphoniumsalz (23). Alkohol (1) initiiert ein Ringöffnung, wodurch die Alkoxyphosphonium-Spezies (24) entsteht. Anschließend nukleophile Substitution liefert nicht nur Produkt (4),

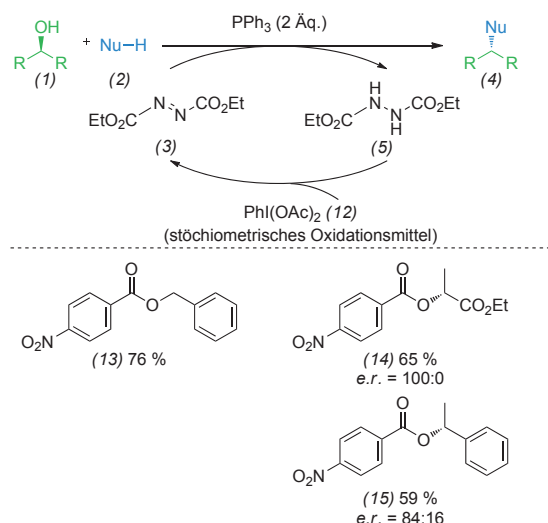


Abb. 2. Weiterentwicklung der Mitsunobu-Reaktion durch katalytischen Einsatz von DEAD.

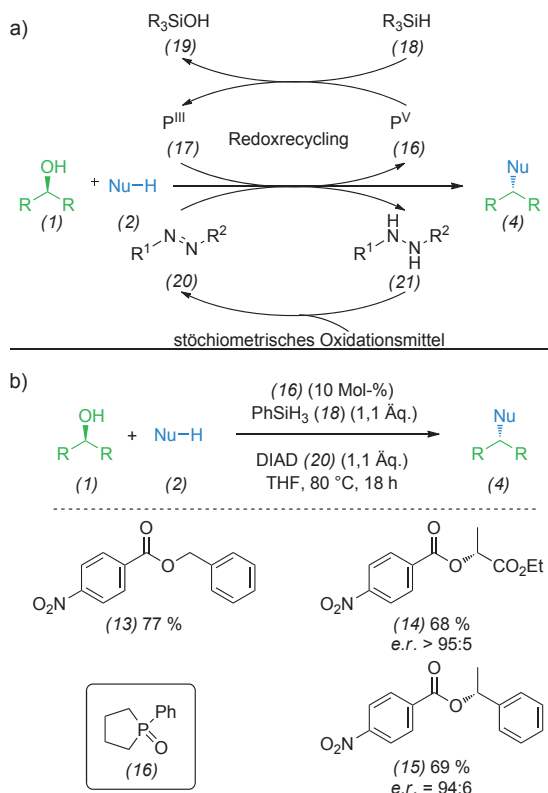


Abb. 3. a) Mechanismus der katalytischen Mitsunobu-Reaktion basierend auf Redoxrecycling. b) Ausschnitt des Substratumfanges von Buonomo und Aldrich.

sondern dient auch der Rückgewinnung des Katalysators (22) (Abbildung 4). Indem das einzige Nebenprodukt über einen Wasserabscheider entfernt wird, lässt sich die Hydrolyse des Phosphoniumsalzes verhindern und die kinetische sowie thermodynamische Stabilität gewährleisten.

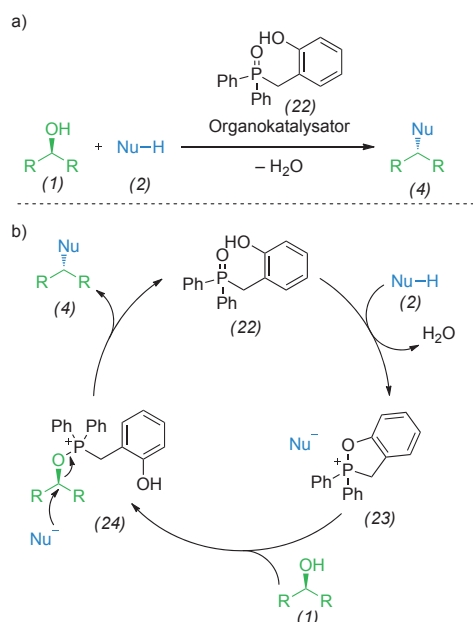


Abb. 4. a) Redoxneutrale, katalytische Mitsunobu-Reaktion nach Beddoe und Mitarbeitern. b) Mechanismus der organokatalysierten Mitsunobu-Reaktion.

Stöchiometrische Veresterungen benötigen oft eine aktivierte Carbonsäure oder saure Bedingungen. Über Beddoes Methode lassen sich zudem sonst schwer zugängliche primäre und sekundäre Alkohole verestern, da viele funktionelle Gruppen im Substrat toleriert werden, etwa Carbonsäureester, Amide, Phtalimide und Nitrile (Abbildung 5). Diese wären unter klassischen Veresterungsbedingungen nicht stabil. Ebenso lassen sich phosphansensitive Substrate wie Alkylbromide und Azide umsetzen.

Pro- und Edukte

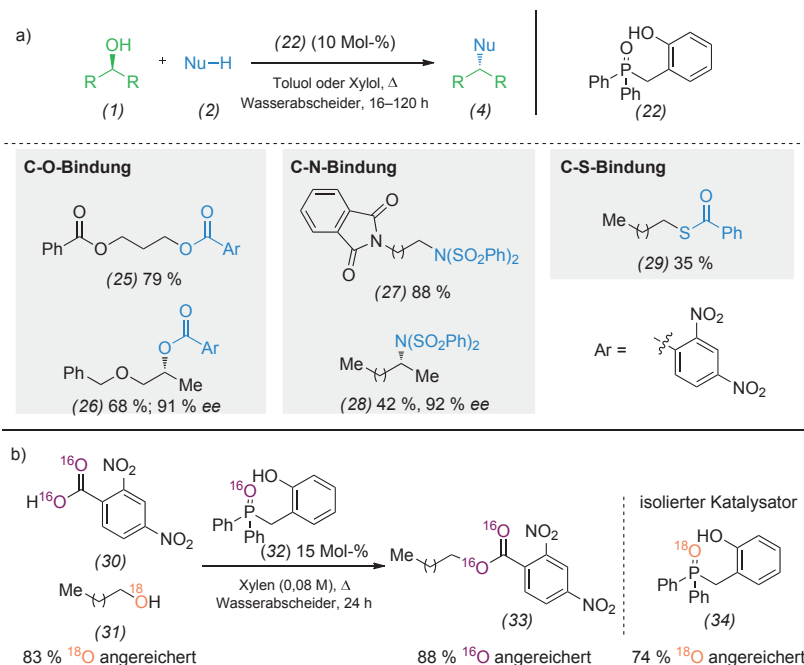
Die Stereozentren sekundärer Alkohole lassen sich mit der redoxneutralen Methode mit Enantiomerenüberschüssen von 67 bis 98 % in die entsprechenden Konfigurationsisomere überführen. Die Methode eignet sich für aliphatische, cyclische bis zu benzylicen, sekundären Alkoholen. Als Pronukleophile dienen 2,4-Dinitrobenzoesäure oder 2-Nitrobenzoesäure. Erhalten wurden Carbonsäureester, die zu-

sätzlich funktionalisiert sind: als Carbonsäureester (25) in 79 %, als Ether (26) in 68 %, aber auch substituiert mit Alken-, Arylchlorid-, Sulfon- und Silylethern in 50 bis 90 % Ausbeute.

Über diese Methode lassen sich nicht nur Carbonsäureester aufbauen: Auch Kohlenstoff-Stickstoff- und Kohlenstoff-Schwefel-Bindungen werden geknüpft. So entstehen mit den entsprechenden Sulfonimiden als Pronukleophile die *N,N*-bis-Sulfonamide (27) und (28) in 88 beziehungsweise 42 % Ausbeute. Thiobenzoessäure liefert mit 35 % Ausbeute den Thioester (29) (Abbildung 5a).

Wie Isotopenmarkierungen zeigen, überträgt ^{18}O -markiertes 1-Decanol (31) während der Reaktion mit 2,4-Dinitrobenzoesäure (30) den ^{18}O -Sauerstoff nicht auf das Produkt (33). Stattdessen findet sich dieses Sauerstoffatom im Katalysator (34) (Abbildung 5b).

- 1) O. Mitsunobu, M. Yamada, Bull. Chem. Soc. Jpn. 1967, 40, 2380–2382
- 2) O. Mitsunobu, Synthesis 1981, 1981, 1–28
- 3) M. Dryzhakov, E. Richmond, J. Moran, Synthesis 2016, 48, 935–959
- 4) B. Sundararaju, M. Achard, C. Bruneau, Chem. Soc. Rev. 2012, 41, 4467–4483
- 5) T. Y. S. But, P. H. Toy, J. Am. Chem. Soc. 2006, 128, 9636–9637
- 6) J. A. Buonomo, C. C. Aldrich, Angew. Chem. Int. Ed. 2015, 54, 13041–13044
- 7) R. H. Beddoe, K. G. Andrews, V. Magné et al., Science 2019, 365, 910–914



AUF EINEN BLICK

Die Mitsunobu-Reaktion funktioniert jetzt auch unter redoxneutralen Bedingungen, Wasser ist das einzige Nebenprodukt.

Die katalytische Variante mindert den Einsatz instabiler Azoverbindungen wie DEAD oder DIAD.

Organokatalytische Reaktionsführung toleriert viele funktionelle Gruppen.

Die Serie Blickpunkt Synthese will zur Beschäftigung mit neuen synthetischen Verfahren oder eleganten und wichtigen organischen Synthesen anregen. Die Beiträge verfassen dieses Jahr Peter Huy und Nina Schützenmeister.

Sensorik

Große Leuchten mit Pillararenen

Pillar[n]arene bilden mit organischen Molekülen Komplexe. Manche von ihnen eignen sich als Chemosensoren – und das nicht nur für Zwischenprodukte.

Chemosensoren spüren in Umweltschutz, Medizin, Sicherheitstechnik und in Produktionsprozessen organische Moleküle auf. Ein Chemosensor besteht aus einer Rezeptor- und einer Meldeeinheit.

Die Schwierigkeit ist, Rezeptoren zu entwickeln, die sowohl empfindlich als auch spezifisch sind. Wie gemacht dafür erscheinen supramolekulare Wirt-Gast-Systeme. Die Komplexbildung verändert die physikalischen und chemischen Eigenschaften von Wirt (host H) und Gast (guest G). Besonders günstig ist die Änderung der Fluoreszenzintensität (Quantenausbeute Φ_F), im Idealfall also eine Schaltung zwischen einem fluoreszierenden und einem nicht-fluoreszierenden Zustand. Sich verstärkende oder abschwächende Lichtsignale lassen sich leicht in elektrische Impulse umwandeln.

Pillar[n]arene, [1.1.1...]*Cyclophane*,¹⁾ enthalten einen zylindrischen Hohlraum mit hoher π -Elektronendichte, in den sich organische Moleküle einfädeln können. Beispiele sind die leicht zugänglichen Pillar[5]²⁾ und Pillar[6]arene³⁾. Die Fluoreszenz resultiert dabei aus fluorophoren Gruppen im Wirt- oder im Gastmolekül oder auf einer aggregationsinduzierten Emission (AIE).

Wirt-Gast-Systeme

Das Pillar[5]aren H1 enthält zwei Chinoxalinbausteine, die über Thioetherbrücken an das Pillar[5]aren-Gerüst binden (Abbildung 1). Dinitrile wie G1 fädeln in den Hohlraum von

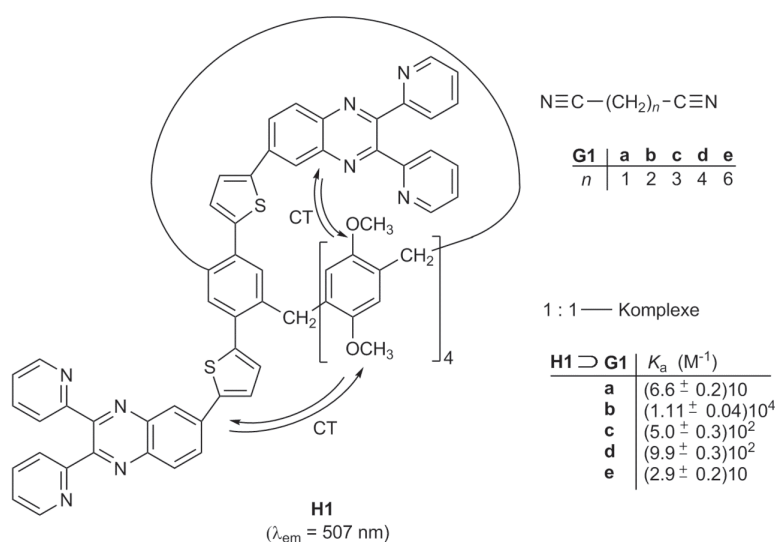


Abb. 1. Komplexbildung von Pillar[5]aren H1 und Dinitrilen G1a–e zu den Wirt-Gast-Systemen H1⊃G1a–e mit den Bindungskonstanten K_a .

H1 ein. Die so entstehenden 1:1-Komplexe H1⊃G1 mit den Bindungskonstanten K_a zeigen bei 507 nm einen Elektronenübergang mit Charge-Transfer-Charakter. Bei der Absorption fließt Elektronendichte von den methoxysubstituierten Benzenringen zu den Chinoxalinbausteinen, bei der Emission läuft der Vorgang in umgekehrter Richtung.⁴⁾

Dichtefunktionaltheorierechnungen liefern die elektrostatischen Potentiale der Komplexe H1⊃G1a und H1⊃G1b.⁴⁾ Die Cyanogruppen der Gastmoleküle ziehen Elektronen aus ihrer Umgebung an. Malonsäuredinitril G1a als Gast sitzt in der Mitte der Kavität, was dort hohe Elektronendichte bewirkt. Diese erschwert die Elektronenrückkehr unter Fluoreszenz.

Im Komplex H1⊃G1b dagegen befinden sich die CN-Gruppen am

Rand der Kavität, wie eine Kristallstrukturanalyse bestätigt. Dies erleichtert den Elektronenrückfluss bei der Emission in das Zentrum. Die Intensität der Fluoreszenz nimmt bei der Komplexbildung von G1a in H1 ab, bei der Komplexbildung von G1b und den höheren homologen Dinitrilen dagegen zu. Abbildung 2 zeigt die beiden Fluoreszenz-Titrationsen.⁴⁾

Derong Cao leitet seit 2008 die School of Chemistry and Chemical Engineering der South China University of Technology in Guangzhou, China. Seine Hauptarbeitsgebiete sind funktionale organische Moleküle und Materialien. Er promovierte im Jahr 1997 bei Herbert Meier.

Herbert Meier hat seit 2005 eine Forschungsprofessur an der South China University of Technology in Guangzhou. Dort bearbeitet er das gleiche Forschungsgebiet wie sein Coautor. Von 1982 bis 2005 hatte er den Horner-Lehrstuhl an der Universität Mainz inne.



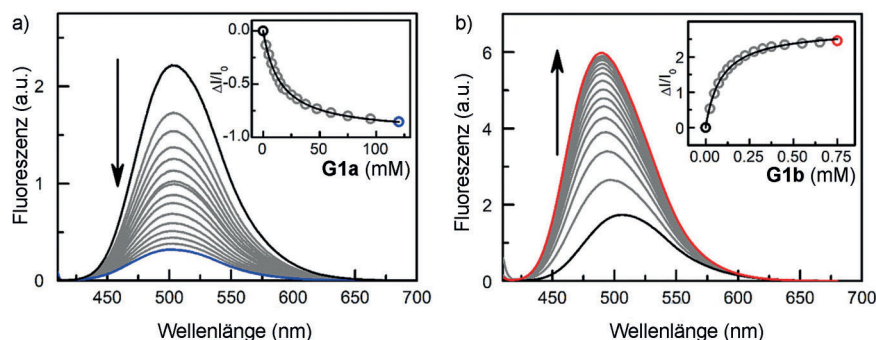


Abb. 2. Fluoreszenz-Titration von Pillar[5]aren H1 mit Malonsäuredinitril G1a (links) und Bernsteinsäuredinitril G1b (rechts) in CDCl_3 . Einschübe: Bindungsisothermen.

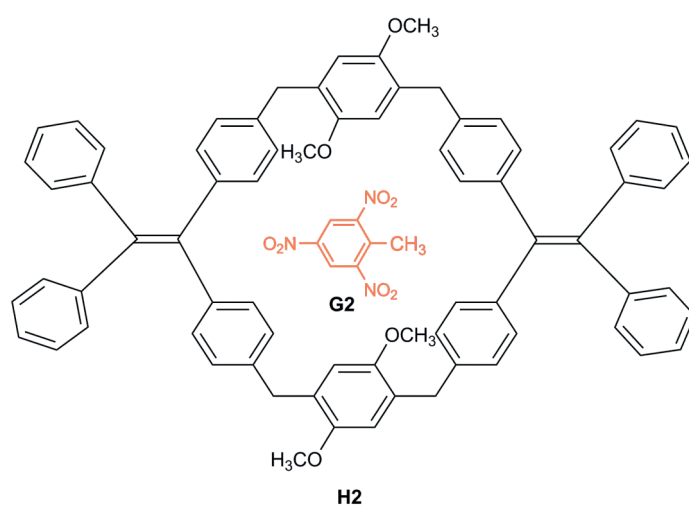


Abb. 3. Nachweis von Trinitrotoluol TNT (G2) durch Komplexbildung in Pillar[6]aren H2.⁵⁾

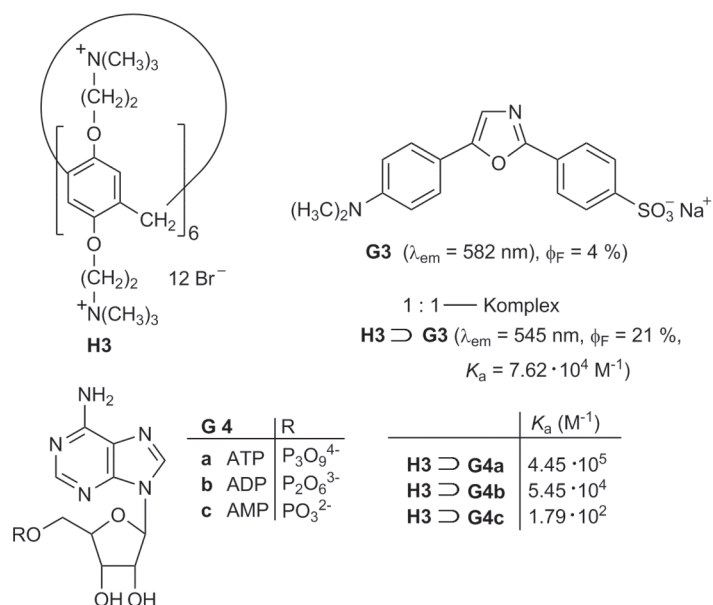


Abb. 4. Funktion eines Chemosensors für ATP (G4a) auf der Basis der Verdrängung des Fluoreszenzindikators G3 im Komplex mit H3.

Sprengstoffe und Biochemie

Mit dem Pillar[6]aren H2 lassen sich Spuren von Trinitrotoluol TNT (G2) in der Luft nachweisen (Abbildung 3).⁵⁾ Die aggregationsinduzierte Emission einer Suspension von H2 in $\text{H}_2\text{O}/\text{THF}$ (95:5) zeigt eine Fluoreszenz ($\lambda_{\text{em}} = 475 \text{ nm}$, $\Phi_{\text{F}} = 24\%$), die im Komplex $\text{H2} \supset \text{G2}$ nahezu gelöscht wird. Andere Nitroaromaten wie Pikrinsäure haben keinen oder einen schwächeren Effekt.

Das Sulfonat G3 (Abbildung 4)⁶⁾ fluoresziert in gepufferter, wässriger Lösung nur leicht ($\lambda_{\text{em}} = 582 \text{ nm}$, $\Phi_{\text{F}} = 4\%$). Diese Fluoreszenz ist im Komplex $\text{H3} \supset \text{G3}$ etwas verschoben und enorm verstärkt ($\lambda_{\text{em}} = 545 \text{ nm}$, $\Phi_{\text{F}} = 21\%$). Bei Zufügen von Adenosin-5-triphosphat (ATP G4a) verdrängt G4a den Fluoreszenzindikator G3 im Komplex, da die Bindungskonstante von $\text{H3} \supset \text{G4a}$ größer ist als die von $\text{H3} \supset \text{G3}$. Daher nimmt die Fluoreszenzintensität ab, es resultiert eine Rückverschiebung zum ursprünglichen Emissionsmaximum (Abbildung 5). Mit Adenosindiphosphat (G4b) und Adenosinmonophosphat (G4c) tritt dieser Effekt nicht auf, da deren Bindungskonstanten kleiner sind als die von G3.⁶⁾

Medikamente und Wirkstoffe

Ein mit dem Pillar[5]aren H4 funktionalisiertes, reduziertes Graphenoxid eignet sich als empfindlicher und selektiver Chemosensor für das Schmerz- und Fiebermittel Paracetamol (Abbildung 6).⁷⁾ Das zunächst komplexierte Acridinorange (G5) fluoresziert nicht, da Graphen als Quencher wirkt. Wird jedoch Paracetamol (G6) hinzugefügt, verdrängt es G5 aus dem Komplex, und G5 beginnt, hell zu fluoreszieren.

Ähnlich funktioniert ein Sensor für Paraquat (1,1-Dimethyl-4,4-bipyridiniumdichlorid), ein weit verbreitetes toxisches Herbizid. Ein auf Graphen gepropftes Pillar[5]aren wird mit Safranin T, ei-

nem Phenazinfarbstoff, komplexiert. Kommt Paraquat dazu, verdrängt es Safranin T aus dem Komplex, und die zunächst durch das Graphen gequenchete rote Fluoreszenz kehrt zurück. Der Nachweis gelingt in vitro wie in vivo bei Mäusen, die Paraquat aufgenommen haben.⁸⁾

Ein weiteres Beispiel ist ein integriertes System, um Glukose und die damit verbundene Freisetzung von Insulin zu bestimmen.⁹⁾ Das wasserlösliche Pillar[5]aren H5 komplexiert den Glukoserezeptor G7 durch Einfädeln der Seitenkette von G7. Die Selbstorganisation dieses Ensembles führt zu Vesikeln. Die π - π -Wechselwirkung von deren Pyreneinheiten erzeugt eine Exzimerfluoreszenz bei $\lambda = 470$ nm. Durch Andocken dieser Pyrene an die zweifache Phenylboronsäurepartialstruktur des Rezeptors lässt sich Glukose selektiv erkennen. Das Andocken führt zur Aufspaltung der Vesikel, und die Monomerfluoreszenz bei 375 nm ersetzt die Exzimerfluoreszenz. Werden die Vesikel vorher mit Insulin beladen, lässt sich durch ihre Auflösung Insulin kontrollierbar freisetzen (Abbildung 7).

- 5) J.H. Wang, H.T. Feng, Y.S. Zheng, Chem. Commun. 2014, 50, 11407
- 6) M. Bojtár, J. Kozma, Z. Szakács, et al., Sens. Actuators B 2017, 248, 305
- 7) G. Zhao, L. Yang, S. Wu et al., Biosens. Bioelectron. 2017, 91, 863

- 8) X. Mao, T. Liu, J. Bi et al., Chem. Commun. 2016, 52, 4385
- 9) M. Zuo, W. Qian, Z. Xu et al., Small 2018, 14, 1801942

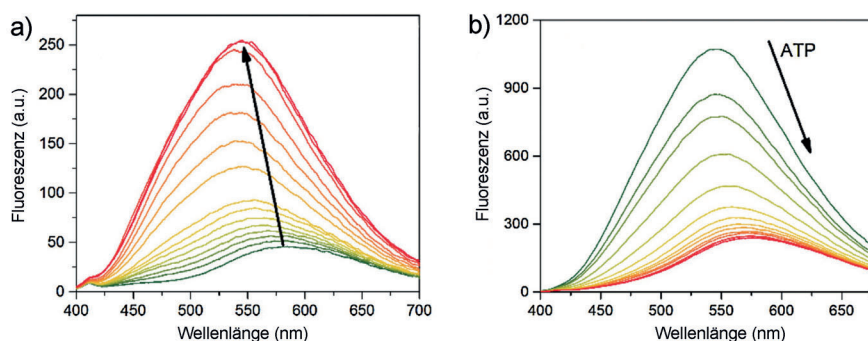


Abb. 5. a) Zunehmende Fluoreszenz von Dapoxylnatriumsulfat (G3) bei Zufügen von Pillar[6]aren H3 in gepufferter wässriger Lösung. b) Abnehmende Fluoreszenz von H3 G3 bei Zugabe von ATP (G4).

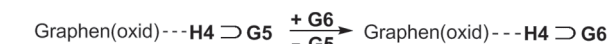
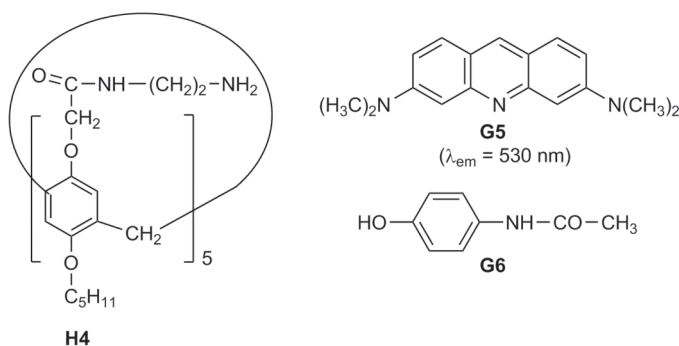


Abb. 6. Auf reduziertes Graphenoxid gepfropftes Pillar[5]aren H4, das mit dem Fluoreszenzindikator Acridinorange (G5) Paracetamol (G6) nachweist.

- 1) H. Meier, D. Cao, Nachr. Chem. 2013, 408
- 2) T. Ogoshi, S. Kanai, S. Fujinami, T.-A. Yamagishi, Y. Nakamoto, J. Am. Chem. Soc. 2008, 130, 5022
- 3) D. Cao, Y. Kou, J. Liang, Z. Chen, L. Wang, H. Meier, Angew. Chem. 2009, 121, 9901
- 4) W. Cui, L. Wang, L. Xu et al., J. Phys. Chem. Lett. 2018, 9, 1047

AUF EINEN BLICK

Pillar[n]arene komplexieren organische Moleküle. Dies kann Fluoreszenz hervorrufen oder löschen.

Als Chemosensoren zeigen Pillar[n]arene beispielsweise Sprengstoffe, Medikamente und Pflanzenschutzmittel an.

Mit wasserlöslichen Pillararenen lässt sich Glukose nachweisen und mit einer Freisetzung von Insulin verknüpfen.

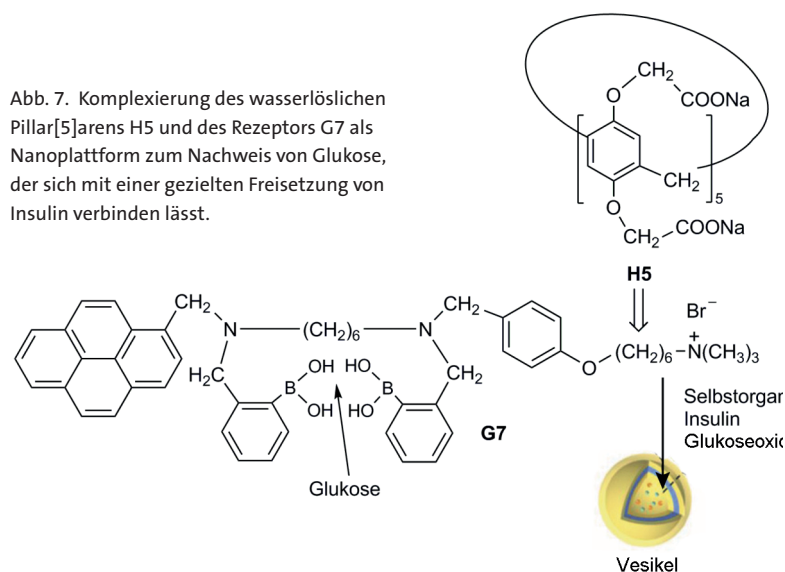


Abb. 7. Komplexierung des wasserlöslichen Pillar[5]arens H5 und des Rezeptors G7 als Nanoplatteform zum Nachweis von Glukose, der sich mit einer gezielten Freisetzung von Insulin verbinden lässt.

The Molecular Marvels of Thor



Thor is the God of Thunder in Norse mythology—but also in the Marvel comic book and cinematic universes. This article aims at hammering out the hypothetical chemistry behind the five most probable chemical components of his signature hammer, Mjolnir.

„Marvel is a cornucopia of fantasy, a wild idea, a swashbuckling attitude, an escape from the humdrum and the prosaic,” said the American comic book creator Stan Lee. His genius facilitated the birth and fame of many popular icons, such as Spider-Man, Captain America, and the Mighty Thor.

Although Lee claimed himself to be „the least scientific person you’ll ever know”, many superheroes in Marvel Comics were inspired by chemistry and have names borrowed from the elements: e.g., Iron Man, Ironheart, Iron Monger, Iron Fist, Silver Surfer, Silver Sable, Silver Samurai, Silver Claw, Silver Fox, Silvermane, Quicksilver, Cobalt Man, Titanium Man, the Mercury Team, and Magneto’s Magnetic Men including Cobalt, Antimony, Iron, Bismuth, and Nickel.

Myths and legends have had an influence on scientists when coining the names of elements: e.g., tantalum, niobium, selenium, tellurium, and plutonium [6]. The most famous mythological character, who has inspired both chemical nomenclature and superhero comic book fiction, is resoundingly the Norse deity of thunder—Thor. Thor’s powers inspired the Swedish chemist Jöns Jacob Berzelius to name element 90 of the periodic table Thorium (Th) in 1828.

Read full article in ChemistryViews.org
<https://doi.org/10.1002/chemv.201900070>

Lighting Up Your Proteins

There are about 500 naturally occurring amino acids, although a mere 20 of those are coded in our DNA as the building blocks of the proteins. Fundamentally though, there is an almost limitless number of hypothetical amino acids. Indeed, many synthetic amino acids have been synthesized for a wide range of applications.

It would be useful to find synthetic amino acids that could be substituted for their natural counterparts in a functioning protein to give said protein a new and useful extra property without disturbing its usual form and function. Unfortunately, finding and synthesizing such non-canonical amino acids is costly, and even when they can be produced, they often disrupt the target protein’s conformation and, thus, its functionality.

Frances H. Arnold, California Institute of Technology (CalTech), Pasadena, USA, and colleagues have found a new way to make the blue fluorescent non-canonical amino acid β -(1-azulenyl)-L-alanine (AzAla). The process involves a single enzymatic reaction step to give AzAla from readily available azulene and L-serine. The enzyme used for the production was an engineered tryptophan synthase that makes the target amino acid from the starting materials in a scalable manner. The product can be swapped into a protein to replace tryptophan without disrupting the conformation or the function of that protein. However, it still provides the benefit of adding a fluorescent marker to the protein that can be used as a tag for spectroscopic studies.

Read full article in ChemistryViews.org
<https://doi.org/10.1002/chemv.201900099>

Guess the Chemist

The chemist we are looking for this time lived in the 19th century and founded the oldest chemical trade journal in Germany.

He or she worked, e.g., on the chemistry of nickel and dyes and was involved in the determination of atomic weights.

Who are we looking for?

Find out on ChemistryViews.org: <https://doi.org/10.1002/chemv.201900108>



ChemistryViews.org is an international online magazine and offers news on latest research and the chemical industry, interviews, and additional features. This page gives a tiny selection of ChemistryViews’ articles. ChemistryViews.org and Nachrichten aus der Chemie cooperate within ChemPubSoc Europe, an organization of 16 European chemical societies including the GDCh.
www.chemistryviews.org

INTERSKRIPTUM

Wenn es nobel kribbelt

Gehören Sie auch zu den Menschen, die jedes Jahr Anfang Oktober dieses Kribbeln spüren? Dann, wenn die Hohepriester in Stockholm über die Zuteilung der Preise an diejenigen entscheiden, „die im verflossenen Jahr der Menschheit den größten Nutzen geleistet haben“, wie Alfred Nobel in seinem Testament festlegte?

Es gibt drei Gruppen, bei denen beim Näherrücken des Nobelpreistermins der Blutdruck steigt: die neugierigen Wissenschaftsbegeisterten, die professionellen Wissenschaftsberichtenden und die nobelpreiswürdigen Wissenschaftsbetreibenden.

Die letzte Gruppe ist überschaubar und – seien wir ehrlich – die meisten von uns gehören nicht dazu. Immerhin bleibt uns die Hoffnung, wenigstens nahe am Nobelpreis dran zu sein. Thematisch zum Beispiel (mein ehemaliges Forschungsgebiet wurde übrigens auch mal ausgezeichnet, ehrlich wahr). Besser noch: Man kennt die Nobelpreisträger persönlich. Oder man kennt einen, der einen Nobelpreisträger kennt, oder einen, der einen kennt, der einen Nobelpreisträger kennt.

Wer völlig verzweifelt ist und in dieser publicitygeilen Welt nicht untergehen will, schickt eine Pressemitteilung heraus mit dem Titel: „Verband XY gratuliert den YZ-Nobelpreisträgern“. Die freuen sich sicher ganz doll darüber.

Genug gespottet – der Nobelpreis bietet die Chance, Wissenschaft weit über die Community hinaus zu promoten. Auch uns Wissenschaftlern selbst gibt der Preis Gelegenheit zur Reflexion: Warum dieses Fachgebiet? Warum genau diese Laureaten? Wie sieht die aktuelle Forschung aus? Antworten darauf finden Sie für den Chemienobelpreis in diesen *Nachrichten* auf S. 48.

In die unendliche Weite geht dieses Jahr der Physiknobelpreis – nämlich für Zeugs im All, das nie zuvor ein Mensch gesehen hatte. Kosmologie ist auch für die Chemie interessant: Draußen im Universum entstanden und entstehen ja die ganzen schönen Elemente, von denen wir im letzten Heft in den Elementerätseln wieder zwei gesucht haben: Au und C. Die Kernfusion zu Gold benötigt eine solche Energie, wie sie nur bei der Kollision von Neutronensternen frei wird; Kohlenstoff entsteht durch vergleichsweise normale Fusion im Sterninneren beim Drei-Alpha-Prozess, dem Heliumbrennen. Der Stern macht fröhlich weiter, nämlich mit dem Kohlenstoffbrennen: Kohlenstoffkerne fusionieren mit Heliumkernen zu Sauerstoff.

Tja, wir alle sind und atmen Sternenstaub.



Im Interskriptum schreibt Nachrichten-Chefredakteur **Christian Remenyi** über Chemisches und Komisches – und was sich sonst noch so im Zettelkasten der Redaktion findet.
nachrichten@gdch.de

Illustration: Uta Neubauer

Ehrungen

Vincenzo Balzani, Prof. em. Dr., früher Univ. Bologna: *Primo Levi Award* der GDCh und der Italienischen Chem. Ges.

Armin Bunde, Prof. Dr., **Jürgen Caro**, Prof. Dr., **Jörg Kärger**, Prof. Dr. und **Gero Vogl**, Prof. em. Dr.: *Literaturpreis des FCI* für das Buch „Diffusive Spreading in Nature, Technology and Society“. Die Auszeichnung ist mit 20 000 Euro dotiert.

Elena Conti, Prof. Dr., Max-Planck-Inst. für Biochemie, Martinsried: *Schleiden-Medaille* der Nationalen Akad. der Wiss. Leopoldina für ihre Erkenntnisse zum RNA-Transport innerhalb der Zelle sowie zum RNA-Stoffwechsel.

Patrick Cramer, Prof. Dr., Max-Planck-Inst. für biophysikal. Chemie, Göttingen: *Ernst-Schering-Preis 2019* für seine Forschungsarbeiten zur Transkription und Genregulation auf molekularer und zellulärer Ebene. Die Auszeichnung ist mit 50 000 Euro dotiert.

Frank Glorius, Prof. Dr., Org.-Chem. Inst. der Univ. Münster: *Publikationspreis Fluorchemie* der AG Fluorchemie für seine Veröffentlichung „Hydrogenation of fluoroarenes: Direct access to all-cis-(multi)fluorinated cycloalkanes“ in *Science* 2017, 357, 908–912. Die Auszeichnung ist mit 1000 Euro dotiert.

Michael Hellwig, Dr., Inst. für Lebensmittelchemie der TU Dresden: *Werner-Baltes-Preis des jungen Wissenschaftlers* der Lebensmittelchem. Ges., Fachgruppe in der GDCh, in Anerkennung seiner Arbeiten zur Chemie und Funktionalität von Lebensmittelproteinen, insbes. der Synthese und Strukturaufklärung oxidativer Proteinmodifikationen. Die Auszeichnung ist mit 2000 Euro dotiert.

Lothar W. Kroh, Prof. Dr., Inst. für Lebensmitteltechnologie und Lebensmittelchemie der TU Berlin: *Joseph-König-Gedenkmünze* der GDCh in Anerkennung seiner wissenschaftl. Leistungen und für sein großes Engagement für die Sichtbarkeit der Lebensmittelchemie.

Henning Sören Kuchenbuch, Dr., Inst. für Lebensmittelchemie der Univ. Münster: *Gerhard-Billek-Preis* der GDCh für seine Dissertation „Investi-

gations on the stability and degradation of T-2 toxin during thermal food processing“. Die Auszeichnung ist mit 2000 Euro dotiert.

Crispin Lichtenberg, Dr., Inst. für Anorg. Chemie der Univ. Würzburg: *EurJIC-Wöhler Young Investigator Award* der Wöhler-Vereinigung, Fachgruppe in der GDCh, und der Zeitschrift *European Journal of Inorganic Chemistry* für seine Veröffentlichung in *Angew. Chem. Int. Ed.* 2018, 57, 3828–3829. Die Auszeichnung ist mit 1500 Euro dotiert.

Nuno Maulide, Prof. Dr., Inst. für Org. Chem. der Univ. Wien: *Tetrahedron Young Investigator Award* für seine Beiträge zur Methodenentwicklung in der org. Chemie sowie der Naturostoffsynthese. Die Auszeichnung ist mit 3000 US-Dollar dotiert.

Herbert Mayr, Prof. Dr., Dept. Chemie der LMU München: *James-Flack-Norris-Award 2020* for Physical Organic Chemistry der American Chemical Society.

Walter Neupert, Prof. Dr., früher Max-Planck-Inst. für Biochemie, Martinsried: *Cothenius-Medaille* (posthum) der Nationalen Akad. der Wiss. Leopoldina für sein wiss. Lebenswerk.

Julian Thiele, Dr., Leibniz-Inst. für Polymerforschung, Dresden: *Georg-Manecke-Preis* der GDCh für seine Arbeiten zur Polymerchemie, bei der er natürliche Mechanismen nachahmt, um reaktionsfähige Materialien herzustellen.

Susan Trumbore, Prof. Dr., Max-Planck-Inst. für Biogeochemie in Jena: *Marsh Award* der Britischen Ökolog. Gesellschaft. Der Preis ist mit 1000 brit. Pfund dotiert.

Karriere

Amitabh Banerji, Prof. Dr., Inst. für Chemie der Univ. Potsdam, hat das Bleibeangebot an dieser Univ. angenommen und wird zum W3-Prof. ernannt. Den Ruf auf eine W3-Professur für Fachdidaktik Chemie an der Univ. Tübingen lehnte er ab.

Nuno Maulide, Prof. Dr., Inst. für Org. Chemie der Univ. Wien, ist neuer Ad-

junct PI beim CeMM – Center for Molecular Medicine der Österr. Akad. der Wiss.

Matthias Rehahn, Prof. Dr., Inst. für Makromol. Chemie der TU Darmstadt, ist seit 1. September 2019 neuer Wissenschaftlicher Geschäftsführer des Helmholtz-Zentrums Geesthacht (Nachf. Wolfgang Kaysser, Prof. Dr.)

Förderung

ERC Starting Grants 2019

Einen Starting Grant des Europäischen Forschungsrats in den chemienahen Förderbereichen erhielten:

Job Boekhoven, Prof. Dr., TU München, Garching,
Josep Cornella, Dr., MPI für Kohlenforschung, Mülheim,
Renhao Dong, Dr., Fak. für Chemie und Lebensmittelchemie der TU Dresden,
Barbara Lechner, Dr., Dept. Chemie der TU München, Garching,
Stephan Hamperl, Dr., Helmholtz-Zentrum München,
Thomas Jagau, Dr., Dept. Chemie der LMU München,
Wolfgang Tress, Dr., Dept. Chemie der LMU München,
Georg Winter, Dr., Forschungszentrum für Molekulare Medizin, Wien.

Bei Geburtstagen im Bilde

Die *Nachrichten aus der Chemie* dokumentieren Geburtstage der GDCh-Mitglieder in Fünfjahresschritten – beginnend mit dem 65. Zu diesem Termin laden wir die Jubilare per E-Mail ein, der Redaktion ein Foto (300 dpi) zu zusenden, das wir bei verfügbarem Platz nach dem Prinzip first-come, first-served veröffentlichen. Mitglieder, die keine Veröffentlichung ihres Geburtstags wünschen, teilen dies bitte dem GDCh-Mitgliederservice mit: ms@gdch.de, Tel.: 069 7917–372



Patrick Cramer



Susan Trumbore



Amitabh Banerji

Geburtstage im Dezember

Helmut G. Alt, Prof. Dr., Bayreuth:
75. Geburtstag am 3.

Gisela Anderson, Langen Brütz,
Verbraucherzentrale Mecklenburg-
Vorpommern, Schwerin:

65. Geburtstag am 30.

Geza Avar, Dr., Leverkusen:

70. Geburtstag am 1.

Helmut Becker-Roß, Dr., Berlin:

75. Geburtstag am 17.

Thomas Beisswenger, Prof. Dr.,
Bad Vilbel: 65. Geburtstag am 22.

Otto Berendes, Dr., Dormagen:

85. Geburtstag am 27.

Hans Jürgen Betche, Dr., Vörssteden:
70. Geburtstag am 24.

Joachim Blanz, Dr., Steinen,
Novartis Pharma, Basel:

65. Geburtstag am 23.

Gisela Boeck, Dr., Rostock,
Inst. für Chemie der Univ. Rostock:
65. Geburtstag am 3.

Reinhold Böhm, Dr., Lörrach:

85. Geburtstag am 19.

Siegfried Böhm, Dr., Überlingen:

75. Geburtstag am 6.

Hermann Bozler, Dr., Gundelfingen:

70. Geburtstag am 18.

Manfred Brehm, Dr.-Ing., Berlin:

70. Geburtstag am 22.

Werner Brich, Dr., Eschborn:

70. Geburtstag am 23.

Hans Brückner, Prof. Dr., Ostfildern:

75. Geburtstag am 28.

Helga Brune, StR., Bissendorf:

70. Geburtstag am 7.

Friedemann Dinglinger, Dr., Stuttgart:

80. Geburtstag am 5.

Stephan Doerfelt, Dr., Glauchau:

65. Geburtstag am 1.

Hermann Eichholz, Dr., Krefeld:

65. Geburtstag am 5.

Armin Förtsch, Dr., Berlin, Bayer,

Leverkusen: 65. Geburtstag am 7.

Edgar Friedrich, Dr., Taunusstein:

70. Geburtstag am 18.

Hermann Josef Frohn, Prof. Dr.,

Kempfen: 75. Geburtstag am 3.

Klaus Funke, Prof. Dr., Münster:

75. Geburtstag am 16.

Eduard Gast, Dr., Kraiburg:

80. Geburtstag am 8.

Thomas Geiger, Dr., Dießen:

70. Geburtstag am 18.

Klaus Geschwill, Dr., Gießen,
NuGenesis Technologies, Gießen:
65. Geburtstag am 5.

Wolfgang Geßner, Prof. Dr., Berlin:

85. Geburtstag am 25.

Bernd Greving, Dr., Marl:

75. Geburtstag am 31.

Rainer Guggenberger, Dr., Herrsching:

65. Geburtstag am 21.

Manfred Hagmann, Dipl.-Ing.,
Herrenberg, SAS hamann, Horb:

65. Geburtstag am 15.

Ralf-Hermann Harms, Dr., Neu-
Isenburg: 70. Geburtstag am 6.

Hermann Hauer, Dr., Karlsruhe,
Dr. Willmar Schwabe, Karlsruhe:

65. Geburtstag am 4.

Thomas Haug, Dr., Kirchentellinsfurt,
Isotopenlabor der Univ. Tübingen:

65. Geburtstag am 14.

Peter Hegemann, Prof. Dr., Falkensee,
Experimentelle Biopsysik der HU Ber-
lin: 65. Geburtstag am 11.

Heinz Walter Hein, Dipl.-Chem.,
Chemnitz, Reisewitz Beschichtungs-
gesellschaft, Penig:

65. Geburtstag am 27.

Wilfried Helbig, Dr., Neustadt:

65. Geburtstag am 12.

Ralph Hensel, Dr., Hamburg:

65. Geburtstag am 23.

Dietrich Hörner, Dr., Haßloch:

75. Geburtstag am 16.

Georg-Alexander Hoyer, Prof. Dr.,
Berlin: 85. Geburtstag am 28.

Walter Illger, Dr., Bous:

75. Geburtstag am 3.

Karl-Heinz Jung, Dr., Konstanz:

70. Geburtstag am 27.

Rolf Keck, Dr., Rust:

70. Geburtstag am 5.

Uwe Keup, Dr., Herdecke:

80. Geburtstag am 30.

Erhard Kirchhoff, Dr., Berlin:

70. Geburtstag am 28.

Reinhard Knauf, OstR., Ebsdorfer-

grund: 75. Geburtstag am 5.

Jochen Knecht, Dr., Essen:

70. Geburtstag am 25.

Barbara Köhler, Steinbach (Ts.), GDCh,
Frankfurt: 65. Geburtstag am 22.

Gerhard Langbein, Dr., Jena:

90. Geburtstag am 24.

Jörg Leenings, Dipl.-Ing., Grainau:

65. Geburtstag am 19.

Hans-Jürgen Leuchs, Dr., Ingelheim:

70. Geburtstag am 7.

Hans Jörg Lindner, Prof. Dr.-Ing.,

Darmstadt: 80. Geburtstag am 3.

Bernd Loewer, Dr., Hamburg:

70. Geburtstag am 29.

Reinhold Löhr, Dr., Bergisch Gladbach:

65. Geburtstag am 25.

Udo Mallick, Dr., Berlin:

70. Geburtstag am 29.

Walter Meckel, Dr., Düsseldorf:

80. Geburtstag am 6.

Manfred Meisel, Prof. Dr., Berlin:

80. Geburtstag am 9.

Walter Mennicke, Dr., Köln:

80. Geburtstag am 24.

Joachim Moede, Dr., Berlin,

Schering, Turku/Finnland:

65. Geburtstag am 31.

Horst Mons, Dr., Ibbenbüren:

65. Geburtstag am 18.

Manfred Müller, Dr., Alfeld:

80. Geburtstag am 22.

Istvan Nadidai, Dr., Düsseldorf:

70. Geburtstag am 21.

Klaus Naumann, Dr., Leverkusen:

80. Geburtstag am 10.

Thomas Netscher, Dr., Bad Krozingen,
DSM Nutritional Products Europe,

Basel: 65. Geburtstag am 30.

Werner Niggemann, Dr., Overath:

70. Geburtstag am 4.

Gerhard Nolte, Dr., Erftstadt:

85. Geburtstag am 1.

Oskar Nuyken, Prof. Dr.-Ing.,

München: 80. Geburtstag am 17.

Gabriel Obiora Odenigbo, Dr.,

Hamburg: 80. Geburtstag am 27.

Richard Öhlinger, Dr., Österreichische

Agentur für Gesundheit und Ernäh-

rungssicherheit, Linz:

65. Geburtstag am 24.

Christof Palm, Dr., Ludwigshafen:

85. Geburtstag am 10.

Dieter Palm, Prof. Dr., Gerbrunn:

85. Geburtstag am 10.

Manfred Peuscher, Dr., Neuss:

70. Geburtstag am 5.



Werner Brich



Friedemann
Dinglinger



Barbara Köhler

Hermann Pütter, Dr., Neustadt:

75. Geburtstag am 27.

Martin Rapp, Dr., Oberschleißheim, Bayer. Landesamt für Gesundheit und Lebensmittelsicherheit, Oberschleißheim: 65. Geburtstag am 15.

Birgit Rasper, Dr., Ratingen, Bayer, Leverkusen: 65. Geburtstag am 17.

Reinhard Rasper, OstR., Düsseldorf: 75. Geburtstag am 11.

Birgit Rebmann, LM-Chem., Neustadt: 75. Geburtstag am 3.

Klaus Redecker, Dr., Nürnberg: 80. Geburtstag am 7.

Jürgen Röder, Dr., Geislingen: 75. Geburtstag am 29.

Günter Rosner, Dipl.-Chem., Berlin: 85. Geburtstag am 21.

Michael Rössert, Dr., Unterschleißheim: 70. Geburtstag am 3.

Dieter Sauermann, Prof. Dr., Olching: 85. Geburtstag am 18.

Michael Matthias Schaal, Dr., München: 75. Geburtstag am 16.

Karola Schäfer, Dr., Aachen: 65. Geburtstag am 2.

Willy Schiwy, Kiel:

75. Geburtstag am 4.

Hubert Schmidbaur, Prof. Dr., Garching [vgl. „Wer ist's?“, *Nachr. Chem. Tech. Lab.* 1982, 30, 308]: 85. Geburtstag am 31.

Jürgen Schmitt, Dr., Kirchhain, B. Braun, Melsungen:

65. Geburtstag am 22.

Ebbo Michael Schnaith, Dr. Dr. med., Fürstzell: 70. Geburtstag am 7.

Jens-Michael Schröder, Prof. Dr., Blumenthal: 70. Geburtstag am 11.

Uwe Schulze, Dr., Dormagen: 65. Geburtstag am 5.

Werner Speer, Dr., Nörtershausen: 70. Geburtstag am 18.

Dirk U. Springer, Dr., Köln: 65. Geburtstag am 16.

Adolf Steffen, Dr., Morbach: 70. Geburtstag am 29.

Klaus Struß, Dr., Leverkusen, Bayer, Dormagen: 65. Geburtstag am 3.

Jörg Rainer Stubenrauch, Dr., Herrsching: 75. Geburtstag am 14.

Lucien Thil, Dr., Limburgerhof:

75. Geburtstag am 13.

Igor Tkatchenko, Prof. Dr., Vievigne/Frankreich: 80. Geburtstag am 4.

Günther Tölg, Prof. Dr. Dr. h.c., Herdecke: 90. Geburtstag am 5.

Ulrich Türck, Dr., Marl: 80. Geburtstag am 11.

Johannes Vinke, Prof. Dr., Offenburg, FH Offenburg: 65. Geburtstag am 2.

Konstantin von Martius, Dr., München: 75. Geburtstag am 2.

Stefan Walch, Dr., Leimen: 75. Geburtstag am 8.

Dirk Walther, Prof. Dr., Jena: 80. Geburtstag am 9.

Thomas Westermair, Dr., Kempten: 65. Geburtstag am 26.

Hinrich Woldmann, Dr., Buxtehude: 75. Geburtstag am 2.

Bernhard Wolf, Dr., Hauset/Belgien: 70. Geburtstag am 9.

Gisela Zichner, StR., Darmstadt: 75. Geburtstag am 20.

Bernhard Zipperer, Dr., Dirmstein, BASF, Ludwigshafen: 65. Geburtstag am 1.

Gestorben

Christa Bauer, Dr., Teltow, langj. Mitgl. der GDCh, am 8. August 2019 im Alter von 87 Jahren.

Hans Friedrich Ebel, Dr., Heppenheim, früher Cheflektor bei Wiley-VCH, Weinheim, langj. Mitgl. der GDCh, am 7. August 2019 im Alter von 86 Jahren.

Siegfried Ebel, Prof. Dr., Höchberg, früher Inst. für Pharmazie und Lebensmittelchemie der Univ. Würzburg, früher Vors. des AK Chemometrik der GDCh-Fachgruppe Analyt. Chemie, Inh. der Goldenen Ehrennadel der Pharmazeut. Ges., am 29. Juli 2019 im Alter von 85 Jahren.

Rudolf Epple, Dipl.-Chem., früher Geschäftsführer von Epple Druckfarben, Neusäß, langj. Mitgl. der GDCh, am 20. Juli 2019 im Alter von 93 Jahren.

Carl Otto Fischer, Berlin, langj. Mitgl. der GDCh, am 15. August 2019 im Alter von 81 Jahren.

Hans Joachim Gross, Prof. Dr., Würzburg, früher Inst. für Humangenetik der Univ. Würzburg, Inh. der Carus-Medaille der Deutschen Akad. der Naturforscher Leopoldina, Halle, früher Vorsitzender des GDCh-Ortsverbands Unterfranken, langj. Mitgl. der GDCh, am 6. August 2019 im Alter von 83 Jahren.

Jakob Herz, Dr., Engelskirchen, früher Hüls Silicone, langj. Mitgl. der GDCh, am 14. August 2019 im Alter von 84 Jahren.

Ursula Hofmann-Malschinger, Dipl.-Chem., Augsburg, langj. Mitgl. der GDCh, am 20. Juli 2019 im Alter von 64 Jahren.

Hella Kramer, Dr., Rüdesheim, SAP, (zuvor Inst. für Physikal. Chemie der Univ. Jena), langj. Mitglied der GDCh, am 8. August 2019 im Alter von 56 Jahren.

Günter Plein, Dipl.-Chem., Bad Nenn-dorf, langj. Mitgl. der GDCh, am 25. Juli 2019 im Alter von 82 Jahren.

Richard Rothbauer, Dr., Lorch, langj. Mitgl. der GDCh, am 17. August 2019.

Ralph Scheu, Dr., Rastede, früher Landwirtschaftl. Untersuchungs- und Forschungsanst., Oldenburg, langj. Mitgl. der GDCh, am 28. August 2019 im Alter von 76 Jahren.

Hans-Georg Schmarr, Priv.-Doz. Dr., Frankfurt, Dienstleistungszentrum Ländl. Raum Rheinpfalz, Neustadt, langj. Mitgl. der GDCh, am 20. August 2019 im Alter von 58 Jahren.

Alfred Schmidpeter, Prof. Dr., München, früher Dept. Chemie der LMU München, langj. Mitgl. der GDCh, am 21. August 2019 im Alter von 89 Jahren.

Plädoyer für das Langperiodensystem

☞ Das Aufführen der Lanthanoide und Actinoide in einem verkürzten Periodensystem [Nachr. Chem. 2019, 67(9), 8ff. und 74] unterhalb der anderen Elemente ist ausschließlich dem Platzbedarf geschuldet. Jedem ist schon durch die fehlende Gruppennummerierung klar, dass sich zumindest bei den höheren Lanthanoiden und Actinoiden keine Ähnlichkeiten zu den darüberstehenden Elementen ergeben. Das ist auch nicht zu erwarten, da im Normalfall nicht mehr als maximal acht Valenzelektronen für Verbindungen genutzt werden. Entsprechend zeigen auch die f-Elektronen bei den höheren Lanthanoiden und Actinoiden deutlich weniger Neigung, sich an der Verbindungsbildung zu beteiligen.

Trotzdem wird bei den Studierenden immer wieder ein Bezug zur Gruppennummer der jeweils darüberstehenden d-Nebengruppenelemente gesehen. Daher sollte auch aus didaktischen Gründen – wenn schon verkürzt geschrieben – der f-Block unter der Gruppe 3 beginnen, wie die Autoren der drei genannten Artikel übereinstimmend anerkennen. Der steigenden technischen Bedeutung der Lanthanoide und Actinoide entsprechend gebührt diesen Elementen aber der richtige Platz in einem standardmäßig verwendeten Langperiodensystem.

Als weitere Frage stellt sich, ob in der 3. Gruppe wirklich Lanthan und Actinium stehen können (wie in dem PSE der Royal Society of Chemistry), denn erst bei Lutetium beziehungsweise Lawrencium sind die f-Orbitale vollständig besetzt, und es wird neu ein d-Elektron eingebaut (Konfiguration $s^2f^{14}d^1$). Das heißt, Lutetium und Lawrencium gehören in die 3. Gruppe. Das entspricht auch der analogen Einordnung der p-Elemente Gallium, Indium, Thallium (und Nihonium) mit einer Elektronenkonfiguration $s^2d^{10}p^1$ in Gruppe 13. Die Besetzung des d-Niveaus mit einem Elektron bei Lanthan, Cer und Gadolinium stellt eine Ausnahme dar; bei Gadolinium folgt sie der Stabilität der mit sieben Elektronen halbbesetzten f-Orbitale (nach Europium nicht $4f^85d^0$, sondern $4f^75d^1$).

Suchen wir also bei Lanthanoiden und Actinoiden oder gar den Elementen der 8. Periode nicht nach den – unter anderem durch relativistische Effekte – immer schwieriger festzulegenden Gemeinsamkeiten mit den in einer verkürzten Darstellung des PSE zufällig darüberstehenden Elementen, sondern stellen sie gleichberechtigt in einem Langperiodensystem dar.

Wolfgang Weber, Augsburg

Was eine Promotion erfolgreich macht

☞ In ihrer Karrierekolumne [Nachr. Chem. 2019, 67(9), 25] definiert Karin Bodewits eine erfolgreiche Promotion hauptsächlich als etwas, was den Forscher „anstellbar“ macht. Diesen Aspekt bietet doch schon die Master- oder Diplomarbeit, bei der die Studierenden zeigen,

dass sie in der Lage sind, wissenschaftlich und selbstständig eine Problemstellung lösungsorientiert zu bearbeiten. In dieser kurzen Zeit lernen die Studierenden in der Regel nicht, wie man Wissenschaft betreibt, wozu auch insbesondere kritisches und wissenschaftstheoretisches Reflektieren über das Wesen des Forschens und des eigenen Forschungsgebietes gehört. Die Promotion bietet nun die Chance für diesen Bildungsprozess und die Entwicklung zu einer wissenschaftlichen Eigenständigkeit. Denn viele Doktoranden und Doktorandinnen kommen in eine Phase, wo sie die Vorstellungen ihrer Professoren und Professorinnen durch eigene Ideen in Frage stellen und daher nach neuen Wegen und Ideen suchen müssen. In dieser Phase erfahren sie sich – vielleicht zum ersten Mal – als wissenschaftlich unabhängige Personen. Anstellbare, angepasste und stromlinienförmige Leute gibt es genug; sie halten den „Betrieb“ ordentlich am Laufen, aber wichtige Innovationen kommen doch meistens nur von den wissenschaftlich unabhängigen Menschen.

Michael G. Hoffmann, Flörsheim

Benzo[def]chrysen statt Benzo[a]pyren

☞ Im Artikel „Neue Aromaten auf die Überwachungsliste“ [Nachr. Chem. 2019, 67(9), 38] finden sich für die Strukturformeln polycyclischer aromatischer Kohlenwasserstoffe (PAK) leider insgesamt fünf nach den IUPAC-Regeln nicht korrekte Namen. Deren Nomenklatur-Regeln – im konkreten Fall die sehr umfangreichen und detaillierten Regelungen von „Nomenclature of Fused and Bridged-Fused Ring Systems“ [Pure & Appl. Chem. 1998, 70(1), 143] – sollten strikt beachtet werden.

So ist der Name ausgerechnet jener Verbindung – im Formelschema des Artikels die Strukturformel ganz rechts in der dritten Zeile von oben – nicht korrekt, die als Standard für die Toxizität von PAK verwendet wird. Diese Verbindung wird zwar ganz allgemein und auch in so gut wie allen Lehrbüchern als „Benzo[a]pyren“ bezeichnet. Während zwar die Orientierung des gezeigten Strukturdiagramms regelkonform ist, ist dieser systematische Name gemäß der zitierten IUPAC-Regeln weder korrekt noch ein von IUPAC „systemisierter Trivialname“. Entsprechend den in FR-3.3 definierten Kriterien für die Auswahl („selection“) der Basiskomponente („parent component“) und entsprechend der in Appendix 1 „Hydrocarbon parent components in order of decreasing seniority“ (speziell S. 206) wiedergegebenen Prioritätenabfolge polycyclischer Kohlenwasserstoffe lautet der – natürlich auch von Chemical Abstracts verwendete – korrekte Name Benzo[def]chrysen.

Chrysen hat als Basiskomponente Vorrang („is preferred“) vor Pyren. Das für die höhere Priorität von Chrysen ausschlaggebende Kriterium ist – nach den in die-



sem Fall keine Entscheidung herbeiführenden Kriterien: 1. Anzahl der Ringe; 2. größter Einzelring; 3. linear anelliert vor angular anelliert; 4. ortho-anelliert vor ortho- und peri-anelliert.

Aus dem gleichen Grund sind im Artikel auch die „Pyren“-Namen weiterer vier Verbindungen inkorrekt, die zwar alle Pyren, aber eben auch Chrysen als Teilstruktur enthalten. [Red.: Ein vom Leserbriefschreiber farblich kodiertes korrektes Formelschema ist als Supporting Info online erhältlich: www.gdch.de/doi/10.1002/nadc.2019.4092798].

Ludwig Call, Völs

Hanfblätterttee nicht an den Endverbraucher

Ein Lebensmittel, das weniger als 0,2 % THC enthält, ist damit noch lange nicht verkehrsfähig und kann nicht einfach so an den Endverbraucher abgegeben werden – auch Hanfblätterttee nicht [Nachr. Chem. 2019, 67(9), 42]. Es geht nicht darum, dass irgendjemand „high“ werden könnte, sondern um Verbraucherschutz, insbesondere auch von Kindern. Wirkungen können bereits bei viel geringeren Gehalten in Lebensmitteln auftreten, zumal wenn die betreffende Person ein geringes Körpergewicht hat.

Hersteller hanfhaltiger Lebensmittel haben die Richtwerte des BGVV, veröffentlicht bereits im Jahr 2000, zu beachten, wobei zu berücksichtigen ist, dass die Richtwerte nicht in allen Fällen niedrig genug sind, um die Sicherheit des Verbrauchers zu gewährleisten. Im Einzelfall muss sichergestellt sein, dass die akute Referenzdosis (EFSA 2015) von $1 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Körpergewicht nicht überschritten wird. Siehe auch die jüngste Veröffentlichung des Bundesinstituts für Risikobewertung („Tetrahydrocannabinolgehalte sind in vielen hanfhaltigen Lebensmitteln zu hoch – gesundheitliche Beeinträchtigungen sind möglich“, Stellungnahme Nr. 034/2018 vom 8. November 2018.).

Wir bewegen uns also hier analytisch in ganz anderen Zielbereichen. Nutzhanf unterliegt nur dann nicht dem allgemeinen Verkehrsverbot des BtMG, wenn der Verkehr ausschließlich gewerblichen Zwecken dient, die einen Missbrauch zu Rauschzwecken ausschließen. Hierzu sei auch auf die Informationen des BfArM und des Bundestags verwiesen (www.bfarm.de/DE/Service/FAQ/_functions/Bundesopiumstelle/Cannabis/_node.html).

Dem Leser hier einen Zielwert von 0,2% THC im Lebensmittel zu suggerieren, ist grob fährlässig.

Constanze Sproll, Karlsruhe

Anmerkung des Autors: Ziel des Artikels war, die Cannabis-Analytik von zum Beispiel Hanfsamenöl zu zeigen und dem Leser Methoden für die Überprüfung und Beurteilung derartiger Lebensmittel zu geben. Der Artikel kann in diesem Umfang keine umfassende Betrachtung der komplexen lebensmittelrechtlichen Verkehrsfähigkeit einzelner Produkte liefern. Zur Einordnung der Ergebnisse wurde der Grenzwert 0,2 % THC gewählt,

da ab diesem Grenzwert Pflanzen oder Pflanzenteile der Gattung Cannabis von den betäubungsmittelrechtlichen Vorschriften ausgenommen sind und somit theoretisch der Lebensmittelindustrie zugänglich sind. Es steht außer Frage, dass ein Lebensmittel mit einem THC-Gehalt unter 0,2 % nicht sofort uneingeschränkt verkehrsfähig ist und einer weiteren Beurteilung bedarf. Der Artikel sollte daher nicht suggerieren, dass ein Lebensmittel ab einem Gehalt von 0,2 % THC an den Endverbraucher gegeben werden kann. Es sollten vielmehr Methoden aufgezeigt werden, mit denen die Verkehrsfähigkeit überprüft werden kann, um Analyselaboren für diesen relativ neuen Zweig der Analytik eine Orientierung zu geben.

Wege aus der Pharmakrise?

Trotz der vorwiegend wissenschaftlichen Ausrichtung der GDCh sollten die derzeit anhaltenden negativen Entwicklungen der Pharmaindustrie (Stichworte: Antibiotikakrise, Fertigung von hochaktiven Wirkstoffen in Indien und China, fehlende Konzepte beim Generikamanagement, Digitalisierung der industriellen chemischen Prozesse) nicht unkommentiert bleiben und durch chemische Hintergründe beleuchtet werden.

Wo sind die Antworten der Universitäten auf diese ethischen und industriellen Herausforderungen? Wo anders als in den Nachrichten kann der chemische Inhalt solcher Fragestellungen denn einigermaßen sach- und fachkundig aufbereitet werden? Eine solche Behandlung kann der öffentlichen Aufklärung in diesen drängenden Problemstellungen unserer Zeit nur dienlich sein.

Hartwig Müller, Neukirchen-Vluyn

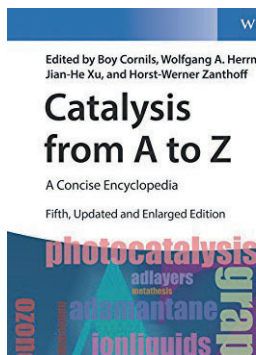
Die „Korrespondenz“ veröffentlicht Briefe an die Redaktion. Gedruckt und online steht sie allen Lesern der Nachrichten aus der Chemie offen. Bitte senden Sie Ihre Zuschrift mit einem Umfang von maximal 1500 Zeichen als E-Mail an: nachrichten@gdch.de. Die Redaktion behält sich Kürzungen vor.

So wär's richtig:

Im Beitrag „Licht und Leuchten bei 3d-Metallen“ [Nachr. Chem. 2019, 67(9), 54] muss es heißen „Bei der Gewinnung der seltenen Erden können Uran und Thorium frei werden.“ (Und nicht: „Bei der Gewinnung von Uran und Thorium werden radioaktive Stoffe frei.“) Zudem ist Biprajit Sarkar Professor für anorganische Chemie und nicht wie angegeben für organische. In der Notiz „Prima prognostiziert“ [Nachr. Chem. 2019, 67(9), 41] steht „Die Methode des Leverkusener Unternehmens Cosmologic beruht auf maschinellern Lernen.“ Korrekt muss es heißen „... beruht auf Grundlagen der Physik und theoretischen Chemie.“ Im Beitrag „Japans Masterplan“ [Nachr. Chem. 2019, 67(10), 24] steht auf S. 26 in der ersten Spalte „Die Spera-Hydrogen-Prozesskette ... produziert über Hydrieren von Toluol Methylcyclohexan und transportiert dieses nach Kawasaki, wo das Toluol dehydriert und zurückgewonnen wird.“ Korrekt muss es heißen „... wo das Methylcyclohexan dehydriert und Toluol zurückgewonnen wird.“

Die Redaktion





Neue Nachschlagewerke

Die fünfte Auflage des Nachschlagewerks *Catalysis from A to Z: A Concise Encyclopedia* enthält über 15 000 Stichwörter zur Katalyse auf Englisch, Deutsch und Französisch. Das Buch umfasst Reaktionen, Prozesse, die zugehörige Analytik sowie Kurzbiografien von Wissenschaftlern. Anders als die vorherigen Ausgaben umfasst die Enzyklopädie Säuren, Liganden und organische Synthesen. Tabellen und 2000 Abbildungen ergänzen den Textteil.

Von Boy Cornils, Wolfgang A. Herrmann, Jian-He Xu,
Horst-Werner Zanthoff. Wiley-VCH, Weinheim 2019.
3000 Seiten, geb. 999,00 Euro bis 31. Dezember.

ISBN 978-3-527-34311-9

Die zweite Auflage von *Sprengstoffe Treibmittel Pyrotechnika*, einem Nachschlagewerk mit 686 alphabetisch geordneten Einträgen, enthält 98 neue Stichworte und ist um Literaturstellen und Tabellen ergänzt. Zudem ist sie als E-Book verfügbar.

Von Ernst-Christian Koch. De Gruyter, Berlin 2019.

627 Seiten, brosch. 99,95 Euro.

ISBN 978-3-11-055784-8

In der Kürze liegt die Würze

Reactivity and Mechanism in Organic Chemistry.

Von Hendrik Zipse. Shaker-Verlag, Düren 2019. 147

Seiten, brosch. 22,90 Euro. ISBN 978-3-8440-6753-8

Das Buch entspricht in seiner Aufmachung dem Skript, mit dem an der Ludwig-Maximilians-Universität München Bachelor- und Masterstudenten in organischer Chemie ausgebildet werden. *Reactivity and Mechanism in Organic Chemistry* ist erfrischend kurz, übersichtlich und erweist sich auch für Doktoranden und ältere, nicht-theoretische Chemiker als informative Einführung.

Das Buch besteht aus nur drei Kapiteln, bei denen die Konzepte des MO-Verfahrens neben der VB-Theorie im Vordergrund stehen. Das erste Kapitel „Structure and Bonding“ führt in die MO-Theorie organischer Strukturelemente mit σ - und π -Bindungen ein. Es folgt eine Übersicht über Hyperkonjugation sowie über Konformationsbarrieren von Alkanen. Bei der Homologisierung von Stoffklassen lassen sich Gruppeninkremente für Standardbildungsenthalpie berechnen, um sie mit den experimentellen Werten zu vergleichen. Aus der Differenz der beiden Werte lässt sich die Spannungsenergie von Molekülen abschätzen. Für die Kenntnis der besonderen Stabilität

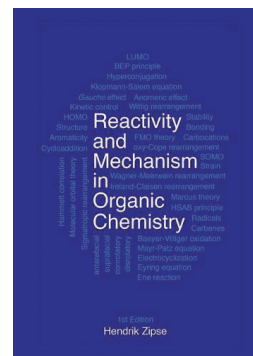
von aromatischen Molekülen kommt dann die Berechnung von isodesmischen und homodesmotischen Reaktionen dazu. Hierzu zitiert der Autor nur die Highlights der letzten Jahre.

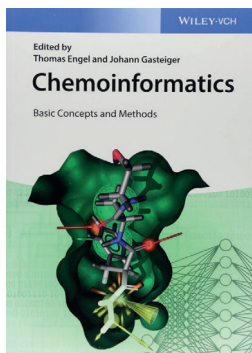
Das Kapitel „Reactivity Models in Organic Chemistry“ behandelt die klassischen Modelle wie Potenzial-Energie-Diagramme, das Bell-Evans-Prinzip, die Marcus-Theorie, die Theorie von harten und weichen Säuren und Basen sowie die Hammett-Beziehungen. Zipse bevorzugt Beispiele mit radikalischen bimolekularen Reaktionen.

Das letzte Kapitel „Pericyclic Reactions“ kommt wie der Verfasser selbst vorwiegend aus der Münchener Schule. An erster Stelle stehen electrocyclische Reaktionen mit 4π -, 6π - und $2+8\pi$ -Elektronen. Die nach diesem Schema erfolgenden Cyclisierungsreaktionen werden an typischen Beispielen beschrieben. Es schließen sich Cycloadditionen von Carbenen an Doppelbindungen an. Darauf folgen 1,2-Umlagerungen von Carbokationen und Carbanionen und neue Erkenntnisse über das stabile 2-Norbornylkation mit seiner Struktur – Theorie und Experiment sind jetzt konsistent.

Das Buch ließe sich gut zu einer größeren Monographie erweitern, dabei sollten der Index durch bekannte Namen und die benutzten quantenmechanische Begriffe erweitert werden.

Dieter Lenoir, München





Nützlich für Lernende wie Lehrende

Chemoinformatics – Basic Concepts and Methods. Herausgegeben von Thomas Engel, Johann Gasteiger. Wiley-VCH, Weinheim 2018. 608 Seiten, brosch. 89 Euro. ISBN 978–3–527–33109–3

Das Buch *Chemoinformatics – Basic Concepts and Methods* ist eine Weiterentwicklung des *Handbook of Chemoinformatics* mit einer aktualisierten Einführung in die Methoden und Konzepte. Dazu gehört ein weiterer Band mit Anwendungsbeispielen [siehe unten].

Das Buch stellt einzelne Bereiche der Chemieinformatik vor, wofür die Herausgeber international renommierte Experten gewonnen haben. Nach einer allgemeinen Einführung behandeln die ersten fünf Kapitel Konzepte der Codierung von chemisch wichtigen Bausteinen wie Strukturen, Reaktionen oder Eigenschaften. Kapitel 6 und 7 führen in Organisation und Benutzung von Chemiedatenbanken ein. Das achte Kapitel gibt einen Überblick über die wichtigsten Methoden der Computerchemie inklusive einer Einführung in Molekülmechanik und -dynamik sowie in die Quantenmechanik. Die folgenden vier Ka-

pitel präsentieren Methoden, die helfen, Moleküleigenschaften wie quantitative Struktur-Wirkungsbeziehungen und neuronale Netzwerke vorherzusagen. Ein Kapitel führt in die Grundbegriffe der Bioinformatik ein und lenkt den Blick so auf verwandte Disziplinen. Das Buch schließt mit einem kurzen Ausblick auf künftige Entwicklungen. Jedes Kapitel enthält ein eigenes Literaturverzeichnis sowie eine Sammlung von Internetverweisen.

Den Charakter eines Lehrbuchs zum Selbststudium verdeutlichen kompetenzorientierte Lernziele, die sich mit den Übungen am jeweiligen Kapitelende prüfen lassen. Zudem enthält das Buch Musterlösungen. Zur besseren Orientierung sind die zentralen Inhalte eines jeden Kapitels an dessen Schluss als „Essentials“ zusammengefasst.

Das klassische gedruckte Lehrbuch gehört nach wie vor zu den verlässlichsten Wissensspeichern. Allerdings wäre eine elektronische Ergänzung über die Verlagswebseite wünschenswert, etwa mit den Internetverweisen auf Literatur und Webseiten. Gleichwohl lässt sich das vorliegende Buch allen Lehrenden wie Studierenden zum nutzbringenden Gebrauch empfehlen.

Anselm Horn, Erlangen

Wertvoll für Vorträge, Vorlesungen und die tägliche Arbeit

Applied Chemoinformatics – Achievements and Future Opportunities. Herausgegeben von Thomas Engel, Johann Gasteiger. Wiley-VCH, Weinheim 2018. 648 Seiten, brosch. 129 Euro. ISBN 978–3–527–34201–3

Während das Handbuch *Chemoinformatics – Basic Concepts and Methods* in die Chemieinformatik einführt [siehe oben], zeigt das aktualisierte Lehrbuch *Applied Chemoinformatics – Achievements and Future Opportunities* die Bereiche, in denen Konzepte der Chemieinformatik heutzutage Anwendung finden. Hier ist es den beiden Herausgebern erneut gelungen, mehr als 50 Experten zu verpflichten, einen Überblick über ihr Arbeitsgebiet zu geben.

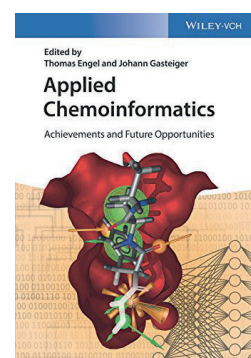
Der Leser erfährt in 14 Kapiteln auf fast 600 Seiten über die reinen Grundlagen der Chemieinformatik hinaus Aspekte zu neuen, sich entwickelnden Konzepten und aktuellen Forschungsthemen. Dazu gehören QSAR/QSPR, Vorhersage physikochemischer Parame-

ter, chemische Reaktionsplanung, Synthesedesign, Spektrenvorhersage, Drug Discovery, Pharmakophore, ADMET und Virtual Screening.

Sehr gelungen ist der konsequent gleiche Aufbau aller Kapitel: Noch vor der Einleitung stehen stets in tabellarischer Form die Lernziele sowie eine Gliederung des Abschnitts. Den Abschluss bilden jeweils kurz und prägnant formulierte Essentials, eine tabellarische Auflistung zugehöriger Software und Webdienste, weiterführende Literatur sowie umfassende Literaturverweise. Nicht zuletzt das klar strukturierte Layout sowie die qualitativ hochwertigen Abbildungen erleichtern, die Abschnitte mit ihrer hohen Informationsdichte durchzuarbeiten.

Wie schon die Vorgängerwerke wird auch das neue *Applied Chemoinformatics* einen festen Platz in meiner Sammlung finden und nicht nur mir eine wertvolle Hilfe dabei sein, Vorträge, Vorlesungen und die tägliche Arbeit vorzubereiten. Ich kann das Werk jedem Leser uneingeschränkt empfehlen.

Harald Lanig, Erlangen



Analytik/Labortechnik

Die **LED-Beleuchtungsbasis** von Olympus für das Stereomikroskop SZX2/SZ2 und das Makro-Zoom-Mikroskop MVX10 ist 41,5 mm flach und verfügt über ein Revolver-System für bis zu vier Einsätze. Insgesamt gibt es neun Einsätze für verschiedene Beobachtungsmethoden, darunter Hellfeld, Dunkel- feld, Polarisation und Schräg- licht, sowie für drei Kontrast- stufen für die Hellfeld- und



Schrägllichtbeleuchtung. Die Lampe hat eine Lebensdauer von 60 000 Stunden und be- hält ihre Farbtemperatur auch bei veränderter Hellig- keit oder verändertem Zoom. **Olympus, Hamburg, Tel. 040 23773-0, info@olympus.de, www.olympus.de**

Die **Doppelmembranpumpe** Fluimac P007 von Bibus pumpt bis zu 8 Liter pro Mi- nute. Die Rohranschlüsse sind 9,525 mm bis 76,2 mm groß. **Bibus, Neu-Ulm, Tel. 0731 207690, info@bibus.de, www.bibus.de**

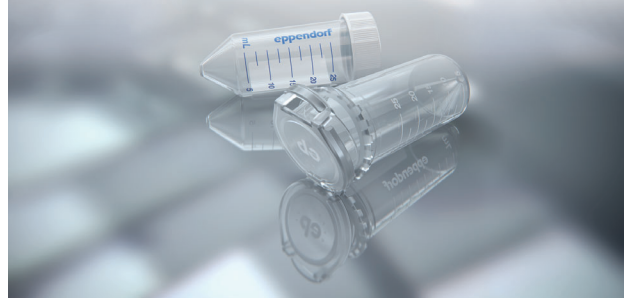


Gesamtstickstoff-
Analysator von
Analytik Jena.

Die **potentiometrischen Ti- tratoren** HI931, HI932C1 und HI932C2 von Hanna Instru- ments messen auch den pH- Wert und das Redoxpotenzi- al. Die Geräte, deren Pumpen weniger als 1 μL dosieren können, sind halb so groß wie die vorherigen Modelle, wobei HI931 der kleinste der drei Titratoren ist. Mehrere Äquivalenzpunkte in einer Ti- tration erfassen HI932C1 und HI932C2. Letztgenann- tes ist auf zwei Analogboards erweiterbar. Der Nutzer wechselt mit dem Clip-Lock- System die Bürette in weni- gen Sekunden und kann eine zweite Bürette ergänzen. **Hanna Instruments, Vöhringen, Tel. 07306 3579-100, info@hannainst.de, www.hannainst.de**

Die **Zentrifugenröhrchen** Co- nical Tubes von Eppendorf ha- ben ein Volumen von 25 mL. Der integrierte Snap-Tec-De- ckel senkt das Risiko für Kreuzkontaminationen. Die Conical Tubes sind 78 mm hoch, 30 mm breit und haben den gleichen Durchmesser wie die entsprechenden 50-mL-Röhrchen. **Eppendorf Vertrieb, Wesseling, Tel. 02232 418-0, vertrieb@eppendorf.com, www.eppendorf.com**

25-mL-Zentrifugenröhrchen von Eppendorf.



Das **Mikroheizsystem** Vaheat temperiert dyna- misch ein Probenvolumen von einigen hundert Mikrolit- tern für Anwendungen in der optischen Mikroskopie. Das System eignet sich für Invers- und Durchlichtmikroskope und kann in Kombination mit Immersionsmedium verwen- det werden. Das System er- fasst die Proben temperatur, heizt mit Raten bis zu 100 $\text{K}\cdot\text{s}^{-1}$ und verfügt über API; zudem sind Temperatur- profile programmierbar. **Linnowav, Erlangen, Tel. 09131 9176-722, info@linnowave.com, www.linnowave.com**

Der **Hochdurchsatzanalysa- tor** multi N/C 2100S pharma misst den Gesamtstickstoff- gehalt und ist für die Quali- tätskontrolle in der Pharma- industrie konzipiert, etwa in der Impfstoffproduktion. Pro- ben werden vollautomatisch direkt injiziert, damit die Analyse des Gesamtprotein- gehalts verschleppungsfrei bleibt. Das Schwestermodell multi N/C 3100 pharma be- stimmt vollautomatisch den Gehalt an organischem Koh- lenstoff. Das Gerät eignet sich unter anderem für die Reinigungsvalidierung. **Analytik Jena, Jena, Tel. 03641 77-0, info@analytik-jena.de, www.analytik-jena.de**

Das **Aufschlussystem** Eco- pre von AHF arbeitet druck- frei und eignet sich für Säu- reaauflösungen in der Lebens- mittelanalytik. Es besteht aus hochreinen Fluorpoly- mergefäßen mit Rückfluss- aufschlägen, die eine säure- resistente Heizplatte erhitzt. Die Gefäße nehmen Einwaa- gen von 0,2 g bis 5 g auf. **AHF analyssentechnik, Tübingen, Tel. 07071 970901-0, info@ahf.de, www.ahf.de**

Der **Laborheizblock** Multi- cube 48 von Anton Paar nimmt 50-mL-Probengefäße für Auflösungen und zum Ver- dampfen auf. Die Temperatur weicht über den gesamten



Block maximal $\pm 1 \text{ K}$ ab. Stan- dardmethoden sind vorin- stalliert, der Nutzer kann zu- dem eigene Methoden im Gerät programmieren. **Anton Paar, Ostfildern- Scharnhausen, Tel. 0711 720910, info.de@anton-paar.com, www.anton-paar.com**

Tagungen – Kongresse – Ausstellungen – Kurse (Ausland)

Dezember

Materials Research Society 2019 Fall Meeting (MRS 2019)

1.12.–6.12. Boston, MA/USA
www.mrs.org/fall2019/

Conference on Frontiers in Chemistry and Drug Discovery

2.12.–3.12. Madrid/Spanien
chemistry@scholarsmeetings.org; <https://scholarsconferences.com/chemistry-frontiers/>

CO₂ Detection in Biological Systems

2.12.–3.12. Newport Pagnell/Großbritannien
<https://t1p.de/i7mc>

RNA Targeted Drug Discovery Summit

2.12.–4.12. Boston, MA/USA
info@hansonwade.com; <https://rna-drugdiscovery.com>

Conference on Phosphorus, Boron and Silicon – PBSi 2019

2.12.–4.12. Rom/Italien
pbsi2019@premc.org; <https://t1p.de/v7hy>

Green Chemistry New Zealand 2019 (GCNZ19)

2.12.–5.12. Auckland/Neuseeland
www.greenchemistry.science.auckland.ac.nz/

Caparica Christmas Congress on Translational Chemistry 2019

2.12.–5.12. Milton Keynes/Großbritannien
clodeiro.ic3tc2019@bioscopegroup.org;
www.ic3tc2019.com

5th Annual Mena Pharmaceutical Manufacturing Congress

3.12.–5.12. Riad/Saudi-Arabien
info@pharmamanufacturingmena.com;
<https://t1p.de/3ltx>

International Conference on Nanoscience and Nanotechnology

4.12.–6.12. Vellore/Indien
icnan2019@vit.ac.in; <https://vit.ac.in/files/ICNAN19/index.php>

Conference on Imaging Systems and Techniques (IST 2019)

8.12.–10.12. Abu Dhabi/Vereinigte Arabische Emirate
<https://ist2019.ieee-ims.org>

Asian Chemical Congress and General Assembly of the Federation of Asian Chemical Societies

8.12.–12.12. Taipeh/Taiwan
juntsai@elitepc.com.tw; www.acc2019.tw

Geneva Forum

9.12.–13.12. Genf/Schweiz
contact-genevaforum@objectif-sciences-international.org; www.osi-genevaforum.org

Smart Nano Materials 2019

10.12.–13.12. Paris/Frankreich
a.baldycheva@exeter.ac.uk;
<https://snaia2019.com>

International Symposium on Bioorganic Chemistry (ISBOC-12)

15.12.–18.12. Shenzhen/V. R. China
klab@pku.edu.cn; www.sz-isboc.com

Inorganic19

15.12.–19.12. Wollongong/Australien
<http://inorganic19.org>

Conference on Functional Materials and Chemical Engineering (ICFMCE 2019)

16.12.–18.12. Bangkok/Thailand
icfmce@iased.org; www.icfmce.org

Conference of the Asian Crystallographic Association

17.12.–20.12. Singapur/Singapur
info@asca2019.org; <https://asca2019.org>

17. Central European Symposium on Theoretical Chemistry

Anfang September fand das Central European Symposium on Theoretical Chemistry (CESTC) auf der Burg Schlaining, Stadtschlaining im österreichischen Burgenland statt. Bereits zum 17. Mal trafen sich über 100 Theoretiker aus dem zentralen europäischen Raum und tauschten sich über Themen von Quantenchemie bis zu maschinellem Lernen aus. Organisiert wurde die viertägige Konferenz von Leticia González, Professorin für theoretische Chemie an der Universität Wien, und ihrer Gruppe.

Als erster eingeladenen Sprecher beschäftigte sich Markus Reiher (ETH Zürich) am Montag mit der Density Matrix Renormalization Group (DMRG). Im Anschluss betrachteten Vera Krawald (TU Darmstadt) und Maja Gruden (Univ. Belgrad) Aspekte von Übergangsmetallkomplexen. Am Dienstag berichtete Jörg Behler (Univ. Göttingen) über die Anwendung von neuronalen Netzen, und Jiří Pittner (Tschechische Akademie der Wissenschaften) referierte über nichtadiabatische Dynamiksimulationen. Malgorzata Biczysko (Univ. Shanghai) sprach über anharmonische Korrekturen und Stansislav Komorovsky (Slowakische Akademie der Wissenschaften) über relativistische Effekte. Am Mittwoch erläuterte Jana Pavliková (CEITEC Tschechien) NMR-Verschiebungen in phosphorylierten Proteinen und Ágnes Szabados (Eötvös-Loránd-Universität Ungarn) Multireferenzansätze für Coupled-Cluster-Theorie. Am letzten Konferenztag berichtete Attila Császár (Eötvös-Loránd-Universität Ungarn) über quasistruktur-



Die Organisatorin des CESTC 2019, Leticia González (Mitte), überreichte die Posterpreise an (v.l.) Štepan Sršeň, Michal Lesiuk, Ádam Margócsy und Aleksandra Tucholska. Foto: Ludwig Schwiedrzik

le Moleküle und Mariana Derzsi (Slowakische Technische Universität Bratislava) über die Modellierung von Kristallchemie mit Dichtefunktionaltheorie.

Diese Vorträge wurden ergänzt durch 21 weitere Präsentationen und über 60 Poster.

Die Posterpreise, gestiftet von der Gesellschaft Österreichischer Chemiker (GÖCh) sowie den Wiley-Zeitschriften *Journal of Computational Chemistry* und *International Journal of Quantum Chemistry*, gingen an Štepan Sršeň, Michal Lesiuk, Ádam Margócsy und Aleksandra Tucholska. Finanziell unterstützten die Tagung die GÖCh, die ChemPubSoc Europe Association, das

Bundesland Burgenland, die Zeitschriften *Computational and Theoretical Chemistry* (Elsevier), *Physical Chemistry Chemical Physics* (RSC) und *Molecules* (MDPI), der Wissenschaftsverlag Springer, SCM (Software for Chemistry and Materials), Nvidia und Hewlett Packard Enterprise. Eine Sonderausgabe der *Theoretical Chemistry Accounts* soll dem CESTC gewidmet werden. Das nächste CESTC wird 2020 in Ungarn stattfinden. Dem ständigen Gremium aus Österreich, Polen, Slowakei, Tschechien und Ungarn gehört ab sofort auch Kroatien an.

Philipp Marquetand, Universität Wien
philipp.marquetand@univie.ac.at

1. Halbjahr: Tagungen – Kongresse – Ausstellungen – Kurse (Ausland)

Januar

GRC on Protein Folding Dynamics – From Protein Folding In Vitro to Hierarchical Assembly In Vivo

5.1.–10.1. Galveston, TX/USA
www.grc.org/protein-folding-dynamics-conference/2020/

GRC on Electrochemistry – Bridging Scales in Electrochemical Materials and Methods

5.1.–10.1. Ventura, CA/USA
www.grc.org/electrochemistry-conference/2020/

International Conference on Agrochemicals Protecting Crops, Health and Natural Environment

7.1.–10.1. Neu-Delhi/Indien
iamshakil@gmail.com; https://t1p.de/w2nm

RSC Biomaterials Chemistry Group Annual Meeting

8.1.–10.1. Manchester/Großbritannien
https://t1p.de/mum8

GRC on Geobiology – The Interaction of Microbial and Geological Processes Through Time

12.1.–17.1. Galveston, TX/USA
www.grc.org/geobiology-conference/2020/

Winter Conference on Plasma Spectrochemistry

12.1.–18.1. Tucson, AZ/USA
http://icpinformation.org

Conference on Sustainable Development of Water and Environment (ICSDWE2020)

13.1.–14.1. Incheon/Südkorea
cfp@icsdwe.org; www.icsdwe.org

SUM 2020 „SOLEIL Users' Meeting“

16.1.–17.1. Saint-Aubin/Frankreich
SUM2020@synchrotron-soleil.fr;
https://t1p.de/z4ib

Winter Conference on Medicinal and Synthetic Chemistry

19.1.–23.1. St. Anton/Österreich
info@LDOrganisation.com; www.alpinewinterconference.org

GRC on Multifunctional Materials and Structures

19.1.–24.1. Ventura, CA/USA
www.grc.org/multifunctional-materials-and-structures-conference/2020/

EMBO Course on Single Particle cryoEM of Macromolecular Assemblies and Cellular Tomography

19.1.–30.1. Kalkutta/Indien
cem3dip2020@iiservm.ac.in; http://meetings.embo.org/event/20-cem3dip

SMi's Pharmaceutical Microbiology Conference

20.1.–21.1. London/Großbritannien
events@smi-online.co.uk; https://t1p.de/mcm8

International Caparica Symposium on Nanoparticles/Nanomaterials and Applications

20.1.–23.1. Caparica/Portugal
clodeiro.isn2a2020@bioscopegroup.org;
www.isn2a2020.com

Introduction to RNA-Seq and Functional Interpretation

20.1.–23.1. Hinxtton/Großbritannien
https://t1p.de/qaia

Future of Polyolefins Summit

22.1.–23.1. Brüssel/Belgien
lpardoux@acieu.net; www.wplgroup.com/aci/event/polyolefins-conference/

Symposium on Chemical Biology

22.1.–24.1. Genf/Schweiz
nccr-chembio@unige.ch; https://symposium.nccr-chembio.ch/welcome/

Sanibel Conference on Mass Spectrometry

23.1.–26.1. Captiva, FL/USA
info@asms.org; https://t1p.de/piia

GRS on Bioinorganic Chemistry – Spectroscopic, Synthetic and Biochemical Approaches to Exploring the Reactivity of Metals in Biology

23.1.–26.1. Ventura, CA/USA
www.grc.org/bioinorganic-chemistry-grs-conference/2020/

Society for Laboratory Automation and Screening (SLAS 2020)

25.1.–29.1. San Diego, CA/USA
vloise@slas.org; www.slas2020.org

Liquid Phase Electron Microscopy

26.1.–31.1. Lucca/Italien
www.grc.org/liquid-phase-electron-microscopy-conference/2020/

FSQ Europe 2020 Food, Safety and Quality

29.1.–30.1. London/Großbritannien
lhersi@acieu.net; www.wplgroup.com/aci/event/food-safety-quality-europe/

Symposium on Hyphenated Techniques in Chromatography and Separation Technology

29.1.–31.1. Gent/Belgien
htc16@kuleuven.be; https://kuleuvencongres.be/htc16/

Engineering meets Evolution: Designing Biological Systems

30.1.–1.2. Chennai/Indien
https://t1p.de/6eip

Pacific Conference on Spectroscopy and Dynamics

30.1.–2.2. San Diego, CA/USA
info@westernspectroscopy.org; www.westernspectroscopy.org

Visions in Chemistry – The Torkil Holm Symposium

31.1.–1.2. Kopenhagen/Dänemark
mg@atv.dk; https://t1p.de/xaed

Februar

SPIE Photonics West

1.2.–6.2. San Francisco, CA/USA
customerservice@spie.org; https://t1p.de/sgrs

Advanced Materials World Congress

2.2.–5.2. Sydney/Australien
contact@iaamonline.org; www.advancedmaterialscongress.org/feb20/

GRC on Oxygen Radicals – Chemical Reactivity, Metabolism and Opportunities for Therapeutic Development in Oxygen Radicals

2.2.–7.2. Ventura, CA/USA
www.grc.org/oxygen-radicals-conference/2020/

Bioinformatics for Discovery

4.2.–5.2. Cambridge/Großbritannien
www.ebi.ac.uk/training/events/2020/bioinformatics-discovery-3

Frontiers in Peptide Science and Drug Discovery

5.2.–6.2. Singapur/Singapur
eileen.so@ntu.edu.sg; http://event.ntu.edu.sg/FPSDD2020/Pages/index.aspx

INST 2020 International Natural Sciences Tournament

7.2.–12.2. Warschau/Polen
participants@scitourn.com; www.scitourn.com/index

Central European Conference on Photochemistry

9.2.–13.2. Bad Hofgastein/Österreich
info@cecp.at; www.cecp.at/

Lorne Conference on Protein Structure and Function

9.2.–13.2. Lorne/Australien
annalee.g@asnevents.net.au; www.lorneproteins.org

GRC on Atomically Precise Nanochemistry

9.2.–14.2. Galveston, TX/USA
www.grc.org/atomically-precise-nanochemistry-conference/2020/

EMBO Symposium on Mycobacterial Heterogeneity and Host Tissue Tropism

11.2.–15.2. Neu-Delhi/Indien
mtbsymposium2020@nii.ac.in; http://meetings.embo.org/event/20-mycobacteria

A Matter of Life or Death: Mechanisms, Models and Therapeutic Opportunities

12.2.–14.2. Bergamo/Italien
laura.strachan@eacr.org; https://t1p.de/1si7

Luminescent Silicon Nanostructures Faraday Discussion

12.2.–14.2. York/Großbritannien
https://t1p.de/66vn

Asian NIR Symposium

12.2.–15.2. Khonkaen/Thailand
www.eng.rmuti.ac.th/ans2020/

Conference on Chemometrics in Analytical Chemistry (ICCAC 2020)

13.2.–14.2. Istanbul/Türkei
<https://t1p.de/qwgu>

FEBS3+ LS2 Annual Meeting Cells, Molecules & Organisms

13.2.–14.2. Zürich/Schweiz
info@ls2.ch; <https://annual-meeting.ls2.ch>

Biophysical Society Annual Meeting

15.2.–19.2. San Diego, CA/USA
society@biophysics.org; www.biophysics.org/2020meeting#/

Annual Meeting of the Israel Chemical Society

18.2.–19.2. Jerusalem/Israel
www.chemistry.org.il/ics-meetings

Applied Late-stage Functionalisation: Where Chemistry meets Biology

18.2.–19.2. Manchester/Großbritannien
<https://t1p.de/kpa6>

Conference on Dementia and Dementia Care

19.2.–20.2. Paris/Frankreich
dementia@pulsusmeet.com; <https://dementia.cmesociety.com/>

Chemistry Conference for Young Scientists

19.2.–21.2. Blankenberge/Belgien
<https://chemcys.be/index.php>

Frontiers in Photochemistry Conference

22.2.–25.2. Nassau/Bahamas
admin@fusion-conference.com;
www.fusion-conferences.com/conference/96

Forum on Process Analytical Chemistry (IFPAC 2020)

23.2.–26.2. North Bethesda, MD/USA
<http://ifpacglobal.org/>

Polish-German Crystallographic Meeting

23.2.–27.2. Breslau/Polen
anja.hannawald@conventus.de;
www.dgk-conference.de

RSC/SCI Ion Channels as Therapeutic Targets Symposium

24.2.–25.2. Cambridge/Großbritannien
<https://t1p.de/8029>

Winter Symposium on Chemometrics (WSC 12)

24.2.–28.2. Saratow/Russland
wsc12@chemometrics.ru; <http://wsc.chemometrics.ru/wsc12/>

Conference on Polymer Science and Composite Materials

26.2.–28.2. Lissabon/Portugal
kiran.kumar@biopolymersepisod.com;
<https://polymersconference.yuktan.com/>

Conference on Photonics, Optics and Laser Technology (PHOTOPTICS 2020)

27.2.–29.2. Valletta/Malta
photoptics.secretariat@insticc.org;
<http://photoptics.org/>

März

GRC on DNA Damage, Mutation and Cancer

1.3.–6.3. Ventura, CA/USA
www.grc.org/dna-damage-mutation-and-cancer-conference/2020/

Pittsburgh Conference on Analytical Chemistry and Applied Spectroscopy (Pittcon 2020)

1.3.–5.3. Chicago, IL/USA
info@pittcon.org; <https://pittcon.org>

International Conference on „Frontiers in Chemical Sciences“

2.3.–4.3. Kairo/Ägypten
info.chemconf@cu.edu.eg; <https://chem-conf.com>

International Hydrocolloids Conference

2.3.–5.3. Melbourne/Australien
<https://t1p.de/i5ex>

American Physical Society March Meeting

2.3.–6.3. Denver, CO/USA
www.aps.org/meetings/march/

International Conference on Material Science (ICMS2020)

4.3.–6.3. Agartala/Indien
icms2020tu@gmail.com;
<https://icms2020.wordpress.com>

International Conference on Chemical and Biological Sciences (ICCBS 2020)

6.3.–8.3. Singapur/Singapur
iccb@iccbes.net; www.iccbes.org

Experimental Nuclear Magnetic Resonance Conference (ENC 2020)

8.3.–13.3. Baltimore, MD/USA
enc@enc-conference.org; www.enc-conference.org

GRC on Protein Transport Across Cell Membranes

8.3.–13.3. Galveston, TX/USA
www.grc.org/protein-transport-across-cell-membranes-conference/2020/

ACS Research Conference: Chemistry and Chemical Engineering in MENA

10.3.–12.3. Doha/Katar
qataracs@qatar.tamu.edu; <https://acs.qa/>

Chemistry of 2-dimensional Materials: Beyond Graphene Faraday Discussion

16.3.–18.3. Cambridge/Großbritannien
<https://t1p.de/7se0>

Arablab 2020

16.3.–18.3. Dubai/Vereinigte Arabische Emirate
info@arablab.com; www.arablab.com

Formulation & Drug Delivery USA Congress

17.3.–18.3. San Diego, CA/USA
marketing@oxfordglobal.co.uk;
<https://t1p.de/arar>

Chemical Society of Japan (CSJ) Annual Meeting

22.3.–25.3. Chiba/Japan
nenkai@chemistry.or.jp; <https://t1p.de/dzwx>

ACS National Meeting & Expo Macromolecular Chemistry: The Second Century

22.3.–26.3. Philadelphia, PA/USA
www.acs.org/content/acs/en/meetings/national-meeting.html

The Astbury Conversation 2020: Seeing into Cells

23.3.–24.3. Leeds/Großbritannien
<https://t1p.de/47oj>

Meeting on Pharmaceuticals, Biopharmaceuticals and Pharmaceutical Technology

23.3.–26.3. Wien/Österreich
info@worldmeeting.org; www.worldmeeting.org/home

Snow Cover, Atmospheric Precipitation, Aerosols: Chemistry and Climate

23.3.–27.3. Listwanka/Russland
snow-baikal@mail.ru; <http://snow-baikal.tw1.ru/index-eng>

Hydrogen & Fuel Cells for Heavy Duty Transport

25.3.–26.3. Brüssel/Belgien
office@cogitongroup.com; <https://h2-transport.com/>

Graphene Korea 2020 International Conference

25.3.–27.3. Incheon/Südkorea
www.setcor.org/conferences/Graphene-Korea-2020

Conference on Protein and Proteomics (CPP 2020)

27.3.–29.3. Xi'an/V. R. China
paper_service@163.com; www.marchconf.org/conference/CPP2020/

Drug Delivery Partnerships

30.3.–1.4. Orlando, FL/USA
register@knect365.com; <https://lifesciences.knect365.com/ddp/>

April

Single-Molecule Sensors and NanoSystems International Conference – S3IC 2020

1.4.–4.4. Barcelona/Spanien
s3ic2020@premc.org; <https://t1p.de/xkq3>

Symposium on Microscale Separations and Bioanalysis

5.4.–8.4. Saint-Malo/Frankreich
info@msb2020.com; www.msb2020.com/

EUROPT(R)ODE XV Conference on Optical Chemical Sensors and Biosensors

5.4.–8.4. Warschau/Polen
secretariat@europtrode2020.eu; <http://europtrode2020.eu/>

EMBO Workshop on Muscle Formation, Maintenance, Regeneration and Pathology

5.4.–10.4. Gouvieux/Frankreich
<https://t1p.de/6729>

Quantum Technology International Conference 2020

6.4.–8.4. Barcelona/Spanien
qtech2020@premc.org; <https://t1p.de/rukc>

Faraday Joint Interest Group Conference

6.4.–8.4. Sheffield/Großbritannien
<https://t1p.de/aig7>

Meeting on Mass Spectrometry and Separation Techniques

13.4.–15.4. Tokio/Japan
info@frontiersmeetings.com; <https://t1p.de/zyd1>

Dalton 2020

14.4.–16.4. Coventry/Großbritannien
www.rsc.org/events/detail/40633/dalton-2020

analytica Anacon India

16.4.–17.4. Bombay/Indien
<https://analyticaindia.com/>

Nanotech Singapore Conference and Exhibition

20.4.–22.4. Singapur/Singapur
<https://t1p.de/3owk>

Translational Microbiome Conference

21.4.–23.4. Boston, MA/USA
enquiries@arrowheadpublishers.com; www.microbiomeconference.com/

Österreichische Lebensmittelchemiker-Tage 2020

22.4.–24.4. Klagenfurt/Österreich
michael.murkovic@tugraz.at; www.goech.at

Reaction Mechanisms in Catalysis: Faraday Discussion

22.4.–24.4. London/Großbritannien
<https://t1p.de/yqk0>

International Glow Discharge Spectroscopy Symposium

26.4.–29.4. Oviedo/Spanien
www.ew-gds.com

Australian X-ray Analytical Association (AA2020) Conference and Exhibition

29.4.–1.5. Gold Coast/Australien
axaa@pco.com.au; www.axaa.org/

Mai**GRC on Renewable Energy: Solar Fuels**

3.5.–8.5. Lucca/Italien
www.grc.org/renewable-energy-solar-fuels-conference/2020/

Drug Metabolism and Pharmacokinetics

5.5.–6.5. Liverpool/Großbritannien
<https://t1p.de/dq6y>

ACS Research Conference: Chemistry and Chemical Engineering in Mena

10.5.–12.5. Doha/Katar
qataracs@qatar.tamu.edu; <https://acs.qa/>

EMBO Workshop on Bacterial cell biophysics

10.5.–15.5. Ein Gedi/Israel
meetings@diesenhaus.com; <http://meetings.embo.org/event/20-bacteria-biophysics>

Fibroblast Growth Factors in Development and Disease

10.5.–15.5. Lucca/Italien
www.grc.org/fibroblast-growth-factors-in-development-and-disease-conference/2020/

European Symposium on Biological and Organic Chemistry

15.5.–17.5. Newtown/Großbritannien
redmanJE@cardiff.ac.uk; www.esboc.org.uk

Translational Science of Myelin

17.5.–22.5. Lucca/Italien
www.grc.org/myelin-conference/2020/

EuroPACT2020

18.5.–20.5. Kopenhagen/Dänemark
nina.weingaertner@dechema.de; <https://dechema.de/europact2020.html>

Jahrestagung der Chinesischen Chemiker in Deutschland

Anfang Mai fand die 31. Jahrestagung der Gemeinschaft Chinesischer Chemiker und Chemieingenieure in Deutschland (Chinese German Chemical Association, CGCA) im Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ) in Leipzig statt. An der zweitägigen Veranstaltung beteiligten sich etwa 70 Wissenschaftler aus der Chemie und angrenzenden Forschungsgebieten. Organisiert wurde die Tagung von der CGCA und dem UFZ, finanziell unterstützten Unternehmen wie Eutech-Consulting, Springer, Sinojobs, Jindun-Chemie, das Institut für Bioenergie und Bioverfahrenstechnik der Chinesischen Akademie der Wissenschaften in Qingdao, die Universität Schanghai, AcaBridge.edu.cn sowie die Bildungsabteilung der chinesischen Botschaft in Deutschland.

Neben den Vortragenden aus Deutschland hielten zwei Professorinnen und vier Professoren chinesischer Universitäten Hauptvorträge. Der Konferenzvorsitzende Chang Ding hieß alle Teilnehmer herzlich willkommen. Das wissenschaftliche Vortragsprogramm erstreckte sich über Chemie, Physik und Materialforschung sowie Umwelt- und Biowissenschaften; ergänzt wurde es durch eine Posterpräsentation. Stellvertretend für alle Beiträge seien genannt: Volker Deckert (Universität Jena) berichtete über optische Spektroskopie im Nanometerbereich, Yang Yu (Universität Schanghai) berichtete über ihre jüngsten Forschungen zu „Recognition and reactivity in deep cavities“, Andreas Köhn (Universität Stuttgart) erklärte, wie sich theoretische Chemie mit experimenteller Che-



Die Preisträger des CGCA Young Researchers Awards und Gäste der Preisverleihung (v. l.): Rongchao Pan (CGCA-Vorsitzender); Qingli Hao (Nanjing-Universität für Wissenschaft und Technologie); Jiajia Ma (2. Preis, Universität Münster); Lin Li (1. Preis, FU Berlin); Yuewen Wang (2. Preis, TU Berlin); Yujin Tong (Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft); Chang Ding (Vorsitzender der Konferenz).

Foto: Longyin Qi

mie verbinden lässt. Dazwischen präsentierte Xian Wu, der für die europäische Abteilung der American Chemical Society arbeitete, in seinem Vortrag die Didaktik der Chemie im China des 19. Jahrhunderts.

Im Rahmen der Veranstaltung wurde zum sechsten Mal der CGCA Young Researchers Award verliehen. Von etwa 18 Bewerbern wurden drei Kandidaten eingeladen, ihre wissenschaftlichen Arbeiten in Leipzig vorzustellen. In die Wertung gingen neben den Vorträgen der Bewerber die Beurteilungen der externen Gutachter ein. Den ersten Preis erhielt Lin Li (FU Berlin), den zweiten Preis teilten sich Yuewen Wang (TU Berlin) und Jiajia Ma (Universität Münster). Neben Urkunden, die Qingli Hao

(Nanjing-Universität für Wissenschaft und Technologie), CGCA-Vorsitzender Rongchao Pan (Universität Erlangen-Nürnberg) und Yujin Tong (Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft) überreichten, konnten sich die Teilnehmer der Endausscheidung über Buchgutscheine freuen, welche der Springer-Verlag speziell für den CGCA Young Researchers Award gestiftet hatte. Den Preis für das beste Poster und einen Bürobedarfsgutschein erhielt Weiyang Ouyang (UFZ Leipzig).

Die 32. Jahrestagung wird im nächsten Jahr in Mainz stattfinden. Weitere Informationen über die CGCA und die 32. Jahrestagung gibt es unter www.cgca.de.

Wenlan Liu

International Polymer Characterization Forum POLY-CHAR

18.5.–21.5. Venedig/Italien
info@poly-char2020.org; www.poly-char2020.org

Cooperative Phenomena in Framework Materials: Faraday Discussion

19.5.–21.5. Sapporo/Japan
https://t1p.de/irwt

International Symposium „Molecular Order and Mobility in Polymer Systems”

19.5.–22.5. St. Petersburg/Russland
mumps2020@onlinereg.ru;
http://mumps2020.macro.ru

CMA4CH Meeting, Measurements, Diagnostics, Statistics in Environment and Cultural Heritage Fields

24.5.–26.5. Rom/Italien
www.cma4ch.org/form-cma4ch.html

Japan Geoscience Union Meeting

24.5.–28.5. Chiba/Japan
office@jpgu.org; www.jpgu.org/en

Canadian Chemistry

24.5.–28.5. Winnipeg/Kanada
www.cce2019.ca

GRC on Epigenomics of Diabetes and Other Metabolic Diseases

24.5.–29.5. Hongkong/V. R. China
https://t1p.de/bmq3

GRC on Inorganic Chemistry

31.5.–5.6. Newport, RI/USA
www.grc.org/inorganic-chemistry-conference/2020/

Juni

RSC/SCI Symposium on Kinase Inhibitor Design

1.6.–2.6. London/Großbritannien
https://t1p.de/zxno

Conference on the Applications of Magnetic Resonance in Food Science (MRFood2020)

2.6.–5.6. Aarhus/Dänemark
sofiekaasovesen@food.au.dk; https://conferences.au.dk/mrfood2020/

Expoquimia 2020 Chemistry for the Future

2.6.–5.6. Barcelona/Spanien
expoquimia@firabarcelona.com; www.expoquimia.com/en/home

Nordic Conference on Plasma Spectrochemistry

7.6.–10.6. Loen/Norwegen
http://nordicplasma.com/

GRC on Bioinspired Materials

7.6.–12.6. Les Diablerets/Schweiz
www.grc.org/bioinspired-materials-conference/2020/

Conference of Theoretical and Applied Nanoscience and Nanotechnology (TANN'20)

8.6.–10.6. Niagara Falls/Kanada
info@tannconference.com; https://tannconference.com

SPEA 11 Conference on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Applications

8.6.–12.6. Turin/Italien
info.spea11@unito.it; www.spea11.unito.it/home

GRC on Bioorganic Chemistry Enabling Technologies in Chemical Biology

14.6.–19.6. Andover, NH/USA
www.grc.org/bioorganic-chemistry-conference/2020/

International Congress on Catalysis (ICC)

14.6.–19.6. San Diego, CA/USA
info@2020icc.com; https://2020icc.com

EACR 2020 Congress – Innovative Cancer Science

17.6.–20.6. Turin/Italien
eacr2020@covr.be; www.eacr2020.org

Conference on Hydrogen Atom Transfer (ICHAT 2020)

21.6.–25.6. Monte Porzio Catone/Italien
http://ichat.uniroma2.it

GRC on Crystal Engineering

21.6.–26.6. Newry, ME/USA
www.grc.org/crystal-engineering-conference/2020/

Nanotech France 2020 Conference and Exhibition

24.6.–26.6. Courbevoie/Frankreich
www.setcor.org/conferences/Nanotech-France-2020

RSC/SCI/SEQT Symposium on Medicinal Chemistry for Global Health

24.6.–26.6. Tres Cantos/Spanien
https://t1p.de/3owk

European Symposium on Atomic Spectrometry (ESAS 2020)

24.6.–26.6. Warschau/Polen
esas2020@uw.edu.pl; http://esas2020.uw.edu.pl/

Symposium on Phytochemicals in Medicine and Food

24.6.–30.6. Xi'an/V. R. China
https://381313990.wixsite.com/4-ispmf

Balticum Organicum Syntheticum (BOS 2020)

28.6.–1.7. Vilnius/Litauen
registration@seventips.lt;
https://boschem.eu

GRC on Advancing Sustainable Technologies Through Catalysis

28.6.–3.7. New London, NH/USA
www.grc.org/catalysis-conference/2020/

International Zeolite Conference 2019

Mitte Juli fand die 19. internationale Zeolith-Konferenz in Perth, West Australien statt. Für die sechstägige Veranstaltung hatte die International Zeolite Association (IZA) Forscher und Interessenten aus Unternehmen und Industrie eingeladen, um über Forschungsergebnisse zu porösen Materialien zu sprechen. Dabei ging es nicht nur um Zeolithe, sondern auch um poröse Silicate sowie metallorganische und kovalente organische Gerüstverbindungen. Schwerpunkt war meist die Katalyse im Zusammenhang mit der Raffination organischer Naturstoffe.

Nach der offiziellen Eröffnung begann die Konferenz mit einem Plenarvortrag von Wataru Ueda, Professor an der Universität von Kangawa in Japan, über „Zeolite-type crystal structuring in complex metal oxide catalysts of group V and VI elements“. Die drei Teile des Vortrags behandelten Materialsynthese, Kristallstrukturen neuer Verbindungen und die Anwendung als Oxidationskatalysator. In einem der anschließenden Vorträge, dem von Peter Behrens, Professor an der Universität Hannover, ging es um mesoporöse Silicaverbindungen in der Galenik. Hierbei sollen Antibiotika über einen einstellbaren Zeitraum freigesetzt werden und die Entzündung, die durch ein Hörimplantat entsteht, verhindern.

Am Dienstag stach der Vortrag von Martin Hartmann hervor, Professor an der Universität

Erlangen und Mitglied des Ausschusses der IZA. Er präsentierte die Synthese neuer poröser Koordinationspolymere in ionischen Flüssigkeiten. Zudem stellte er eine neue hcp-Form von Zr-UO-66 vor.

Den Mittwochvormittag prägte Hubert Koller, Professor an der Universität Münster. Sein Vortrag umfasste NMR-Methoden wie SQ-DQ, ¹H-NMR und SQ-TQ-¹H-NMR. Mit diesen Methoden ließen sich schwer zu identifizierende Silanolgruppen in Si-NMR-Spektren eindeutig zuordnen.

Beim IZA General Assembly am Donnerstag bekamen die Teilnehmer einen Einblick in die Organisation und deren Mitglieder. Es gab Informationen über neu hinzugewonnene und austretende Mitglieder des Komitees, für verschiedene Positionen innerhalb der Organisation wurden neue Verantwortliche gewählt.

Der Keynotesprecher Haoyang Wu stellte am Freitag seine Ergebnisse zu Metallazolat-Gerüstverbindungen als Separationsmaterialien für Olefine vor. Selektivität und Ausbeuten dieser Verbindungen übertreffen etablierte Industrieseparatoren bei Standardbedingungen.

Für's Lernen abseits der Chemie sorgten der Besuch zweier Weingebiete sowie einer Schokoladenmanufaktur.

Timo Rabe, Kiel

Tagungen – Kongresse – Ausstellungen – Kurse (Inland)

Dezember

Management Tool-Set für effiziente Prozesse – Kleine Verbesserung mit großer Wirkung

2.12.–3.12. Frankfurt am Main
<https://dechema-dfi.de/Management.html>

Gentechnikrecht: Gefährdungspotenziale, Sicherheitsmaßnahmen und Rechtsvorschriften

2.12.–3.12. Frankfurt am Main
<https://dechema-dfi.de/Gentechnikrecht.html>

Conference on Regulatory Toxicology of Active Substances in Plant Protection Products

2.12.–3.12. Mainz
smummenbrauer@akademie-fresenius.de;
<https://t1p.de/oov9>

Dresdner Sensor-Symposium

2.12.–4.12. Dresden
barbara.feisst@dechema.de;
<https://dechema.de/dss14.html>

Basiswissen GxP (GMP, GLP, GCLP, GCP)

2.12.–5.12. Saarbrücken
<https://gdch.link/2k>

Werkstoffprüfung 2019

3.12.–4.12. Neu-Ulm
werkstoffpruefung@dgm.de;
<https://wp2019.dgm.de/home/>

Moderne Laborplanung – nachhaltig und sicher

3.12.–5.12. Frankfurt am Main
<https://gdch.link/2i>

SOPs und QM-Dokumentation im Labor

4.12.–5.12. Saarbrücken
<https://gdch.link/2j>

Grundlagen der Pyrotechnik

4.12.–6.12. Kaiserslautern
seminars@lutradyn.com; www.lutradyn.com/home/deutsche-seminare/

Datenintegrität und Computervalidierung im analytischen Labor

5.12.–6.12. Frankfurt am Main
fb@gdch.de; <https://veranstaltungen.gdch.de/tms/frontend/index.cfm?l=8797>

Conference on Aquatic and Terrestrial Ecotoxicology and Risk Management

5.12.–6.12. Köln
cwerner@akademie-fresenius.de;
<https://t1p.de/znye>

Vom Urknall bis heute – 50 Jahre GSI-Forschung auf den Spuren des Universums

11.12. Darmstadt
info@gsi.de; <https://t1p.de/h5pa>

Hybrid Materials and Additive Manufacturing Processes (HyMaPro)

11.12.–12.12. Dresden
hymapro@iws.fraunhofer.de; www.soil-metagenomics.org/

Validation & Transfer of Methods for Biopharmaceutical Analysis

11.12.–13.12. Berlin
www.mournetrainingservices.co.uk/course_list.html#vampa

Thünen Symposium on Soil Metagenomics

11.12.–13.12. Braunschweig
registrierung@conventus.de; www.iws.fraunhofer.de/en/events/hymapro.html

Fortschritte bei Sprengstoffen

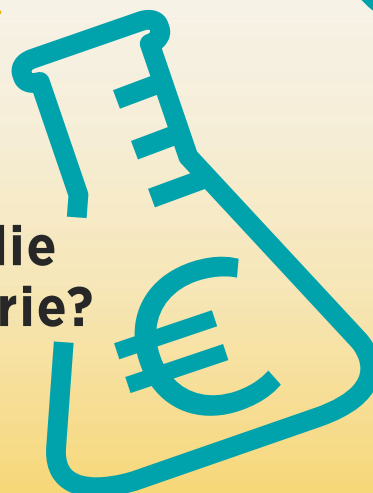
11.12.–13.12. Kaiserslautern
seminars@lutradyn.com; www.lutradyn.com/home/deutsche-seminare/

Euroforum Jahrestagung | 26. und 27. November 2019

CHEMIE- UND INDUSTRIEPARKS

ZU GAST IM RÖMER DER STADT FRANKFURT

Wer investiert noch in die deutsche Chemieindustrie?



Jetzt informieren:
www.euroforum.de/chemieparcs

Kooperationspartner:



euroforum

1. Halbjahr: Tagungen – Kongresse – Ausstellungen – Kurse (Inland)

Januar

NE:volution ins digitale Zeitalter

15.1.–16.1. Berlin
dgm@dgm.de; <https://t1p.de/9tle>

Jahresauftakttreffen Produktionsleiter-Tagung

22.1.–23.1. Dortmund
imueller@akademie-fresenius.de;
<https://t1p.de/gawf>

Februar

Sicherheit chemischer Reaktionen

3.2.–5.2. Frankfurt am Main
<https://dechema-dfi.de/SicherheitchemischerReaktionen.html>

PRAXISforum Enzymes for Industrial Applications

4.2.–5.2. Frankfurt am Main
chereen.semrau@dechema.de; <https://dechema.de/Enzymes-p-20123147.html>

Projektmanagement: Zusammenarbeit und Kommunikation im Projektteam

6.2.–7.2. Frankfurt am Main
<https://dechema-dfi.de/Projektteam.html>

Frühjahrstagung der Biotechnologen

17.2.–18.2. Frankfurt am Main
sabine.schneider@dechema.de;
<https://t1p.de/ct7k>

Amine Biocatalysis 4.0

17.2.–19.2. Stuttgart
secretary@itb.uni-stuttgart.de; <https://aminebiocat4.com/>

Irseer Naturstofftage

19.2.–21.2. Irsee
silke.rumpf@dechema.de; <https://dechema.de/Irsee2020.html>

Industrial Inorganic Chemistry – Materials and Processes

20.2.–21.2. Frankfurt am Main
xueqing.wu@dechema.de; https://processnet.org/29_atc.html

Analytical Chemistry 2020

24.2.–25.2. Berlin
analyticalchemistry@euroconferences.net;
<https://analyticalchemistry.euroscicon.com>

Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppen Fluidverfahrenstechnik, Adsorption und Extraktion

26.2.–28.2. Berchtesgaden
nina.weingaertner@dechema.de; https://dechema.de/FVT_ADS_EXT20.html

März

EMBO Course on Techniques for Mammary Gland Research

1.3.–6.3. Heidelberg
events@embl.de; <https://t1p.de/6u5v>

Praxistage „Konformitätsarbeit für Lebensmittelverpackungen“

3.3.–4.3. Mainz
sullerich@akademie-fresenius.de;
<https://t1p.de/l6df>

Kolloquium: Gemeinsame Forschung in der Klebtechnik

3.3.–4.3. Würzburg
andrea.koehl@dechema.de; <https://dechema.de/GFKT2020.html>

Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppe Energieverfahrenstechnik

4.3.–5.3. Frankfurt am Main
lenke@dechema.de; https://dechema.de/JTR_EVT2020.html

Joint Conference of the German Society for Hygiene and Microbiology (DGHM) & Association for General and Applied Microbiology

8.3.–11.3. Leipzig
christian.tschaepe@conventus.de;
www.dghm-vaam.de

Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppen Computational Fluid Dynamics und Gasreinigung

10.3.–11.3. Bamberg
silke.rumpf@dechema.de; https://dechema.de/CFD_GAS_20.html

Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Hochschuldidaktik

10.3.–13.3. Berlin
info@dghd2020.de; www.dghd2020.de

Jahrestreffen Deutscher Katalytiker

11.3.–13.3. Weimar
barbara.feisst@dechema.de; <https://dechema.de/katalytiker2020.html>

EMBO Course on FISHing for RNAs: Classical to single molecule approaches

15.3.–20.3. Heidelberg
<http://events.embo.org/coming-soon/index.php?EventID=pc20-12>

Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppe Kristallisation

16.3.–18.3. Dortmund
maren.termuehlen@tu-dortmund.de;
<https://t1p.de/761i>

Bioinspired Materials 2020 – International School and Conference on Biological Materials Science

16.3.–19.3. Irsee
bio-inspired@dgm.de; <https://bioinspired2020.dgm.de/home/>

Data Science und Künstliche Intelligenz

17.3.–18.3. Stuttgart
Assistenz.DIGI@iao.fraunhofer.de;
<https://t1p.de/fcb5>

Fresenius Conference „The Biocidal Products Regulation“

17.3.–18.3. Köln
nmiozga@akademie-fresenius.de;
<https://t1p.de/7sqd>

Meeting of the German Society for Parasitology

18.3.–21.3. Bonn
parasitology@conventus.de; www.parasitology-meeting.de/

Frontiers in Medicinal Chemistry with Chemical Epigenetics

22.3.–25.3. Freiburg
c.birkner@gdch.de; https://veranstaltungen.gdch.de/tms/frontend/index.cfm?l=9286&sp_id=2

Deutsche Zeolith-Tagung

25.3.–27.3. Hannover
petra.hellwig@dechema.de; <https://dechema.de/DZT32.html>

JCF-Frühjahrssymposium

25.3.–28.3. Köln
guestservice@jcf-fruehjahrssymposium.de;
www.jcf-fruehjahrssymposium.de

Fresenius-Praxistage „Allergenmanagement“

26.3.–27.3. Dortmund
sullerich@akademie-fresenius.de;
<https://t1p.de/akwv>

Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppen Lebensmittelverfahrenstechnik, Mischvorgänge, Grenzflächenbestimmte Systeme und Prozesse

26.3.–27.3. Würzburg
jana.geiss@dechema.de; https://dechema.de/LVT_MIS_GFSP20.html

Chemiedozententagung

30.3.–1.4. Dresden
tg@gdch.de; <https://t1p.de/ze85>

Analytica Conference

31.3.–2.4. München
tg@gdch.de; <https://t1p.de/vhn3>

Analytica Trade Fair

31.3.–3.4. München
info@analytica.de; www.analytica.de

April

Bunsentagung 2020 „Understanding Dispersion Interactions in Molecular Chemistry“

1.4.–3.4. Gießen
l.rubner@gdch.de; <https://t1p.de/u2lm>

71. Mosbacher Kolloquium „The world of RNAs – principles and applications“

2.4.–2.4. Mosbach
info@mosbacher-kolloquium.org;
<https://mosbacher-kolloquium.org/home.html>

European Conference on Nonlinear Optical Spectroscopy (ECONOS2020)

19.4.–22.4. Karlsruhe
info@econos-online.org; <http://econos-online.org/>

EMBO Course on Microbial Metagenomics: A 360° Approach

20.4.–27.4. Heidelberg
events@embl.de; www.embl.de/training/events/2020/MET20-01/

EMBO Workshop: The Epitranscriptome

22.4.–24.4. Heidelberg
events@embl.de; www.embl.de/training/events/2020/ETC20-01/

Hybrid Materials and Structures 2020 – International Conference on Hybrid Materials

28.4.–29.4. Karlsruhe
hotel.karlsruhe@bwg-hotel.de;
<https://hybrid2020.dgm.de/home/>

Fresenius Conference „Detergents and Cleaning Products“

28.4.–29.4. Mainz
imueller@akademie-fresenius.de;
<https://t1p.de/skij>

Jahrestreffen der Seniorexperten Chemie

28.4.–30.4. Wernigerode
a.hannebauer@gdch.de; <https://t1p.de/1njh>

PRAXISforum Lab of the Future

29.4.–30.4. Frankfurt am Main
kristina.boehlandt@dechema.de; <https://dechema.de/FutureLab.html>

Mai

EMBO Course on Measuring Translational Dynamics by Ribosome Profiling

3.5.–9.5. Heidelberg
events@embl.de; <https://t1p.de/9me8>

Sicherheitstechnik in der Chemischen Industrie

11.5.–13.5. Frankfurt am Main
<https://dechema-dfi.de/Sicherheitstechnik.html>

Reaktionstechnik – Das Engineering chemischer Reaktionen

12.5.–14.5. Frankfurt am Main
<https://dechema-dfi.de/Reaktionstechnik.html>

EMBO Symposium on Cellular Mechanisms Driven by Liquid Phase Separation

11.5.–14.5. Heidelberg
events@embl.de; <https://t1p.de/sy40>

3D Cell Culture 2020: Models, Applications & Translation

12.5.–14.5. Freiburg
xueqing.wu@dechema.de; <https://dechema.de/3DCC2020.html>

Werkstoffe und Additive Fertigung

13.5.–15.5. Potsdam
Additive-fertigung@dgm.de; <https://additive-fertigung-2020.dgm.de/home/>

Himmelfahrtstagung 2020 – New Bioprocesses, New Bioproducts

18.5.–20.5. Mainz
petra.hellwig@dechema.de; <https://dechema.de/BioPro20.html>

Jahrestreffen Reaktionstechnik 2020 – Annual Meeting on Reaction Engineering

18.5.–20.5. Würzburg
chereen.semrau@dechema.de; <https://dechema.de/REAKT2020.html>

FDMD 2020 – Fatigue Design and Materials Defects

26.5.–28.5. Potsdam
fdmd@inventum.de; <https://fdmd2020.inventum.de/home/>

Juni

EMBO Symposium on Microtubules: From Atoms to Complex Systems

3.6.–6.6. Heidelberg
events@embl.de; <https://t1p.de/0d73>

EMBO Workshop on Physics of Living Systems: From Molecules to Tissues

8.6.–12.6. Dresden
<https://t1p.de/vtjw>

Explorative Datenanalyse

15.6.–16.6. Frankfurt am Main
<https://dechema-dfi.de/EDA.html>

PRAXISforum Additive Manufacturing

17.6.–18.6. Frankfurt am Main
jana.geiss@dechema.de; <https://dechema.de/AdditiveManufacturing.html>

Fresenius-Praktikertreffen „QS-Leiter Tagung“

23.6.–24.6. Dortmund
imueller@akademie-fresenius.de;
<https://t1p.de/ozeh>

Laser Precision Microfabrication Symposium

23.6.–26.6. Dresden
lpm2020@dgm.de; <https://lpm2020.inventum.de/home/>

Keramische Werkstoffe – Fortbildungstagung

24.6.–25.6. Dresden
fortbildung@inventum.de; <https://keramische-werkstoffe2020.dgm.de/home/>

Regelungstechnik – Praxis für verfahrenstechnische Prozesse

25.6.–25.6. Frankfurt am Main
<https://dechema-dfi.de/Regelungstechnik.html>

Keine halben Sachen.

Die Welt ist voll von Halbwissen. Besonders im sensiblen Umfeld der Chemie ist dies jedoch fehl am Platz. Deshalb arbeiten wir seit 1947 mit Leidenschaft und Liebe zum Detail daran, dass evaluierte Daten und Fakten rund um das Themenfeld Chemie zur Verfügung stehen. Immer. Und ohne Ausnahme. So wurde „Der RÖMPP“ Synonym für inzwischen über 65 000 Stichwörter und über 240 000 Querverweise, auf die man sich verlassen kann. Das sollten Sie sich am besten selbst anschauen.



Sonderpreis
für GDCh-Mitglieder 139,- €
für stud. Mitglieder 69,- € www.gdch.de



Nur 100% sind 100%.
www.roempp.com



Young Investigator Workshop 2019

The 11th edition of the Young Investigator Workshop, organized by the Organic Division of EuChemS, was hosted at the University of Vienna. This format is solely dedicated to young researchers involved in various branches of organic chemistry.

28 participants from Europe, Russia, Israel, Canada and from the United States gathered early July (prior to the ESOC meeting) in Vienna, the capital of Austria. All participants were nominated by their local representatives (member societies), with a maximum of two nominees per country. Represented were Austria, Belgium, Canada, Cyprus, Czech Republic, Denmark, Finland, France, Ireland, Israel, Italy, Latvia, Norway, Portugal, Russia, Spain, Switzerland, the Netherlands, UK, and USA. The local organizer was Prof. Vittorio Pace and his group from the University of Vienna, who was supported by the presence of Prof. Berit Olofsson (Stockholm University, Sweden), Prof. Gianluca M. Farinola (University of Bari, Italy) and Prof. Christoforos Kokotos (University of Athens, Greece). The workshop was organized over three days and was divided into four sessions of up to eight oral presentations (25 min each). This format encouraged communication and exchange of ideas.

Prof. Gianluca M. Farinola chaired the first session and Florian Rudroff (TU Wien, Austria) gave the opening lecture. His research was inspired by nature and was dedicated to catalytic cascades composed of different catalytic entities for the synthesis of high value chemicals in biochemical cell factories. The second speaker was Hennie Valkenier (University of Brussels, Belgium), who presented her work on artificial macrocyclic receptors for transmembrane transport of inorganic and organic ion pairs. She was followed by Maria Koyioni from the University of Cyprus, Cyprus, who presented methods to synthesize 5H-1,2,3-dithiazoles and dithiazolylidenes and gave novel insights into their chemistry. Moving from synthetic chemistry to material science, the next presenter was Marina

Sekutor from the Ruder Boskovic Institute, Croatia. Her work focused on bulky cage hydrocarbons as ideal candidates for the study of London dispersion contributions to self-assembly, for example on metal surfaces.

After a short coffee break, the scientific session continued with Ji-Woong Lee from the University of Copenhagen, Denmark, whose main research interest lies in the CO₂-capture and sequestration or CO₂-functionalization. Amongst other things, he reported a novel Michael-type cyanation reaction of coumarins by using CO₂ as catalyst. Toni T. Metsänen from the University of Jyväskylä, Finland, presented a novel concept for synthetic ketoreductase mimics by bifunctional foldamer-type catalysts. The third speaker of this session was Vincent Coeffard from the Université de Nantes, France. He presented the use of light, oxygen and a photosensitizer to produce singlet oxygen (¹O₂) for the one-pot preparation of functionalized polycyclic compounds, starting from phenol derivatives. Christos I. Stathakis from the Aristotle University of Thessaloniki, Greece, complemented the first scientific day. He demonstrated the power of synthetic chemistry for the synthesis of complex racemic Vaticanol A. This resveratrol trimer was constructed by exploiting the quinone methide reactivity thrice as a key synthetic tool. After these exciting and very mixed scientific sessions, the first day was completed with a dinner at Salmbräu and a “good-night” cocktail at the Kunsthalle Wien. All participants enjoyed traditional Viennese cuisine, local beer and good drinks and had time for networking in a very relaxed atmosphere.

The second day, chaired by Prof. Berit Olofsson, started with Andy McNally from Colorado State University, USA, who

presented his newest results on the C-H functionalization of pyridines via phosphorous intermediates either in a catalytic or non-catalytic fashion. This late stage functionalization method led to novel C-C, C-O, C-N and C-S bond formations. Marcus Baumann (University College Dublin, Ireland) demonstrated the power of flow-chemistry in the second talk. He showed how dangerous reactions on industrial scale, like the monomerization of cyclopentadiene (reactive distillation), can be performed under controlled and safe reaction conditions, allowing further transformation into complex heterocyclic molecules in a continuous fashion. Ori Gidron presented a completely different topic from the Hebrew University of Jerusalem, Israel. He demonstrated the synthesis of twisted acenes. He addressed how the twisting affects the electronic and optical/chiroptical properties. Furthermore, he presented the first macrocyclic oligofuran. Silvia Marchesan (University of Trieste, Italy), who complemented the first scientific session of day two, gave insights into the field of peptide nanostructures. She used D-amino acids to achieve diverse supramolecular assemblies with putative applications in drug delivery and supramolecular catalysis. After a short coffee break, Melanie Hall (University of Graz, Austria) introduced the field of redox-neutral biocatalysis with redox enzymes. She presented an intramolecular bio-Tishchenko reaction catalyzed by alcohol dehydrogenases and an ene-reductase mediated asymmetric C=C bond isomerization. Alexander Astrand (University of Oslo, Norway) concluded the morning session and reported about a potential solution to antibiotic resistance by overcoming β -lactam resistance. Therefore, his team designed, synthesized and



Participants of the Young Investigator Workshops 2019. Foto: Vittorio Pace, University of Wien

tested novel zinc chelators that inhibit metallo β -lactamases.

Prof. Christoforos G. Kokotos chaired the third session, in which diverse synthetic methodologies were presented. Marcin Kalek (University of Warsaw, Poland) first reported on metal free C-H functionalization using iodonium salts as group transfer reagents and discussed relevant mechanistic aspects. Luis Cruz (University of Porto, Portugal) then gave an overview on flavylum-based system and their technological application, in particular for dyes, followed by Eliška Matoušová (Charles University, Czech Republic), who currently works on the development of new methods for the synthesis of polycyclic natural products and their analogues, notably to access quaternary centers with high enantioselectivity. The use of flavylum polymethine fluorophores was presented by Ellen M. Sletten (University of California, Los Angeles, USA), who applies them in high resolution, multicolor imaging in vivo. Marcos García Suero (Barcelona Institute of Science and Technology, Spain) provided an overview on new reactivity rules at carbon. The application of electrophilic metal homoenolates in the synthesis of cyclopropylamines was reported by Sophie Rousseaux (University of Ottawa, Canada), who showed that several cyclopropylamines could be obtained with high level of diastereoselectivity. Finally, Michal Juriček (University of Zurich, Switzerland) presented the design and synthesis of magnetic switches made of graphene fragments.

The second day was concluded by dinner at Fuhrgassl-Huber, during which all participants could enjoy traditional Viennese cuisine and local wines, and interact in a very casual atmosphere.

The last session on the third and final day was chaired by Prof. Vittorio Pace and highlighted the diversity of research performed in organic chemistry in Europe. Aleksandra Mitrovic (University of Belgrade, Serbia) gave insights into the covalent functionalization of black phosphorus, while sharing details on the spectroscopic techniques and DFT calculations employed to demonstrate the degree of functionalization thereby attained. Going back to synthetic methodologies, Alexey Sukhorukov (Russian Academy of Sciences, Russia) shared his latest results in the Umpolung functionalization of carbon atom in nitronates, and presented the scope and application of the methodology in total synthesis. Clemens Mayer (University of Groningen, The Netherlands) gave a presentation on the design of enzymes displaying artificial catalytic activity and on biocompatible transition metal catalysts, with a common feature of using stop codon suppression. The use of rarely employed 4- π photocyclisation of 1,2-dihydropyridazines was detailed by Susannah Coote (Lancaster University, UK), who currently employs this reaction to access bicyclic 1,2-diazetidine building blocks. Finally, Mihály Herczeg (University of Debrecen, Hungary) reported on the synthesis and biological studies of heparin analogue oligosaccharides.

New to this year edition was the closing EurJOC lecture, given by Prof. Ilan Marek (Israel Institute of Technology, Israel), who gave an inspiring talk on remote functionalization, or how to merge metal-walk with C-C bond cleavage.

Also present during the workshop were Susanne Haak, managing director chemistry journals at Thieme, and Anne Nijs, EurJOC editor-in-chief.

The Young Investigator Award 2019 was given to Marcos García Suero from ICIQ, Spain, for his significant and innovative discoveries in photoredox catalysis, and particularly for his studies on the generation of carbyne equivalents for late stage functionalization of aromatic compounds, and of radical carbenoids for the stereoconvergent formation of cyclopropanes.

Both participants from the Austrian delegation thank the Austrian Chemical Society for the nomination and the opportunity to participate in this dynamic event, which provided the chance to exchange with peers at similar career stage. The local organization by Vittorio Pace and his group was impeccable and the involvement of the division of organic chemistry of EuChemS was highly appreciated.

The Website of YIW 2019 can be found at:
www.euchems.eu/divisions/organic-chemistry-2/young-investigator-workshop-euchems-division-of-organic-chemistry/

Melanie Hall, Florian Rudroff

Österreichische Lebensmittelchemiker-Tage 2020

Food Chemistry and Cosmetics in the Alpe Adria Region

Die nächsten Österreichischen Lebensmittelchemiker-Tage werden in Klagenfurt vom 22. bis 24. April 2020 stattfinden. Dieses Mal wird diese traditionell österreichische Tagung international ausgeschrieben. Gemeinsam mit den Kosmetikern werden die Lebensmittelchemiker die aktuellen Fortschritte in den entsprechenden Arbeitsgebieten diskutieren. Wie in den letzten Jahren wird sich auch diese Tagung nicht nur an die Vertreter der Wissenschaft wenden, es sollen auch die Vertreter aus den angewandten Bereichen, insbesondere der Wirtschaft, angesprochen werden.

Die letzten Entwicklungen im Bereich der Lebensmittelanalytik, den chemischen Veränderungen während der Verarbeitung und des Kochens, Entwicklungen in Verarbeitung, Qualitätskontrolle, Stabilität und Sicherheit werden diskutiert. Es ist geplant, Wissenschaftler, die Lebensmittelaufsicht und auch Repräsentanten der Wirtschaft zusammenzubringen, um eine gemeinsame Plattform zu bilden, die sich mit den weiteren Entwicklungen und Verbesserungen von Produkten und Verarbeitungsprozessen auseinandersetzen

kann. Die letzten rechtlichen Veränderungen werden ebenfalls ein Thema dieser Tagung sein, zum Beispiel die Regularien bezüglich des alimentären trans-Fettes.

Neben der traditionellen Posterpräsentation gibt es die Möglichkeit, die Poster in Kurzvorträgen vorzustellen. Zusätzlich wird das wissenschaftliche Komitee einen Posterpreis vergeben. Im Rahmen der Tagung wird auch der P.B.-Czedik-Eysenberg-Preis für Publikationen junger Wissenschaftler vergeben. Die Ausschreibung für diesen Preis, der bereits gedruckte oder auch von wissenschaftlichen Zeitschriften zum Druck akzeptierte Manuskripte würdigt, ist unter www.goech.at/finanziell abrufbar.

Da die Tagung international ausgeschrieben wird, ist die Tagungssprache Englisch.

Wir freuen uns auf eine spannende Veranstaltung.

Michael Murkovic

Vorsitzender der Arbeitsgruppe „Lebensmittelchemie, Kosmetik und Gebrauchsgegenstände“ der Gesellschaft Österreichischer Chemiker

Fortbildung Zweigstellen

Zweigstelle Tirol und Vorarlberg

Information: Univ.Prof. Dr. Thomas Magauer, Institut für Organische Chemie, Universität Innsbruck, Innrain 80–82, 6020 Innsbruck, Tel. 0043 512 507 57731, thomas.magauer@uibk.ac.at

Small Molecule Modulators of Bacterial Behavior and Customized Antibiotics

Dr. Thomas Böttcher, Universität Konstanz
Termin: 11. November, 17.15 Uhr
Ort: Hörsaal L.E.G.200, Innrain 80/82, 6020, Innsbruck

From Molecules to Materials and Back: 2D Nanostructures for Sensing and Solar Energy Conversion

Prof. Dr. Bettina Lotsch, MPI für Festkörperforschung, Stuttgart
Termin: 25. November, 17.15 Uhr
Ort: Hörsaal L.E.G.200, Innrain 80/82, 6020, Innsbruck

Alle Zweigstellenvorträge sind kostenlos. Weitere Termine der Zweigstellenvorträge entnehmen Sie bitte unserer Website www.goech.at

Diverse Veranstaltungen

EF ECS 2019 – European Forum for Electronic Components and Systems

Termin: 19. – 21. November
Ort: Finlandia Hall in Helsinki
Information: <https://efecs.eu/>

Joint Polish-German Crystallographic Meeting 2020

Termin: 23. – 27. Februar
Ort: Warschau, Polen
Information: <https://www.dgk-conference.de/>

Asac News – www.asac.at

37. Agilent Forum Analytik
11. und 12. Februar 2020
Ort: Hotel Schloss Wilhelminenberg,
1130 Wien
Information: www.asac.at

MassSpec Forum 2020
25. und 26. Februar 2020
Ort: Technische Universität Wien
Information: Assoc.Prof. Dr. Martina Marchetti-Deschmann, Tel. 0043 1 58801 15162, martina.marchetti-deschmann@tuwien.ac.at,

<https://mass-spec-forum-vienna.conf.tuwien.ac.at/home/>

Sommerschule Chromatographie und Kopplung mit Massenspektrometrie
13. bis 16. September 2020
Ort: Schloss Seggau bei Leibnitz
Information: Institut für Chemie, Karl-Franzens-Universität Graz, Universitätsplatz 1, 8010 Graz, Österreich, Tel. 0043 316 380 5302, walter.goessler@uni-graz.at, www.asac.at



Gesellschaft Österreichischer Chemiker
Nibelungengasse 11/6
1010 Wien, Austria
Tel.: 0043 1 587 42 49, Fax: 0043 1 587 89 66
E-Mail: office@goech.at, Web: www.goech.at



Prof. Wolfgang Kroutil, Prof. Oliver Kappe, Prof. Dirk Trauner, Prof. Rolf Breinbauer, Dr. Hiromichi Sugahara, Prof. Michael Trauner, Dr. Dirk Schubert (v.l.). Foto: Mario Leypold

Adolf Lieben Lectureship 2019

Bereits zum vierten Mal vergab die Arbeitsgruppe Organische Chemie der GÖCH die Adolf Lieben Lectureship an einen international renommierten Chemiker. Der diesjährige Preisträger war Prof. Dirk Trauner von der New York University. Wie schon in den vergangenen Jahren hielt der Preisträger Vorträge an mehreren österreichischen Universitäten, diesmal in Innsbruck, Linz, Wien und Graz. Die offizielle Verleihung des Lectureship Awards fand am 6. Juni im Rahmen des Vortrags in Wien, im Rahmen der TUtheSky Lounge der TU Wien statt. Ein besonderer Dank gebührt auch heuer wieder unserem großzügigen Sponsor TCI Chemicals, ohne den die Verleihung dieser Lectureship nicht möglich wäre.

Im Rahmen der Preisverleihung signierte Prof. Trauner auch wieder ein bereits von Adolf Lieben persönlich signiertes Separatum seiner Publikation „Über die Entstehung von Jodoform und Anwendung dieser Reaction in der chemischen Analyse“, erschienen 1870 in *Liebigs Annalen der Chemie und Pharmacie*, womit die Sammlung an Unterschriften von herausragenden Chemikern auf diesem Manuskript wieder gewachsen ist.

Wir freuen uns schon auf die Veranstaltung im nächsten Jahr und werden den oder die Adolf Lieben Lecturer 2020 sobald wie möglich bekannt geben.

Nuno Maulide, Michael Schnürch

Abschied

Liebe GÖCH-Mitglieder,
an dieser Stelle möchte ich mich bei Ihnen ganz herzlich verabschieden. Mit Ende dieses Jahres werde ich die GÖCH verlassen, da ich in Pension gehe. Ich danke Ihnen für die sehr lange angenehme Zusammenarbeit und für die immer währende Unterstützung, die ich von vielen Mitgliedern erfahren habe. Es waren spannende und interessante Jahre, in denen ich auch sehr viel gelernt habe und die ich in keiner Weise missen möchte. Ein großer Dank gilt auch allen Präsidien und Vorständen, die mich in den mehr als

20 Jahren immer sehr konstruktiv unterstützt haben.

Daher gibt es ein weinendes und ein lachendes Auge. Weinend, weil ich sehr gerne für die Gesellschaft Österreichischer Chemiker tätig bin, lachend, weil ein neuer, anderer Lebensabschnitt beginnt, der neue Herausforderungen bringen wird.

Ich wünsche Ihnen allen weiterhin viel Erfolg und Gesundheit und verbleibe wie immer

mit lieben Grüßen
Ihre
Gabriela Ebner

Wir gratulieren zum Geburtstag

Jänner 2020

05.01.1930 Dr. Franz Narbeshuber
05.01.1980 Dr. Christian Stanetty
08.01.1935 Dr. Franz Aigner
09.01.1955 Univ.Prof. Dr. Peter Englmaier
14.01.1960 Dr. Michael Steinberger
17.01.1945 Dr. Josef Weiss
19.01.1940 Dr. Hans Jahnel
21.01.1945 DI. Mathias Holweg
21.01.1970 Prof. Dr. Stephan Schwarzingher
25.01.1940 Dr. Ludwig Call
25.01.1945 Dr. Veit Nitsche
29.01.1945 O.Univ.Prof. Dr. Manfred Grasserbauer
31.01.1965 Dr. Simone Knaus
31.01.1970 Dr. Reinhard Wimmer

Feber 2020

01.02.1970 Ao.Univ.Prof. Dr. Klaus Zangger
06.02.1970 Dr. Robert Stadler
08.02.1950 DDr. Haio Harms
09.02.1970 Dr. Ralf-Dieter Josephs
10.02.1955 Dr. Kurt Kalcher
10.02.1965 Univ.Prof. Dr. Günther Knör
12.02.1955 Ing. Gerhard Gribl
13.02.1955 Dr. Matthaeus Siebenhofer
13.02.1980 Assoz.Prof. Dr. Matthias Rainer
14.02.1960 Dr. Berndt Oberhauser
18.02.1965 Ao.Univ.Prof. Dr. Hans Christian Flandorfer
20.02.1970 Dr. Georg Waldner
20.02.1960 Gerhard Körner
20.02.1970 Dr. Marion Gebhart
21.02.1950 O.Univ.Prof. Dr. Wolfhard Wegscheider
21.02.1980 Dr. Hannes Wallnöfer
23.02.1945 Dr. Walter Knapp
28.02.1940 DI. Andreas Kunsch
29.02.1980 Dr. David Obermayer

März 2020

02.03.1960 Dr. Franz Schrank
02.03.1970 Univ.Prof. Dr. Marko Mihovilovic
03.03.1955 Dr. Martin Decristoforo
05.03.1965 Ao.Univ.Prof. Dr. Robert Saf
06.03.1970 Univ.Prof. Dr. Peter Ertl
06.03.1970 DI. Karl Prattes
09.03.1965 Univ.Prof. Dr. Jürgen Fleig
12.03.1970 Dr. Michael Gerold Stanek
13.03.1940 Dr. Heinrich Mutschlechner
13.03.1965 Dr. Hubert Duchaczek
13.03.1970 Ao.Univ.Prof. Dr. Matthias Weil
18.03.1940 Dr. Erich Schaschel
19.03.1965 Marianne Fennes
23.03.1960 Dr. Peter Nussbaumer
26.03.1980 Dr. Christoph Rameshan
27.03.1940 em.o.Univ.Prof. Dr. Harald Schmidt
28.03.1945 Dr. Helmuth Schwarz
28.03.1970 Univ.Prof. Dr. Gunda Köllensperger
30.03.1960 Ing. Wolfgang Neuningner

Neumitglieder von Jänner bis September 2019

Die GÖCH begrüßt als neue Mitglieder:

Adelwöhrer Dr. Christian, Techn. Untersuchungsanstalt der BFV, 1030 Wien; Alan Ebru, 1060 Wien; Atzl Leonard, 1190 Wien; Bachmann Dr. Verena, 6330 Kufstein; Balla BSc. Josef, 1120 Wien; Battisti Mag.Pharm. Verena, 1150 Wien; Bieber BSc. Paul, 1190 Wien; Bin Dario, 1020 Wien; Bischofberger Walburga Freyja, 6020 Innsbruck; Bögl DI. BSc. Thomas, 4050 Traun; Bogner Paul, 3500 Krems an der Donau; Bonczyk BSc. Tobias, 6020 Innsbruck; Bosch BSc. Dominik, 6020 Innsbruck; Böttinger Mgr. MSc, BSc, Katharina, 5061 Elsbethen; Brandl BSc. Bianca, 8010 Graz; Braun Dipl.-LMChem Dominik, 1170 Wien; Brenner Mag.pharm. Dr. Stefan, Chemisch pharmazeutisches Laboratorium der österreichischen Apothekerkammer, 1090 Wien; Chloupek DI. Stefan, 1100 Wien; Cristurean DI. Doris, Institut für Chemie der Polymere, Universität Linz, 4040 Linz; Di Mauro MSc. Giovanni, 1090 Wien; Diwald Mag. (FH) Jakob, Plantapharm GmbH, 1200 Wien; Doppelbauer BSc. David, 4730 Waizenkirchen; Drienovska Dr. Ivana, 8010 Graz; Eder DI. Wolfgang, 1070 Wien; Ehrenbrandtner Jakob, 1010 Wien; Eilen Stefanie, Techn. Untersuchungsanstalt der BFV, 1030 Wien; Estrada MSc. Adriana, Institut für Chemie der Polymere, Johannes Kepler Universität, 4040 Linz; Feuerstein MSc. Max Lennart, 1050 Wien; Flasch Mira, 1170 Wien; Fleiss BSc. Tobias, 8010 Graz; Fleissner Sarah, 1140 Wien; Floros MSc. Dimitrios, Universität für Bodenkultur Wien, Dept. für Agrarbiotechnologie, IFA-Tulln, Inst. f. Bioanalytik und Agro-Metabolomics, 3430 Tulln; Getreuer BSc. Paul,

1190 Wien; Göpperl DI. Lukas, 4040 Linz; Grabner Marlene, 1030 Wien; Gradnitzer Lukas, 6020 Innsbruck; Greussing Victoria, 6063 Rum; Gummerer Rebecca, 6020 Innsbruck; Guntner DI. BSc. Armin Sebastian, 4040 Linz; Gupta Agrim, 4040 Linz; Habibi PhD student Fereshteh, 1230 Wien; Handelshauser MSc. Martin, Institut für Chemische Technik und Analytik, TU Wien, 1060 Wien; Herrmann Barbara, 1100 Wien; Hobiger MSc. Viola, 1160 Wien; Honsig-Erlenburg MSc. Bakk.rer.nat. Barbara, apis labor GmbH, 9065 Ebenthal; Horeschi Ing. Andreas, 2700 Wiener Neustadt; Huber BSc. Martin, 3100 St. Pölten; Itzenhaler Christoph, 3100 St. Pölten; Janker MSc. Lukas, 1230 Wien; Keppel DI. Patrick, Institut für Angewandte Synthesechemie, TU Wien, 1060 Wien; Kisling DI. Thomas, 4040 Linz; Kitzler Christian Manuel, Institut für Organische Chemie, Universität Linz, 4040 Linz; Knaack DI. Dr. Patrick, Inst.f. Angewandte Synthesechemie, TU Wien, 1060 Wien; Kolb DI. Larissa, Inst.f. Analyt. Chemie & Lebensmittelchemie, TU Graz, 8010 Graz; Komlodi Aranka Timea, 1020 Wien; Kozak BSc. Fanny, 1050 Wien; Kriesche BSc. Bernhard, 6020 Innsbruck; Lahnsteiner MSc. Marianne, 1060 Wien; Latschka Markus, 2170 Poysdorf; Lienbacher Laura, 5431 Kuchl; Löffler Andreas, 1100 Wien; Luger Mag. Mathias, Post AG, 2232 Deutsch Wagram; Magenheimer Lukas, 1100 Wien; Mairhofer Christopher, 4040 Linz; Malissa DI. Antonia, 1010 Wien; Marchet BSc. Nikolas, 6020 Innsbruck; Matijevic Andreas, 8010 Graz; Mirwald Johannes, Institut für Materialchemie, TU Wien, 1060 Wien;

Moll Vanessa, 6020 Innsbruck; Müller MSc. Katharina, Universität Salzburg, FB Biowissenschaften AG Huber, 5020 Salzburg; Neuditschko MSc. Benjamin, 1110 Wien; Newerkla Thaddaeus Hieronymus, 1200 Wien; Nimmervoll DI. Manuela, 3400 Klosterneuburg; Orthofer BSc. Marco, 4733 Heiligenberg; Peric Mag. Ing. Matea, 4030 Linz; Perktold Liane, 6020 Innsbruck; Pernusch DI. Daniel Christian, 4040 Linz; Pfennigbauer Katharina, 2136 Laa an der Thaya; Pichler Jessica 1140 Wien; Pillwein BSc. Felix, 4020 Linz; Plank Dr. Doris, 8020 Graz; Pokrant Univ.Prof. Dr. Simone, FB Chemie & Physik der Materialien, Universität Salzburg, 5020 Salzburg; Poremba BSc. Nikolaus, 1120 Wien; Portenkirchner DI.(FH) Dr. Engelbert, Institut für Physikalische Chemie, Leopold-Franzens-Universität Innsbruck, 6020 Innsbruck; Priessner MSc. Martin, 9064 Pischeldorf; Purtscher Felix, 6020 Innsbruck; Razenböck Alexander, 8010 Graz; Reimhult Univ.Prof. Dr. Erik, Institute for Biologically Inspired Materials, University of Natural Resources and Life Sciences, 1190 Wien; Reithofer Assoz. Prof. Dr. Michael, Inst.f. Anorganische Chemie, Universität Wien, 1090 Wien; Rosecker DI. Veronika, 2340 Mödling; Sasse Michael, Inst. f. Analytische Chemie & Radiochemie, Universität Innsbruck, 6020 Innsbruck; Schaumüller DI. Stephan, Institut für Chemie der Polymere, Universität Linz, 4040 Linz; Schebeck Matthias, 2320 Schwechat; Schedl BSc. Christina, 2500 Baden bei Wien; Scheiber Mag.Pharm. Nina, Institut für Pharmazeutische Chemie, Karl Franzens Universität Graz, 8010 Graz; Schmidbauer BSc. Lucia, 1160 Wien; Schön Univ.-Doz. DDr. Ing. Hans, 3500 Krems; Schröder MSc. Philipp, 6020 Innsbruck; Semlitsch DI. Dr. Stefan, 8054 Graz; Spiegel DI. Gunnar, Inst. f. Chem. Technolog. Organ. Stoffe, Universität Linz, 4040 Linz; Stainer Florian, 9020 Klagenfurt; Stankovic BSc. Toda, 1100 Wien; Staudegger DI. Dr. Erich, 9020 Klagenfurt; Steinberger DI. Stephanie, Institut für Analytische Chemie, TU Wien, 1060 Wien; Stockhammer BSc. Lotte, 4810 Gmunden; Strasser MSc. Paul, 4742 Pram; Streibitzer BSc. MSc. Elisabeth, 6020 Innsbruck; Süß BSc. Raphaela, 4040 Linz; Templ Johanna, 1030 Wien; Topf Dr. Christoph, Institut für Katalyse, Johannes Kepler Universität, 4040 Linz; Wagner MSc. Stefan, Dept. Allgem., Analyt. und Physikal. Chemie, Montanuniversität Leoben, 8700 Leoben; Walenta MSc. Martin, 8010 Graz; Wallergraber Christoph, 4407 Dietach; Weber Johann, 1080 Wien; Werkovits Stefan, 7372 Draßmarkt; Widter DI. Zivka, 1140 Wien; Wiedemair Mag. MSc. MA. Verena, 6020 Innsbruck; Wohlschlager DI. Dr. Therese, Fachbereich Biowissenschaften, Universität Salzburg, 5020 Salzburg; Wollrab Julian, 6020 Innsbruck; Zeindl BSc. Ricarda, 6020 Innsbruck; Zeininger DI. BSc. Johannes, 1070 Wien; Zoratto MSc. Samuele, Inst. of Chemical Technologies and Analytics, TU Wien, 1060 Wien.

Weitere Zweigstellen- und Arbeitsgruppenvorträge

GÖCH AG Geschichte der Chemie

Information: Univ.Do. Dr. Rudolf Werner Soukup, rudolf.werner@kabelnet.at; www.rudolf-werner-soukup.at/

Wissenschaftlerinnen der ersten Generation in den Nachfolgestaaten der Habsburgermonarchie

Termin: 22. November, 9:30 Uhr

Zweigstelle Oberösterreich

Information: Assoc.Univ.Prof. DI. Dr. Mario Waser, Institut für Organische Chemie, Universität Linz, Altenbergerstraße 69, 4040 Linz, Tel. 0043 732 2468 5411, mario.waser@jku.at, Veranstaltungsort für beide Vorträge ist JKU Linz – HS 13 (TNF Turm)

Escape from Noble Transition Metals

Ein Vortrag von Prof. Christoph Bour, Université Paris Sud

Termin: 26. November, 17.15 Uhr

AMANDA – an autonomous, robot-based research platform to accelerate material development

Ein Vortrag von Prof. Christoph Brabec, Universität Erlangen Nürnberg

Termin: 3. Dezember, 17.15 Uhr

Weitere Termine finden Sie auf www.goech.at



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Ein Stipendium der GDCh...



...bewirb dich auch!

Es locken 300 Euro im Monat!

www.gdch.de/hofmannstiftung

Ein Stipendium der August-Wilhelm-von-Hofmann-Stiftung der GDCh

benannt nach August Wilhelm von Hofmann (1818-1892), dem Gründungspräsidenten der Deutschen Chemischen Gesellschaft.

Bedingungen:

Bachelor-Student/in der Chemie mit guten Studienleistungen, zwei bzw. drei Semester vor Bachelorabschluss

Ausschreibung und Antragsformular unter www.gdch.de/hofmannstiftung.

Antrag beim GDCh-Ortsverbandsvorsitzenden oder JCF-Regionalsprecher mit Empfehlungsschreiben eines Hochschullehrers bis 1. Februar 2020 einreichen.

Laufzeit des Stipendiums:

12 bzw. 18 Monate ab April 2020

Das gemeinsame Element

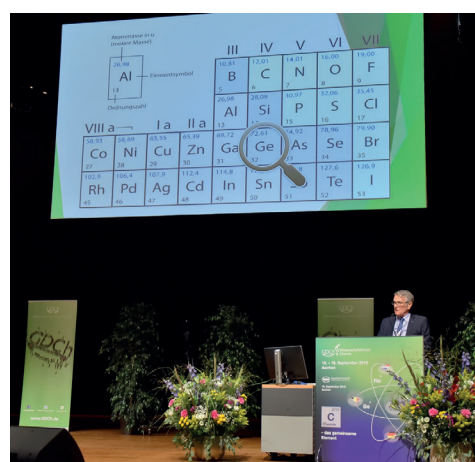
4 Tage, 1500 Chemiebegeisterte, 11 Plenarreden, 250 Vorträge, 350 Poster, Diskussionen, Firmenausstellungen, Karriereveranstaltungen, ein Satellitenevent und, und, und – das GDCh-Wissenschaftsforum Chemie in Aachen hatte für alle etwas zu bieten.



Matthias Urmann mit Eva Wille beim gemeinsamen Empfang von GDCh und dem Verlag Wiley-VCH. Die Torte mit dem Motto „Starke Partner für die Chemie“ war schnell verspeist.



GDCh-Präsident Matthias Urmann eröffnet das GDCh-Wissenschaftsforum Chemie in Aachen. alle Fotos: Christian Augustin



Im Aachener Dreiländereck waren die chemischen Gesellschaften der Niederlande und Belgiens Partner der GDCh beim Wifo. Eric Schouteden, Vizepräsident der belgisch-flämischen KVCV, sprach eines der Grußworte.



Als Preisträger hat man gut lachen: hier Frank Würthner, frisch ausgezeichnet mit der Adolf-von-Baeyer-Denk Münze.

Noch mehr Bilder und Tagungsrückblicke im Internet unter www.gdch.de/gdch/wissenschaftsforum-chemie/wifo-2019.html auf der GDCh-Website und bei ChemistryViews unter www.chemistryviews.org/details/ezone/11186680/GDChs_WiFo_in_Aachen.html



„Das Wichtigste an einer Tagung sind die Gespräche in den Pausen.“ Diese alte Weisheit bewahrheitete sich auch wieder auf dem Wifo, etwa hier vor dem GDCh-Stand.



Experiment Zukunft: Beim Satellitenevent des Wissenschaftsforums ging es unter dem Leitmotiv „Wissen und Nichtwissen“ in interaktiven Diskussionsrunden um die großen Fragen, denen sich die Chemie stellen muss.



Gruppenbild mit GDCh-(Alt-)Präsidenten: Karl-Ziegler-Preisträger Klaus Müllen (Mitte) präsentiert Urkunde und Medaille, Matthias Urmann (rechts) hält unauffällig den Briefumschlag mit dem Scheck des höchstdotierten GDCh-Preises, Dieter Jahn die Blumen und seine Laudatio.



Über diesen formschönen Siegerpokal jubelt die Slammerin Marlene Bödl. Vor 250 Zuschauern setzte sie sich bei der Abstimmung zum Dr. ChemSlam gegen fünf Konkurrenten durch.

Foto: mika-photography.com



Drei Dutzend Preise wurden auf dem Wifo verliehen – an Chemiker vom Prof. emeritus bis zum Doktoranden. Hier freuen sich die Gewinner des H.C.-Starck-Tungsten-Promotionspreises der GDCh-Fachgruppe Festkörperchemie und Materialforschung: Simon David Kloß und Heidi Annemarie Schwartz.



„Toward Efficient Utilization of Renewable Resources“: Kyoko Nozaki von der Universität Tokio wurde von der GDCh mit der August-Wilhelm-von-Hofmann-Vorlesung geehrt.



Nicht nur Wissenschaft: In Vorträgen, Diskussionen und an Ausstellungsständen ging es auch darum, wie sich Chemiker ihre Brötchen verdienen, etwa auf der zweitägigen Jobbörse des GDCh-Karriereservices oder beim Intensiv-Gründerworkshop. Coach Andreas Voss (stehend) vermittelte dabei unternehmerisches Denken und Handeln.

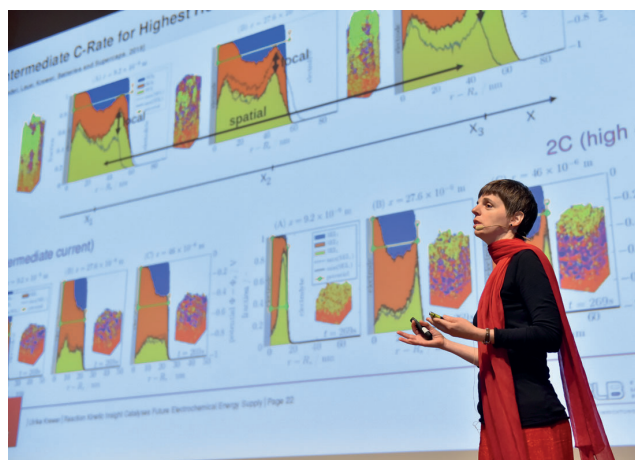
Wifo-Highlights



Veranstaltungen auf allen Ebenen: oben ein Blick in die Postersession, unten drei der zwei Dutzend Ausstellerstände von Verlagen, Laborzulieferern und Chemieunternehmen.



Kalium oder nicht Kalium? Das Periodensystemrätsel am GDCh-Stand war knifflig. Die Besten schafften es in knapp 20 Sekunden, andere rätseln noch heute.



In elf Plenarvorträgen ging es wissenschaftlich in die Tiefe. Hier Ulrike Krewer mit ihrem Vortrag zur Analyse und Optimierung elektrochemischer Zellen.



Das Erlenmeyerschens grüßt mitsamt den Wifo-Stipendiaten der AG Berufliche Bildung. Foto: Lisa Süßmuth



Peter R. Schreiner



Stefanie Dehnen



Carla Seidel



Timo Fleßner

GDCh-Präsidium

Am 16. September fand in Aachen die konstituierende Sitzung des GDCh-Vorstands für die Jahre 2020 – 2023 statt. Bei diesem Anlass wurde das Präsidium für das Jahr 2020 gewählt. Die Vorstandsmitglieder haben in geheimer Abstimmung für folgende Kolleginnen und Kollegen votiert:

- Präsident 2020/2021
Prof. Dr. Peter R. Schreiner, Universität Gießen
- Stellvertretende Präsidentin 2020
Prof. Dr. Stefanie Dehnen, Universität Marburg
- Stellvertretende Präsidentin 2020
Dr. Carla Seidel, BASF SE, Ludwigshafen
- Schatzmeister 2020 – 2023
Dr. Timo Fleßner, Bayer AG, Bergkamen

Ausschreibung: August-Wilhelm-von-Hofmann-Stipendium 2020/2021

Die bei der GDCh eingerichtete August-Wilhelm-von-Hofmann-Stiftung vergibt ab April 2020 wieder Stipendien für zwei oder drei Semester zur Förderung Studierender der Chemie und angrenzender Gebiete.

Bachelorstudierende mit guten Studienleistungen, die zu Beginn des Sommersemesters 2020 noch drei oder zwei Semester bis zum Bachelorabschluss vor sich haben, können sich um ein Stipendium der August-Wilhelm-von-Hofmann-Stiftung bewerben. Die Stipendiaten erhalten monatlich 300 Euro über einen Zeitraum von 18 Monaten (drei Semester bis zum Bachelorabschluss) oder 12 Monaten (zwei Semester bis zum Bachelorabschluss). Eine Doppelförderung neben anderen leistungsorientierten materiellen Förderungen durch Begabtenförderwerke ist ausgeschlossen. Parallel Bafög zu beziehen, ist in Ordnung.

Die Ausschreibung und das Antragsformular gibt es zum Download auf www.gdch.de/hofmannstiftung oder unter www.gdch.de/dc. Das vollständig ausgefüllte Formular muss mit den verlangten Unterlagen – darunter ganz wichtig: das Empfehlungsschreiben eines Hochschullehrers – bis zum 1. Februar 2020 beim zuständigen GDCh-Ortsverbandsvorsitzenden oder beim Sprecher des regionalen Jungchemikerforums abgegeben werden. Aus jedem Ortsverband können zwei Bewerbungen bei der GDCh eingereicht werden. Der Ortsverbandsvorsitzende wählt zusammen mit dem jeweiligen Sprecher des Jungchemikerforums aus den eingereichten Bewerbungen maximal zwei zur Weiterleitung an die GDCh aus. Ortsverbandsvorsitzende und JCF-Vertreter senden die ausgewählten zwei Bewerbungen bis zum 15. Februar 2020 eintreffend an die GDCh-

Geschäftsstelle, zu Händen von Barbara Köhler. Die Bewerbungen werden anschließend dem Stiftungsrat vorgelegt, der in einer Sitzung über die Stipendienvergabe entscheidet. Die Geschäftsstelle informiert die Studierenden anschließend schriftlich. Auswahlkriterien für die Vergabe eines Stipendiums bilden Studienleistungen, wirtschaftliche Situation und ehrenamtliches Engagement der Studierenden.

Die August-Wilhelm-von-Hofmann-Stiftung ist nach dem ersten Präsidenten der 1867 gegründeten Deutschen Chemischen Gesellschaft benannt, eine der beiden Vorläuferorganisationen der GDCh. Die Mittel der Stiftung stammen von einem im Jahr 2010 verstorbenen GDCh-Mitglied, das der GDCh den Großteil seines Vermögens zu dem Zweck vermachte, begabte Studierende der Chemie zu fördern.



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Call for Nominations for the Klaus Grohe Prize 2020

The Klaus Grohe Foundation, which is administered by the GDCh (Gesellschaft Deutscher Chemiker/German Chemical Society), has established the Klaus Grohe Prize, one of the most highly endowed prizes for medicinal chemistry in Europe. The prize, which has a value of € 50,000 will be awarded every two years from 2020.

The prize is conferred on an individual working in Europe who has demonstrated creativity and excellence in developing novel principles of medicinal chemistry or drug discovery and whose research results plot a clear route towards future applications. The award winner should be under the age of 45 with a promising independent scientific career and should already enjoy international recognition for his or her outstanding achievements in the field.

The award will be conferred for the first time on September 6, 2020, during the opening ceremony of the International Symposium on Medicinal Chemistry of the European Federation of Medicinal Chemistry (EFMC-ISMIC), 6–10 September 2020 in Basel, Switzerland. After the award ceremony, the prize winner will be invited to give a lecture on his or her scientific work.

Nominations for the award should be supported by a letter of endorsement, a curriculum vitae and a list of publications. Please note that self-nominations are not allowed.

Please submit your nomination by **31 January 2020** to b.koehler@gdch.de or by post to Gesellschaft Deutscher Chemiker, Barbara Köhler, Awards, Varrentrappstraße 40-42, 60486 Frankfurt am Main, Germany.

Contact

Barbara Köhler
Gesellschaft
Deutscher Chemiker e.V.
Awards, International affairs
P.O. Box 90 04 40
60444 Frankfurt a.M.
Germany

Phone +49 (0)69 7917-323
Fax +49 (0)69 7917-1323
E-mail: b.koehler@gdch.de

Jungchemikerforum

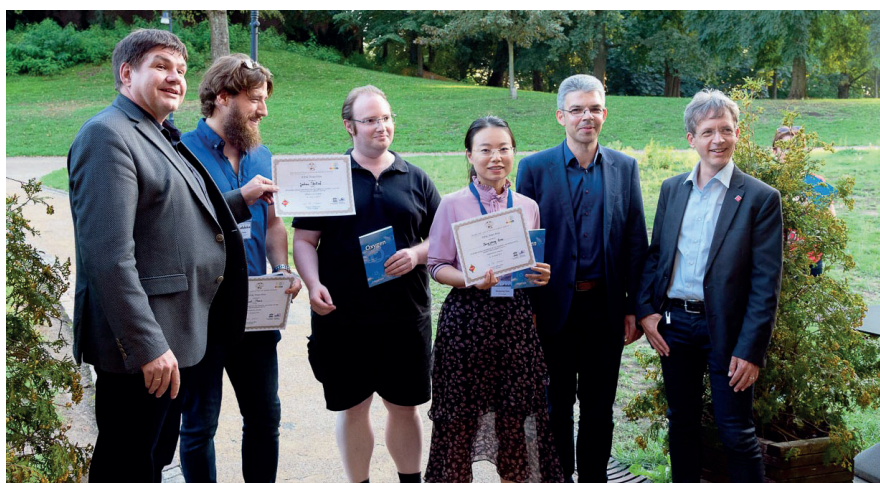
Digitalization in the daily life of Chemists: Do we still need Chemists in the digitalized world (in 20 years)?

Digitalisation has been off late a hot topic among young chemists. Taking into account how digitalization has influenced our day to day life, it is impossible to ignore the impact it will have to our future careers as young chemists. 10 years ago digitalization in the society was mostly limited and associated to knowledge in operation of a computer or digital home appliances. Today, chemical companies are striving to alter their ways of operation by finding smart holistic solutions to increase production and revenue. Academic institutions have also not been left behind due to increased demand for new

and efficient ways of handling and storage of data. For this reasons, the JCF Siegen organized a podium discussion on 2nd of July at the University of Siegen to explore the future roles of chemists in a digitalized world beyond 20 years. The invited panelists included Katharina Uebele (Pricewaterhouse Coopers Germany), Dr. Wolfram Keller (Wolfram Keller Management Consulting), Prof. Dr. Peter. W. Simon (Hochschule Rhein-Waal – University of Applied Sciences) and Prof. Dr. Benjamin Butz (Department of Mechanical Engineering University of Siegen). More than 50 people attended the discussion including professors, post-docs, PhD, bachelor and master students.

Below is a summary of questions that were asked by the participants:

- Do you think Chemistry as a course will change in the future or what should be added in the curriculum to fulfil the needs of a graduate intending to be employed in a chemical industry?
- How will digitalization affect chemists in different levels in industry, from hands-on lab assistant to lab manager? What are respective skills to be required and which positions will be affected most and reduced?
- What kind of repetitive work in the lab do you think will be done by machines in the future? What kind of further skills should chemists, who do this kind of repetitive work nowadays, learn?
- What will happen with chemists when digitalisation is fully implemented? Is human creativity enough to make humans still valuable? Will we need less humans in chemical industry in the future or will we just need a different education for chemists?
- Do you think that the structural design of drugs and furthermore the industrial synthetic pathway of these drugs can be done by machines or do we still need the experience of a synthetic chemist for that task?
- How far or close are we to the completion of the chemical industrial revolution 4.0? Will it take 20 or 100 years? Not every country in the world is industrialised to the same level. Thus do you think the chemical industry will become more advanced in some regions of the world and remain the same level or even stagnate in other countries?
- Will we advance our measures to protect the environment or are there any contradictions with the chemical industrial revolution? Will the industrialisation be implemented not only to the end product but also to the mining, ore digging, etc.?
- Is there a danger of monopolization, since only large companies can afford to implement advanced robotics to the complete production cycle, and it



From left: Rolf-Dietmar Herzberg (Chairman Poster Prize Jury) with the three awardees Raphael Haas, Jochen Ballof, Yangyang Guo, Michael Block and Christoph Duellmann (TAN19 Organizers). Foto: Stanislav Chenmarev/TAN 19

Iupac Poster Prizes, Germany, 2019

Three Iupac Poster Prizes have been awarded at occasion of the 6th International Conference on the Chemistry and Physics of the Transactinide Elements in Wilhelmshaven, Germany, August 25 – 30, 2019. The awardees are Yangyang Guo (University Groningen, Netherlands), Jochen Ballof (Cern Geneva, Switzerland &

University of Mainz, Germany), and Raphael Haas (University of Mainz, Germany). In addition to the poster prize which includes a certificate and a one year online abonement for the IUPAC Chemistry International magazine the winners received the book "Oxygen" (Authors Carl Djerassi/Roald Hoffmann) sponsored by the German Chemical Society (GDCh).

will be too expensive for smaller local companies?

Recent statistics from the GDCh revealed that majority of the graduates irrespective of whether they have bachelor, master or PhD degrees prefer to join the chemical or related industries. The question whether the chemistry curriculum should or should not change to cater for growing trends in the industry will still be a debate for the next years. However, with industries having passion to accelerate innovation and sustainability, digitalization will with no doubt take a leading role in achieving these smart solutions. It is important for students to be aware of such trends at an early stage in career development. There is no competition between academia and industry because both sectors have realized the need for improved digital systems. Chemistry subjects such as simulation and modelling will eventually be a good to know for all chemists in the future generation. It was further mutually agreed at the end of the discussion that all parties professors, post-docs, PhD, bachelor and master students and industry have to find a common ground to work together to fully implement Chemistry 4.0.

Willis Muganda

Fachgruppen und Arbeitskreise

Liebig-Vereinigung für Organische Chemie Neuer Vorstand gewählt

Die Liebig-Vereinigung für Organische Chemie hat ihren Vorstand neu gewählt. Für die Amtsperiode vom 1. Januar 2020 bis 31. Dezember 2023 werden die Mitglieder des Vorstands sein:

- Prof. Dr. Harald Gröger, Universität Bielefeld
- Prof. Dr. Thomas J. J. Müller, Universität Düsseldorf
- Prof. Dr. Martin Oestreich, TU Berlin
- Prof. Dr. Daniel B. Werz, TU Braunschweig
- Prof. Dr. Kirsten Zeitler, Universität Leipzig

GDCH-ORTSVERBAND HARZ: **Neue Vorsitzende Ursula Fittschen**

Seit 1. Oktober 2019 ist Ursula Fittschen neue Ortsverbandsvorsitzende im Ortsverband Harz. Ihre Vorgängerin ist Sabine Beuermann, deren Amtszeit am 1. September 2014 begann.

Seit Juli 2017 ist Ursula Fittschen ordentliche Professorin für Materialanalytik und Funktionale Festkörper an der TU Clausthal. Davor war Sie als Assistant Professor an der Washington State University (2014–2017) in den USA tätig. Sie hat Chemie an der Universität Hamburg studiert (Diplom 1996), die Promotion bei Wittko Francke (2001) und die Habilitation in der Arbeitsgruppe von José A. C. Broekaert im Fach Analytische Chemie (2013) schlossen sich ebenfalls an der Universität Hamburg an. Sie beschäftigt sich mit dem Verständnis von Elementgradienten und Elementspezies in wenig kristallinen Festkörpern. Ihre aktuelle

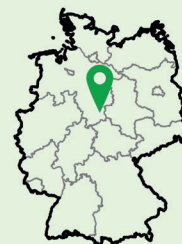
Forschung fokussiert sich insbesondere auf die Bildung von recycelbaren Elementspezies in Batterierecyclingschlacken und Redoxprozesse von Ionen in Polymerelektrolytmembranen. Seit 1995 ist sie Mitglied der GDCh.

„Als Ortsverbandsvorsitzende will ich auch weiterhin interessante Persönlichkeiten zu Vorträgen in den Harz einladen und den sehr guten Kontakt zum Jungchemikerforum weiterführen. Eine intensivere Miteinbeziehung der ortsansässigen Chemiebetriebe halte ich für erstrebenswert.“

ursula.fittschen@tu-clausthal.de

Ortsverband Harz:

- 120 Mitglieder, davon 46 Jungchemiker
- gegründet 1947
- Ursula Fittschen ist die 17. Ortsverbandsvorsitzende



Ursula Fittschen

GDCH-ORTSVERBAND KASSEL: **Neuer Vorsitzender: Ulrich Siemeling**

Seit 1. Oktober 2019 ist Ulrich Siemeling neuer Ortsverbandsvorsitzender im Ortsverband Kassel. Sein Vorgänger ist David-Samuel Di Fuccia, dessen Amtszeit am 1. Oktober 2016 begann.

Ulrich Siemeling (GDCh-Mitglied seit 1989) hat in Bielefeld Chemie und Englisch studiert. Nach Diplom und 1. Staatsexamen erfolgte dort 1990 seine Promotion.

Nach einem Postdocjahr in Durham, England, kehrte er nach Bielefeld zurück, wo er sich im Jahr 1996 habilitierte. Seit 2000 ist er Professor in Kassel; er leitet dort das Institut für Chemie. Für seine Leistungen erhielt er ein Heisenbergstipendium der DFG und den Bennigsen-Förderpreis des Lan-

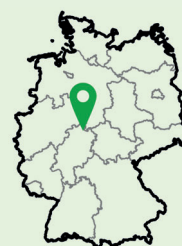
des Nordrhein-Westfalen. Seine Forschungsgebiete reichen von nanostrukturierten Oberflächen bis hin zu niedervalenten Hauptgruppenelementverbindungen.

„Im Ortsverband soll auch zukünftig ein attraktives Vortragsprogramm angeboten werden. Die Zusammenarbeit mit dem JCF wird weiter intensiviert.“

siemeling@uni-kassel.de

Ortsverband Kassel:

- 156 Mitglieder, davon 48 Jungchemiker
- gegründet 1991
- Ulrich Siemeling ist der 15. Ortsverbandsvorsitzende



Ulrich Siemeling

Foto: Andreas Fischer
im Auftrag der Universität Kassel

Die GDCh vor Ort

Berlin

Vortragstitel noch unbekannt

Prof. Dr. P. Arnold, Univ. of Edinburgh
11.11., 17 Uhr c. t. a)

Facile Access to Versatile Compounds via Domino Reactions

Prof. Dr. S. Tsogoeva, Univ. Erlangen-Nürnberg
25.11., 17 Uhr c. t. b)
a) HU Berlin, Inst. für Chemie, Walter-Nernst-Haus, Marie-Curie-Hörsaal (0.06), Newtonstr. 14; b) FU Berlin, Inst. für Chemie, Hörsaal, Takustr. 3

Bielefeld

Ylide Chemistry Revisited: From the Isolation of Reactive Species to Catalytic Applications

Prof. Dr. V. Däschlein-Gessner,
Univ. Bochum
7.11., 17 Uhr c. t.

Univ. Bielefeld, Universitätshauptgebäude, Hörsaal 3, Universitätsstr. 25

Braunschweig

Wheland Intermediates in Catalysis

Prof. Dr. M. Oestreich, TU Berlin
11.11., 17 Uhr c. t.
TU Braunschweig, Inst. für Chemie, Seminarraum HR 30.1, Hagenring 30

Gießen

Building Blocks Containing Phosphorus: From Fundamentals to Applications

Prof. Dr. H. Grützmacher, ETH Zürich
5.11., 17 Uhr c. t.

New Tight-binding Quantum Chemistry Methods for the Exploration of Chemical Space

Prof. Dr. S. Grimme, Univ. Bonn
19.11., 17 Uhr c. t.

Theasinensine & Co. – Chemie und Analytik von Tee

Prof. Dr. U. Engelhardt, TU Braunschweig
26.11., 17 Uhr c. t.
Univ. Gießen, Chemie-Gebäude Neubau, Hörsaal C 5b, Heinrich-Buff-Ring 19

Hannover

Reaktionskinetik und Verbrennungschemie vier Generationen nach Wilhelm Jost (Jost Lecture)

Prof. Dr. M. Olzmann, KIT
28.11., 17 Uhr c. t.
Univ. Hannover, Inst. für Physikal. Chemie und Elektrochemie, Dr. August Oetker-Hörsaal, Callinstr. 3A

Kaiserslautern

Lanthanides: Biologically Relevant

Prof. Dr. L. Daumann, LMU München
12.11., 17 Uhr c. t.

A Quantum-Chemical View on Coordination Chemistry: Spectroscopy, Catalysis, and Bonding

Prof. Dr. Martin Kaupp, TU Berlin
3.12., 17 Uhr c. t.
TU Kaiserslautern, Gebäude 52, Hörsaal 206, Erwin-Schrödinger-Str.

Kassel

Sensitivity-Enhanced Solid State NMR Techniques for Characterization of Functional Materials

Prof. Dr. T. Gutmann,
TU Darmstadt/Univ. Kassel
12.11., 17 Uhr c. t.

Fun with Germanium: The Chemistry of Hyper- and Hypocoordinate Germanium Complexes

Prof. Dr. K. M. Baines, Western Univ., London/Kanada
26.11., 17 Uhr c. t.
Univ. Kassel, Hörsaal 1409, Heinrich-Plett-Str. 40

Köln

Malaria, Artemisinin, Peroxides: Hopes and Misconceptions (Teil 1)

Prof. Dr. A. Griesbeck, Univ. Köln
Combating Drug Resistance in Cancer with Artemisinin & Co (Teil 2)
Prof. Dr. N. Teusch, Univ. Osnabrück
26.11., 17 Uhr s. t.
Univ. Köln, Chem. Inst., Hörsaal II, Greinstraße 4–6

Leipzig

Todd-Krebs-Lecture

Prof. Dr. P. Arnold, Univ. of Edinburgh
14.11., 17 Uhr s. t.

Können Glühwürmchen die Welt retten?

Priv.-Doz. Dr. D. Weiß, Univ. Jena
21.11., 17 Uhr s. t.

Small-Molecule Stabilization of Protein-Protein Interactions in Drug Discovery

Prof. Dr. C. Ottmann, TU Eindhoven
28.11., 17 Uhr s. t.
Univ. Leipzig, Neubau Chemie, Wislicenus-Hörsaal, Johannisallee 29

Paderborn

Dynamisches Verhalten heterogener Katalyse

Prof. Dr. Schlögl, Fritz-Haber-Inst. der MPG, Berlin
18.11., 17 Uhr s. t.

Vortragstitel noch unbekannt

Prof. Dr. H. Menzel, TU Braunschweig
2.12., 17 Uhr s. t.
Univ. Paderborn, Warburger Str. 100

Potsdam

Controlling and Driving Thermal Processes with Light

Prof. Dr. S. Hecht, RWTH Aachen
25.11., 16 Uhr c. t.
Univ. Potsdam, Komplex II, Haus 25, Raum F/1.01 (Kl. Chemiehörsaal), Golm

Rostock

This Manuscript Must either be Drastically Reduced or Fully Oxidized: 50 Jahre Publizieren in der Chemie: 1980 – 2030

Dr. Dr. h.c. P. Gölitz, Weinheim
14.11., 17 Uhr s. t.
Univ. Rostock, Inst. für Chemie, Hörsaal 101, Albert-Einstein-Str. 3a

Siegen

Der Weg zu neuen Arzneistoffen

Dr. M. Urmann, Sanofi-Aventis Deutschland, Frankfurt
5.11., 16:30 Uhr

Poröse Materialien, Gast-Wirt-Wechselwirkungen, Gasspeicherung und Ionenleitung

Prof. Dr. J. Senker, Univ. Bayreuth

19.11., 16:30 Uhr

High-Resolution Mass Spectrometry Imaging of Biological Tissue and Cells

Prof. Dr. B. Spengler, Univ. Gießen

3.12., 16:30 Uhr

Univ. Siegen, Gebäude AR, Eingang H, Hörsaal F 002, Adolf-Reichwein-Straße

Wuppertal-Hagen

Chemical Biology and the Information beyond the Genome Sequence

Prof. Dr. A. Marx, Univ. Konstanz

6.11., 17 Uhr c.t. a)

On Discovery in Catalysis

Prof. Dr. F. Glorius, Univ. Münster

13.11., 17 Uhr c.t. b)

Stereoselective Reactions with

Polyfunctional Organometallics

Prof. Dr. P. Knochel, LMU München

20.11., 17 Uhr c.t. a)

Asymmetric C-H Functionalization:

Powerful Tools in Synthesis

Prof. Dr. N. Cramer, Laboratory of Asymmetric Catalysis and Synthesis, Lausanne

4.12., 17 Uhr c.t. a)

a) Bayer, Pharma-Forschungszentrum Aprath, Gebäude 459, Wuppertal;

b) Univ. Wuppertal, Gebäude S-08.03,

Hörsaal 23, Gaußstr. 20

Deadline für die Datenbankeinträge

für das Heft Januar ist der 15. November.

Neuaufnahmen

Die GDCh begrüßt als neue Mitglieder:

Pohl, Thore, Hildesheim; Breuste, Nele-Juliana, Hannover; Birkholz, Julian, Danndorf; Sayin, Yüksel, Hagen; Gox, Nina Lisann, Garbsen; Matouschek, Florian, Strullendorf; Riegler, Anne, Hannover; Fleck, Jona, Lübeck; Reents, Hendrik, Nenndorf; Thieme, Erik, Lichtenau; Hamberger, Moritz, Lenting; Tschernatko, Erik, Wilhelmshaven; Dietz, Antje, Niedenstein; Annegarn, Fabio, Oelde; Bresche, Lukas, Stadthagen; Schmidt, Johannes, Petersaurach; Sack, Anja, Jena; Fuhsy, Gabriel, Duisburg; Maheswaran, Arani, Schiffweiler; Bodemer, Julian, Lehrte; Finzel, Kati, Dr., Dresden; Hofmann, Dirk, Dr., Neckarwestheim; Rodstein, Ilja, Mülheim; Reihwald, Malte, Rostock; Riemer, Tim, Dortmund; Janzen, George, Leipzig; Michaelis, Vivien, Wuppertal; Mier, Lena, Berlin; Richter, Lennard, Dortmund; Eichner, Anja, Stuttgart; Wanner, Daniel, Gerlingen; Matthäus, Tizia, Karlsruhe; Grüne, Jeannine, Würzburg; Vicino, Maria Francesca, Bonn; Wende, Mirco, Marburg; Werner, Yannic, Duisburg; Streitenberger, Elisa, Cadolzburg; Hans, Andreas, Stuttgart; Männel, Max, Dresden; Herrmann, Torben, Wietmarschen; Klaußnitzer, Stefan, Berlin; Neitzel, Angelika, Braunschweig; Stremmel, Christopher, Siegen; Behne, Sina, Braunschweig; de Vivanco, Mateo, Dr., Dresden; Schramm, Jannis, Frankfurt; Moradi Farssani, Mitra, Hannover; Olscher, Chrisitan, Hof; Warweitzky, Jakob Kasimir, Hannover; Loew, Quentin, Luhe-Wildenau; Heidrich, Anna, Ratingen; Domke, Patrick, Schwabach; Dieckhoff, Josef, Prof.Dr., Aachen; Hufnagel, Matthias, Dr., Karlsruhe; Kretzschmar, Nadja, Leipzig; Simandi, Claus, Dipl.-Chem., Cuxhaven; Hermann, David, Dr., Widdern; Repp, Annabell, Wächtersbach; Ertürk, Beyza, Gießen; Bernardy, Tristan, Koblenz; Köhler, Katharina, Freiburg; Weiß, Raphael, Berlin; Wagner, Tim, Waiblingen; Jonscher, Clemens, Dresden; Böhm, Leon, Eichenzell; Nwokoye, Rapuruchukwu Ifeyinwa, Freiburg; Onaa, Chukwuemeka, Freiburg; Glinka, Daniel, Obernkirchen; Korte, Henning, Meppen; Nour, Alwa, Neunkirchen; Stehle, Laura, Königsbrunn; Brehm, Klara, Berlin; Kambas, Annaluise, Goslar; Pitzen, Mona, Bad Neuenahr-Ahrweiler; Aßmann, Lena-Marie, Dormagen; Kley, Celina, Bretten; Schliffka, Max, Neuhausen; Vallentin, Amelie, Seligenstadt; Dehn, Johanna, Husum; Kolpe, Jonas, Schneeberg; Ebersbach, Cedric, Mülsen; Keiling, Hannes, Deiningen; Kramps, Daniel, Bad Wünnenberg; Marke, Daniel, Haren; Raschke, Pascal, Illertissen; Lindenberg, Jaqueline, Salzgitter; Richter, Sophia, Roßleben-Wiehe; Sylva, Ejona, Hann. Münden; Wittemund, Leon, Friedrichsdorf; Geist, Pascal, Neu-Isenburg; Mayer, Lorenz, Renningen; Kemir, Kaan, Köln; Prahl, Paula, Hannover; Horn, Philipp, Weßling; Hadenfeldt, Hendrik, Bovenden; Krebel, Max, Klosterlechfeld; Weßling, Anna, Ochtrup; Ehrlich, Stine Malin, Radebeul; Imig, Tabea, Remscheid; Birwe, Annika Maria, Bottrop; Grune, Catharina, Karls-

ruhe; Schäfer, Niklas, Erwitte; Papenbrock, Verena, Drensteinfurt; Eßer, Julian, Willebadessen; Stock, Ann-Catrin, Lage; Rotter, Emilia, Mühlhausen; Schobel, Josef, München; Wuttke, Katharina, Marktredwitz; Caca, Suca, Herne; Gohlke, Clara, Aachen; Hoffmann, Kurt, Berlin; Stötzer, Markus, Dresden; Baumert, Sebastian, Oberhausen; Höfmann, Lea, Essen; Regine, Mika, Bonn; Zimmermann, Cindy, Düsseldorf; Müller, Michael, Dresden; Alasmer, Ayah, Solingen; Jähning, Mandy, Hameln; Elfers, Bo-Magnus, Hamburg; Käßler, Lisa, Gießen; Block, Stephan, Dr., Potsdam; Flauaus, Cindy, Gießen; Kletsch, Lukas, Köln; Stoppel, Yasemin, Frankfurt; Kappelhoff, Jan, Ochtrup; Matt, Theresia, Grafenhausen; Guo, Lisa, Düsseldorf; Merkel, Tobias, Hügelsheim; Bartosch, Sascha, Bleicherode; Kirchberger, Franziska, Otterfing; Reimann, Paula, Leverkusen; Fehling, Susanne, Groß-Gerau; Skiri, Sandro, Halle; Tankacheev, Mansur, Bochum; Kotalczyk, Laura, Mönchengladbach; Hümpel, Carla, Düsseldorf; Cinar, Aslihan, Solingen; Obiri Yeboah, Mary Ampomah, Düsseldorf; Holberg, Johanna, Wardenburg; Chehadeh, Ibrahim, Wilhelmshaven; Schlicke, Lisa-Sofie, Dresden; Endrich, Alica, Weissach; Meng, Julia, Mainz; Kronewald, Daria, Greiz; Bertram, Raphaela, Mickhausen; Becker, Andre, Gera; Brandkamp, Sina, Bonn; Schneider, Tom, Penig; Maul, Lars, Darmstadt; Hack, Jonas, Werl; Sicking, Luca Marie, Gescher; Thayaparan, Apeshan, Duisburg; Volkery, Torben, Bad Oeynhausen; Kern, Christian, Elsdorf; Hofmann, Simon, Wettenberg; Rudolf, Fabian, Sörrup; Hinz, Nadine, Neumünster; Eckl, Franziska, Seefeld; Haase, Leah, Jena; Görlich, Franz, Oberkrämer; Zibell, Hendrik, Mülheim; Schmidt, Jakob, Schwabach; Vagner, Lienaerts, Amelie, Kaarst; Pischel, Christoph, Volkach; Turianska, Nadiia, Dortmund; Richter, Jakob, Berlin; Schanz, Linda, Reutlingen; Knapp, Lea, Nidderau; Prilop, Lara Madeleine, Eschweiler; Schwarberg, Benjamin, Winhöring; Arndt, Magnus, Kiel; Stöbel, Barbara, Mannheim; Edler von der Planitz, David, Geyer; Wagner, Steffen, Sendenhorst; Ikkes, Andreas, Bopfinger; Friesen, Alexandra, Karlsruhe; Liedtke, Theresa, Dr., Drammen; Aljets, Hilko, Göttingen; Maiwald, Felix, Göttingen; Benndorf, Christopher, Dr., Leipzig; Bugdahn, Nikolas, Dr., Holzminden; Pflug, Jonas Johannes, Kirchheim; Moos, Lukas, Gießen; Franke, Cornelia, Greifswald; Bommersheim, Stefanie, Schwall; Pühn, Eva, Gießen; Schliebitz, Daniela, Pfingsttal; Spörler, Susanne, Dr., Erlangen; Gardeler, Bente, Kiel; Graubner, Tim, Marburg; Solak, Ozan Mehmet, Braunschweig; Loll, Alexandra, Gießen; Westkamp, Imke, Münster; Reinhardt, Lars, Cölbe; Aydin, Mikail, Gelsenkirchen; Zabolotnic, Alexandru, Berlin; Thönsing, Tobias, Thedinghausen; Müller, Melina, Mannheim; Schätzle, Emil, Biberach; Thiem, Florian, Trösta; Alamdari, Golnaz, Lingen; Greiner, Maximilian, Utendorf; Kireev,

Julia, Lengerich; Büchner, Eva, Bad Frankenhausen; Braun, Fabian, Stuttgart; Winter, Torben, Heiligengrabe; Binder, Daniel, München; Neuhäus, Benno, Hannover; Dettelbach, Jasmin, Münchengosserstätt; Janning, Henric, Herne; Pintér, Simone, Hohenburg; Teuber, Andrea, Ulm; Trabert, Antje, LM-Chem., Karlsruhe; Reiner, Thomas, Dr., Summit/NJ; Klaproth, Oliver Florian, Kaiserslautern; Lausen, Kevin, Bocholt; Vu, Dinh Tiep, Bellheim; Stegemann, Thomas, Apotheker, Kiel; Gorges, Johannes, Bonn; Deschauer, Torben, Mainz; Becker, Sonja, Hamburg; Beßlich, Stefan, Dipl.-Ing., Köln; Hinz, Alexander, Dr., Karlsruhe; Kunigkeit, Jonas, Münster; Weichselgartner, Lisa, Pilsting; Denke, Julia-Christin, Rheinbach; Küllmar, Magnus, Waibstadt; Lakatsch, Hannah Katharina, Alfter; Dango, Moritz Justus, Siegen; Umbreit, Adrian, Weimar; Domack, Julius, Nieder-Olm; Krugmeister, Philipp, Waldsolms; Bialowons, Adrian, Gladbeck; Schröder, Inga, Alveslohe; Ziolkowski, Rebecca, Oschersleben; Böge, Janik, Waldmühlen; Specht, Julia, Krautheim; Neuß, Elisa, Erlangen; Bobe, Jan, Altenbeken; Bogdhan, David, Bochum; Wilmshöfer, Nele, Hilden; Stumpf, Sascha, Schwetzingen; Pótor, Barnabás, Kempten; Penner, Niklas, Aken; Kempe,

Konstantin, Kiel; Sandig, Richard, Memmingen; Amann, Laura, Freising; Schmidl, David, München; Dirau, Samar, Siegen; Genz, Luisa, Berlin; Angstmann, Sebastian, Jena; Byn, Felix, Köln; Ebel, Lars, Mildstedt; Sommer, Ishira, Osternienburger Land; Bieringer, Isabel, Mannheim; Pfisterer, Lars, Fellbach; Steinhäuser, Sophie, Weingarten; Fäßler, Annika, Horgenzell; Richter, Pia-Luise, Ettlingen; Haas, Manuel, Taunusstein; Alig, Lukas, Göttingen; Schmidt, Marius, Gaildorf; Weibchen, Gunnar, Dr., Hamburg; Nilges, Peter, Dr., Itzehoe; Urich, Nelli, Flensburg; Beweries, Torsten, PD Dr., Rostock; Mollenhauer, Doreen, Prof.Dr., Gießen; Wolters, Hanno, Dr., Dübendorf; Abdelrhman, Hossam, Siegen; Remmel, Laura, Freigericht; Müller, Rutger, Essen; Schäfer, Tobias, Nürnberg; Fox, Jonathan, Berlin; Schlosser, Julika, Daaden; Machelett, Moritz, Dr., Emmerich; Peitl, Pia, Ebersberg; Schindler, Niti, St. Andrews Fife; Haupt, Viola, Münster; Palm, Christopher, Wuppertal; Feistel, Felix, Dr., Jena; Kühn, Elisabeth, Dr., Hatten; Marquardt, Jürgen, Dr., Freiburg; Schweissinger, Emily, Dortmund; Eberle, Marcel, Dr., Stuttgart; Schustereit, Tanja, Dr., Stuttgart; Schmaus, Nadine, München; Bockhardt, Dustin, Lehre; Bonerz, Daniel, Dr., Bens-

heim; Gerlach, Christoph, Dr., Bonn; Blaß, Paul, Zirndorf; Renz, Luise, Malsch; Lüpkes, Fiona, Leverkusen; Franz, Lorena Saskia, Durbach; Grant, Francesca Joanne, Mönchengladbach; Pötschke, Debora, Radebeul; Trümper, Helmut Zacharias, Erfurt; Meier, Lara, Schieder-Schwalenberg; Schulze, Vivien, Minden; Körber, Felix, Langenhagen; Schuchardt, Enrico Felix, Walschleben; Niefer, Fabian, Dortmund; Tschu, Katharina, Wuppertal; Hofmann, Alexander, Schweinfurt; Beka, Rona, Knittlingen; Mühlig, Franz, Delitzsch; Hagenlocher, Anna Lena, Hamburg; Fimmen, Johannes, Hoya; Müller, Emilie, Heroldsbach; Knoop, Helena, Lippstadt; Hugo, Lucas, Philipps-thal; Brand, Alina, Frankfurt; Schmitt, Lucas, Au; Jaekel, Meret, Eitorf; Moock, Esther, Altenbeken; Malinowski, Marie, Köln; Wolf, Johanna, Eberbach; Beier, Miriam, Kupferzell; Berg, Paula, Herten; Gabrisch, Joris, Mannheim; Laumer, Michael, Wiesenfelden; Kujath-Dobbertin, Tristan, Edingen-Neckarhausen; Burckhardt, Olaf, Lüneburg; Jacobi, Katharina, Niedererschach; Schlag, Lena, Backnang; Buemann, Luis, Vogt; Doganay, Ilayda, Dortmund; Cuda, Lara, Müllheim; Schulte, Talea, Haren; Niehoff, Dennis, Saerbeck; Schürmann, Natalie, Alfter; Lustermaun, Janika, Riede; Schmidt, Annika, Dortmund; El Kahza, Malek David, Pforzheim; Kamerichs, Sarah, Brühl; Thao Do Ngoc, Claudia, Berlin; Maßalsky, Jakob, Waldenburg; Guthammer, Maxim, Petershagen; Wiborny, Lars, Darmstadt; Fischer, Konstantin, Sömmerda; Aach, Tilman, Bielefeld; Ochsenfart, Luis, Bonn; Christidis, Ioannis, Landshut; Ohlmeyer, Henning, Ahlen; Beining, Christof, Essen; Wunderlich, Greta, Kronshagen; Münch, Lena, Walldürn; Gorbarova, Anastasiya, Rauenberg; Coors, Florian, Griesheim; Over, Shenja, Essen; Belger, Florian Andreas, Rosenheim; Huchatz, Jan, Woltersdorf; Lüers, Marc, Brake; Knoblauch, Alexandra, Pliezhausen; Heise, Jan Lukas, Wildeshausen; Erny, Elias, Gengenbach; Drexel, Katharina, Neu-Isenburg; Henn, Moritz, Hilden; Digel, Pascal, Mössingen; Behrendt, Luca, Klein-Winternheim; Plato, Annika, Königswinter; Timofeev, Hermann, Ludwigsburg; Ciomber, Jennifer, Münster; Stobernack, Tobias, Berlin; Wolf, Stefan, Köln; Langer, Laura, Hannover; Steinbach, Martin, Gießen; Semmler, Luzie, Dr., Braunschweig; Schwarzfischer, Philipp, Dr., München; Kolaric, Zdenko, Dipl.Chem.Ing., Markovci; Winzenburg, Andreas, Dr., Kassel; Dreyer, Charlott, Hamburg; Löw, Mario, Laichingen; Papagna, Raffaella, Bochum; Niehaus, Julia, Groß Ippener; Schulz, Gina Valerie, Kiedrich; Lander, Noah, Berlin; Krauthäuser, Sven, Grafenschaft; Eschen, Yoshi, Wiesbaden; Schwank, Renate, Erlangen; Gläser, Nico, Bad Waldsee; Nguyen, Thuy Vy, Peine; Rummer, Christian, Zwickau; Tas, Cüneyt, Duisburg; Bolz, Carina, Pittsburgh, PA 1832; Zunft, Lea, Magdeburg; Schmidt, Ronja, Obersontheim; Gschwind, Janis, Crailsheim; Meßmer, Rabea, Breisach; Hoh, Hanna, Neunkirchen; Schaper, Tim Alexander, Giesen; Butenschoen, Thies-Hinrich, Kiel; Wagner, Dorothee, Rodgau; Hasler, Lukas, Altenstadt; Heimes, Felix, Kirchhundem; Ball, Elias, Ostrach; Klimas, Janna, Möss-

GDCh – Ich bin dabei: Carsten Schaffer

Die ersten Kontakte zur GDCh hatte ich während meiner Schulzeit als ich die Studiengangsinformationen mit großem Interesse gelesen habe und mich darauf hin für die Aufnahme des Chemiestudiums entschied. Auch die Diskussionen zum „Würzburger Modell“, die unter anderem zur Einrichtung von Studiengängen der Wirtschaftswirtschaft geführt hatten, waren wichtige Impulsgeber für meine Berufsplanung. Seit dieser Zeit ist die GDCh ein steter Begleiter in meinem Leben.

Dieser Begleiter sind sicherlich in regelmäßigem Rhythmus die *Nachrichten aus der Chemie*, aber die GDCh bietet viel mehr. Dies konnte ich selbst erleben.

Das Jungchemikerforum oder auch die Vereinigung für Chemie und Wirtschaft ermöglichten mir die GDCh mitzugestalten, früh Verantwortung zu übernehmen oder auch Themen mit industriellem oder akademischem Fokus lebhaft zu diskutieren.

Darüber hinaus haben sich bei den regelmäßigen Treffen der „Mitstreiter“ auf den Jahrestagungen, Frühjahrssymposien oder anderen Veranstaltungen mit der Zeit Freundschaften entwickelt, die unabhängig von räumlicher Nähe sind. Sogar während meines zweijährigen Auslandsaufenthalts in China oder auch seitdem sich mein Lebensmittelpunkt in der Schweiz befindet, gab und gibt es den regelmäßigen Austausch mit anderen Mitgliedern. Für mich ist die GDCh somit auch ein grenzüberschreitender Begleiter.



Dr. Carsten Schaffer
Siegfried AG, Zofingen, Schweiz

singen; Henniger, Simon, Garbsen; Oberst, Jessica, Karlsruhe; Habercorn, Lasse, Dr., Itzstedt; Katzbach, Sonja, Maintal; Kurth, Sebastian, Pfinztal; Matjeka, Jan, Mülheim; Funke, Emma, Idstein; Florido Martins, Lilliana, Ringsheim; Girstl, Michael, Lehrberg; Friedmann, Bernd, Kraichtal; Inal, Mehmet Ali, Wuppertal; Guerreiro Eglitis, Maria-Charlotte, Bad Vilbel; Behrens, Lukas, Nuthetal; Hauer, René, Bernbeuren; Schmidt, Patricia Leonora, Baumgarten; Lutsch, Justin, Ludwigsburg; Stuber, Johanna, Friesenheim; Wittmann, Rüdiger, Ostf., Groß-Gerau; Staack, Leander, Hamburg; Sobota, Adam, Dortmund; Reimund, Lea, Fürth; Brümmer, Hannah, Werbach; Adam, Caroline, Freiburg; Huber, Antonia, Karlsruhe; Thies, Jasmin, Oldenburg; Kadesch, Patrik, Gießen; Heyse, Bennett, Quickborn; Paulus, Elena, Bous; Hermesmeier, Alexander, Mönchengladbach; Hoang, Michael, Öpfing-

gen; Schledermann, Erik, Bergen; Allmrodt, Daniel, Garbsen; Bouchoucha, Samir, Mainz; Pott, Jonas, Oberhausen; Ebert, Marc, Oberkirch; Roppert, Vladimir, Pforzheim; Rahimy, Said Assiel, Münster; Pelz, Luca, Böbingen; Leclercq, Philipp, Bergisch Gladbach; Zemke, Julia, Nierstein; Mencke, Karolin, Wentorf; Edelmann, Luisa, Perleberg; Lernhardt, Tobias, Obersulm; Hampel, Linus, Wörnersberg; Zipper, Catharina, Bonn; Thomann, David, Idstein; Köhler, Anna, Thermalbad Wiesenbad; Wecken, Paul, Bordesholm; Fleßner, Chiara, Blumenthal; Guldin, Lynn Sophie, Düsseldorf; Bruhn, Leonie, Baiersdorf; Rupp, Viktoria, Rot am See; Brüning, Jona, Bremen; Maier, Emily, Waiblingen; Hillebrand, Julian, Oldenburg; Jörg, Jacqueline, Fellbach; Seifert, Max, Ober-Ramstadt; Müller, Christina, Eitensheim; Kriecherbauer, Theresa, Holzkirchen; von Papen, Alexander, Wiesbaden; Vorbach, Samuel, Saaldorf-Sur-

heim; Kuznik, Laura, Xanten; Narz, Wiebke, Duisburg; Spoiden, Oskar, Frankfurt; Zängle, Laura, Bad Mergentheim; Grünthal, Andre, Herzogenrath; Qiu, Oliver, Gütersloh; Rautland, Jakob, Salzbergen; Franke, Claudia, Korntal-Münchingen; Wieland, Justus Friedrich, Marbach; Winzer, Lucie, Heidelberg; Traub, Lars, Freimersheim; Stoske, Johanna, Kiel; Kreutzmann, Jana, Bad Soden; Hermann, Benedikt, Eschach; Dagli, Serhat, Düsseldorf; Hütter, Anika, Neidenstein; Stolpe, Lena, Au; Ballmann, Iris, Wehrheim; Huber, Quentin, Viernheim; Stoy, Lukas, Großrinderfeld; Kronstein, Devin, Großdubrau; Sütterlin, Jana, Müllheim; Le Phu, Christian, Regensburg; Erler, Carolin, Herzogenaurach; Kläs, Johanna, Frankfurt; Schüler, Sandra, Memmingen; Fleischmann, Franziska, Würzburg; Moshidi, Darja, Braunschweig; Schoch, Alina, Asperg; Odrobina, Jann, Dr., Coburg; Trentin, Ivan, Dr., Ulm.

Fortbildungskalender 2019

Analytische Chemie Chromatographie

UHPLC, Theorie und Praxis (355/19)

Prof. Dr. Thomas Welsch
Leipzig, 14. – 15. November

Analytische Chemie Anwendungen und Verfahren

Umweltanalytik, AQ5 (512/19)

Priv.-Doz. Dr. Thorsten Stahl
Frankfurt, 14. November

Chemie und Recht

Patent Know-how (991/19)

PA Dr. Hans-Peter Jönsson
Frankfurt, 28. November

Chemie und Wirtschaft

Organisation, Personal-, Projektmanagement (880/19)

Prof. Dr. Uwe Kehrel
Frankfurt, 18. – 19. November

Strategisches Technologiemanagement (971/19)

Prof. Dr. Stefanie Bröring
Frankfurt, 21. – 22. November

Marketing, Intensivkurs (962/19)

Prof. Dr. Stefanie Bröring
Frankfurt, 5. – 6. Dezember

Jungchemiker

Führung für Nachwuchsführungskräfte (406/19)

Dipl.-Psych. Dipl.-Kfm. Andreas Ploch
Frankfurt, 14. November

Lebensmittelchemie Analytik und Anwendungen

Molekularbiologische Lebensmittelanalytik (609/19)

LMChem. Hans-Ulrich Waiblinger
Freiburg, 28. – 29. November

Moderne Methoden und Verfahren

Big Data, Grundlagen, Methoden und Praxis (642/19)

Prof. Dr. Uwe Kehrel
Frankfurt, 27. – 28. November

Qualitätssicherung

Gute Vertriebspraxis, GDP (527/19)

Dipl.-Ing. Jürgen Ortlepp
Frankfurt, 11. November

Qualitätssysteme GMP und GLP, Überblick (511/19)

Dr.-Ing. Barbara Pohl
Frankfurt, 18. November

Methodenvalidierungen (533/19)

Dr.-Ing. Barbara Pohl
Frankfurt, 19. November

Qualitätsmanagement im analytischen Labor (517/19)

Dr. Michael Koch
Frankfurt, 21. – 22. November

Grundlagen der Auditierung (528/19)

Dr.-Ing. Barbara Pohl
Frankfurt, 28. – 29. November

Sicherheitsdatenblätter, Datenmanagement und regulatorische Anforderungen (588/19)

Dr. Thorben Bonarius
Frankfurt, 2. Dezember

Validierung computergestützter Analysensysteme (530/19)

Carsten Buschmann
Frankfurt, 5. – 6. Dezember

Synthesemethoden

Chemical Development and Scale-Up (907/19)

Dr. Will Watson,
Frankfurt, 26. – 28. November

Fortbildungskalender 2020

Analytische Chemie Chromatographie

Methoden in der Polymeranalytik, Grundlagen und Anwendungen (397/20)

Dr. Wolfgang Radke,
Frankfurt, 20. März

HPLC, Grundlagen (308/20)

Prof. Dr. Birgit Götzinger,
Nürnberg, 22. – 25. Juni

UHPLC, Theorie und Praxis (355/20)

Prof. Dr. Thomas Welsch,
Leipzig, 12. – 13. November

Analytische Chemie Spektroskopie

Praktische NMR-Spektroskopie für technische Mitarbeiter, Grundlagen (334/20)

Dr. Johannes C. Liermann
Mainz, 8. – 10. September

Schwingungsspektroskopie für Qualitäts- und Prozesskontrollen (503/20)

Prof. Dr. Heinz Wilhelm Siesler
Essen, 15. – 17. September

NMR-Spektroskopie für technische Mitarbeiter, Fortgeschrittene (335/20)

Dr. Johannes C. Liermann
Mainz, 22. – 24. September

NMR-Spektrenauswertung, Fortgeschrittene (506/20)

Prof. Dr. Reinhard Meusinger,
Frankfurt, 28. September – 1. Oktober
NMR-Spektrenauswertung, Grundlagen (505/20)

Prof. Dr. Reinhard Meusinger,
E-Learning, Termin noch offen

Analytische Chemie Anwendungen und Verfahren

Metabolomics: Proteomics und Genomics (391/20)

Prof. Dr. Georg Pohnert
Frankfurt, 2. März

Moderne Rietveld Analyse (389/20)

Prof. Dr. Robert E. Dinnebier
Frankfurt, 24. – 25. September

Umweltanalytik, AQS (512/20)

Eleonora von Abercron
Frankfurt, 30. Oktober

Biowissenschaften

Computergestütztes Wirkstoffdesign, Grundlagen (616/20)

Dr. Franca Klingler
Frankfurt, 26. Juni

Biofilme (594/20)

Prof. Dr. Harald Horn
Frankfurt, 16. November

Chemie für Nichtchemiker

Org. Chemie für Mitarbeiter Produktion u. Technik, Grundlagen (949/20)

Dr. Jörg Fohrer
Frankfurt, 24. – 27. März

Allg./Anorg. Chemie für Mitarbeiter Produktion u. Technik, Grundlagen (948/20)

Dr. Andreas M. Schneider
Bad Dürkheim, 28. September –
1. Oktober

Grundlagen Org. Chemie für Kaufleute u. Ingenieure (986/20)

Dr. Jörg Fohrer
Frankfurt, 20. – 23. Oktober

Chemie und Recht

Patente in der Praxis (968/20)

Dr. Gerhard Auer
Frankfurt, 28. April

Notfall- und Krisenmanagement (936/20)

Dr. Martin Schnauber
Frankfurt, 25. – 26. Mai

Aufgaben und Verantwortung des Laborsleiters (980/20)

Dr. Gitta Weber
Frankfurt, 16. – 17. Juni

Patente, Erfindungsmeldung (992/20)

Dr. Stefan Horstmann
Frankfurt, 19. November

Chemie und Wirtschaft

Controlling (884/20)

Prof. Dr. Uwe Kehrel
Frankfurt, 16. – 17. März

Strategisches Management (878/20)

Prof. Dr. Frank Blümel
Frankfurt, 23. – 24. April

Auswirkungen von Chemie 4.0 (978/20)

Dr.-Ing. Wolfram Keller
Frankfurt, 27. – 28. April

Big Data, Grundlagen, Methoden und Praxis (642/20)

Prof. Dr. Uwe Kehrel
Frankfurt, 4. – 5. Mai

Rechnungswesen (879/20)

Prof. Dr. Andreas Del Re
Frankfurt, 18. – 19. Mai

Blockchain-Technologie, Einführung und Anwendungsfälle (874/20)

Timo Straten

Frankfurt, 30. Juni

F+E-Management (929/20)

Prof. Dr. Klaus Griesar
Frankfurt, 14. – 15. September

Marketing, Intensivkurs (962/20)

Prof. Dr. Stefanie Bröring
Frankfurt, 29. – 30. Oktober

Organisation, Personal-, Projektmanagement (880/20)

Prof. Dr. Uwe Kehrel
Frankfurt, 16. – 17. November

Strategisches Technologiemanagement (971/20)

Prof. Dr. Stefanie Bröring
Frankfurt, 26. – 27. November

Betriebswirtschaftslehre, Grundlagen für Chemiker (900/20)

Prof. Dr. Uwe Kehrel
E-Learning, Termin noch offen

Jungchemiker

Betriebswirtschaftslehre, Grundlagen für Jungchemiker (402/20)

Prof. Dr. Thorsten Daubenfeld
Idstein, 17. – 18. Februar

Aus der Forschung zum eigenen Unternehmen in der Chemie (409/20)

Dr. Holger Bengs
Frankfurt, 4. März

Geprüfter Projektmanager Wirtschaftswirtschaft, Kompaktkurs (414/20)

Prof. Dr. Jens Leker
Münster, 30. März – 4. April

Machtfaktoren in der betrieblichen Praxis (451/20)

Dr. Gerhard Auer
Frankfurt, 27. April

Geprüfter Projektmanager Wirtschaftschemie, Kompaktkurs (415/20)

Prof. Dr. Jens Leker
Münster, 14. – 19. September

New Business Development (420/20)

Prof. Dr. Stephan Haubold
Idstein, 9. Oktober

Führung für Nachwuchsführungskräfte (406/20)

Dipl.-Psych. Dipl.-Kfm. Andreas Ploch,
Frankfurt, 19. November

Lebensmittelchemie**Lebensmittelrecht, Update (669/20)**

Dr. Levke Voß
Frankfurt, 26. Mai

Fruchtsäfte (672/20)

Dr. Christian Sprenger
Wiesbaden, 23. September

Pestizidanalytik (656/20)

Dr. Günther Kempe
Frankfurt, 29. September

Molekularbiologische Lebensmittelanalytik (609/20)

LMChem. Hans-Ulrich Waiblinger
Freiburg, 26. – 27. November

Elementspurenanalytik (675/20)

Dipl.-LMChem. Kerstin Schöberl
Frankfurt, 26. November

Moderne Methoden und Verfahren**Emulsionen und Suspensionen, Rheologie (595/20)**

Prof. Dr. Karl-Heinz Jacob
Nürnberg, 9. – 10. März

Kolloidchemie, Grundlagen und moderne Entwicklungen (601/20)

Prof. Dr. Walter Richtering
Aachen, 16. – 18. März

Polymere, Synthese (039/20)

Prof. Dr. Sebastian Koltzenburg
Frankfurt, 16. – 18. März

Polymere, Charakterisierung, Eigenschaften und Anwendungen (040/20)

Prof. Dr. Sebastian Koltzenburg
Frankfurt, 18. – 20. März

Polymeradditive (004/20)

Dr. Christoph Kröhnke
Frankfurt, 24. – 25. März

Kosmetische/pharmazeutische Emulsionen, Anwendungen (591/20)

Prof. Dr. Andrea Wanningner
Krefeld, 21. – 22. April

Klassische und nicht-klassische Kristallisation (036/20)

Prof. Dr. Helmut Cölfen
Konstanz, 16. – 18. Juni

Tenside, Grundlagen (603/20)

Prof. Dr. Thomas Peter Knepper
Idstein, 10. – 11. September

Statistische Software R, optimierte Datenauswertungen (643/20)

Prof. Dr. Bernard Ludwig
Frankfurt, 21. – 22. September
Pigmente, aktueller Stand (001/20)

Dr. Carsten Handrosch
Darmstadt, 2. – 5. November

Emulsionstechnologie, Grundlagen (605/20)

Prof. Dr. Stefanie Ortanderl
Rheinbach, 5. – 6. November

Qualitätssicherung**GLP-Intensivtraining (526/20)**

Prof. Dr. Jürgen Pomp
Rheinbach, 10. – 12. Februar

Methodenvalidierungen (523/20)

Dr.-Ing. Barbara Pohl
Frankfurt, 24. Februar

Qualitätssysteme GMP und GLP, Überblick (510/20)

Dr.-Ing. Barbara Pohl
Frankfurt, 25. Februar

GMP-Intensivtraining (525/20)

Dipl.-Ing. Jürgen Ortlepp
Frankfurt, 3. – 4. März

SOP Intensivtraining und QS Dokumentation (529/20)

Dipl.-LMChem. Stephan Walch
Frankfurt, 5. – 6. Mai

DoE, statistische Versuchsmethodik (960/20)

Dipl.-Math. Sergio Soravia
Frankfurt, 6. – 7. Mai

DoE Workshop (592/20)

Dipl.-Math. Sergio Soravia
Frankfurt, 8. Mai

Medizinprodukte, Planung, Entwicklung und Zulassung (589/20)

Dr. Dietmar Schaffarczyk
E-Learning, 1. – 30. September

GLP-Intensivtraining (536/20)

Prof. Dr. Jürgen Pomp
Rheinbach, 14. – 16. September

Good Research Practice (545/20)

Prof. Dr. Jürgen Pomp
Frankfurt, 18. September

ICH-GCP-Grundkurs (544/20)

Dr. Volker Hoffmann
Frankfurt, 30. September

Regulatory Affairs (944/20)

Dr. Thorben Bonarius
E-Learning, 1. – 30. Oktober

Prüfmittelüberwachung und messtechnische Rückführung (543/20)

Dipl.-LMChem. Stephan Walch
Frankfurt, 21. – 22. Oktober

Methodenvalidierungen (533/20)

Dr.-Ing. Barbara Pohl
Frankfurt, 22. Oktober

Grundlagen der Auditierung (528/20)

Dr.-Ing. Barbara Pohl
Frankfurt, 26. – 27. Oktober

Qualitätssysteme GMP und GLP, Überblick (511/20)

Dr.-Ing. Barbara Pohl
Frankfurt, 17. November

Qualitätsmanagement im analytischen Labor (517/20)

Dr. Michael Koch
Frankfurt, 19. – 20. November

Sicherheitsdatenblätter, Datenmanagement und regulatorische Anforderungen (588/20)

Dr. Thorben Bonarius
Frankfurt, 30. November

Synthesemethoden**Organische Synthesemethoden (052/20)**

Prof. Dr. Karola Rück-Braun
Frankfurt, 25. – 26. Juni

Organische Chemie für Laboranten, Grundlagen (048/20)

Dr. Christoph Gastl
Frankfurt, 14. – 15. September

Präparative Organische Chemie für Laboranten (056/20)

Prof. Dr. Holger Butenschön
Frankfurt, 28. – 29. September

Photochemie, moderne Methoden (037/20)

Prof. Dr. Axel G. Griesbeck
Köln, 9. – 10. November



Jetzt anmelden

www.gdch.de/fortbildung



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Ihre Jobs. Unser Netzwerk.

Bei uns finden Sie Ihre Fach- und Führungskräfte im Bereich Chemie & Life Sciences. Einfach und unkompliziert: Sie schicken Ihre Anzeige, den Rest erledigen wir.



Chemie & Life Science



Online-Stellenmarkt



Print-Stellenmarkt

Ihre Jobs in den Nachrichten –
Anzeigenschluss Dezember-Heft: 13. November 2019

Weitere Informationen unter

www.gdch.de/stellen



TECHNISCHE UNIVERSITÄT CHEMNITZ

An der Technischen Universität Chemnitz ist zum
01.10.2021 die

W3-Professur "Organische Chemie" Organic Chemistry

zu besetzen.

Wir freuen uns auf Ihre aussagekräftige
Bewerbung!

Weitere Informationen unter:



www.tu-chemnitz.de/stellen

GDCh-Karrierekalender

Termine Nov. 2019

- | | |
|--------------|---|
| 4. Nov. | Souv CHEMUC Campus Event
JCF München |
| 6. + 7. Nov. | 21. Frankfurter Jobbörse
JCF Frankfurt |
| 7. Nov. | Berufsinformationsveranstaltung in
Kooperation mit der GDCh und dem VAA
JCF Darmstadt |
| 13. Nov. | Berufsperspektiven für Chemikerinnen und
Chemiker
JCF Halle |
| 21. Nov. | JCF-Alumnivortrag Ole Winkelmann
(Eurofins)
JCF Kiel |
| 21. Nov. | VAA Abend und 1. VCW Stammtisch
Chemnitz
JCF Chemnitz |
| 28. Nov. | Berufsinformationsveranstaltung in
Kooperation mit dem VAA und GDCh
JCF Dresden |

Euer JCF plant eine größere Veranstaltung/
Vortragsreihe? Wir kommunizieren den Termin
gerne vorab über den Karrierekalender.
Sprecht uns einfach unter karriere@gdch.de
mit dem Stichwort "Karrierekalender" an.

www.gdch.de/karriereevent



An der **Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät** der
Universität Augsburg ist am **Institut für Materials Resource Manage-
ment (MRM)** zum **nächstmöglichen Zeitpunkt** die Stelle für eine/einen

Universitätsprofessor/Universitätsprofessorin (m/w/d) der BesGr. W 3 (Lehrstuhl) für Chemie nachhaltiger Materialien und Prozesse

im Beamtenverhältnis auf Lebenszeit zu besetzen.

Das Forschungsgebiet des/der künftigen Stelleninhabers/Stelleninhaberin
(m/w/d) muss auf dem Gebiet der „Green Chemistry“ liegen, insbeson-
dere in der Bereitstellung erneuerbarer bzw. kreislauffähiger funktionaler
Materialien. Eine umweltanalytische Überwachung und Optimierung
der zugehörigen Prozesse bildet einen weiteren Schwerpunkt.

Es wird eine Persönlichkeit gesucht, die in der Lehre an der Universität
Augsburg die Grundlagen der Chemie ressourceneffizienter Materialien
und Prozesse sowie deren Auswirkungen auf die Umwelt zeitgemäß
vermitteln kann. Die Lehre beinhaltet Vorlesungen und Übungen im
üblichen Umfang von neun Semesterwochenstunden zu dem ent-
sprechenden Themenkreis.

Einstellungsvoraussetzungen sind – neben der Expertise in den o. g.
Themenfeldern – ein abgeschlossenes Hochschulstudium, pädagogi-
sche Eignung, besondere Befähigung zu wissenschaftlicher Arbeit, die
in der Regel durch die Qualität einer Promotion nachgewiesen wird,
sowie zusätzliche wissenschaftliche Leistungen im Bereich der Natur-
oder Ingenieurwissenschaften, insbesondere der Chemie oder chemi-
schen Verfahrenstechnik, die durch eine Habilitation oder gleichwertige
wissenschaftliche Leistungen nachgewiesen oder im Rahmen einer
Juniorprofessur erbracht werden.

Der/Die zukünftige Stelleninhaber/-in (m/w/d) muss wissenschaftlich
hervorragend ausgewiesen sein und eine hohe Expertise in der Ein-
werbung und Durchführung von nationalen und internationalen
Kooperationsprojekten mit Partnern aus Wissenschaft und/oder
Industrie aufweisen. Didaktische Fähigkeiten sind Voraussetzungen,
Erfahrung in der Lehre und in der Betreuung von Doktoranden/-innen
und Masteranden/-innen sowie Erfahrung in der Führung einer Ar-
beitsgruppe sind erwünscht. Das MRM kooperiert mit der Fraunhofer-
Einrichtung für Gießerei-, Composite- und Verarbeitungstechnik IGCV
und dem Zentrum für Leichtbauproduktionstechnologien des DLR
in Augsburg. Der/Die künftige Stelleninhaber/-in (m/w/d) muss die
existierende Kooperation mit den außeruniversitären Einrichtungen in
Augsburg weiter fortsetzen. Eine Kooperation mit den Materialwissen-
schaftlern des Instituts für Physik und Engagement in dem geplanten
gemeinsamen Studiengang „Materials Science and Engineering“ dem
Studiengang „Wirtschaftsingenieurwesen“ sowie die Mitarbeit im Wis-
senschaftszentrum Umwelt und im Anwenderzentrum für Material- und
Umweltforschung sind erwünscht.

Bewerber/Bewerberinnen (m/w/d) dürfen das 52. Lebensjahr zum
Zeitpunkt der Ernennung noch nicht vollendet haben. Ausnahmen von
dieser Altersgrenze sind gemäß Art. 10 Abs. 3 Satz 2 BayHSchPG nur in
dringenden Fällen möglich.

Die Universität Augsburg strebt die Erhöhung des Anteils von Frauen
in Forschung und Lehre an und bittet deshalb Wissenschaftlerinnen
nachdrücklich, sich zu bewerben. Für alle Fragen zur Gleichstellung
finden Sie die Kontaktdaten der Frauenbeauftragten der Mathematisch-
Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät unter:

<http://www.uni-augsburg.de/fakultaeten/mntf/frauenbeauftragte/>

Schwerbehinderte Bewerber und Bewerberinnen (m/w/d) werden bei
ansonsten im Wesentlichen gleicher Eignung, Befähigung und fachlicher
Leistung bevorzugt eingestellt.

Bei allgemeinen Fragen zur Bewerbung und Ausschreibung können
Sie sich an Herrn Prof. Dr. Siegfried Horn (siegfried.horn@mrm.uni-augsburg.de) wenden.

Bewerbungen mit den üblichen Unterlagen (Lebenslauf, Zeugnisse,
Promotionsurkunde, Habilitationsurkunde, Ernennungsurkunden, wis-
senschaftlicher Werdegang, Schriftenverzeichnis, Sonderdrucke der fünf
wichtigsten Publikationen, Auflistung von Drittmitteleinwerbungen,
Liste der durchgeführten Lehrveranstaltungen sowie eine kurze Dar-
stellung der laufenden bzw. geplanten Forschungsvorhaben) sind bis
zum **13.12.2019** elektronisch an den **Dekan der Mathematisch-Natur-
wissenschaftlich-Technischen Fakultät, Universität Augsburg, 86135
Augsburg (BewerbungW3@mrm.uni-augsburg.de)** zu richten.

AUSGEBLÄTTERT

Absorbierende Kunst



„Warum hältst du dir draußen neuerdings die Hand vor's Gesicht?“ „Meine künstlichen Fingernägel können Feinstaub ausfiltern!“ „Echt jetzt?“ „Ja, mit der neuen Active-Clean®-Beschichtung.“ Cartoon: Roland Wengenmayr

Dicke Luft herrscht in den Nagelstudios, die sich in vielen Städten ausgebreitet haben. Leichtflüchtige Lösungsmittel wie Aceton, die in Nagellack und dem zugehörigen Entferner zum Einsatz kommen, reichern sich in der Raumluft an. Vor allem in den USA, so berichtete Carmen Drahl in ACS Central Science, besteht deswegen Handlungsbedarf. Drahl stellt die Umweltingenieurin Lupita Montoya von der University of Colorado in Boulder vor, die sich das Problem vorgeknöpft hat.

Montoya und ihr Doktorand Aaron Lamplugh haben zu der mit ungesunden Dämpfen gesättigten Welt der Nagelsalons Kontakte aufgebaut. Die ermöglichten es ihnen nicht nur, regelmäßig zu messen und Risiken abzuschätzen, sondern auch Lösungen anzubieten. Wie Feldstudien zu verschiedenen Absorptionsmaterialien ergaben, reinigt Aktivkohle die Luft am besten. Da die beteiligten Salons sich keine technischen Lösungen wie Absauganlagen leisten konnten und ihre Schönheit suchende Kundschaft auch nicht mit hässlichen Gerätschaften verschrecken wollten, taten sich Montoya und Lamplugh mit der Künstlerin Camila Friedman-Gerlicz zusammen. Diese kreierte Keramikwerke zum Thema „aktivierter Kohlenstoff“ – und die lassen sich mit aktiviertem Kohlenstoff füllen, ohne das ästhetische Empfinden zu verletzen.

Die absorbierenden Kunstwerke sind noch in der Erprobungsphase. Aber es zeichnet sich eine herzerwärmende Botschaft ab: Kunst und Wissenschaft können zusammen die Umwelt ein wenig verbessern.

Der Dialog zwischen beiden Fakultäten ist ja gerade ohnehin angesagt. Im Londoner Museum Tate Modern zeigt Olafur Eliasson noch bis zum 5. Januar 2020 eine wissenschaftlich geprägte Retrospektive seines Werks, wo es von Kristallstrukturmodellen bis hin zu Nebel, Regen, Lichtspielen, Wasserfällen und Mooswänden alle möglichen Naturphänomene zu bestaunen und teils am eigenen Körper zu erleben gibt. Ein wichtiger Teil der Ausstellung ist das Publikum selbst, das bunte Schatten wirft, sich in einem Kaleidoskop spiegelt oder im dichten Nebel verschwindet – also ebenso von der Kunst aufgesogen wird wie das Aceton im Nagelstudio. Im beginnenden Anthropozän, das will uns Eliasson hier zeigen, verschmelzen Mensch und Umwelt zu einem zusammenhängenden komplexen System. Wir prägen unsere Umwelt und sie prägt uns.

Chemische Kunst gibt es auch von der britischen Bildhauerin Briony Marshall, die oft mit Bronze arbeitet. Sie baut Molekülstrukturen stark vergrößert nach und gestaltet sie als Ketten oder Ringe aus menschlichen Figuren. Für das neue Barton Science Centre an der Tonbridge School im Südosten Englands schuf sie „Barton's chair“, ein Modell der Sesselkonfiguration des Cyclohexans. Die hatte übrigens Tonbridge-Alumnus Derek Barton (1918–1998) nachgewiesen. Und in einem Projekt zu Ehren der Kristallographin Kathleen Lonsdale (1903–1971), dem noch Sponsor und Standort fehlen, will sie auf ähnliche Weise den Benzolring vermenschlichen. Lonsdale hatte in der Anfangszeit der Kristallographie nachgewiesen, dass Benzol tatsächlich flach ist.

An wissenschaftlich inspirierten Kunstwerken mangelt es also derzeit nicht. Manche, wie Camila Friedman-Gerlicz Kohlenstoff und Eliassons Mooswand, leisten bereits einen Beitrag zur Luftverbesserung. Andere könnten diesen Vorbildern folgen und zum Beispiel Stickoxide absorbieren oder Kohlendioxid sequestrieren. Kunst, die nicht nur Blicke anzieht, als Katalysator für eine bessere Umwelt.

Michael Groß
www.michaelgross.co.uk

1) C. Drahl, ACS Cent. Sci. 2019, 57, 1106–1107, <https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acscentsci.9b00627>

Online weiter blättern



GDCh-Mitglieder lesen die *Nachrichten aus der Chemie* kostenfrei online: ab Jahrgang 2011 als E-Paper, ab Jahrgang 2016 als App; alle Jahrgänge als PDF in der Wiley Online Library, die neuesten dort auch als responsive Webversion. Sie benötigen dazu Ihre GDCh-Mitgliedsnummer und das zugehörige Passwort.

Die Nachrichten als App

Mit der App für Apple- und Android-Geräte greifen Sie auf Volltext der *Nachrichten aus der Chemie* zu:

- Lassen Sie sich benachrichtigen, sobald ein neues Heft erscheint.
- Laden Sie Artikel und Hefte, und lesen Sie offline.
- Speichern Sie Artikel, und greifen Sie jederzeit leicht und schnell darauf zu.
- Teilen Sie Ihre Lieblingsartikel mit Freunden und Kollegen.

Die App laden Sie im App-Store (iOS-Geräte) oder in Google Play (Android-Geräte). Die Login-Daten geben Sie nach Installation ein unter: „I already have access“ → „Through my society affiliation“.

Die Nachrichten als E-Paper

Die *Nachrichten aus der Chemie* als E-Paper zum digitalen Durchblättern finden Sie auf der Website der GDCh. Loggen Sie sich in MyGDCh ein – auf www.gdch.de/nachrichten. Folgen Sie den Links zur Titelbildgalerie des jeweiligen Jahrgangs und durchblättern Sie Ihr gewünschtes Heft.

Die Nachrichten in der Wiley Online Library

Mitglieder der GDCh haben in der Wiley Online Library freien Zugang zur Online-Ausgabe der *Nachrichten aus der Chemie*. Lesen Sie die *Nachrichten*-Artikel optimiert für Ihr Ausgabegerät in der HTML-Ansicht als Anywhere Article, oder laden Sie Beiträge als PDF herunter. Loggen Sie sich auf www.gdch.de/nachrichten in MyGDCh ein, und folgen Sie dem Link in die Wiley Online Library. Übrigens: In der Wiley Online Library haben GDCh-Mitglieder auch kostenfrei Zugriff auf die PDF-Artikel sämtlicher Jahrgänge der *Nachrichten aus der Chemie* – zurück bis ins Jahr 1953.

Diese *Nachrichten aus der Chemie* stehen – für GDCh-Mitglieder frei zugänglich – ab spätestens 10. November im Internet www.gdch.de/nachrichten



IMPRESSUM

Herausgeber: © Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V., Postfach 900440, D-60444 Frankfurt am Main; Tel. 069 7917-0, E-Mail: gdch@gdch.de

Verleger: Wiley-VCH-Verlag GmbH & Co. KGaA, Boschstraße 12, 69469 Weinheim; Tel. 06201 606-174, Fax: 06201 606-91205; E-Mail: nachrichten-idc@wiley-vch.de

Kuratorium:

Hans-Dieter Arndt	Eberhard Ehlers
Wolfgang Kautek	Wolfram Koch
Burkhard König	Vera Köster
Manuela Kummeter	Marco Oetken
Susanne Rehn-Taube	Sven Schneider
Denise Schütz	Katharina Uebele
Matthias Urmann (Vorsitzender)	Ursula Westphal

Redaktion:

Jürgen Bugler (Grafik)	Maren Bulmann
Eliza Leusmann	Christian Remenyi (Chefredakteur)
Stefanie Scheilmann (Assistenz)	Frauke Zbikowski

Varrentrappstraße 40 – 42, 60486 Frankfurt am Main.
Tel. 069 7917 – 462, E-Mail: nachrichten@gdch.de

Produktanzeigen: Wiley-VCH-Verlag, Vanessa Winde, Boschstraße 12, 69469 Weinheim, Tel. 06201 606 – 721 Fax 06201 606 – 793, E-Mail: vwinde@wiley.com
Stellenanzeigen: GDCh-Karriereservice, Angela Pereira Jaé, Alina Gajda, Postfach 90 04 40, 60444 Frankfurt am Main Tel. 069 7917 – 665 oder – 668, Fax 069 7917 – 322 E-Mail: stellenmarkt@gdch.de

Die Zeitschrift und alle in ihr enthaltenen Beiträge sind urheberrechtlich geschützt. Alle Rechte, insbesondere die der Übersetzung, sind vorbehalten. Kein Teil dieser Zeitschrift darf ohne schriftliche Zustimmung des Herausgebers in irgendeiner Form reproduziert oder in eine von Maschinen verwendbare Sprache übertragen oder übersetzt werden. Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Warenbezeichnungen und ähnlichen Angaben berechtigt nicht zu der Annahme, dass solche Namen ohne weiteres von jedermann benutzt werden dürfen. Es handelt sich meistens um gesetzlich geschützte, eingetragene Warenzeichen, auch wenn sie nicht gekennzeichnet sind. Der Inhalt der Nachrichten aus der Chemie ist sorgfältig erarbeitet. Redaktion und Herausgeber übernehmen keine Verantwortung für die Richtigkeit von Angaben, Hinweisen und Ratschlägen sowie für Druckfehler. Alle Beiträge erscheinen exklusiv und in redaktioneller Bearbeitung. Interessierte Autoren setzen sich rechtzeitig mit der Redaktion in Ver-



WILEY-VCH

bindung und beachten die Autorenrichtlinien. Die Zeitschrift ist als „Nachr. Chem.“ zu zitieren. Aus Gründen der besseren Lesbarkeit verwenden die Nachrichten oft nur die männliche oder weibliche Sprachform. Damit ist keine Diskriminierung verbunden. Der Text meint bis auf Einzelfälle uneingeschränkt auch die jeweils andere Sprachform. Die in den Nachrichten publizierten Ansichten müssen nicht mit denen des GDCh-Vorstandes übereinstimmen.

Verantwortlich

für den redaktionellen Teil: Dr. Christian Remenyi;
für den GDCh-Teil: Prof. Dr. Wolfram Koch;
für Stellenanzeigen: Dr. Hans-Georg Weinig;
alle: Varrentrappstr. 40 – 42, D-60486 Frankfurt am Main
für die GDCh-Nachrichten:
DI Miranda Dalagianis, Nibelungengasse 11, A-1010 Wien
für Produktanzeigen:
Katja-Carola Habermüller
Boschstraße 12, 69469 Weinheim
Druck: pva, Druck- und Medien-Dienstleistungen GmbH,
Industriestraße 15, 76829 Landau/Pfalz
Erklärung nach § 5 des Hessischen Pressegesetzes:
Gesellschaft Deutscher Chemiker e. V., Frankfurt am Main.
ISSN 1439-9598 D 4158



ARS LEGENDI[®] FAKULTÄTENPREIS

MATHEMATIK UND NATURWISSENSCHAFTEN **2020**

Zum siebten Mal loben der Stifterverband, die Deutsche Mathematiker-Vereinigung, die Deutsche Physikalische Gesellschaft, die Gesellschaft Deutscher Chemiker und der Verband Biologie, Biowissenschaften und Biomedizin in Deutschland den Ars legendi-Fakultätenpreis aus.

Der Preis wird in den Kategorien Biowissenschaften, Chemie, Mathematik und Physik vergeben. Ausgezeichnet werden Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen für herausragende und innovative Leistungen in Lehre, Prüfung, Beratung und Betreuung an Hochschulen.

DER PREIS IST MIT JEWEILS 5.000 EURO DOTIERT.

Fakultäten und Fachbereiche, lokale Vertretungen der jeweiligen Fachgesellschaften und Fachschaften können Vorschläge einreichen; Eigenbewerbungen sind zulässig.

BEWERBUNGSSCHLUSS: 15. JANUAR 2020

Nähere Informationen und die Ausschreibungsunterlagen unter:

[www.stifterverband.org/
ars-legendi-mn](http://www.stifterverband.org/ars-legendi-mn)

