

11. Bonner Wissenschaftsnacht „Kreisläufe“, 18. Mai 2018



Mulliken Center für Theoretische Chemie, Universität Bonn

Molekülkino: Kreisläufe aus der Chemie am Computer sichtbar machen

Wir sind ein Arbeitskreis aus der (Theoretischen) Chemie, der mittels Berechnungen am Computer von Flüssigkeiten Probleme der Nachhaltigkeit in der Chemie zu lösen versucht. Dabei ergeben sich die unterschiedlichsten Kreisläufe, wobei die wichtigsten im Folgenden dargestellt werden sollen.

1) Flüssigkeiten sind bei fast allen Prozessen in der Chemie als Lösungsmittel der zu reagierenden Stoffe vorhanden und sind der Schwerpunkt unserer Forschung. Da Flüssigkeiten ein hohes Gefahrenpotential bei der Herstellung vieler Materialien darstellen, erlaubt uns unsere Forschung stark an Problemen der Nachhaltigkeit in der Chemie zu arbeiten. Konkret beschäftigen wir uns mit den Elektrolyt-Lösungen in Solarzellen oder Batterien und deren Optimierung. Es geht darum, den Kreislauf „Ladungsprozess“ häufig zu ermöglichen, d.h. Komponenten, z.B. Elektrodenbeschichtung, sollen sich nicht zersetzen. Sehr passend ist auch unsere Beteiligung an dem Horizont 2020-Projekt der EU, welches sich mit dem Kreislauf „Recycling“ (Wiedergewinnung) von Metallen aus Abfällen beschäftigt. Hierzu ist es besonders wichtig, Mischungen von Flüssigkeiten zu analysieren und sichtbar zu machen, denn oftmals muss das Metall aus der einen Flüssigkeit in eine andere übertragen werden.

2) Innerhalb unserer Arbeitsabläufe existieren ebenfalls Kreisläufe: Wir arbeiten zum Beispiel mit Prof. Dr. Tom Welton zusammen, der am Imperial College in London den ersten Lehrstuhl für Nachhaltige Chemie besitzt. Eine seiner Beobachtungen im Experiment wirft eine Fragestellung auf, die mit anderen experimentellen aber auch immer mehr mit theoretischen Methoden aufgeklärt werden soll. Haben wir das experimentelle Problem verstanden, können wir daraus neue Reaktionen, Verfahren, etc. entwerfen, wodurch wir früher oder später eine neue Beobachtung machen und somit zur Lösung der Fragestellung beitragen. Dieser Kreislauf „Fragen und Verstehen“ rückt uns immer näher an die Lösungen der großen Probleme der Nachhaltigen Chemie heran und bringt vor allem ständig neue Innovationen hervor.

3.) Prinzipiell besteht unser kompletter Arbeitsalltag aus Kreisläufen. Neben den Kreisläufen zur Lösung der Probleme der Nachhaltigen Chemie, ist auch die Vermittlung von Wissen, die Lehre, ein Kreislauf. Wir schreiben Skripte, halten Vorlesung und vermitteln so unser Wissen an Wissbegierige (Studenten), die irgendwann anderen Wissbegierigen dieses Wissen vermitteln.

Wo zu finden: [Universität, Hauptgebäude - Säulenhalle](#)

Webseite: <https://www.chemie.uni-bonn.de/pctc/mulliken-center/kirchner>

Kontakt: Mulliken Center für Theoretische Chemie, Universität Bonn

Roman Elfgén, elfgen@thch.uni-bonn.de

Prof. Dr. Barbara Kirchner, kirchner@thch.uni-bonn.de