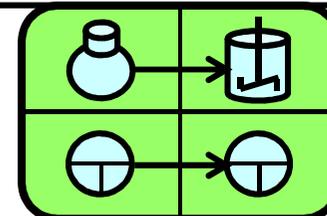


FuE-Projektmanagement in der Chemieindustrie



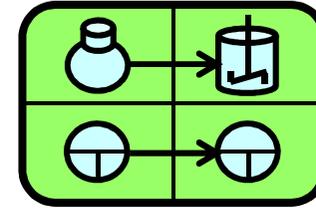
Die folgende Sammlung von PowerPoint®-Charts soll die einschlägigen Fachpublikationen zu den jeweils behandelten Sachthemen weiter verdeutlichen und ergänzen. Sie dient keinerlei kommerziellen Zwecken, sondern als Lernmaterial für Studierende.

In einigen Literaturverzeichnissen sind ausgewählte Quellen zum vertieften Studium des jeweiligen Lernstoffs angegeben.

Die in den Projektbeispielen P1-P3 gezeigten chemisch-technischen Zielkomponenten, Formeln, Termine, Daten, Projektstrukturen und Aktionspläne sind weitgehend praxisnah, aber dennoch rein fiktiv. Sie dienen lediglich der Anschaulichkeit und als Übungsmaterialien.

Die Namen sämtlicher Personen mit Projektfunktionen sind frei erfunden. Übereinstimmungen mit den Namen anderer Personen wären rein zufällig.

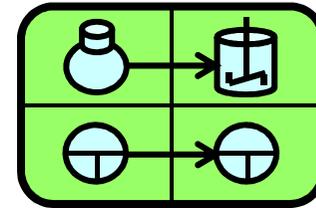
FuE-Projektmanagement in der Chemieindustrie



Die Lerninhalte

- Innovationen: Kennzeichen, Maßnahmen zur Förderung, Prozessvarianten.
- **Drei Beispiele für Innovationsvorhaben (Chemie und Technik):**
 - 1. Hochelastische Klarlackierungen für die Automobil-Serienproduktion.**
 - 2. Nitrilase-katalysierte Synthese einer chiralen α -Hydroxycarbonsäure.**
 - 3. Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung.**
- Projekte, Zielsysteme, Projektmanagement in Forschung und Entwicklung.
- Zweckmäßige Organisation und effektive Strukturplanung von FuE-Projekten.
- Ablaufplanung, Meilensteine, der Stage-Gate[®]-Prozess, Netzplantechnik.
- Wirksame Umsetzung und Steuerung von FuE-Projekten, Trendanalysen.
- Erfolgsrisiken: Identifikation, Einstufung und Behandlung.
- Personalbeschaffung, Personalführung:
Chemiker (m/w/d) – Teamplayer, Impulsgeber und Führungskräfte im Projekt.
- Projektleiter (m/w/d): Aufgaben, Führungsfunktionen und Persönlichkeitsprofil.
- Die systematische Bewertung einzelner Forschungsprojekte.
- FuE-Strategie: Die Planung eines Projektportfolios.

FuE-Projektmanagement in der Chemieindustrie



Lerninhalt →

***P1: Hochelastische Klarlackierungen
für die Automobil-Serienproduktion.***

(Chemie und Technik).

Beispiel P1

Innovationsvorhaben P1:

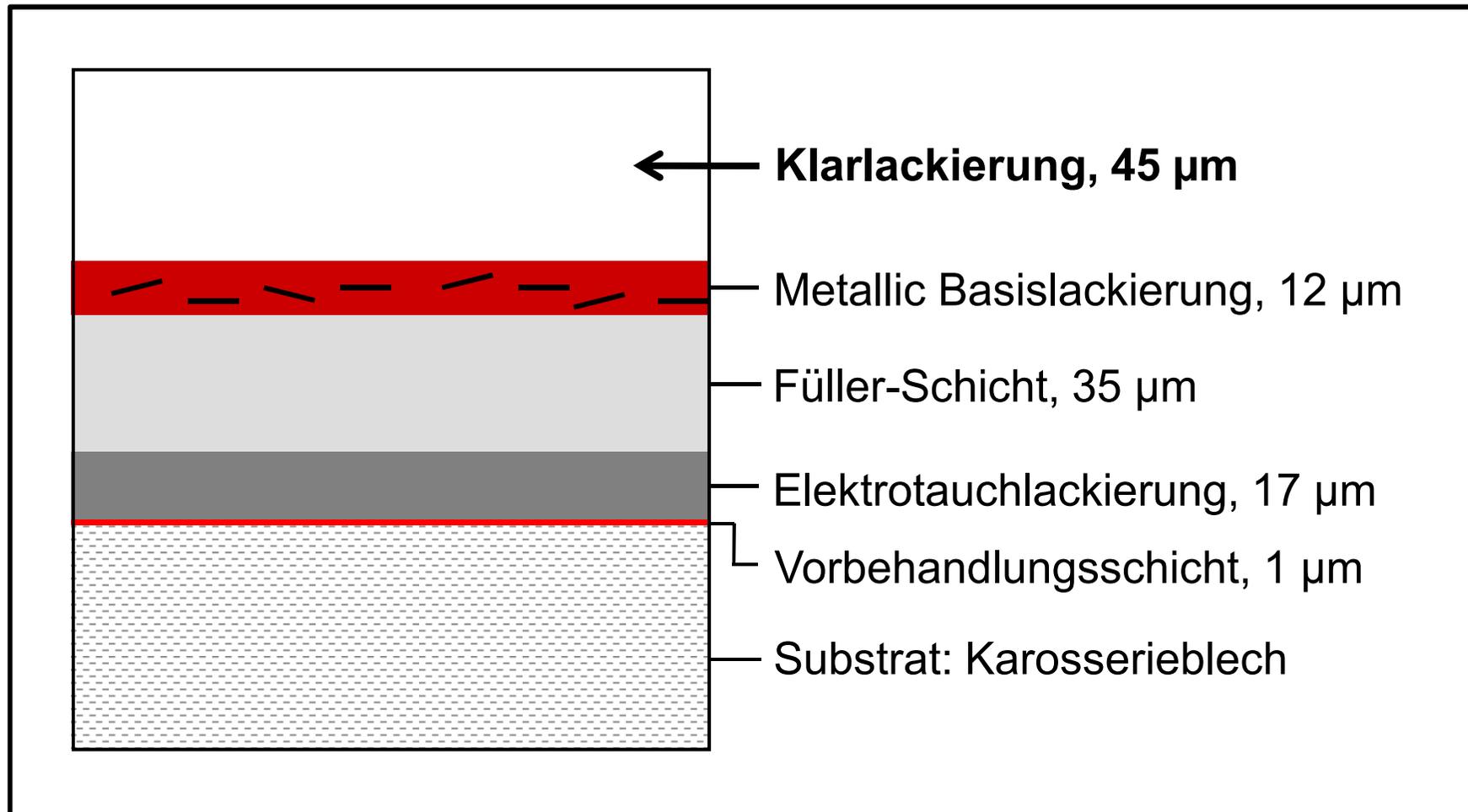


**„Hochelastische Klarlackierungen für die
Automobil-Serienproduktion“.**

(Chemie und Technik)

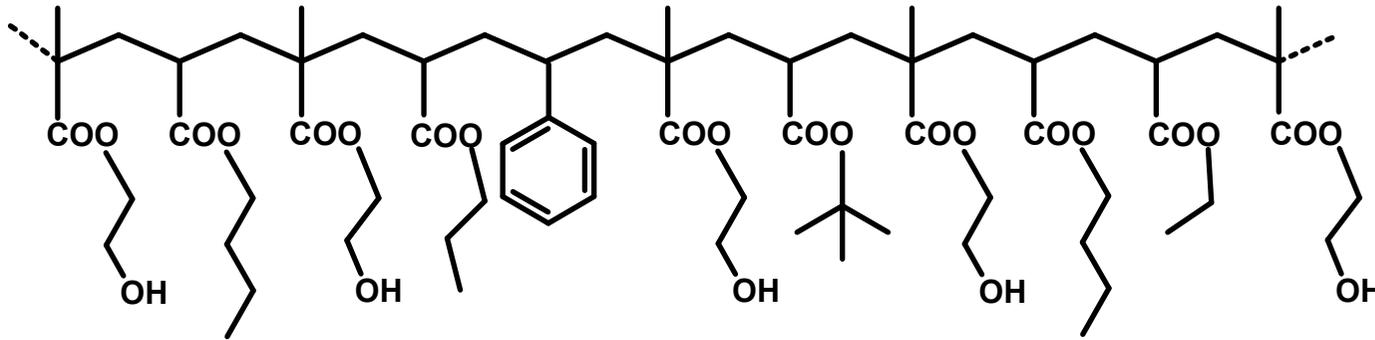
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Klarlackierung: "Wet Look", UV-Licht-/Chemikalienschutz, Resistenz gegenüber mechanischen Beanspruchungen.

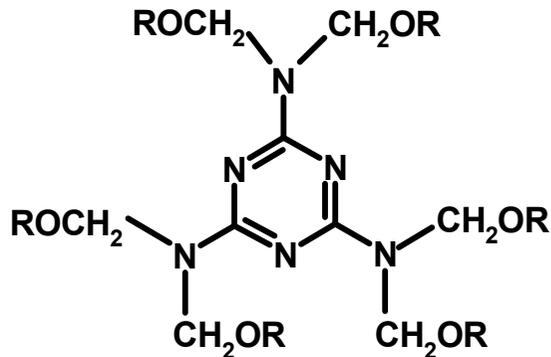


Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

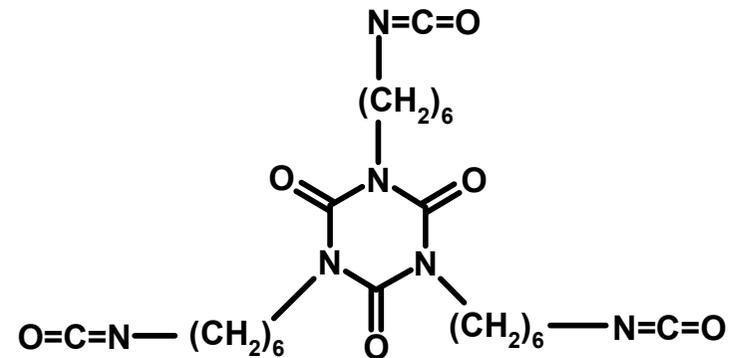
Lackharze für 1- und 2-KomponentenSysteme:



OH-funktionelles Polyacrylat-Harz, „Polyacrylatol“ (Molekülausschnitt)



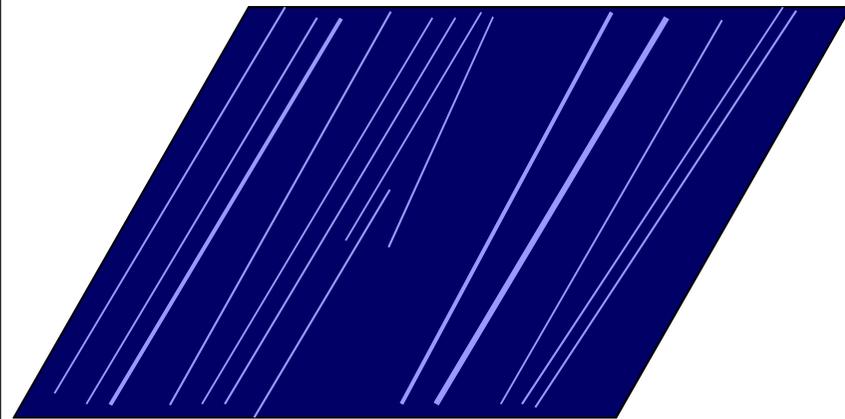
Vernetzer für 1K-Klarlacke
(R = H, CH₃, n-C₄H₉)



Vernetzer für 2K-Klarlacke
(Trimerisiertes Diisocyanat)

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Kratzer, verursacht durch Nutzung von Autowaschanlagen:

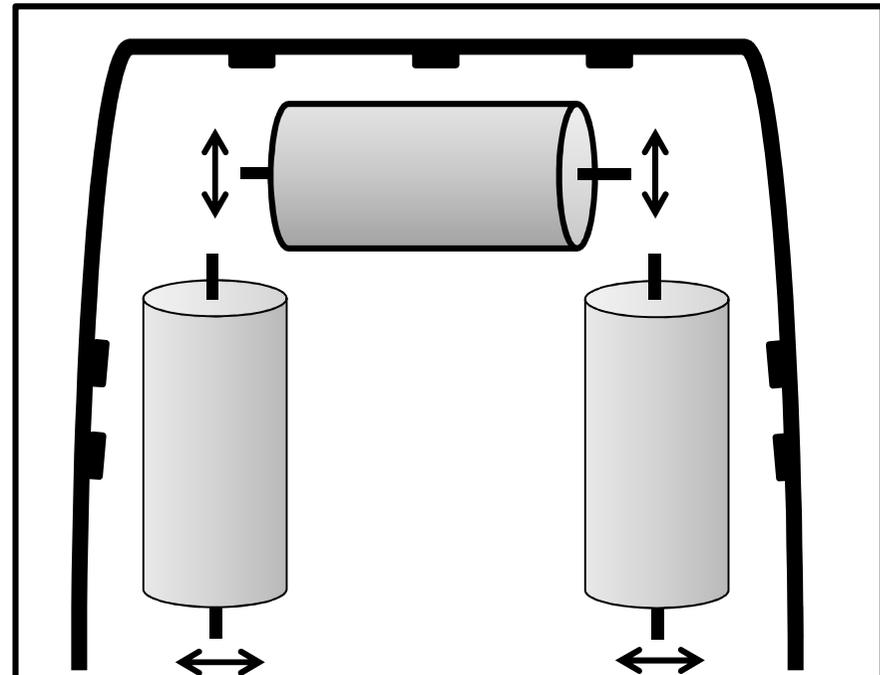


Kratzer auf einer Klarlackierung mit dunkelblauem Untergrund.

Maße üblicher Waschanlagen-Kratzer:

Tiefe: 0,1...0,3 μm ($\ll 1\mu\text{m}$!)

Breite: 1,0...4,0 μm

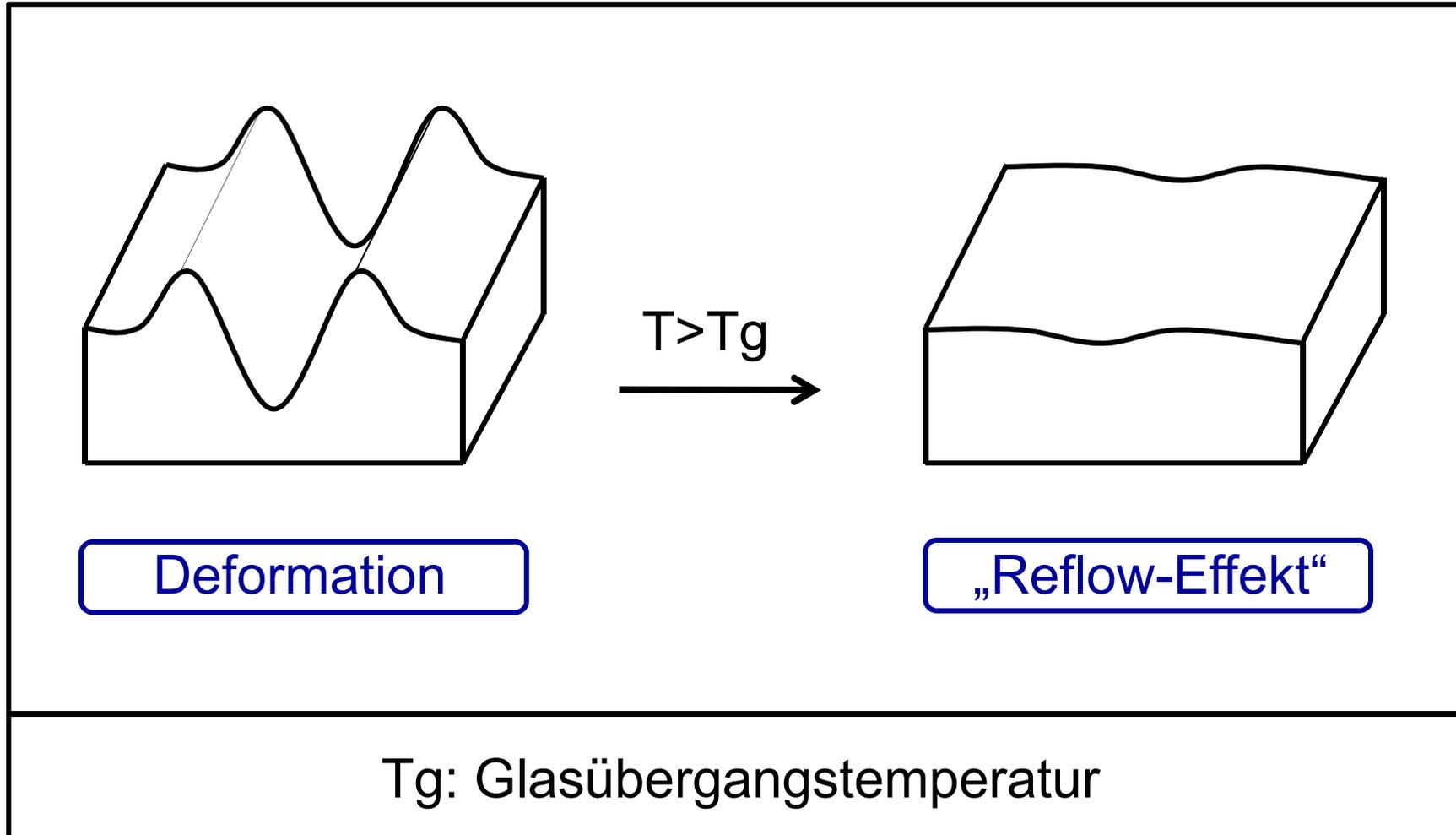


Portalwaschanlage für Autos:
Bürsten, Sprühdüsen (Schema).

Problematisch sind abrasive Kratzer:
Diese sind *tiefer, breiter und rauer* als
plastische Kratzer!

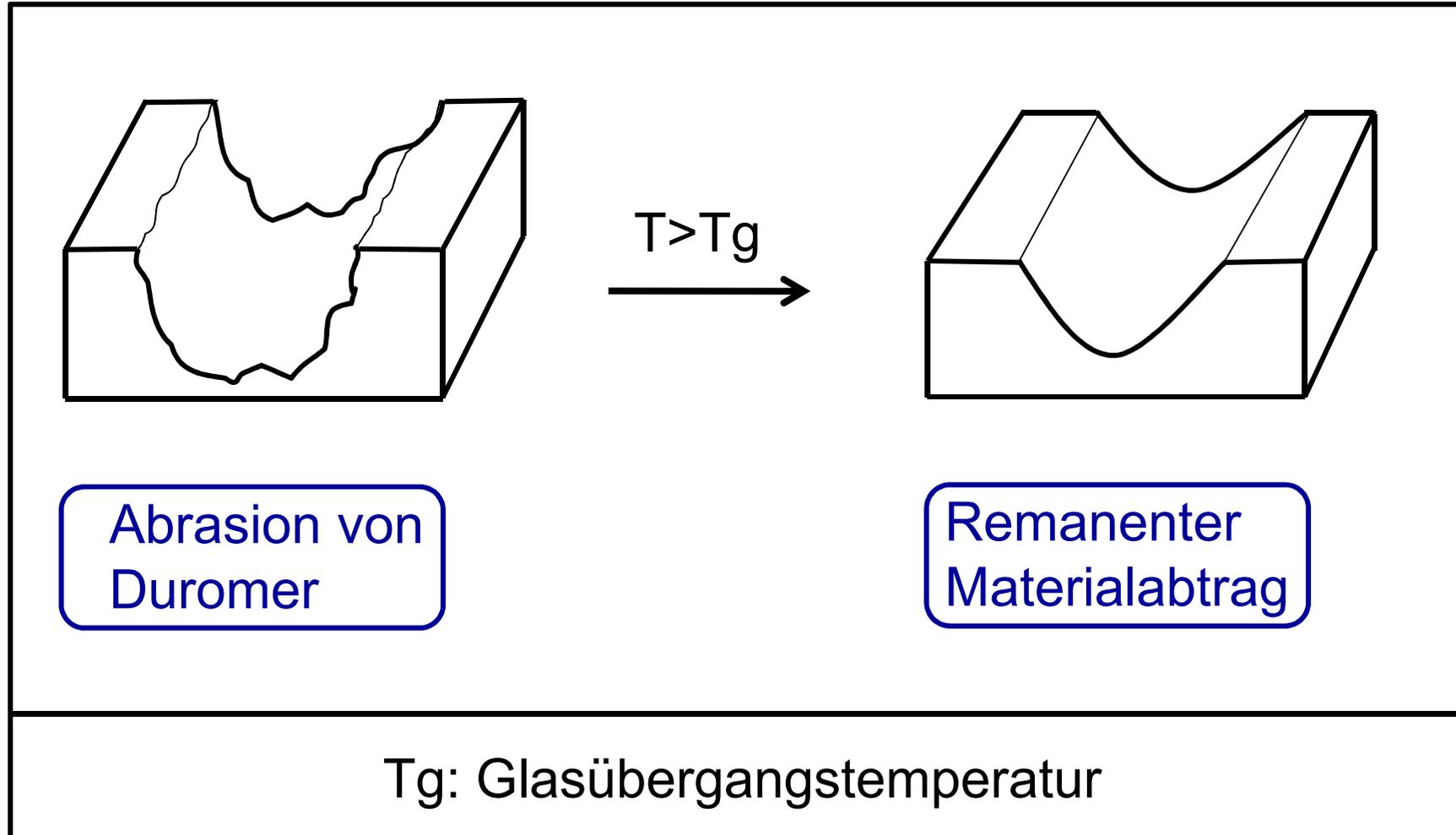
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Kratzer, „Reflow-Effekt“ nach plastischer Verformung:



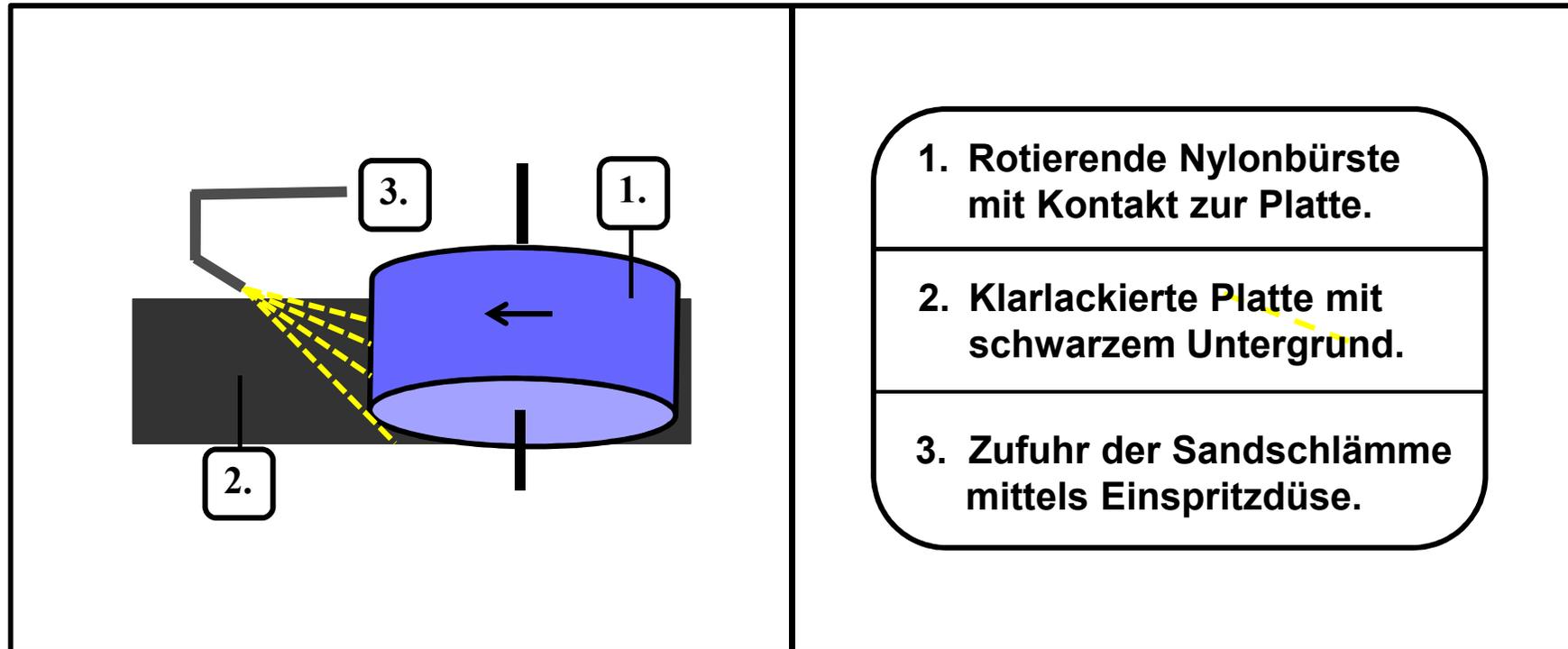
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Kratzer, „Reflow-Effekt“ nach plastischer Verformung:



Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

AWETA: Kratzfestigkeitsprüfung für Klarlackierungen:

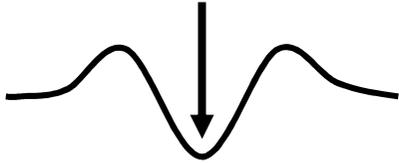
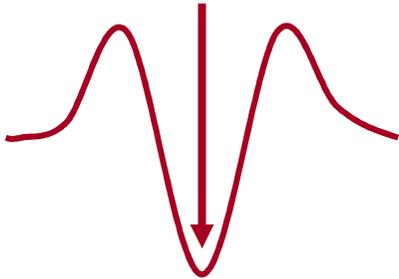
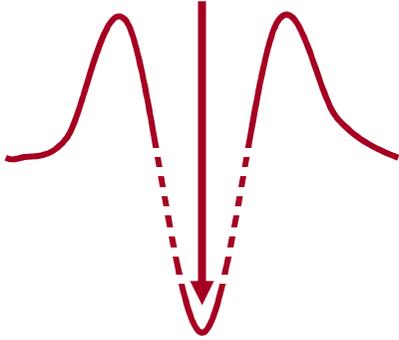


Praxis-Test nach AMTEC-Kistler (Schema) gemäß ISO 20566,
Sandfracht: 1,5g/l H₂O; Mittlere Korngröße des Sands: ≈ 24µm.

- Gute Korrelation mit den üblichen, relevanten Kratzbeanspruchungen.
- Differenzierungsmöglichkeit zwischen hochkratzfesten Beschichtungen.

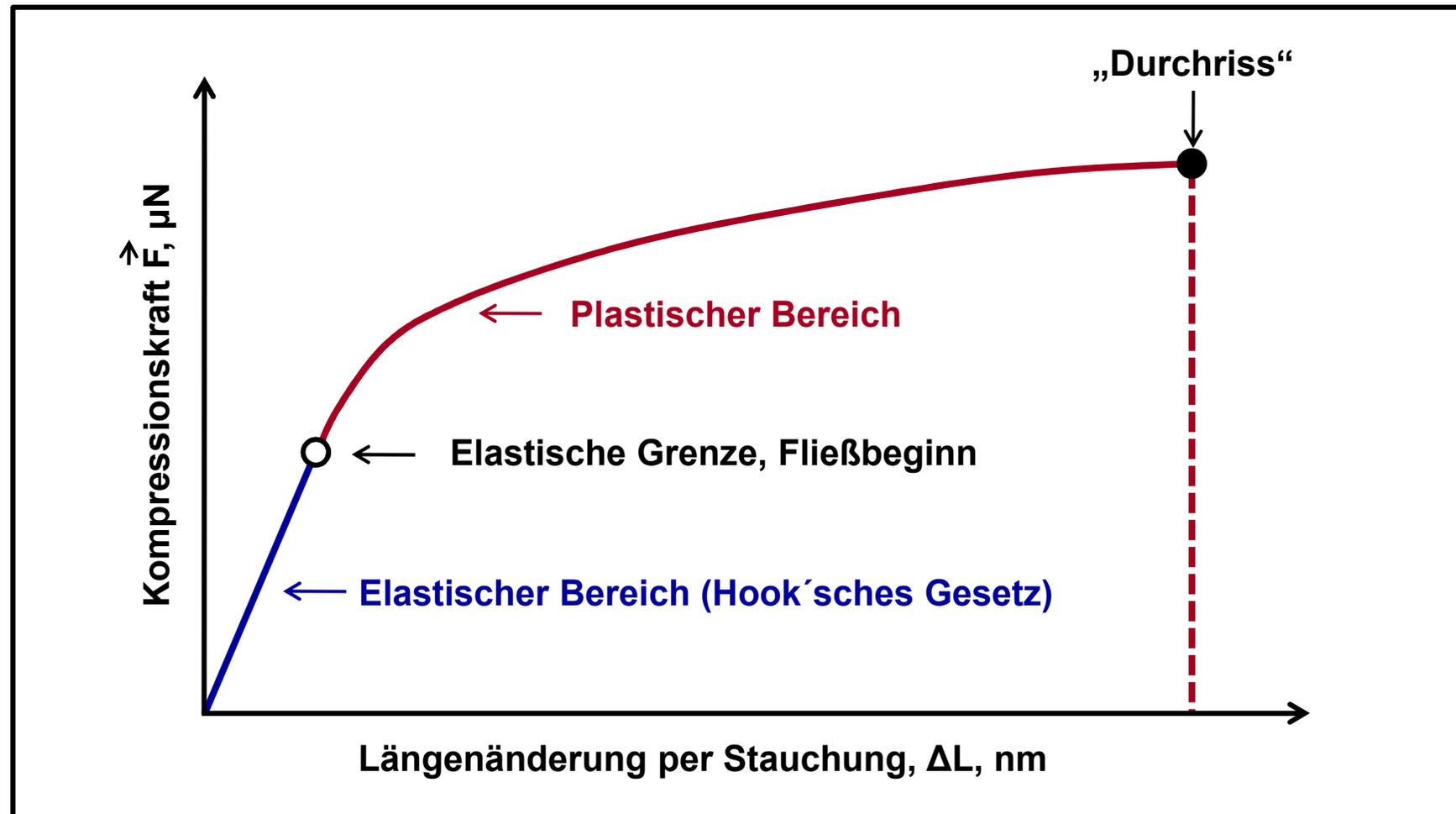
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Mechanisches Film-Verhalten bei lokaler Kompression:

		<hr/> <p>Keine Änderung, <i>Reine Elastizität.</i></p>
		<p>Bleibende Deformation, <i>Plastische Anteile.</i></p>
		<p>Filmriss, <i>Spröde Anteile.</i></p>

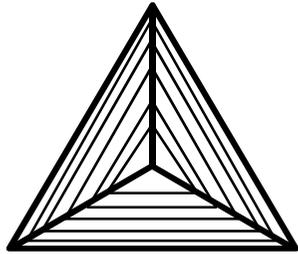
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Mechanisches Verhalten des Films bei der Kompression durch die Messspitze eines AFM:



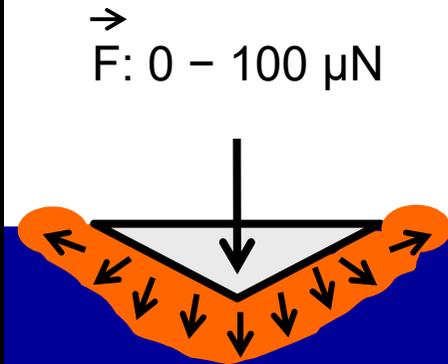
Raster Kraft Mikroskop (AFM) zur Nanoindentierung

Messung von elastischen Rückstellkräften an Klarlackierungen:

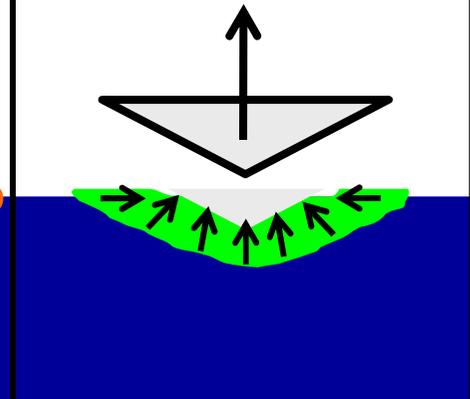


Winkel zwischen einer Kante und ihrer „Gegenfläche“: $142,3^\circ$.

$\vec{F} \sim$ Eindringtiefe

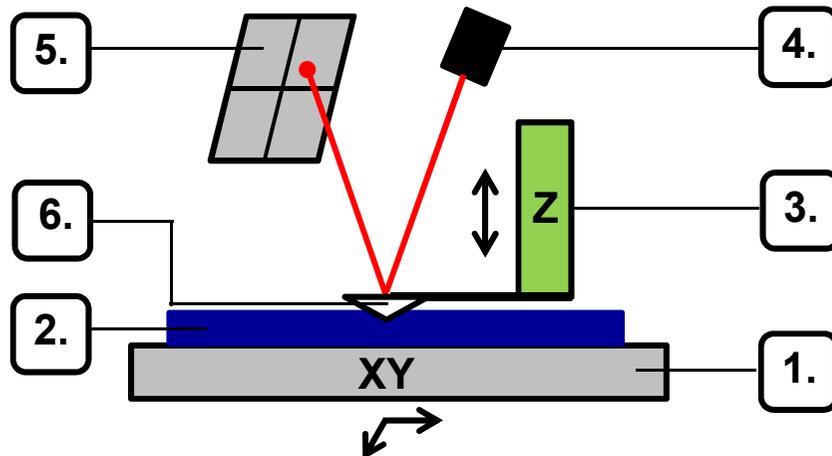


Plastisches Fließen unter Druck.



Rückbildung durch elastische Anteile.

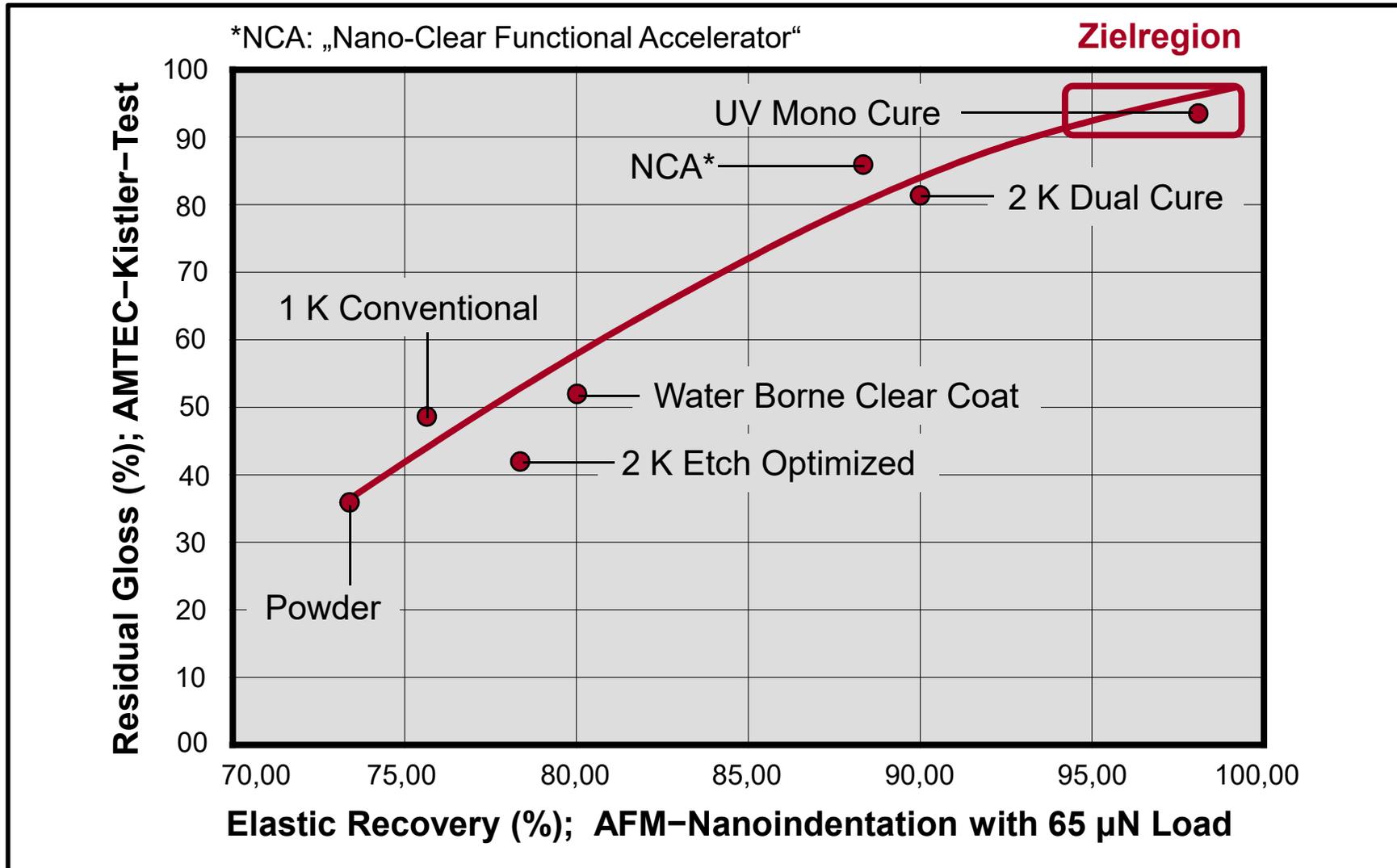
Berkovich-Pyramide; Basiskante: 50 nm.
Material: Diamant oder Saphir.



1. XY-Scanner
2. Lackierung, Oberfläche
3. Piezoelektrischer Z-Scanner
4. Laserdiode
5. Positionsdetektor
6. Berkovich-Pyramide

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

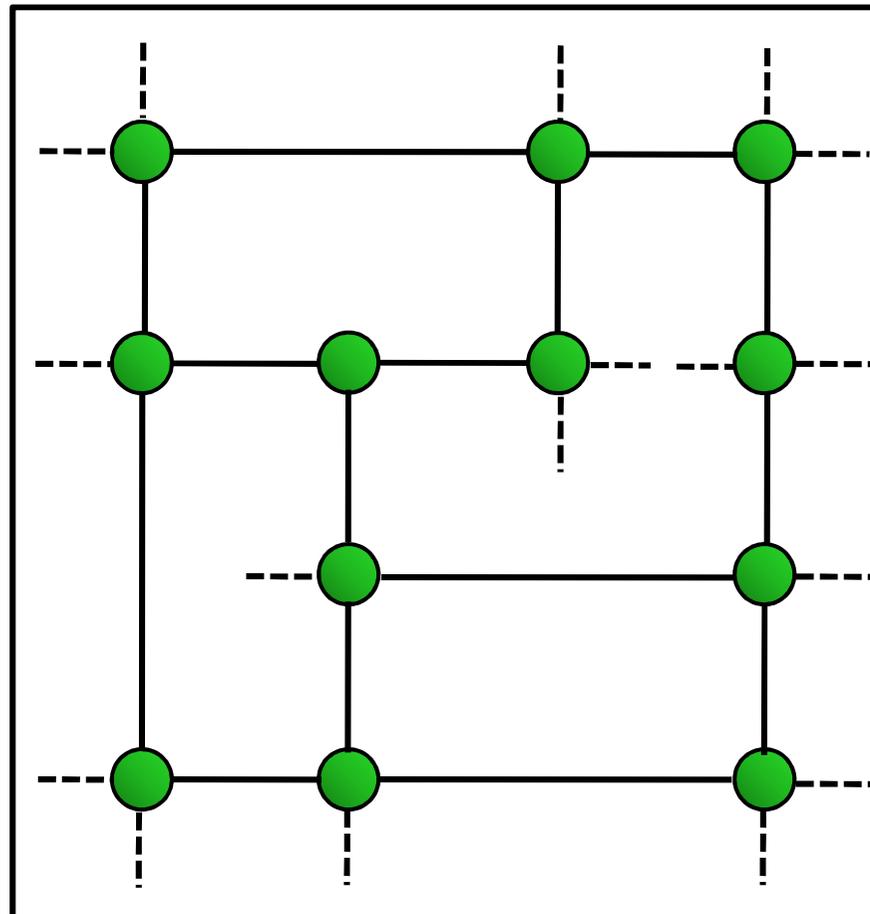
AFM-Indentation, Korrelation mit dem AMTEC-Kistler-Test:



Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Polymere Netzwerk-Typen in Automobilklarlackierungen:

→ **Standard-Beschichtung, Strukturschema.**



Duromer-Netzwerk

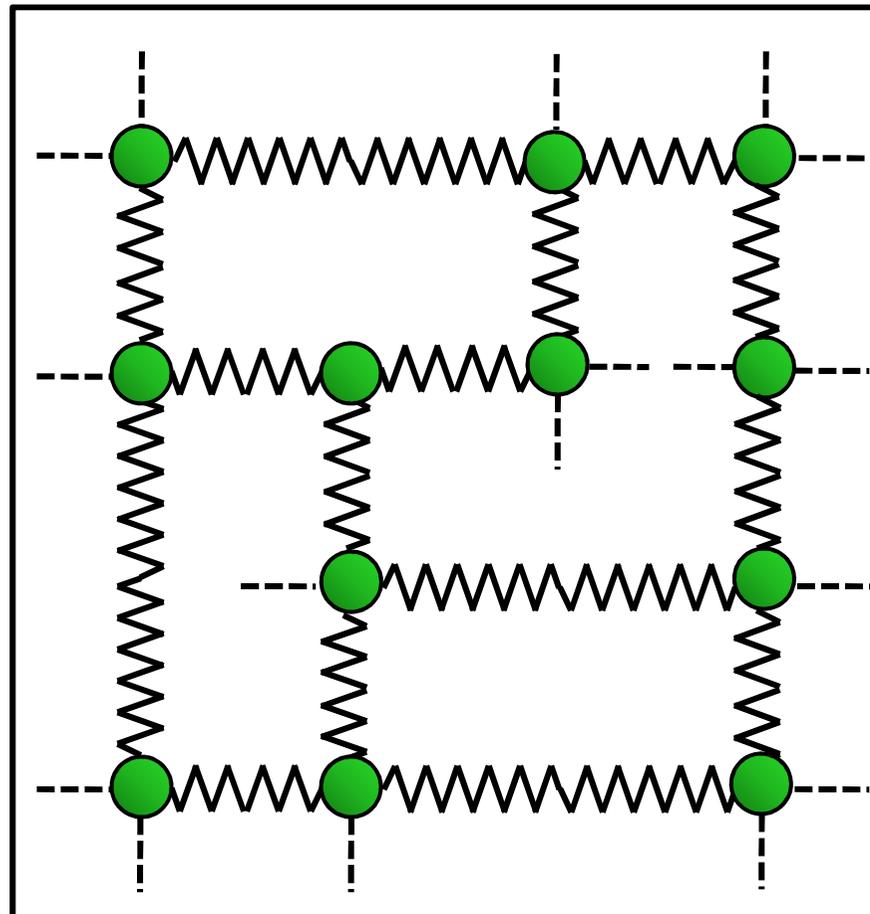


- Geringe Netzwerkdichte
- Starre Ketten
- Hohe T_g -Werte
- Mittlere Härte
- Hohe Chemikalienresistenz

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Polymere Netzwerk-Typen in Automobilklarlackierungen:

→ **Kunststoff-Beschichtung, Strukturschema.**



Duromer-Netzwerk

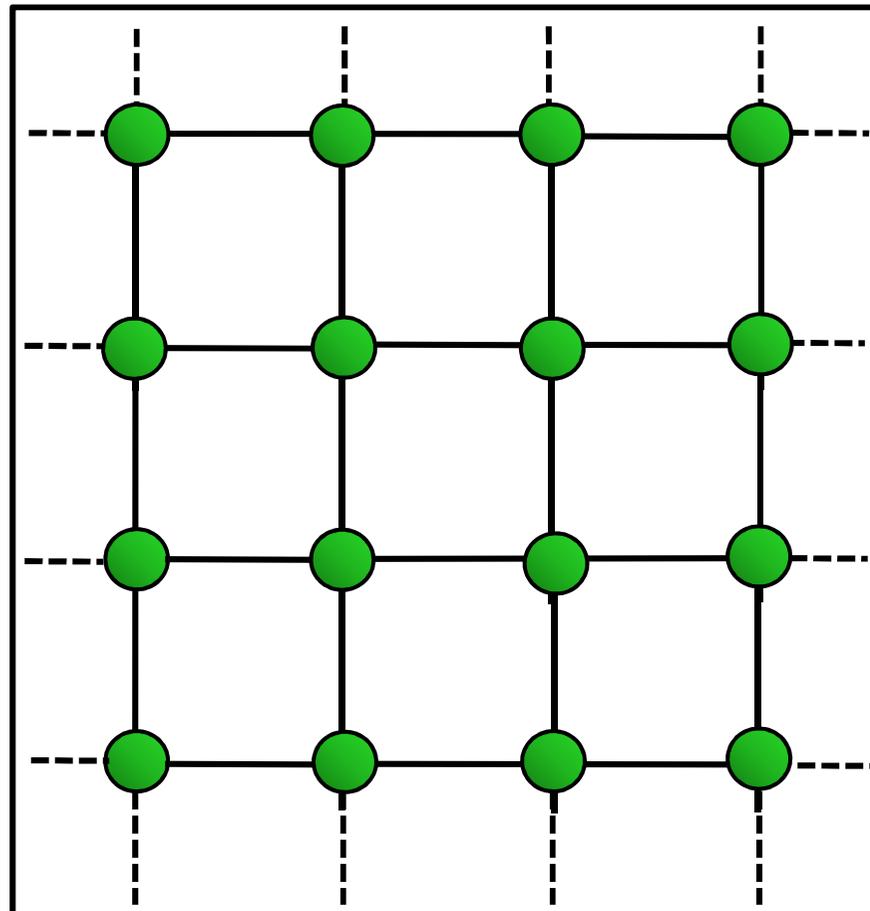


- Geringe Netzwerkdichte
- Flexible Ketten
- Niedrige T_g -Werte
- Geringe Härte
- Eignung als Pastik-Coating

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Polymere Netzwerk-Typen in Automobilklarlackierungen:

→ **Harte Beschichtung, Strukturschema.**



Duromer-Netzwerk

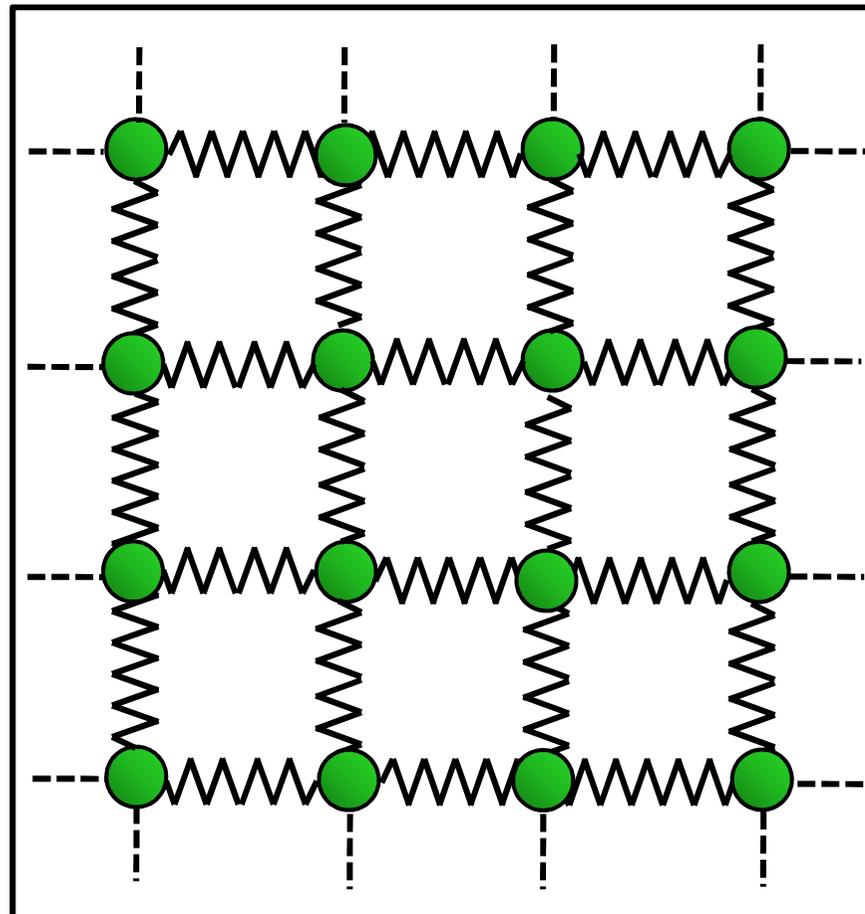


- Hohe Netzwerkdichte
- Starre Ketten
- Hohe T_g -Werte
- Extreme Härte
- Sehr spröde („Glaser“)

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Polymere Netzwerk-Typen in Automobilklarlackierungen:

Kratzfeste Beschichtung, zähelastisch, Strukturschema.



Duromer-Netzwerk

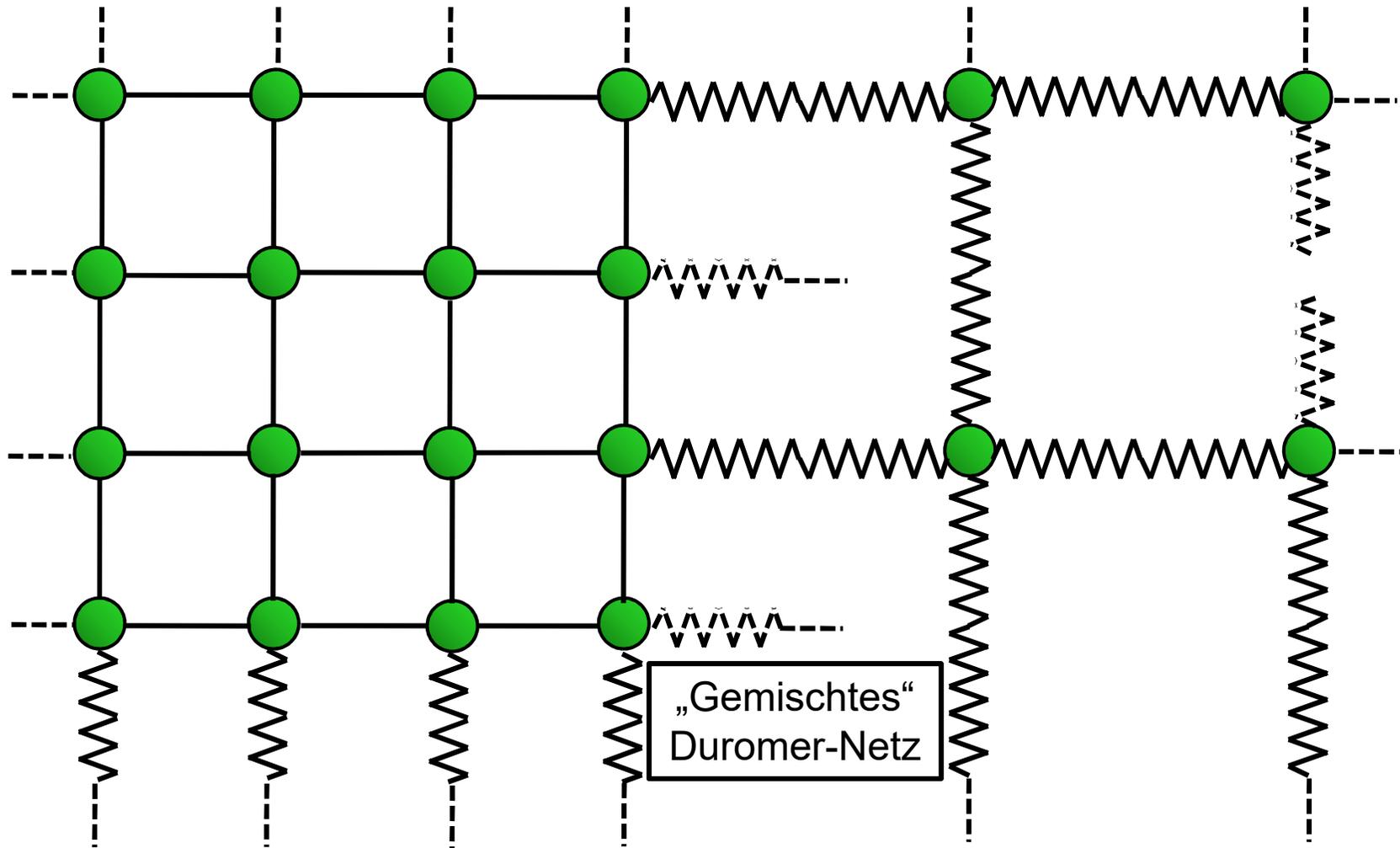


- Hohe Netzwerkdichte
- Flexible Ketten
- Mittlere T_g -Werte
- Mittlere – hohe Härte
- Geringe Sprödigkeit

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

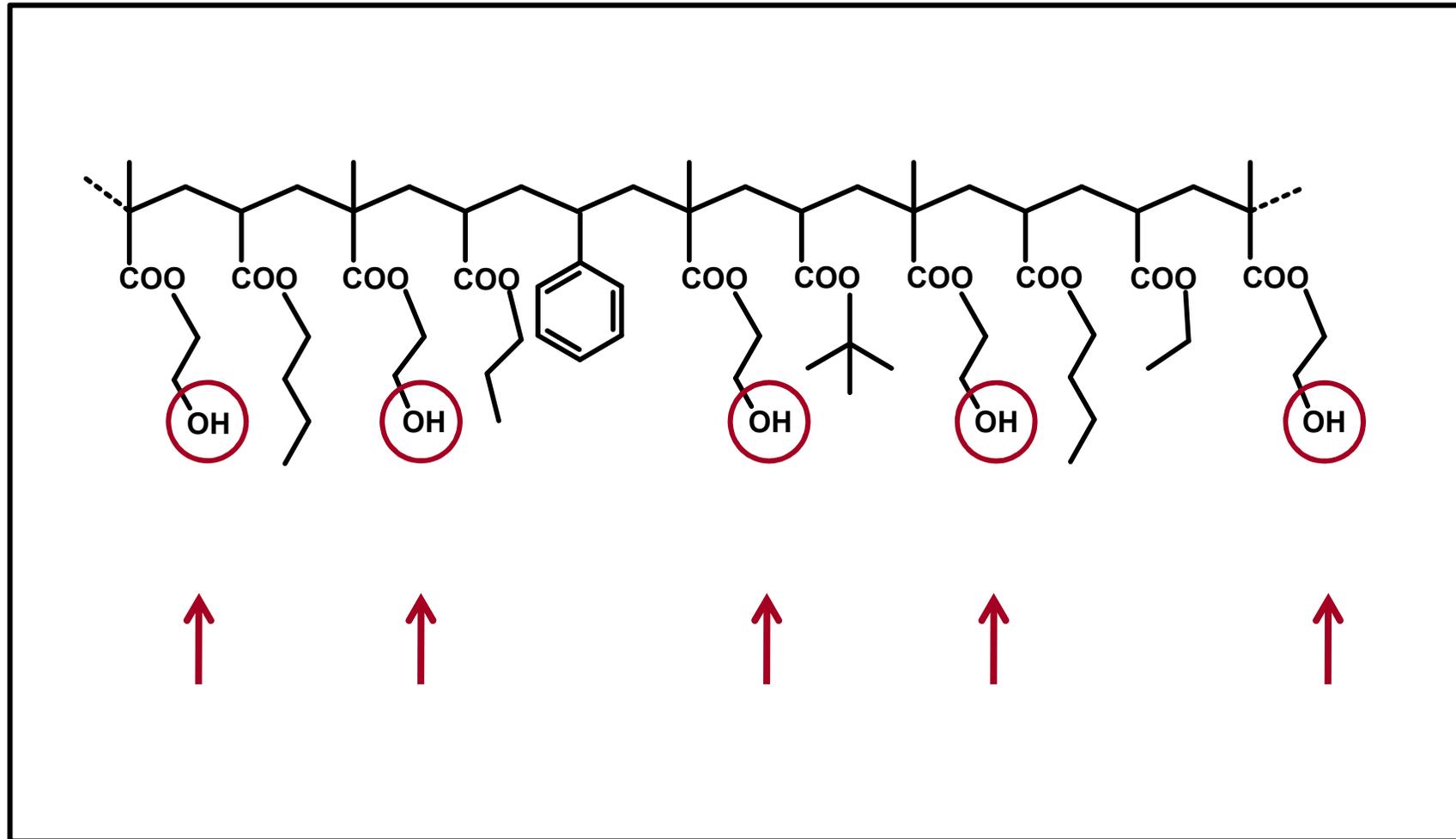
Polymere Netzwerk-Typen in Automobilklarlackierungen:

Kratzfeste Beschichtung, zähelastische Verbundstruktur.

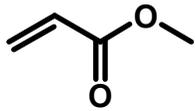


Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

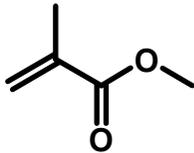
Klarlack, lösliches OH-funktionelles Polyacrylat-Harz:



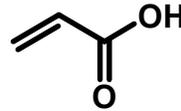
Polyacrylat-Bausteine für die Lackharzsynthesen:



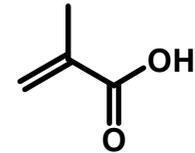
MA



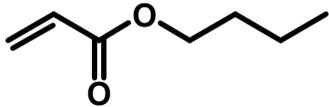
MMA



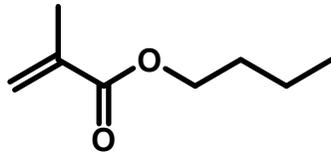
AA



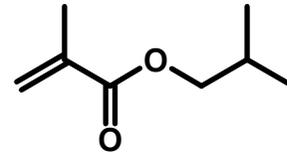
MAA



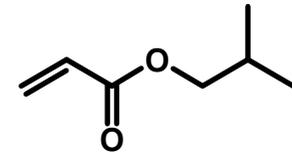
BA



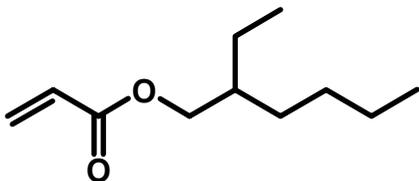
BMA



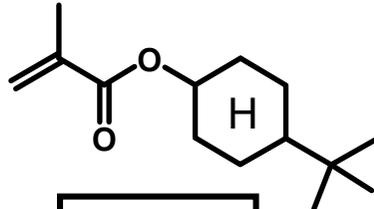
IBMA



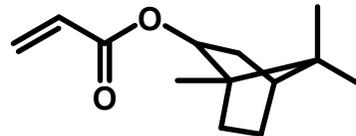
IBA



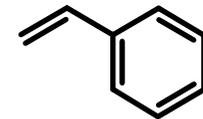
EHA



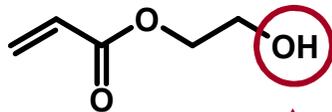
TBCMA



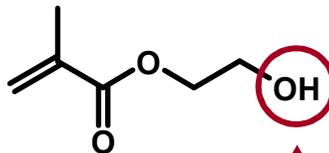
TMNA



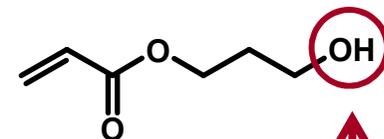
Styrene



HEA



HEMA



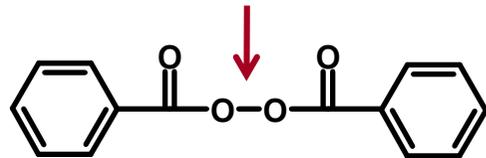
HPA



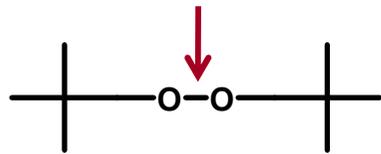
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Radikal-bildende Initiatoren für Polyacrylat-Synthesen.

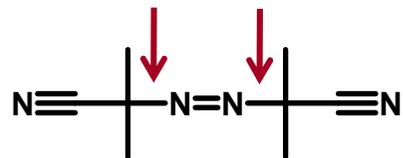
Thermolabile organische Peroxide und Azoverbindungen:



Dibenzoylperoxid

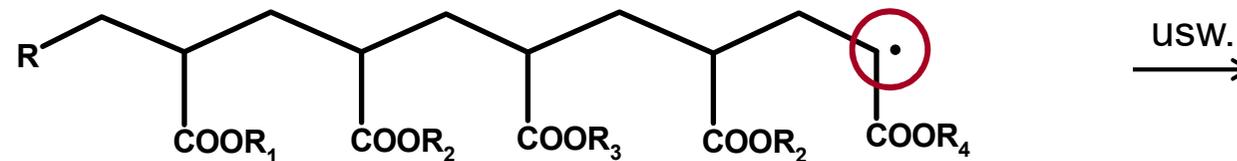
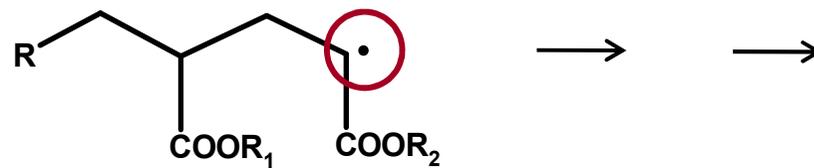
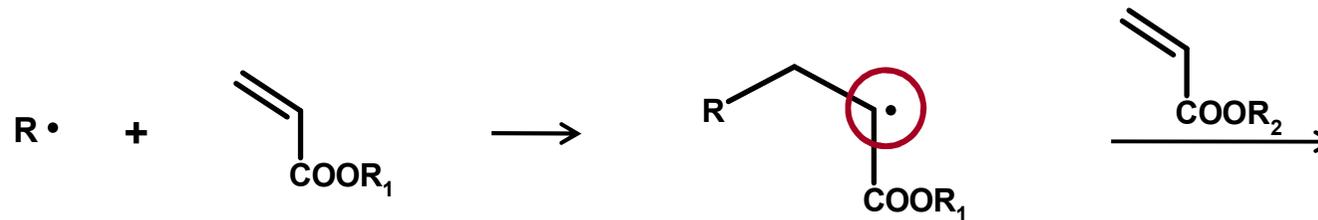
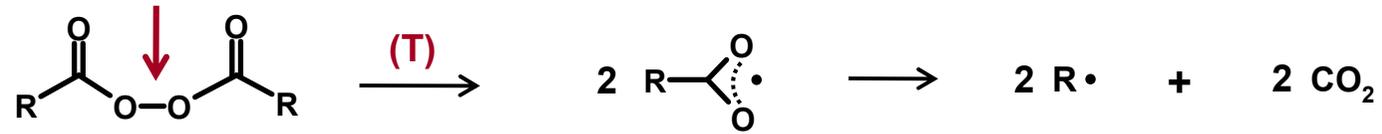


Di-tert.-Butylperoxid

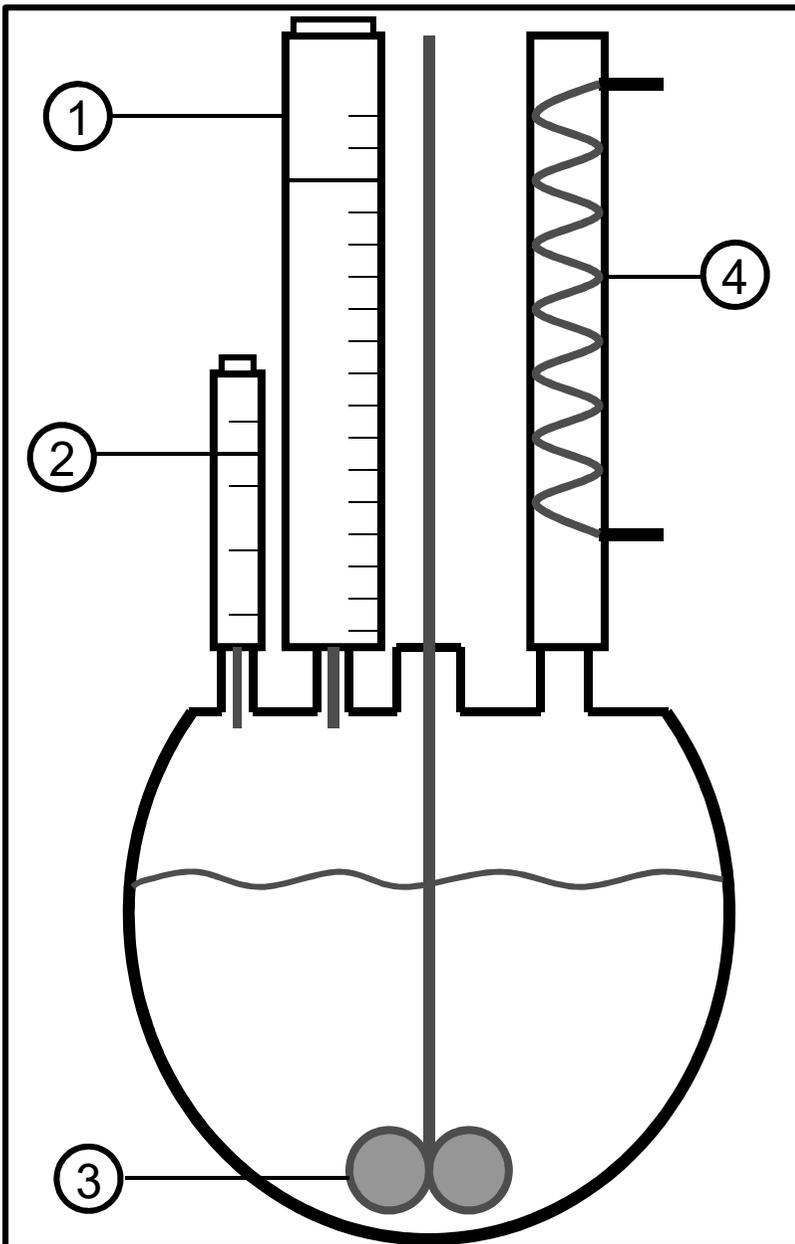


Azobisisobutyronitril

Mechanismus der radikalischen Acrylat-Polymerisation:



Polyacrylatharz: Laborsynthese, allg. Arbeitsvorschrift:



- ① Monomerezulauf
- ② Initiatorzulauf
- ③ Rührer
- ④ Rückflusskühler

Vorlage: Lösemittel (Shellsol, u.a.).

Initiatorlösung bei 142°C binnen
4,75h zutropfen.

Parallel dazu: Monomerenmischung
binnen 4,00h bei 142°C zutropfen.

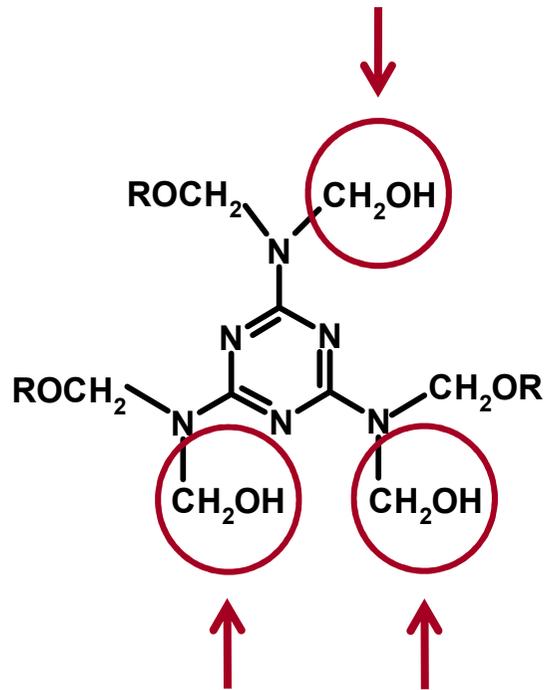
3,00h bei 142°C reagieren lassen.

Mit Lösemittelmischung verdünnen.

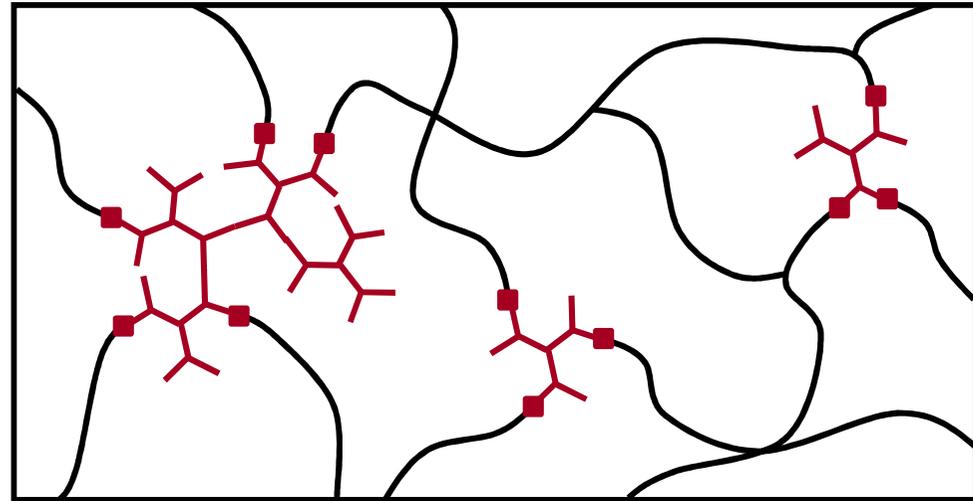
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Einkomponenten Klarlackierung:

—————> **Polyacrylatol + Melamin-Formaldehyd-Harz.**



(R = H, CH₃, n-C₄H₉)

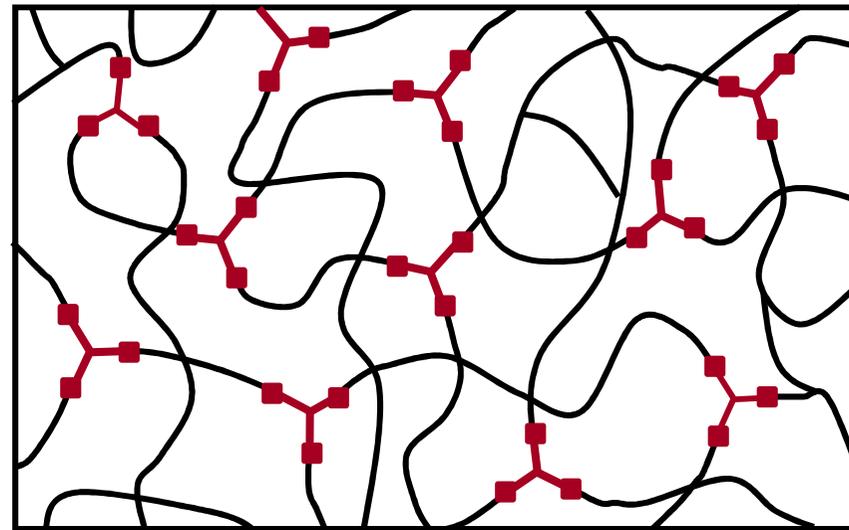
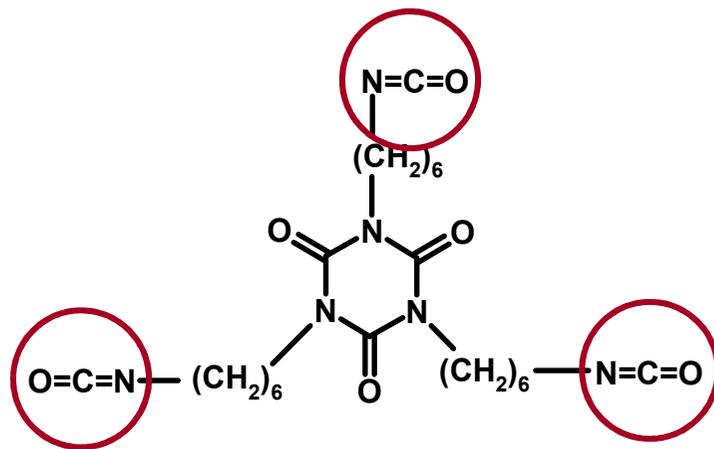


Relativ inhomogenes Netzwerk.

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

2-Komponenten-Klarlackierung:

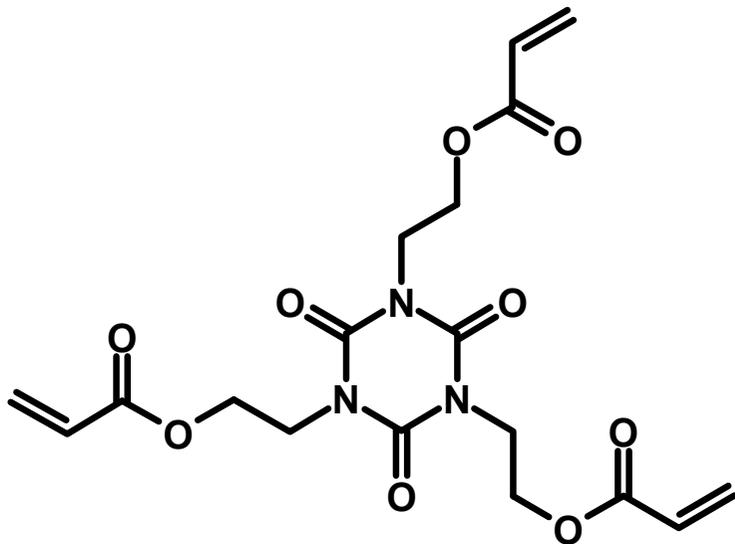
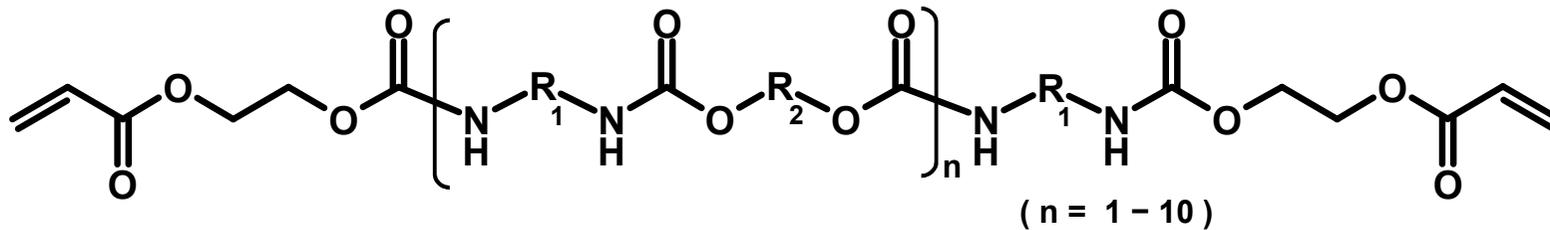
—————> **Polyacrylatol + Trimeres Diisocyanat (HDI).**



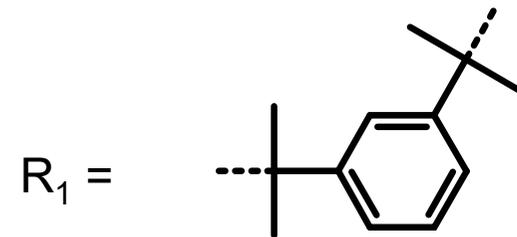
Relativ „homogenes“
Netzwerk.

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

UV-härtbares Polyurethanacrylat, UV-Reaktivverdünner:

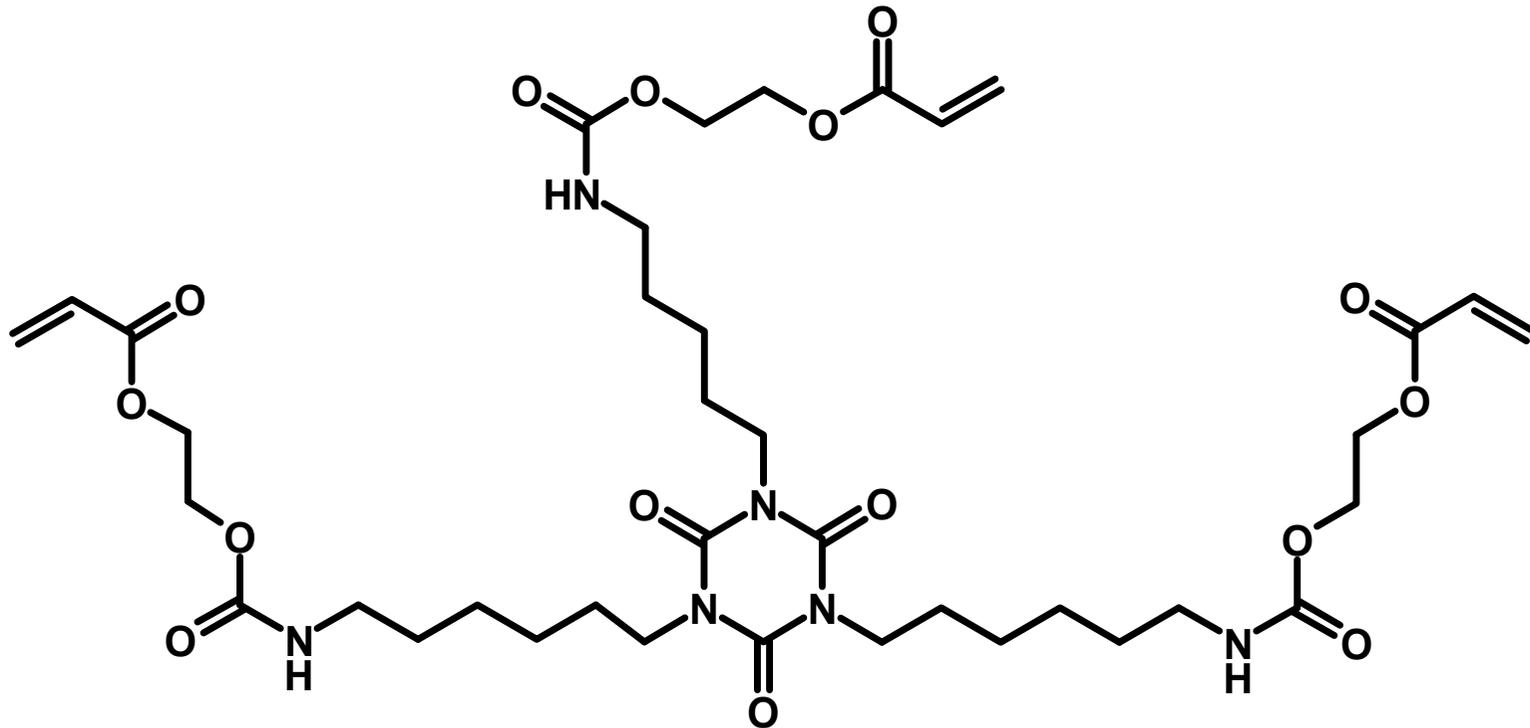


Tris-(2-hydroxyethyl)isocyanurat-triacrylat



Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

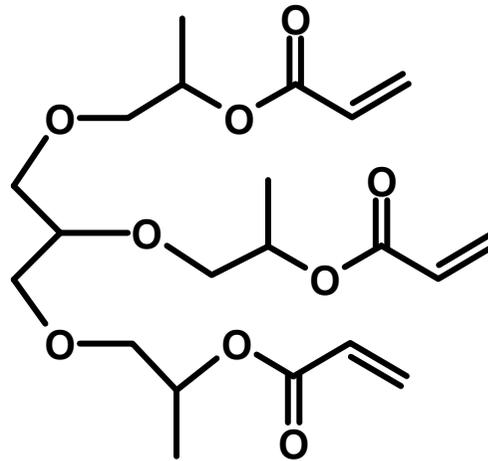
UV-Reaktivverdünner (OEM), analog dem HDI-Trimer:



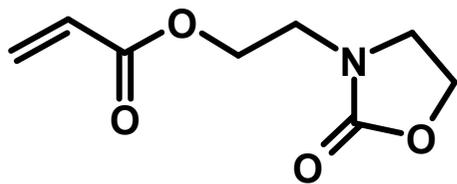
Addukt aus HDI-Trimer und 2-Hydroxyethylacrylat

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

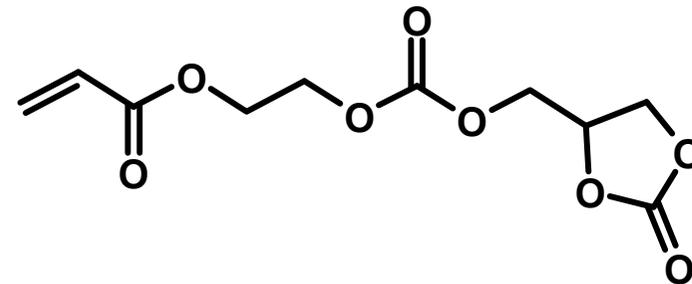
Weitere UV-Reaktivverdünner für Klarlackierungen (OEM):



Propoxyliertes
Glyzerintriacrylat



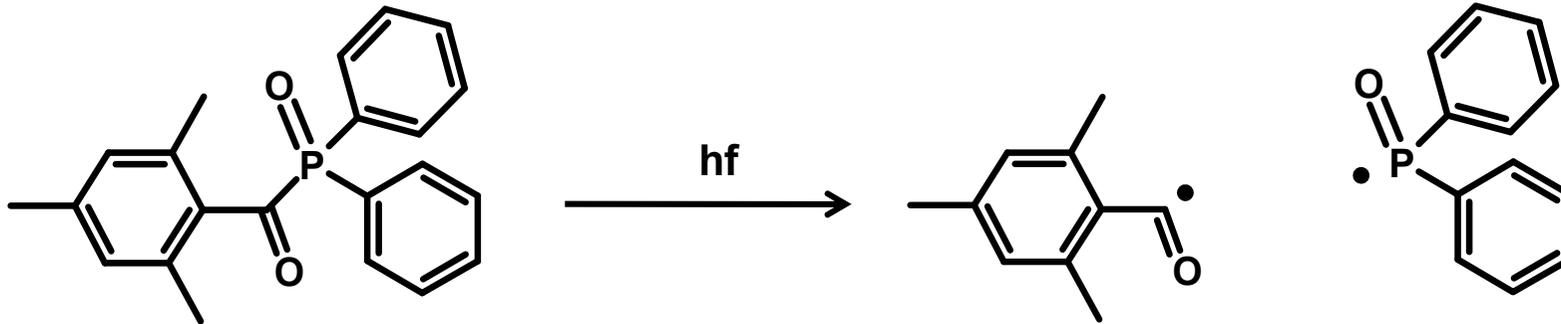
Acrylsäuremodifiziertes
Oxazolidon



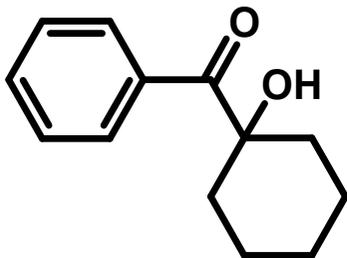
Acrylsäuremodifizierter
Kohlensäureester

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

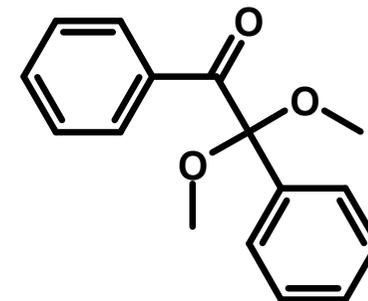
Photoinitiatoren zur Aktivierung der UV-Lack-Härtung:



Trimethylbenzoyl-phosphinoxid (TPO)



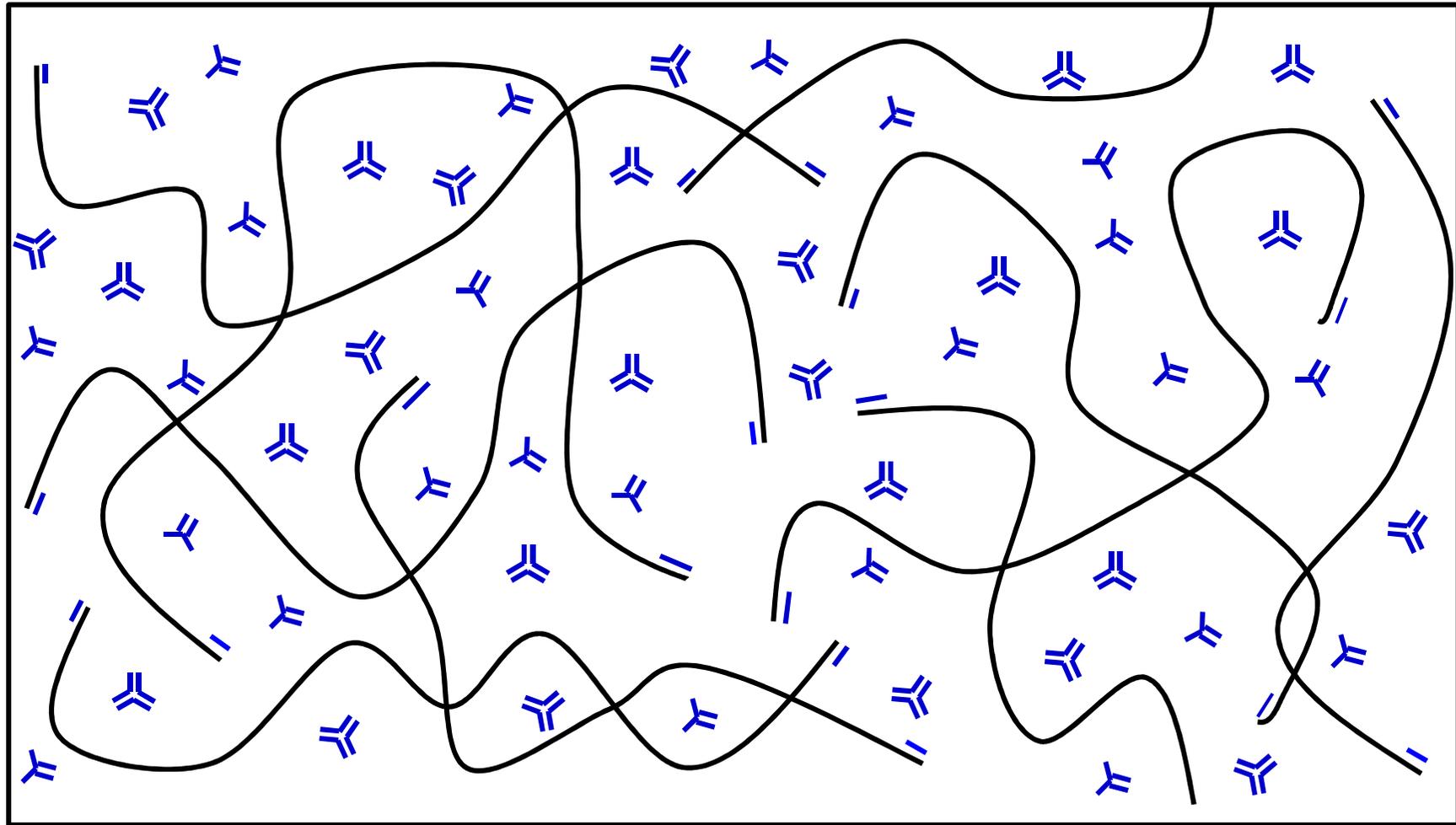
1-Hydroxy-Cyclohexylphenylketon



Benzildimethylketal

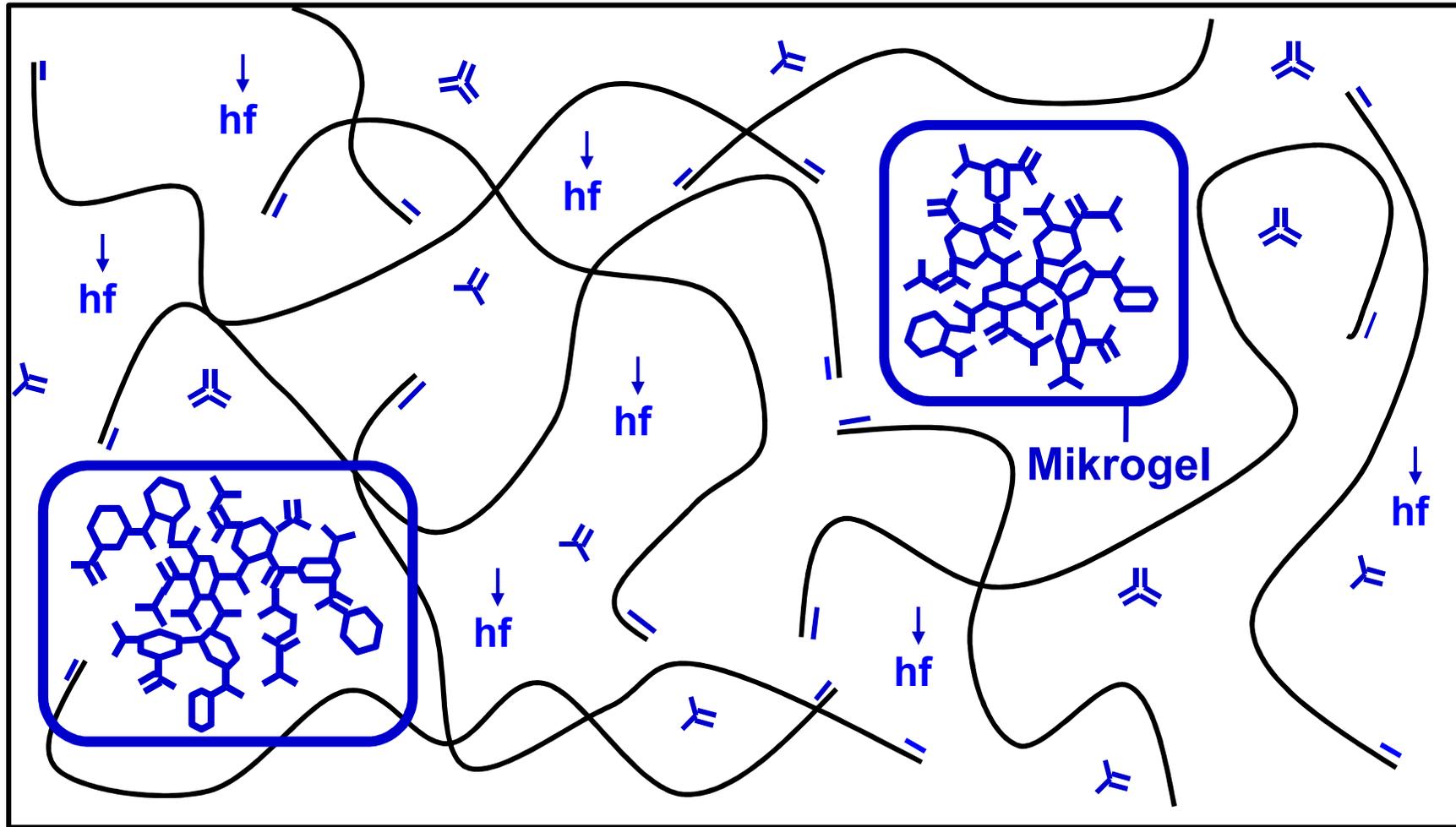
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Flüssiglack, PUR-Acrylat + Reaktivverdünner (= / =):



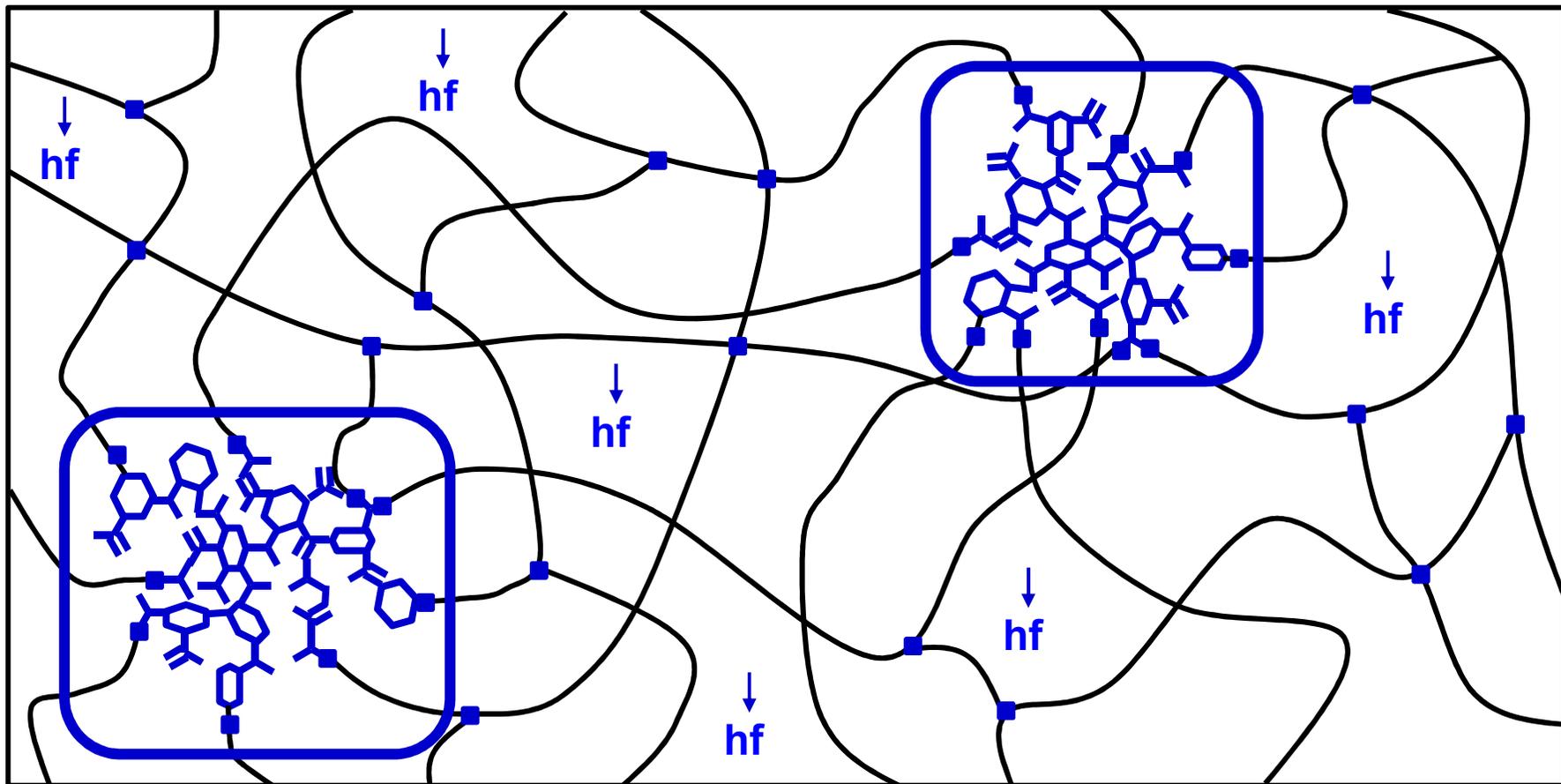
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Teilaushärtung, Polyurethan-Acrylat + Reaktivverdünner:



Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

**Aushärtung des UV-Lacks durch komplette Vernetzung:
Kompakte Domänen mit relativ hoher Netzwerkdichte.**



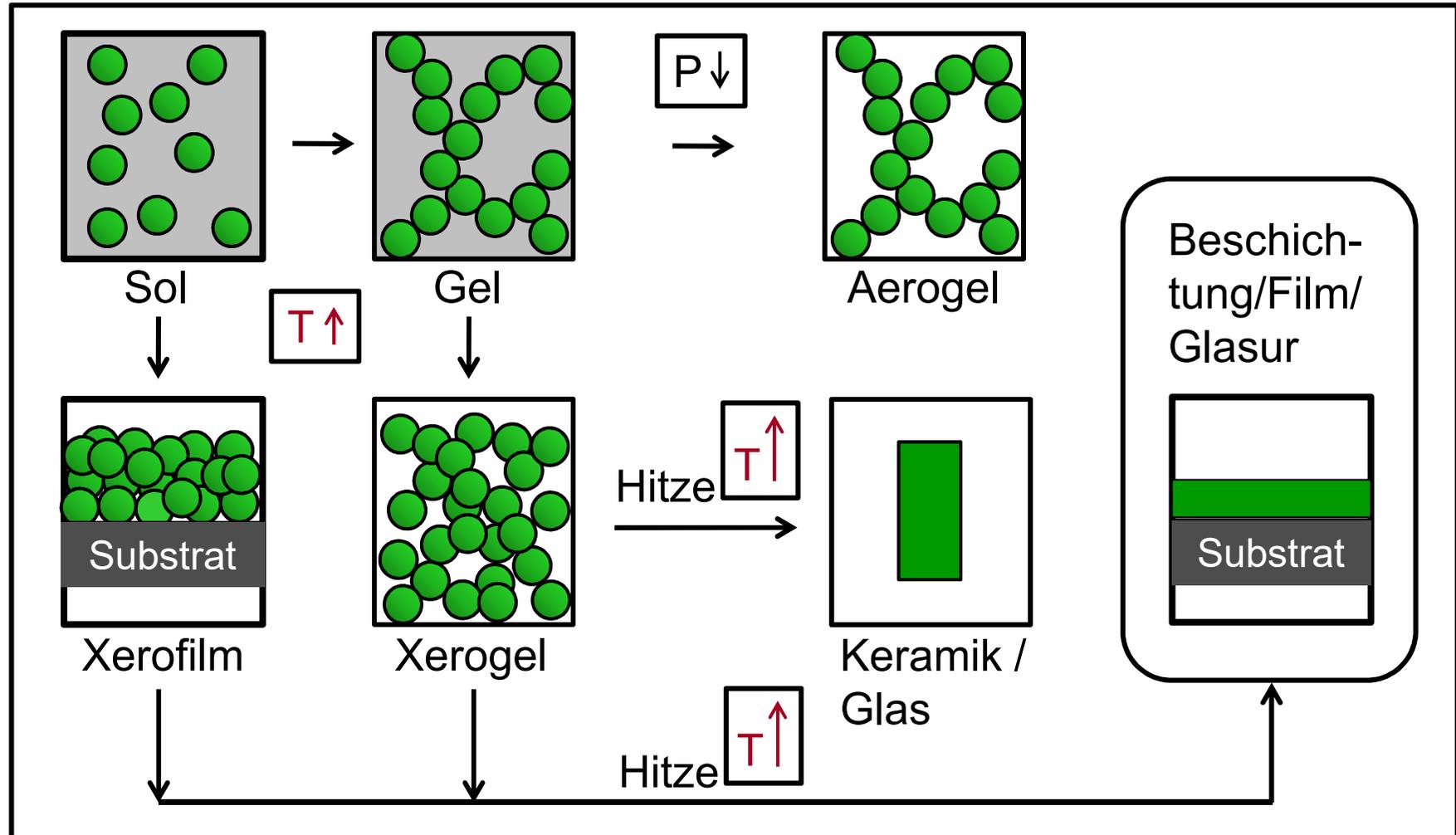
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Nachteile bei der Applikation von UV-härtbaren Lacken:

- Die Beschichtung von dreidimensionalen Oberflächen erfordert spezielle, Robotik-gesteuerte Belichtungsanlagen.
- Unerwünschte Emission des Reaktivverdünners durch IR-Anteile aus der Hg-Hochdrucklampe. Aufwändige Abzugssysteme auf der Lackierstraße.
- Intensive Kühlung der UV-Lampen bei Dauerbetrieb erforderlich, wegen deren Erwärmung.
- Sauerstoff-bedingte Inhibierungen der Radikalkettenreaktionen verhindern das vollständige Aushärten des Lackfilms.

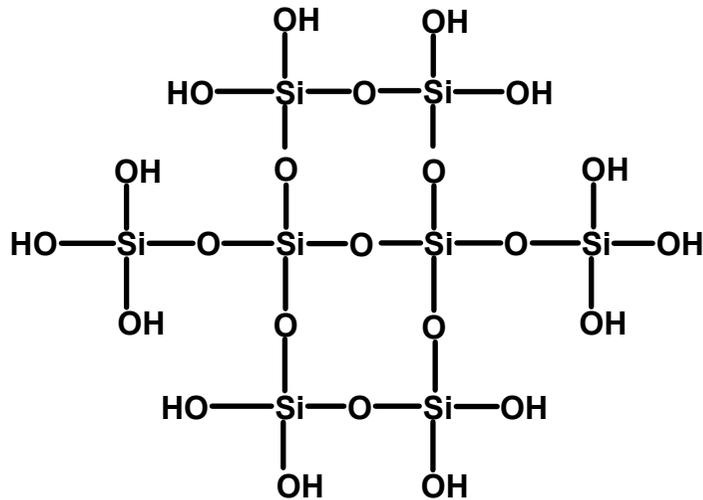
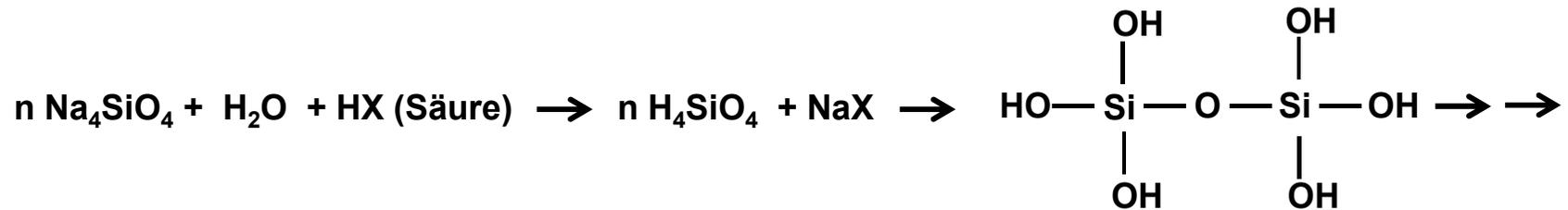
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Sol-Gel-Technik zur Herstellung von Keramiken und Beschichtungen: Prinzip und technische Varianten.

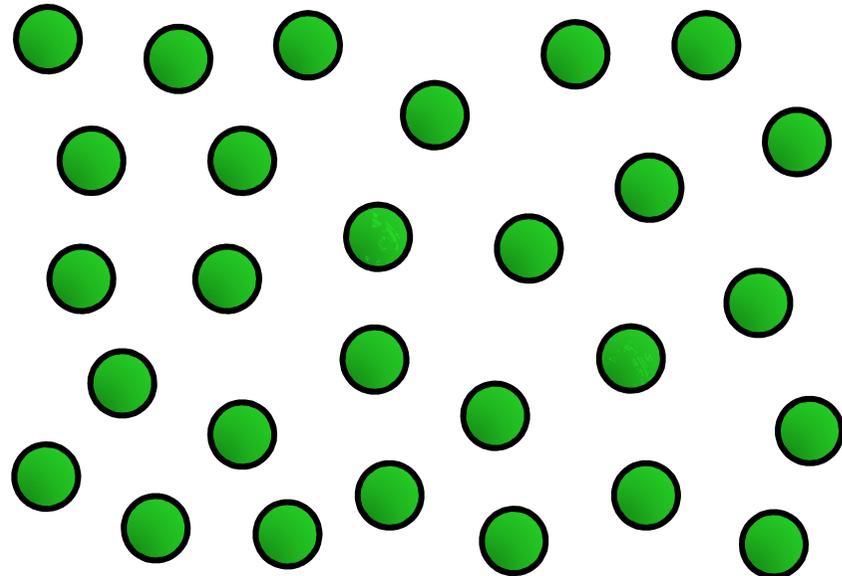


Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Glasuren, Formierung von Silica-Sol, Bildung der Partikel:

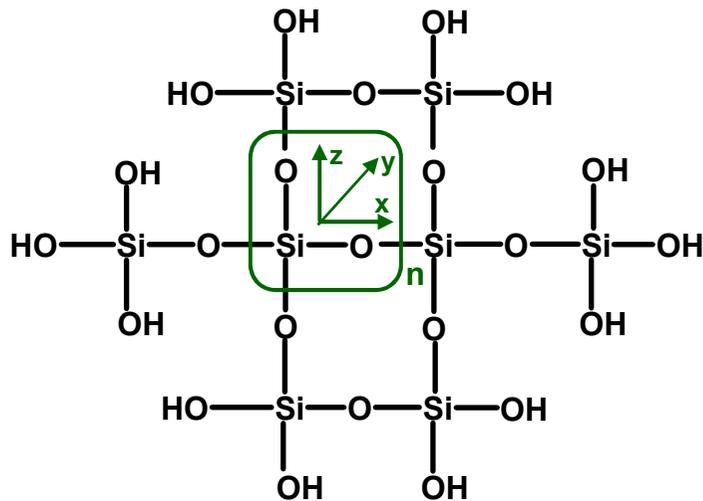
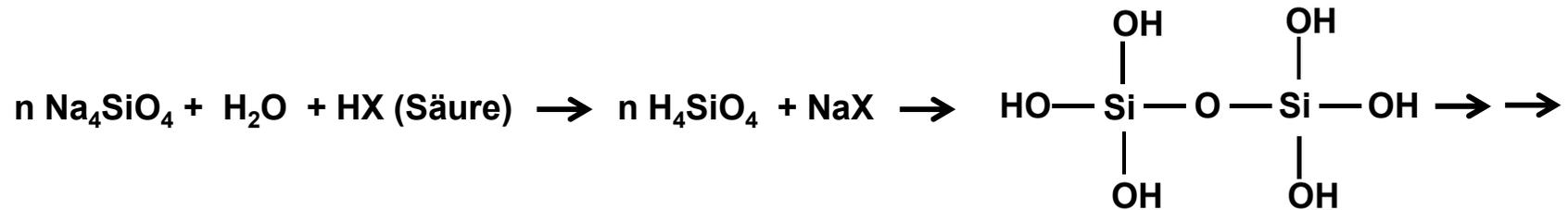


Ideales, monodisperses Sol



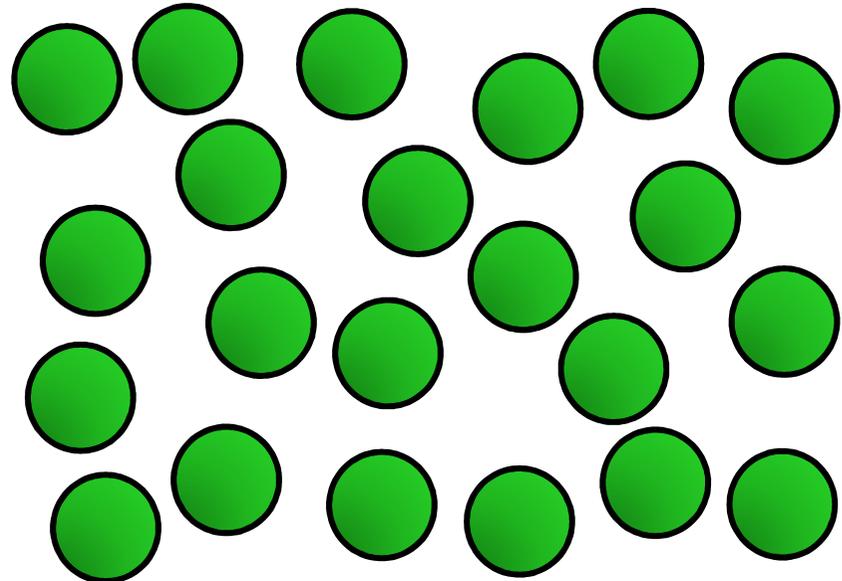
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Glasuren, Formierung von Silica-Sol, Wachstum der Partikel:



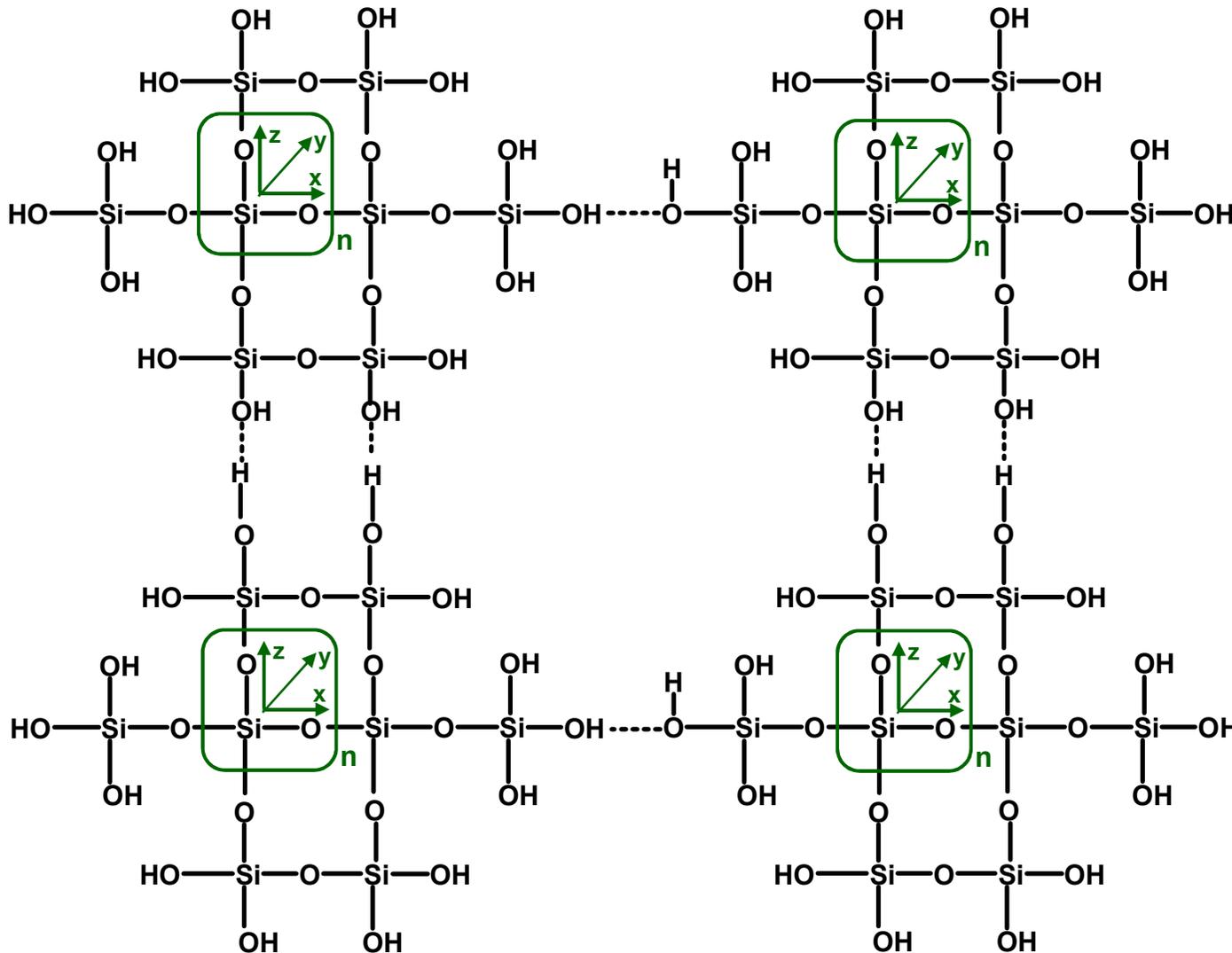
$n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$: jeweils für die x-, y- und z-Richtung

Ideales, monodisperses Sol

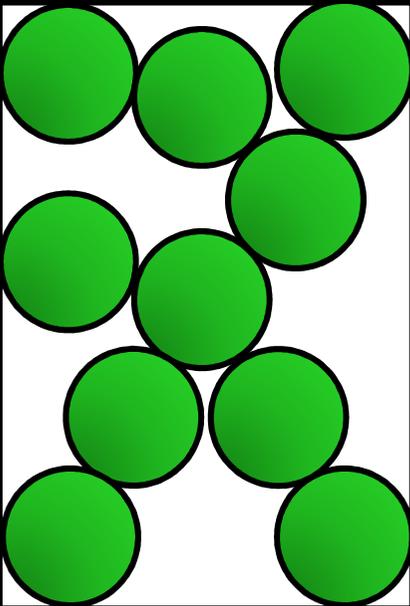


Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Glaser, Bildung von Silica-Gel per Wasserstoffbrücken:



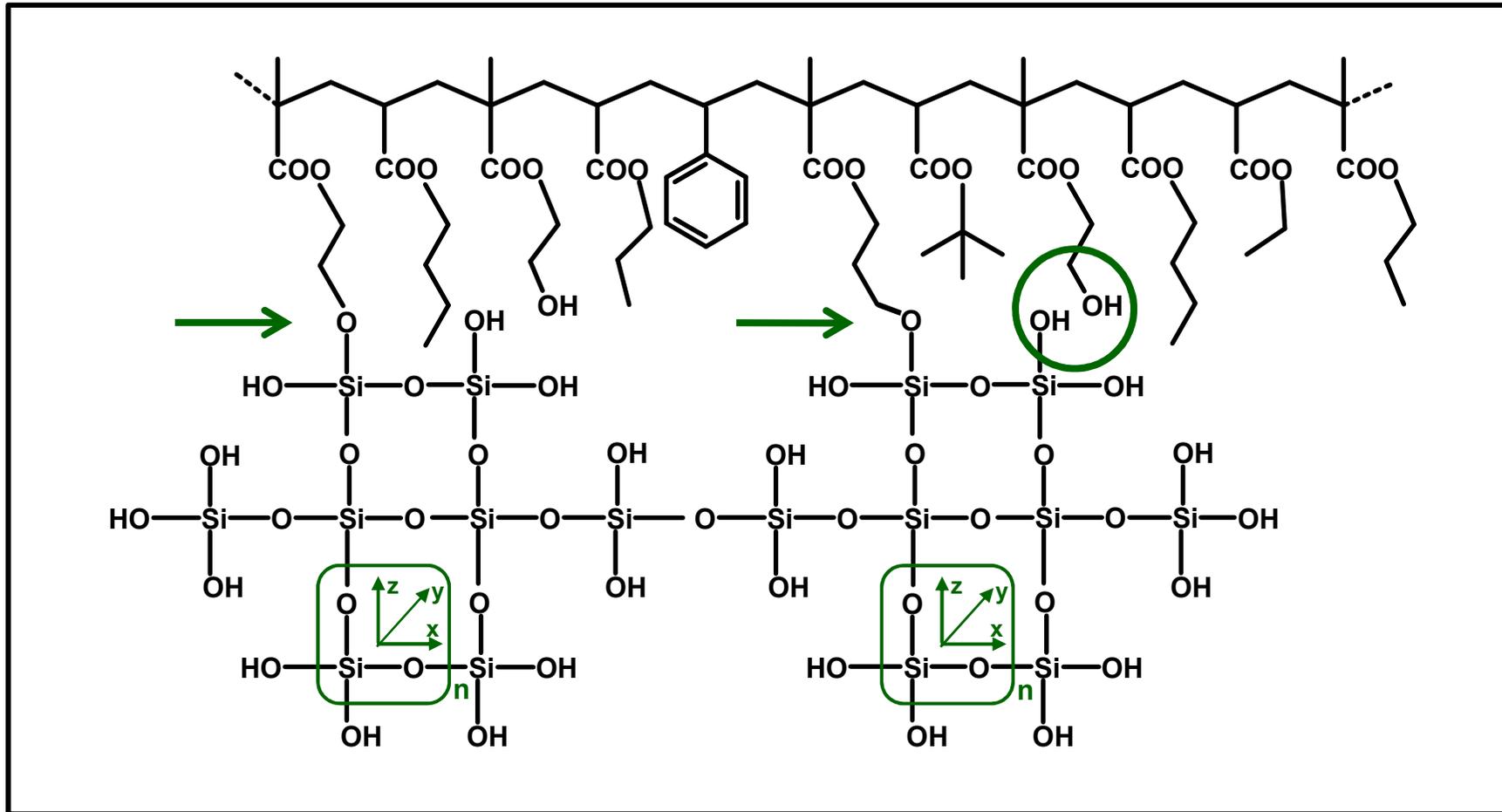
Silica-Gel



Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

"Organic Modified Ceramics"

Sol-Gel-Prozess: Gelierung vor der Bildung des Xerofilms.

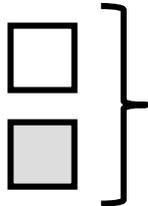


Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

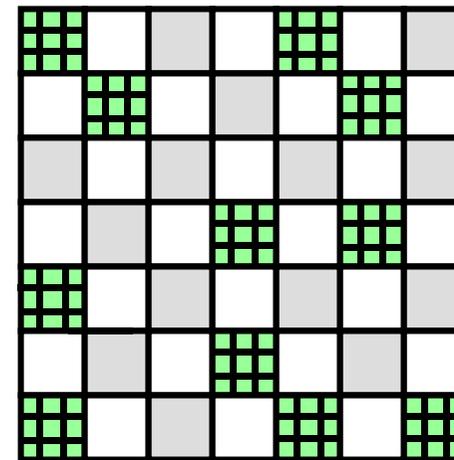
**Ausgehärteter Lack-Film nach Zusatz von "Silica-Sol",
Nanometer-Domänen sehr hoher Netzwerkichte
(→ Strukturschema).**



„Hartes“, SiO_2 -vernetztes
Strukturelement ($\approx 10 \text{ nm}$).

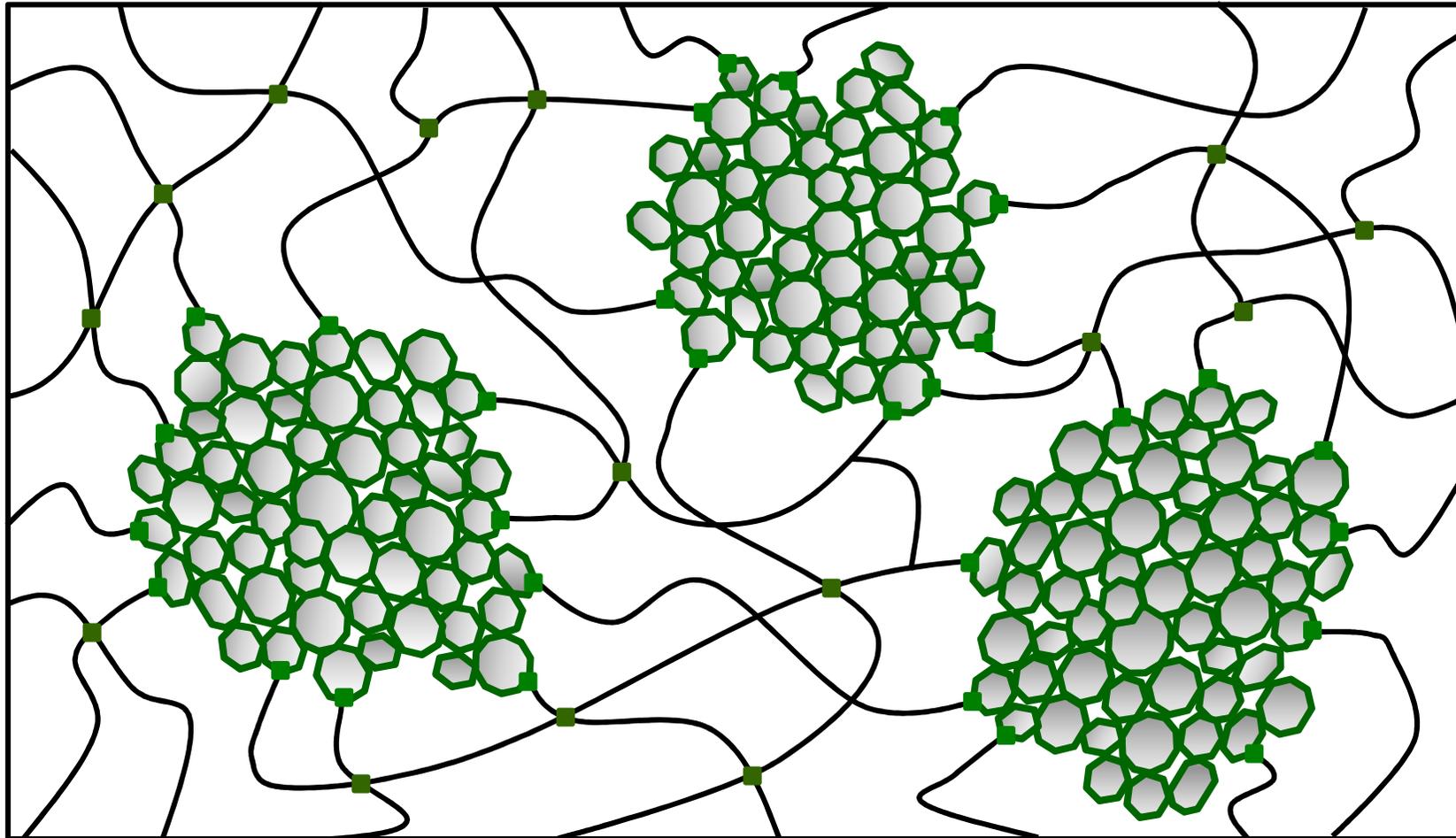


„Weiche“, weniger stark
vernetzte Strukturelemente.



Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

**Ausgehärteter Lack-Film nach Zusatz von "Silica-Sol",
Nanometer-Domänen mit sehr hoher Netzwerkdichte.**



Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Limitierungen von Sol-Gel-Applikationen für Automobile:

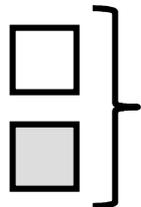
- Sol-Gel-Lacke müssen kühl gelagert werden.
- Lebensdauer < 6 Monate.
- Meist kommen lösemittelhaltige Lackformulierungen zur Anwendung.
- Kritische Applikationsbedingungen hinsichtlich Luftfeuchtigkeit und Temperatur.
- Die Kompatibilität des Silikat-Netzwerkes mit dem organischen Polymer ist nicht immer gegeben.

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

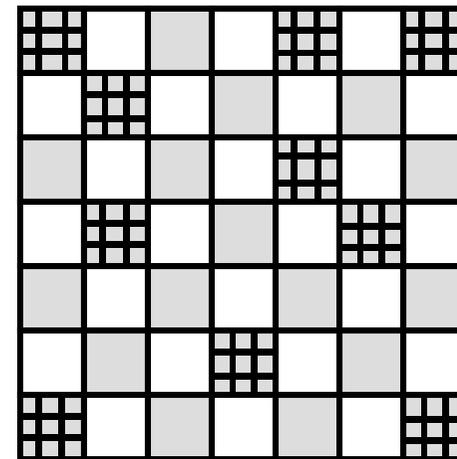
Alternative zur Glasur: Polyacrylate hoher OH-Zahl, oder hoher COOH-Zahl, vernetzt mit dendrimeren oder hoch verzweigten Oligomeren (→ Strukturschema).



„Hartes“, hoch vernetztes
Strukturelement (≈ 10 nm).

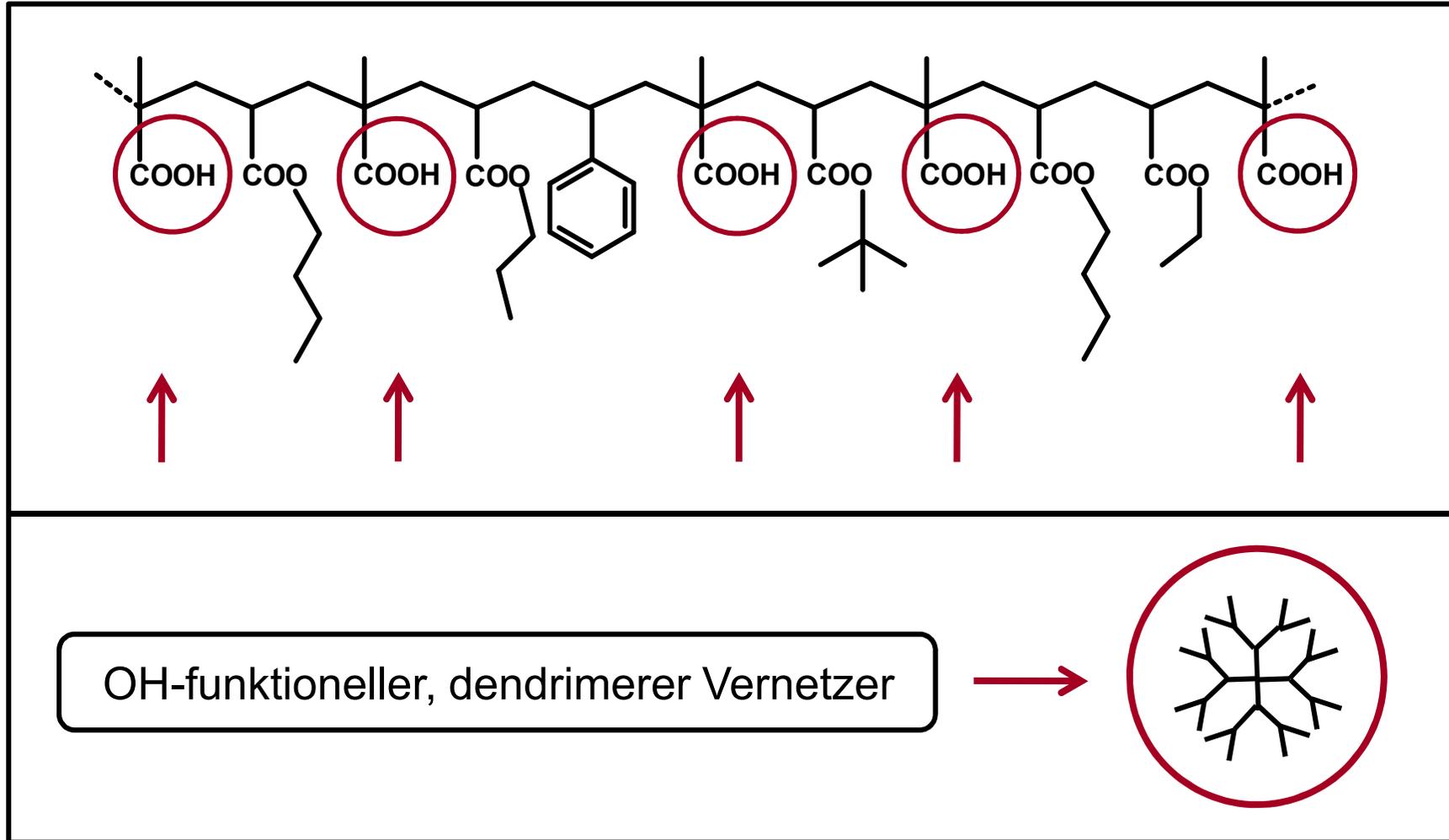


„Weiche“, weniger stark
vernetzte Strukturelemente.



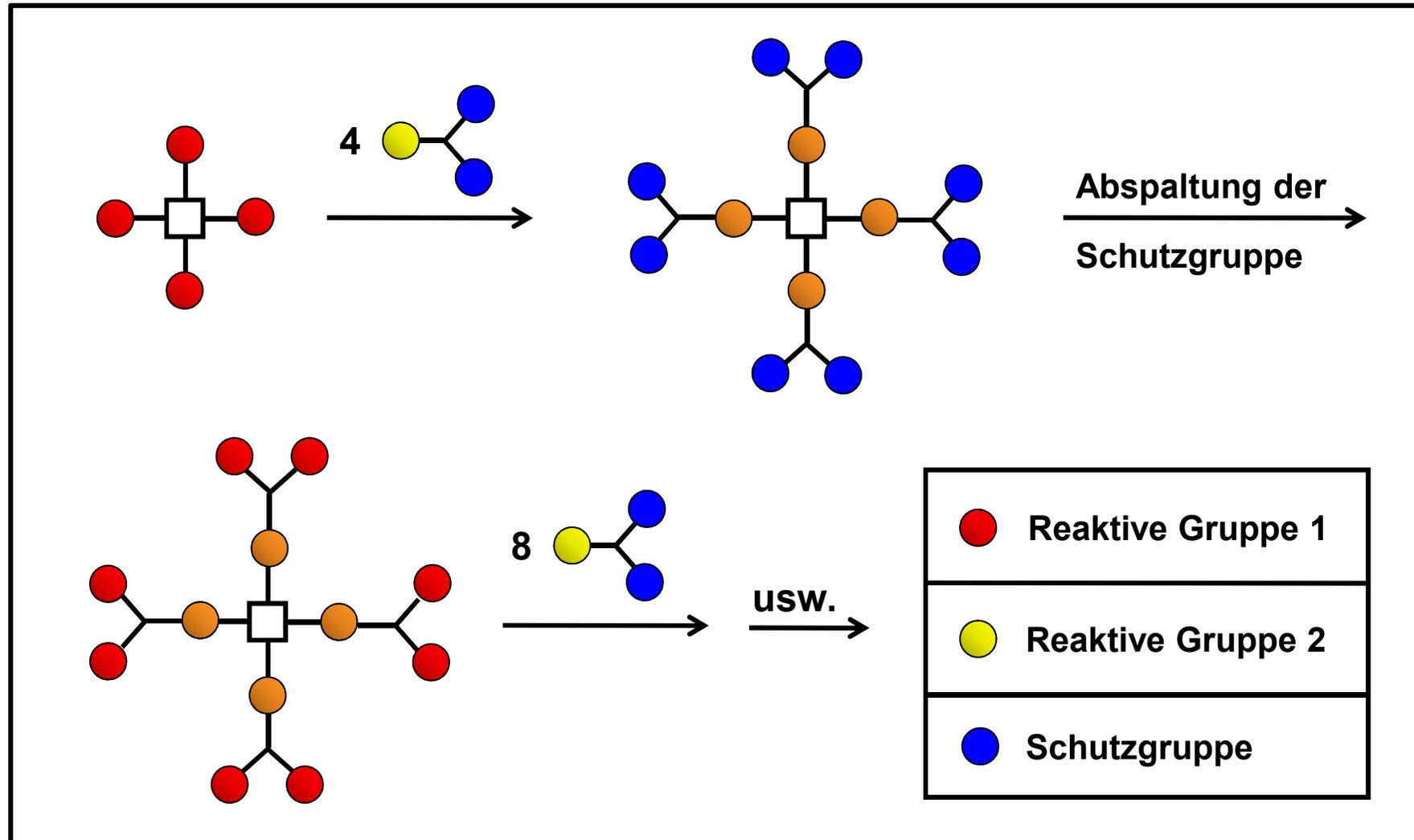
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

COOH-funktionelles Polyacrylat mit hoher Säurezahl:



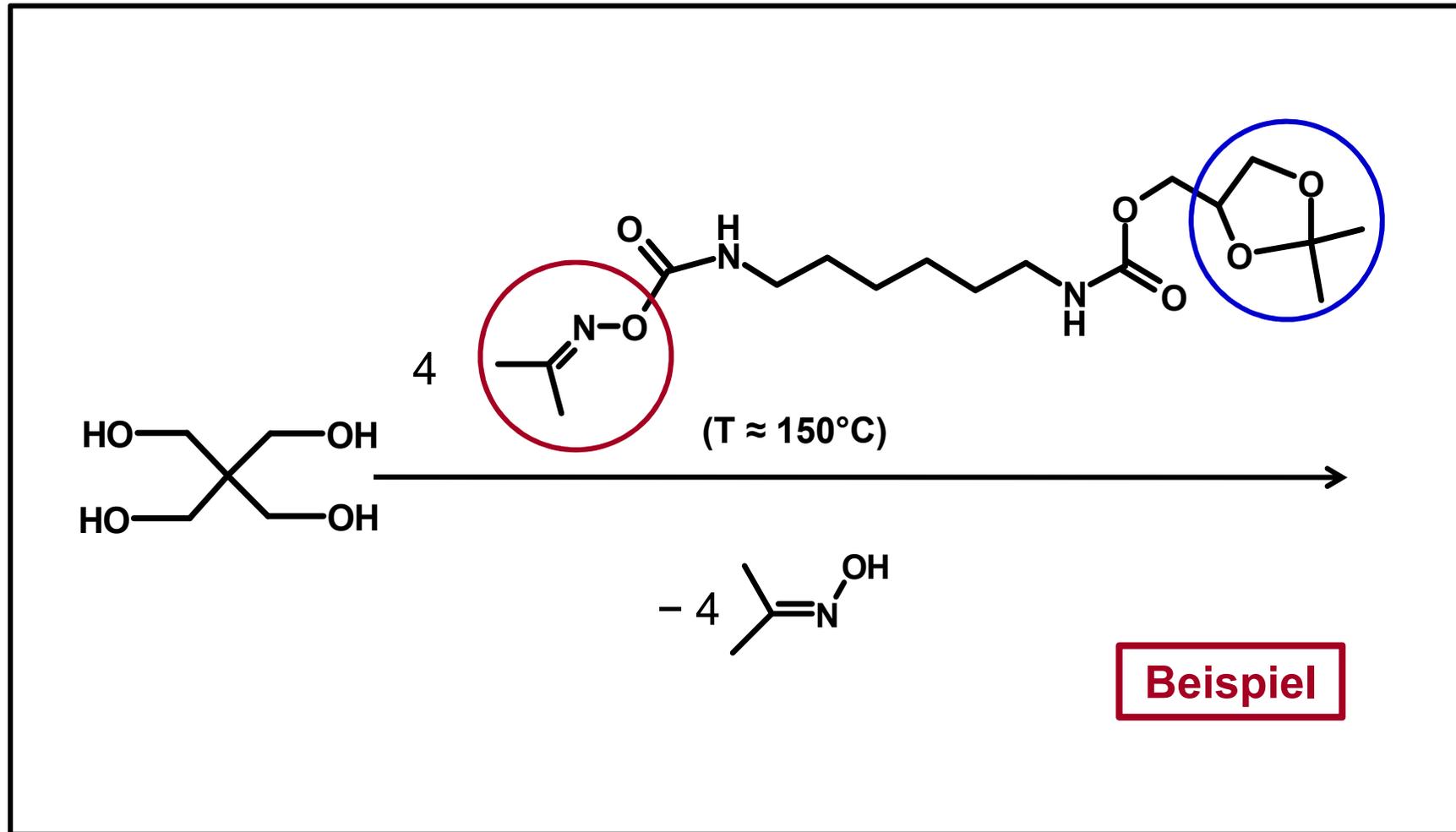
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

„Dendrimerer“ Vernetzer, divergenter, mehrstufiger Aufbau:



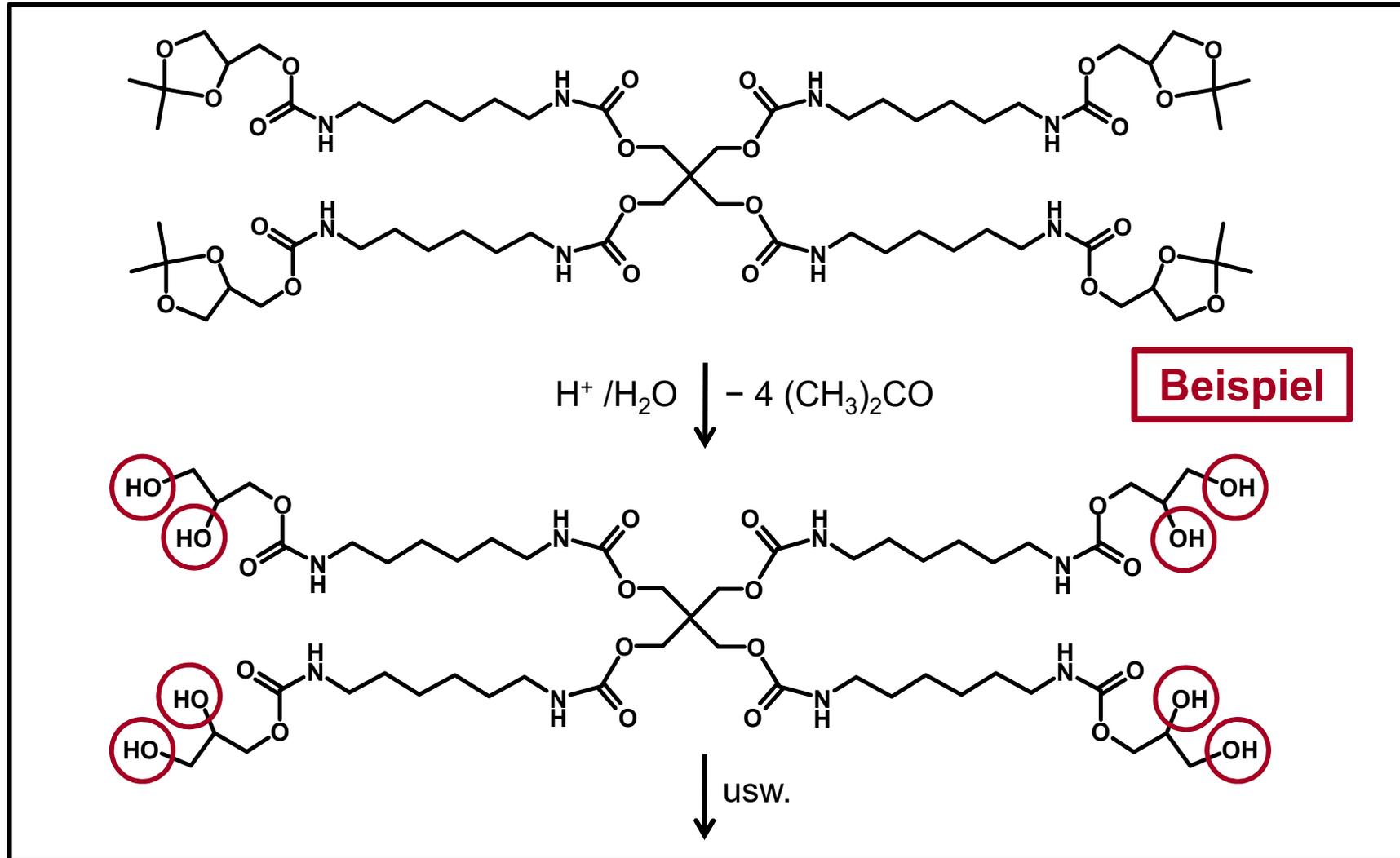
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Divergenter Aufbau eines vernetzenden-Oligools:



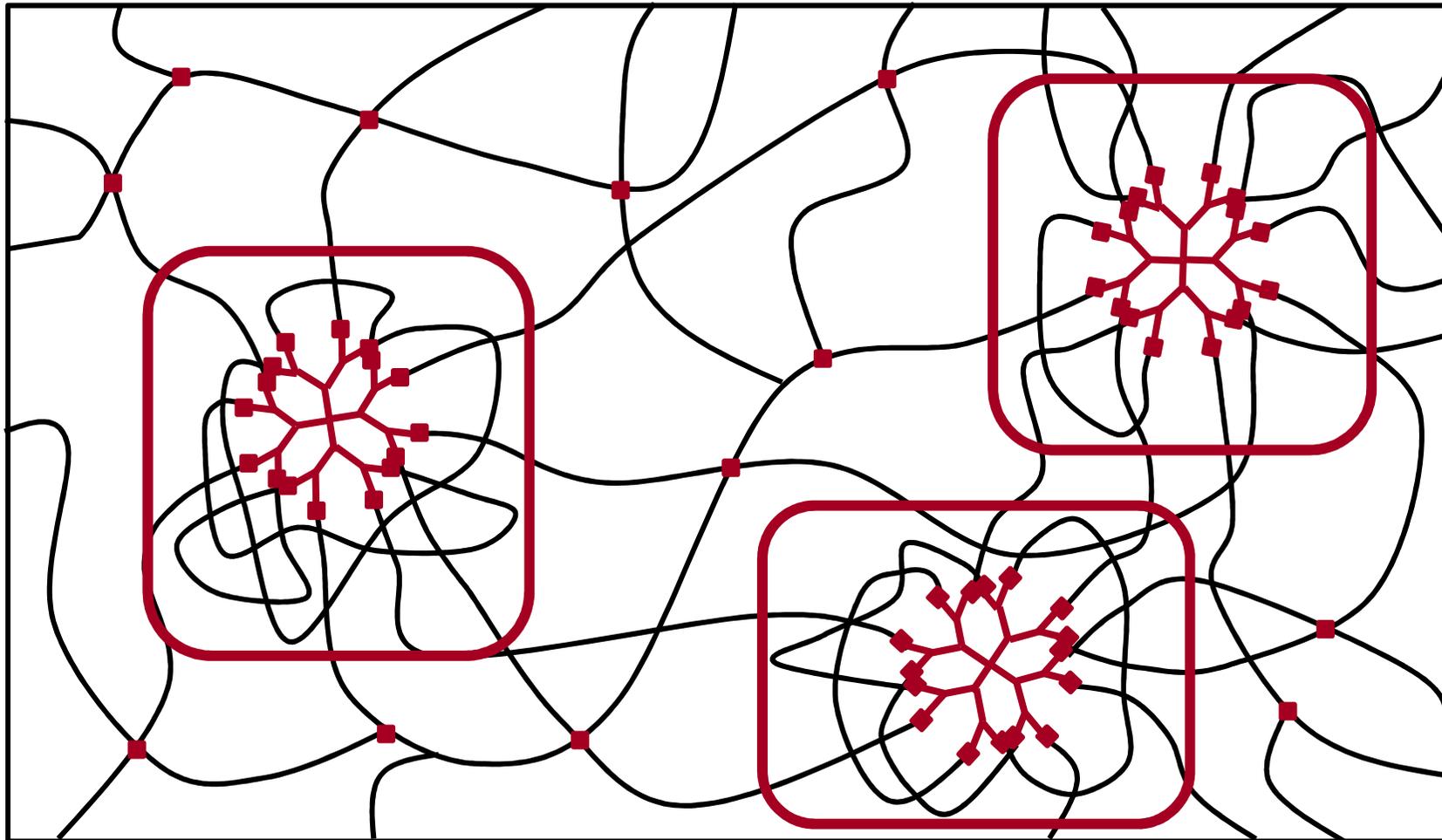
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Divergenter Aufbau eines vernetzenden Oligools:



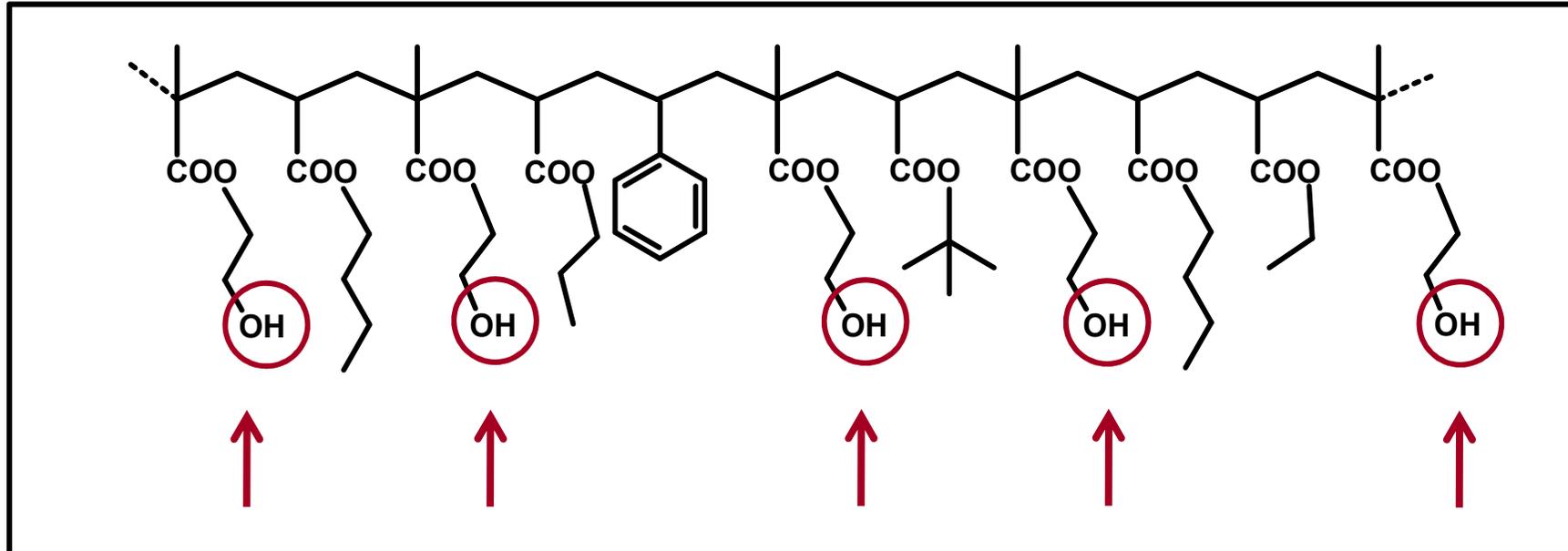
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Ausgehärteter Lackfilm, Zusatz von „dendrimerem Vernetzer“: Nanometer-Domänen hoher Netzwerkdichte.

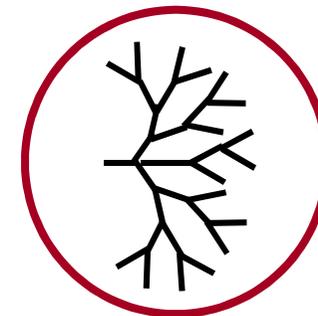


Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

OH-funktionelles Polyacrylat mit hoher OH-Zahl:

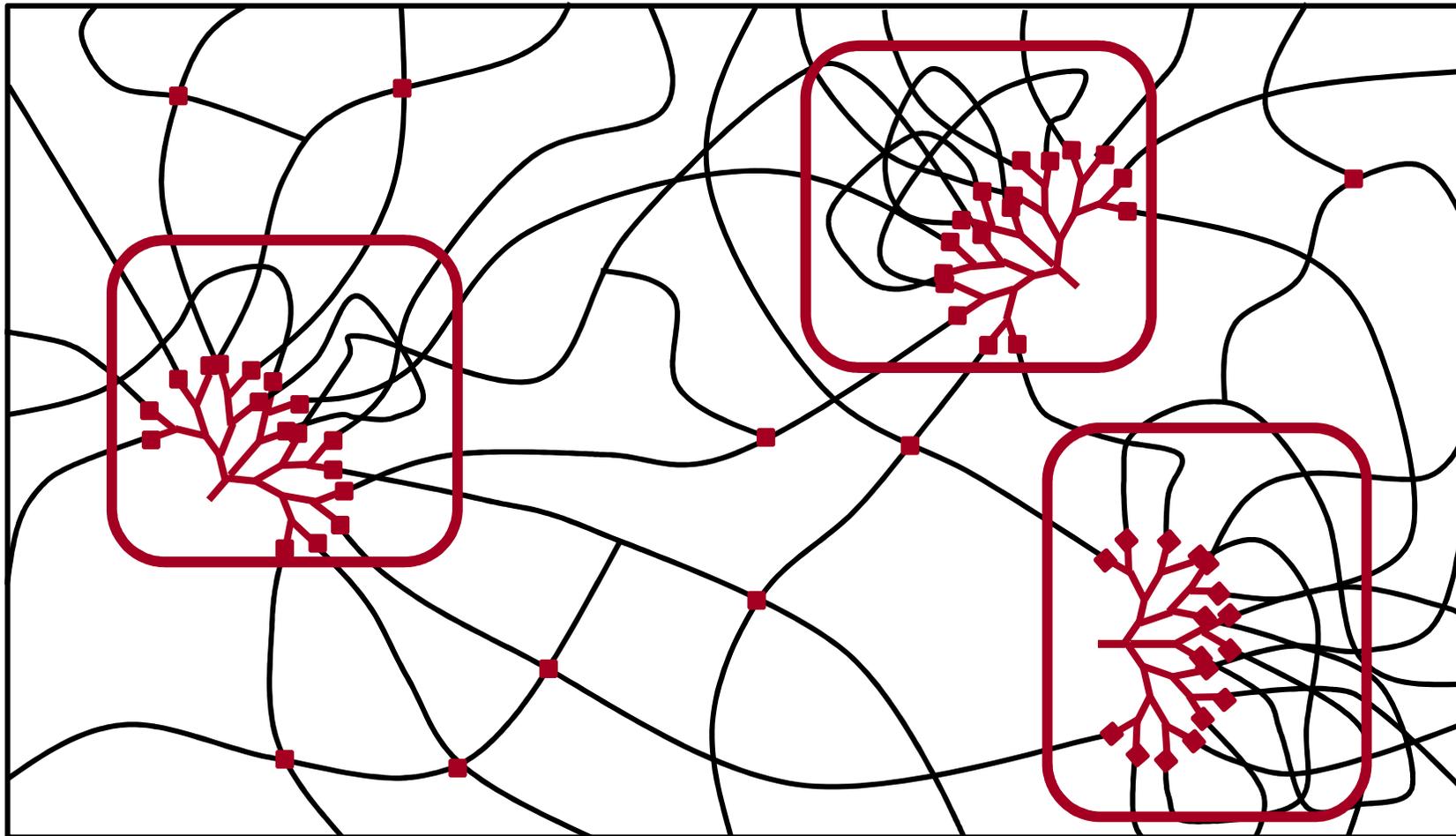


Multi-N=C=O-funktioneller,
hochverzweigter Vernetzer



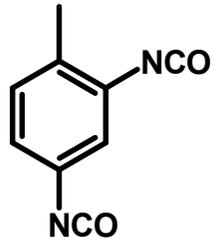
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Ausgehärteter Lackfilm, Zusatz von "Hyperbranched Crosslinker" Nanometer-Domänen hoher Netzwerkichte.

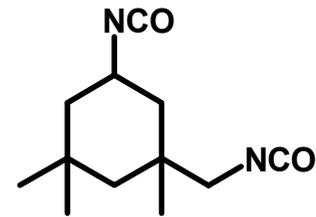


Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

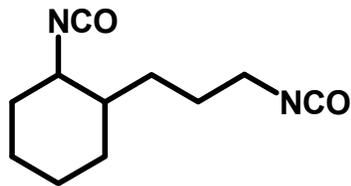
Hochverzweigte Vernetzer; Technische Diisocyanate:



TDI



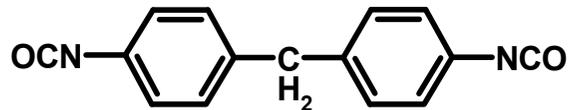
IPDI



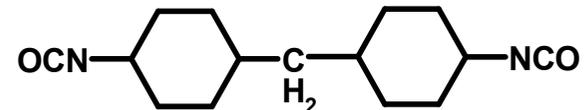
IPCI



HDI



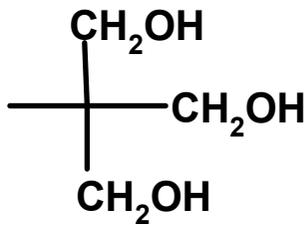
MDI



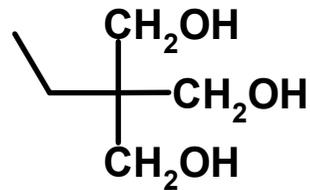
HMDI

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

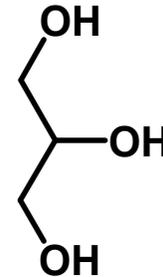
Hochverzweigte Vernetzer; Technische Tri-Alkohole:



1,1,1-Trimethylol-ethan (**TME**)



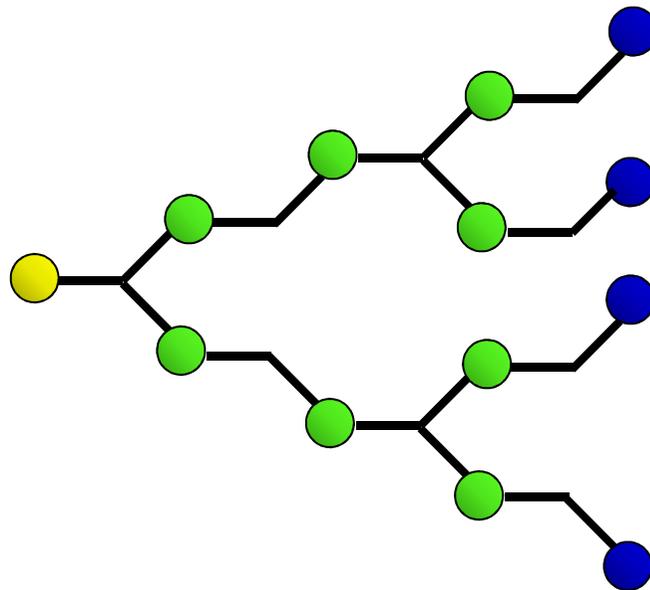
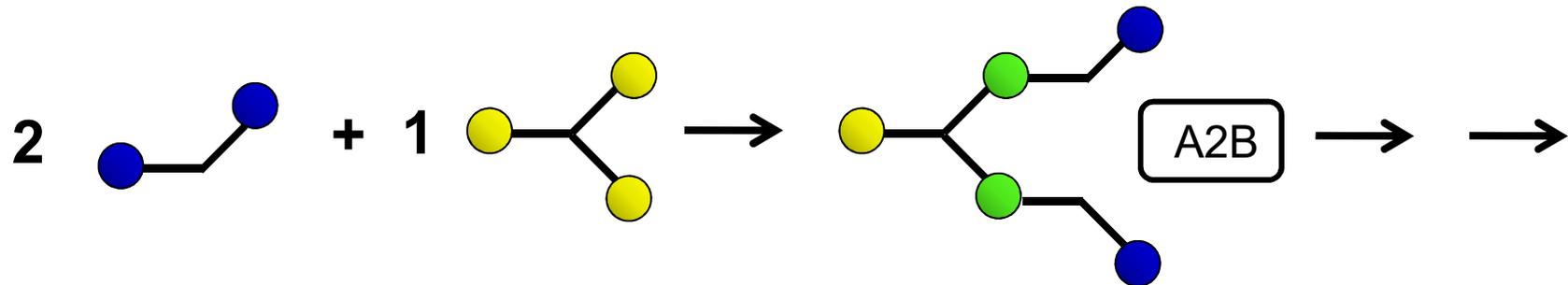
1,1,1-Trimethylol-propan (**TMP**)



Glyzerin

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Hochverzweigte Isocyanat-Vernetzer: Eintopfsynthese eines Oligo-Isocyanates, erste Schritte (idealisiert):



A4B

	—N=C=O
	—OH
	—O—CO—NH—

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

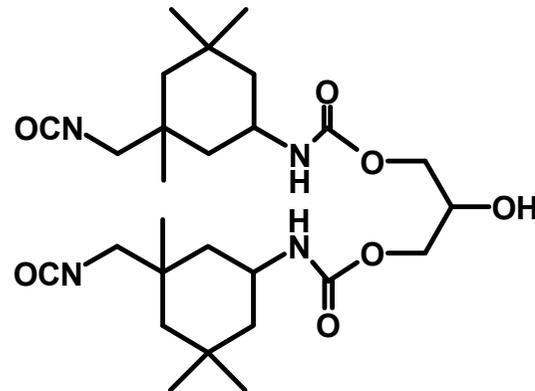
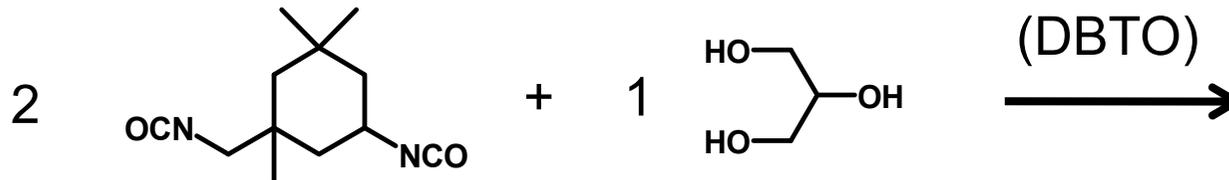
Hochverzweigter Vernetzer: „Eintopfsynthese“ von Lack-härtenden Oligo-Isocyanaten:

1. 2,0 Mol diisocyanate is dissolved in 500 ml THF.
2. Dry nitrogen is bubbled through the liquid, the solution is cooled down to 0°C.
3. 1,0 Mol Triol in 250 ml THF is added below 5°C.
4. 30 Minutes stirred at 0-5°C, then 0,1 g dibutyltindilaurate in 10 ml THF is added and temperature elevated to 60°C.
5. 0,08 Mol diisocyanate in 20 ml THF is added and the mixture stirred at 60°C. THF is removed at 80°C in an rotary evaporator.

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

**Hochverzweigter Vernetzer: IPDI + Glycerin (2 : 1).
Eintopfsynthese eines Oligo-Isocyanates;
Erste Schritte (Idealisiert):**

Beispiel



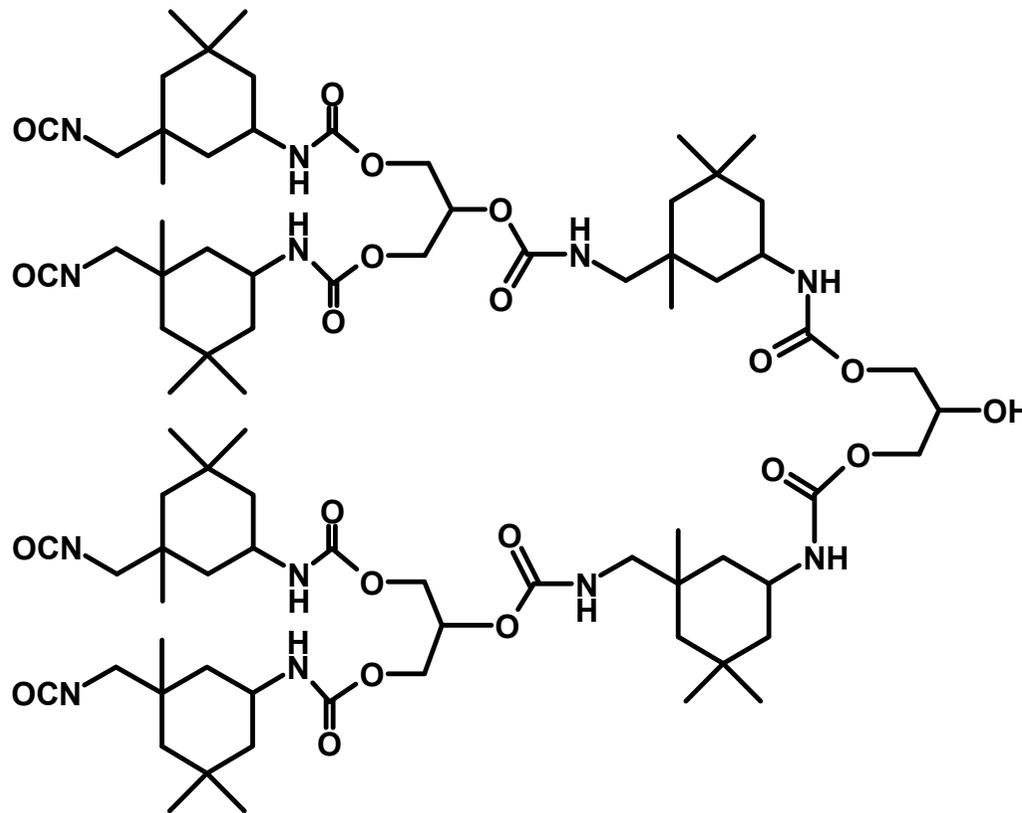
A2B-Baustein

$\longrightarrow \longrightarrow$
(DBTO: Dibutylzinnoxid)

Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

**Hochverzweigter Vernetzer: IPDI + Glyzerin (2 : 1).
Eintopfsynthese eines Oligo-Isocyanates;
Folgeschritt (Idealisiert):**

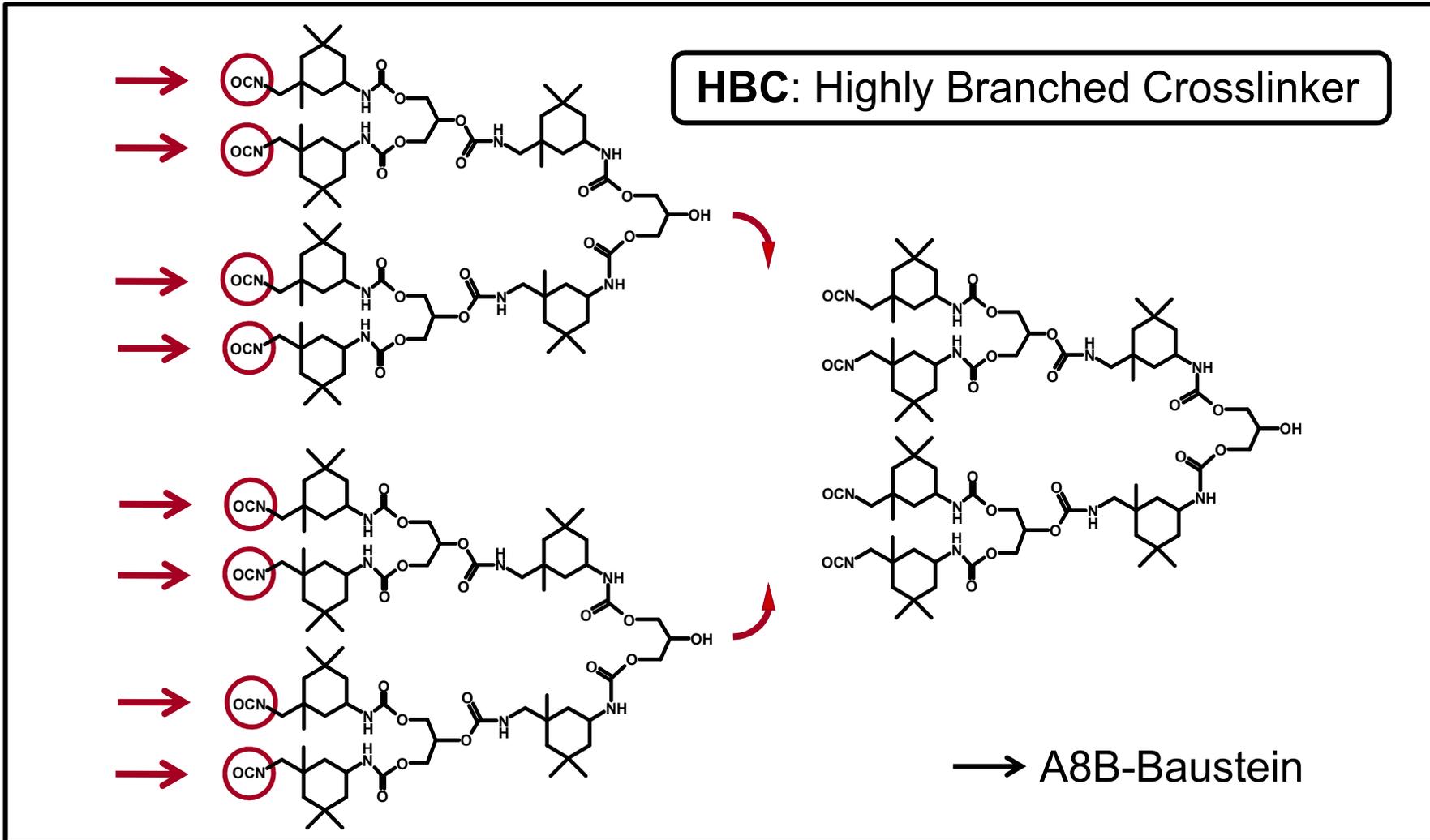
Beispiel



A4B-Baustein

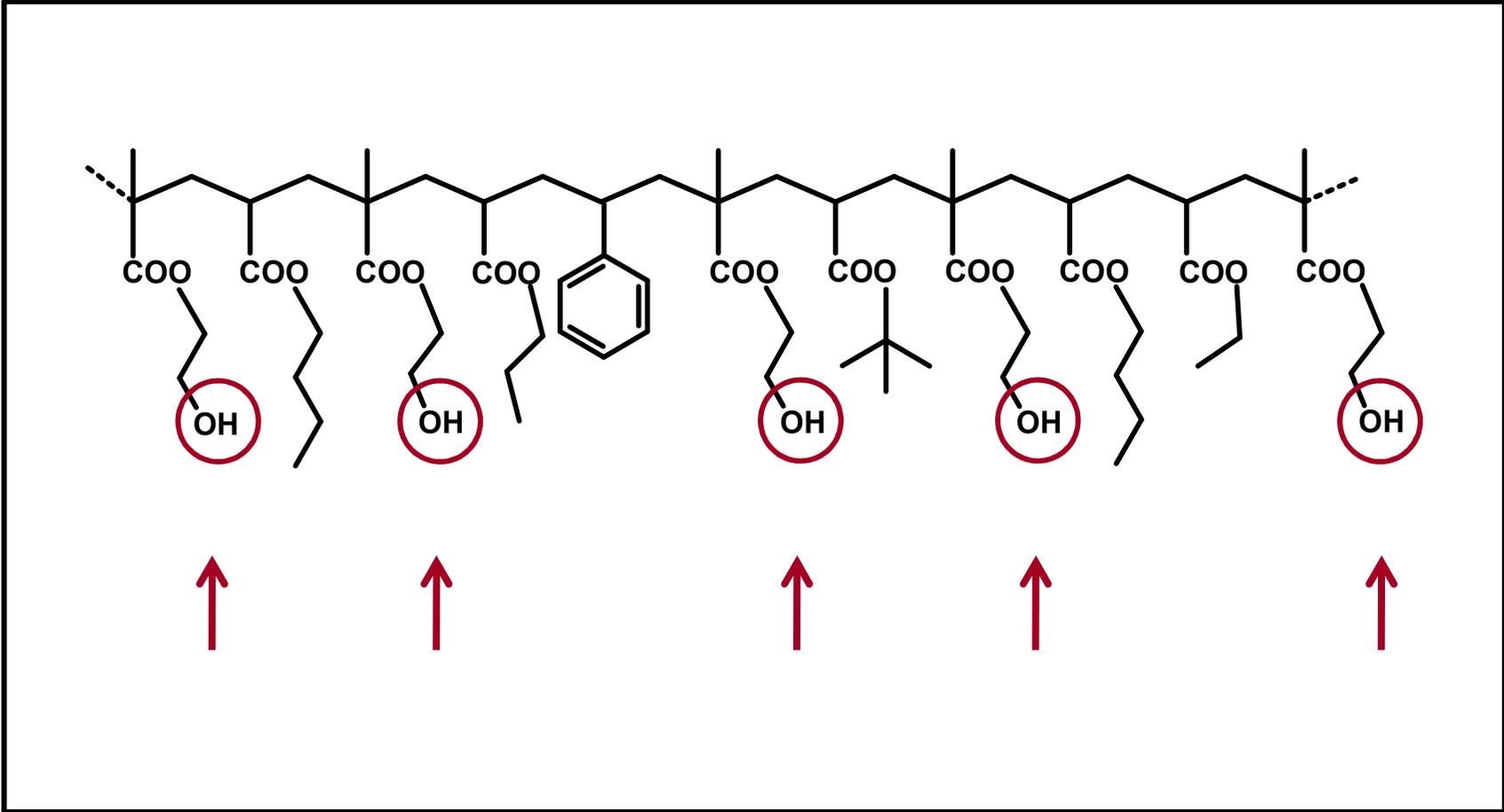
Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

Verzweigter Oligoisocyanat-Vernetzer per Eintopf-Synthese (Idealisierte Reaktionskaskade, IPDI / Glyzerin = 2 : 1):



Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

OH-funktionelles Polyacrylat mit hoher OH-Zahl:

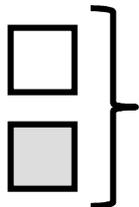


Hochelastische Klarlackierungen für die Automobilproduktion

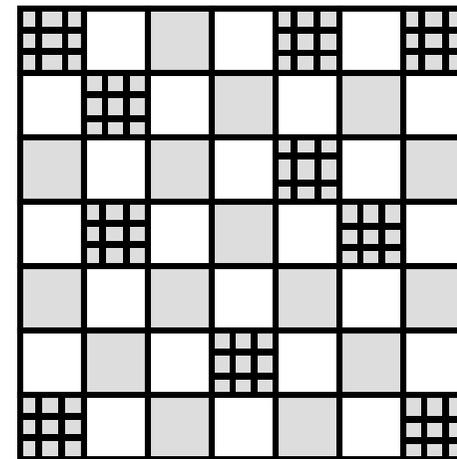
Ausgehärteter Lackfilm, Zusatz von "Hyperbranched Crosslinker": Nanometer-Domänen mit hoher Netzwerkdichte (→ Strukturschema).



„Hartes“, hoch vernetztes
Strukturelement (≈ 10 nm).

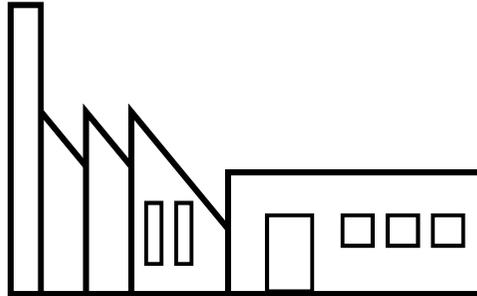


„Weiche“, weniger stark
vernetzte Strukturelemente.



Die Firma, in der die zugehörige Lackentwicklung stattfinden soll.

FuE-Projekt „Hochelastische Klarlackierungen...“



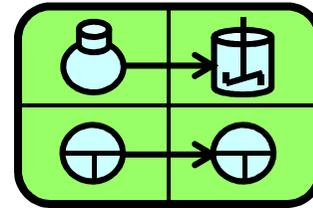
Das Lack- und Chemieunternehmen „[...] GmbH 1“:

Größerer, mittelständischer Betrieb: Weltweit 1270 Mitarbeiter, davon 25 Chemiker, 37 Ingenieure (FH), 19 Ingenieure (TU).

Eigene Forschung und Entwicklung, eigene Produktionsanlagen für Lackpolymere und aus diesen hergestellte Lacke. Seit 15 Jahren aktiv auf dem Gebiet „Klarlacke für die Serienlackierung von Automobilen“.

Chemische Spezialität: Synthese „maßgeschneiderter“ OH-Polyacrylate.

FuE-Projektmanagement in der Chemieindustrie



Lerninhalt →

***P2: Nitrilase-katalysierte Synthese
einer chiralen α -Hydroxycarbonsäure.***

(„Weiße“ Biotechnologie).

Beispiel P2

Innovationsvorhaben P2:

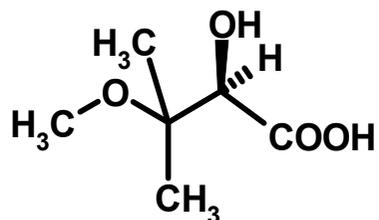
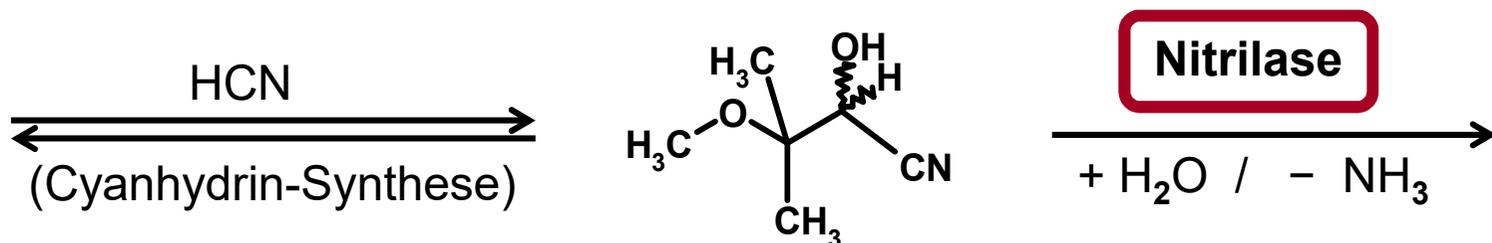
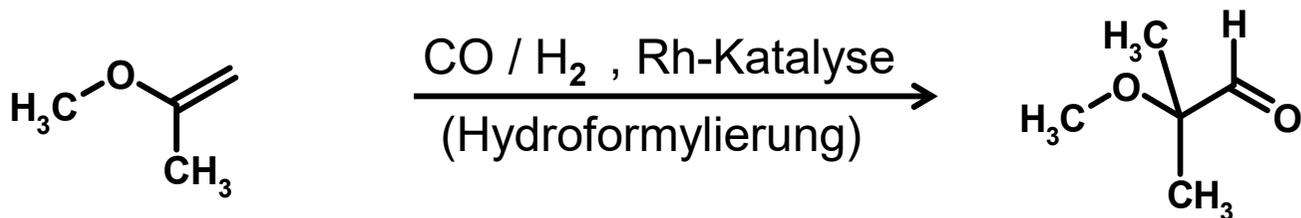


**„Nitrilase-katalysierte Synthese einer
chiralen α -OH-Carbonsäure“.**

(Chemie und Mikrobiologie)

(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

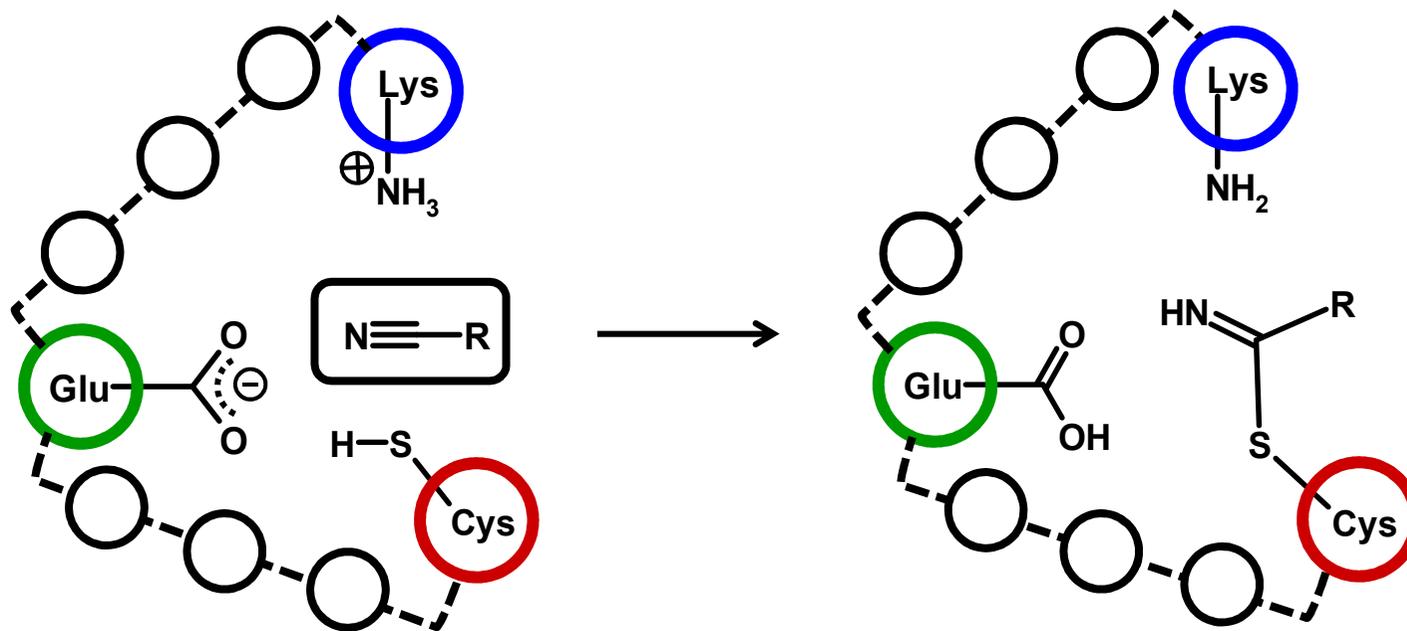
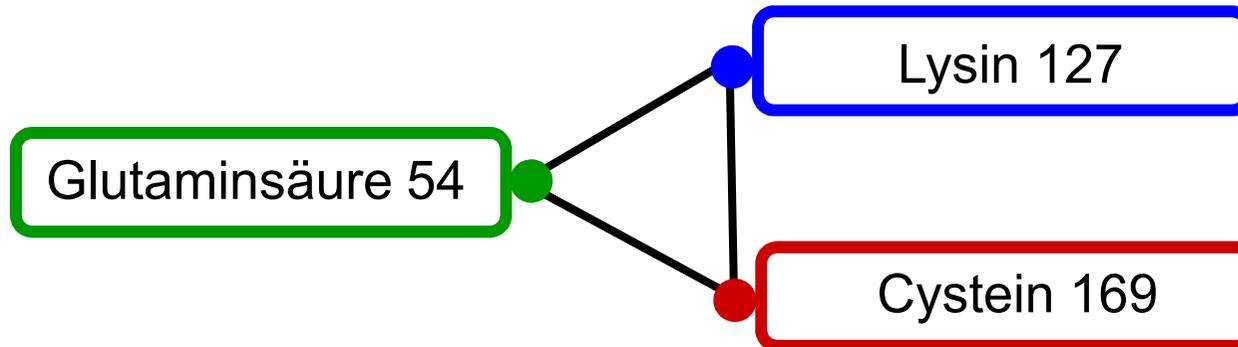
Stereospezifische Synthese des Moleküls in drei Stufen:



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Nitrilase A, Katalyse-Mechanismus: Nitril \longrightarrow Carbonsäure

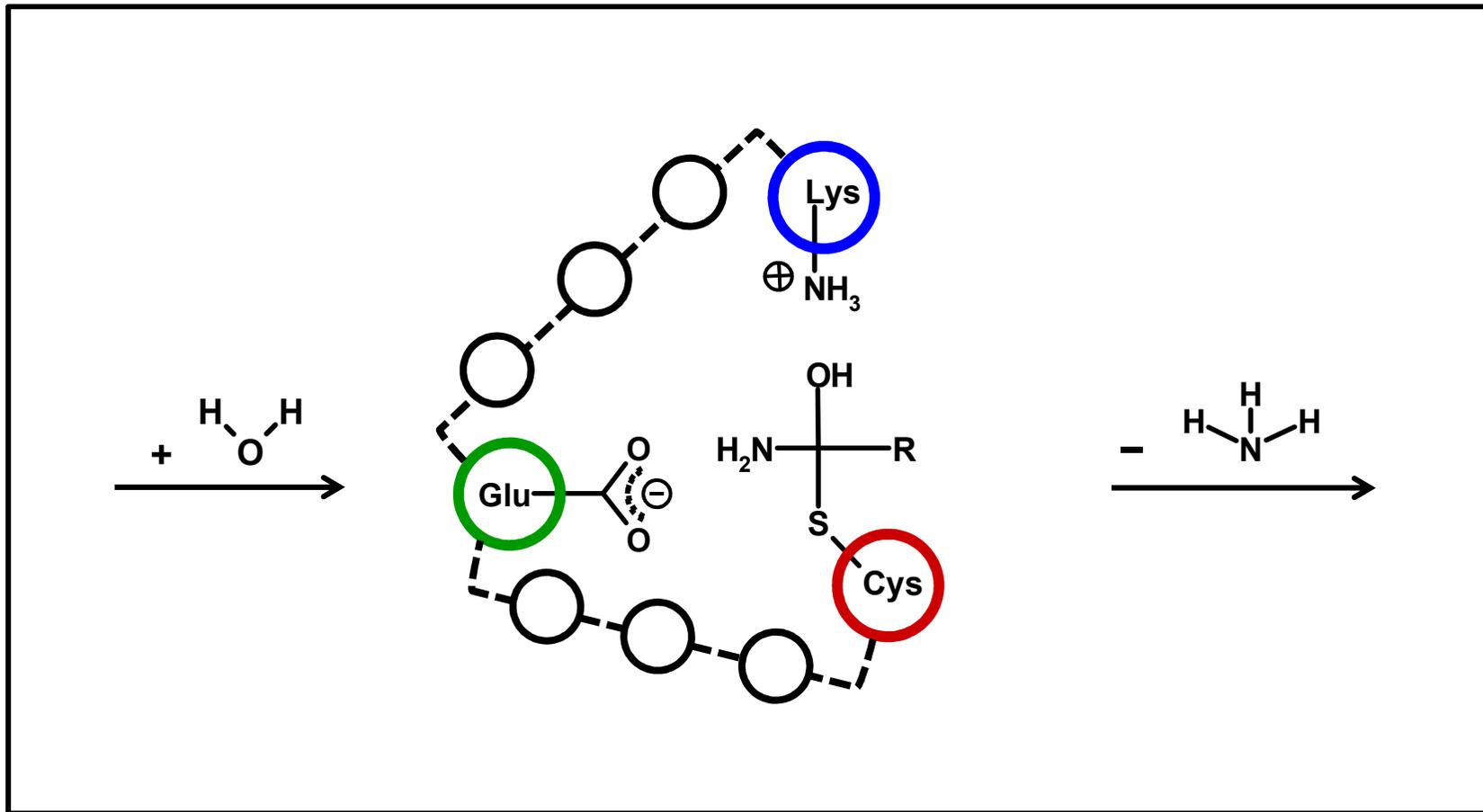
„Konservierte“ Aminosäuren; „Katalytische Triade“.



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Nitrilase A, Katalyse-Mechanismus: Nitril \rightarrow Carbonsäure.

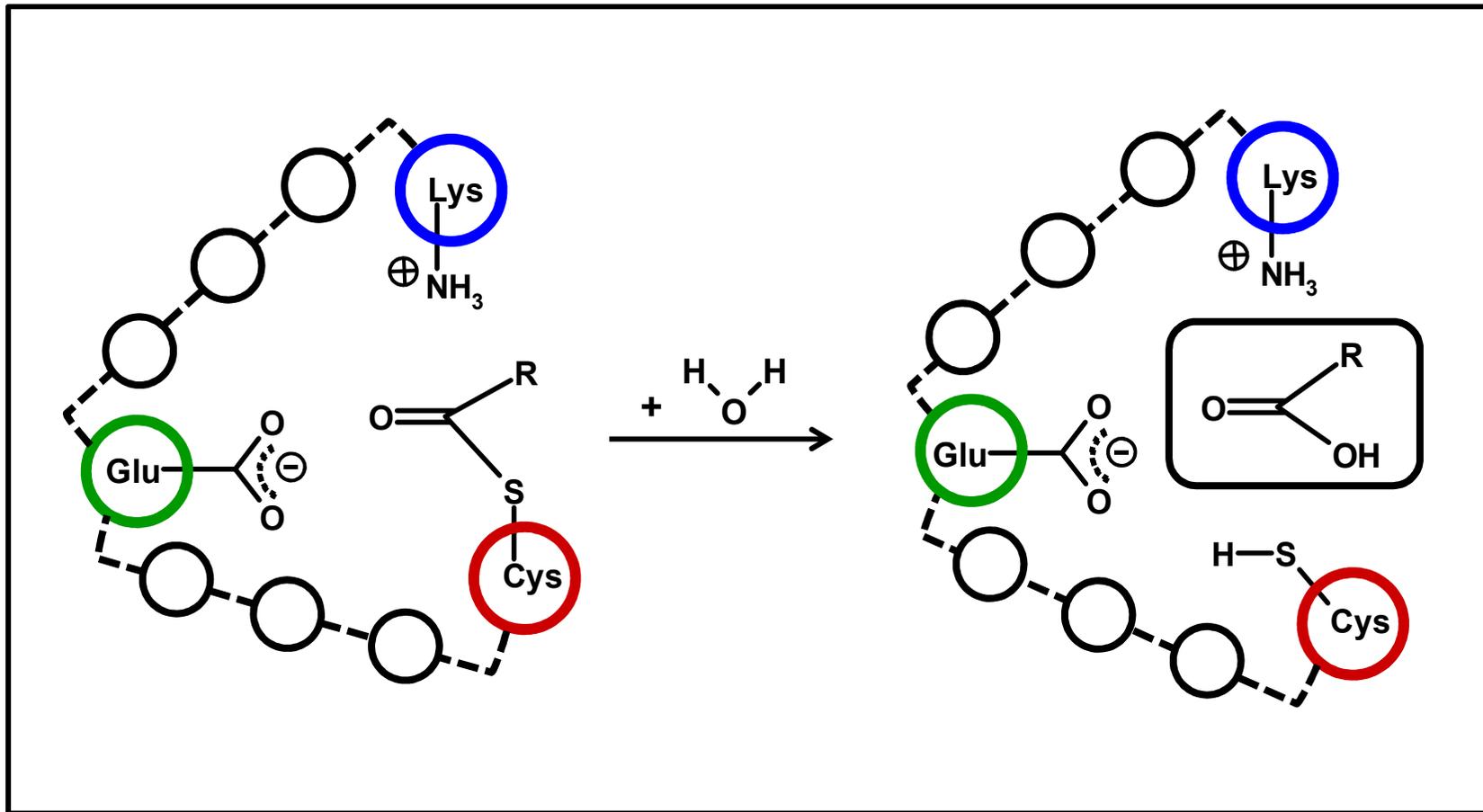
Nitrilase A: 320-340 Aminosäuren, α -Helixes, β -Faltblätter.



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

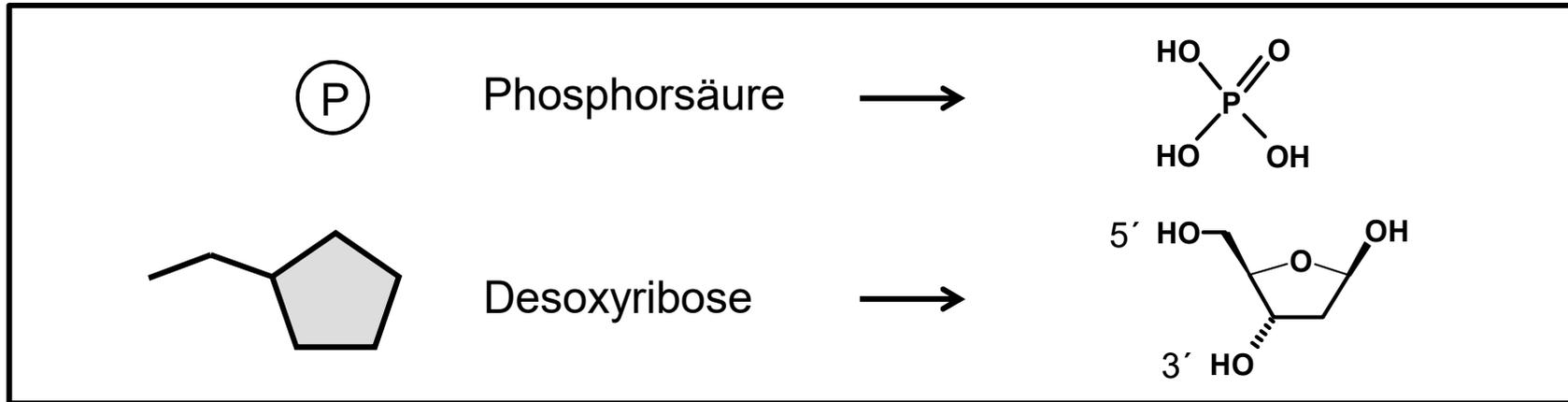
Nitrilase A, Katalyse-Mechanismus: Nitril \rightarrow Carbonsäure.

Nitrilase A: 320-340 Aminosäuren, α -Helixes, β -Faltblätter.

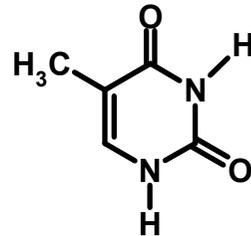


(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

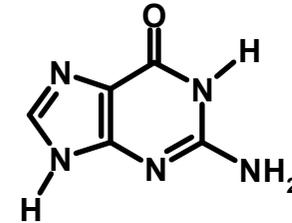
Nitrilase-codierende DNA-Abschnitte: Bausteine.



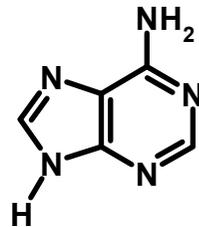
Thymin



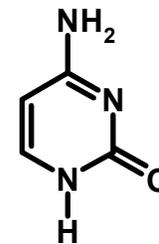
Guanin



Adenin

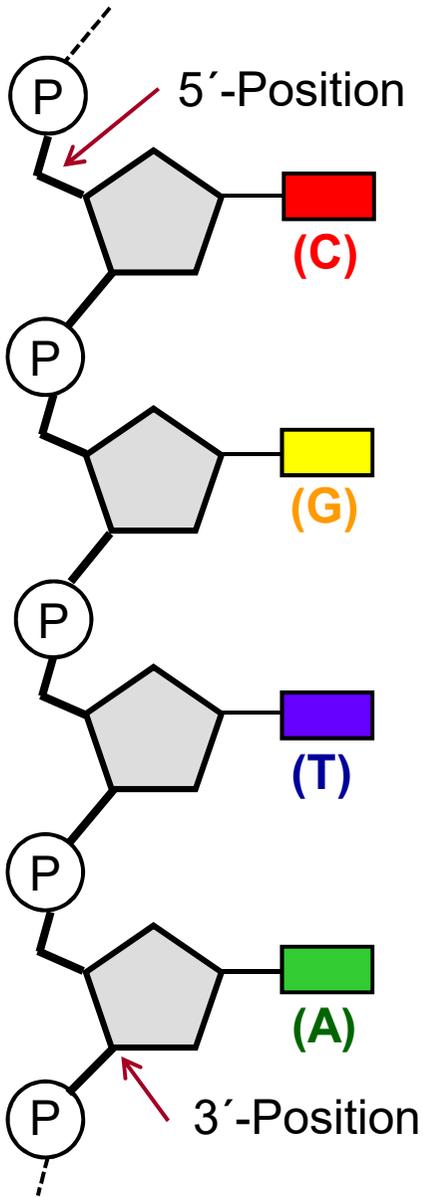


Cytosin



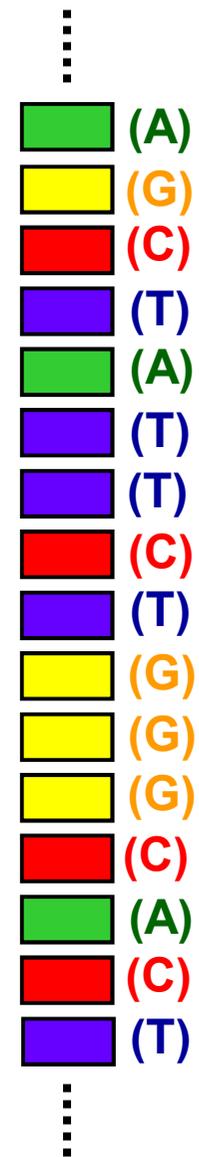
(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Oligonucleotid-Ausschnitt aus einem DNA-Einzelstrang:



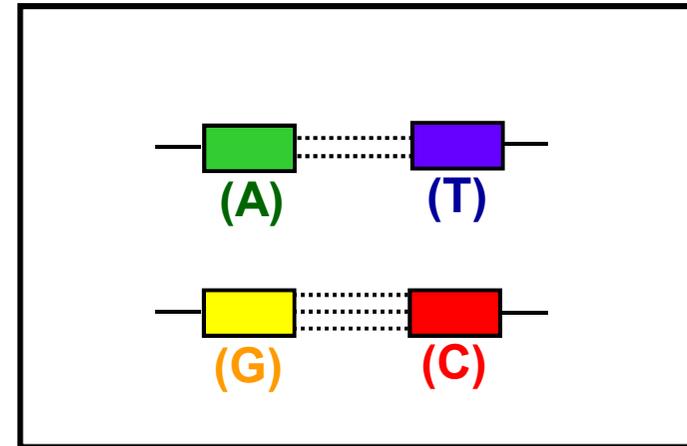
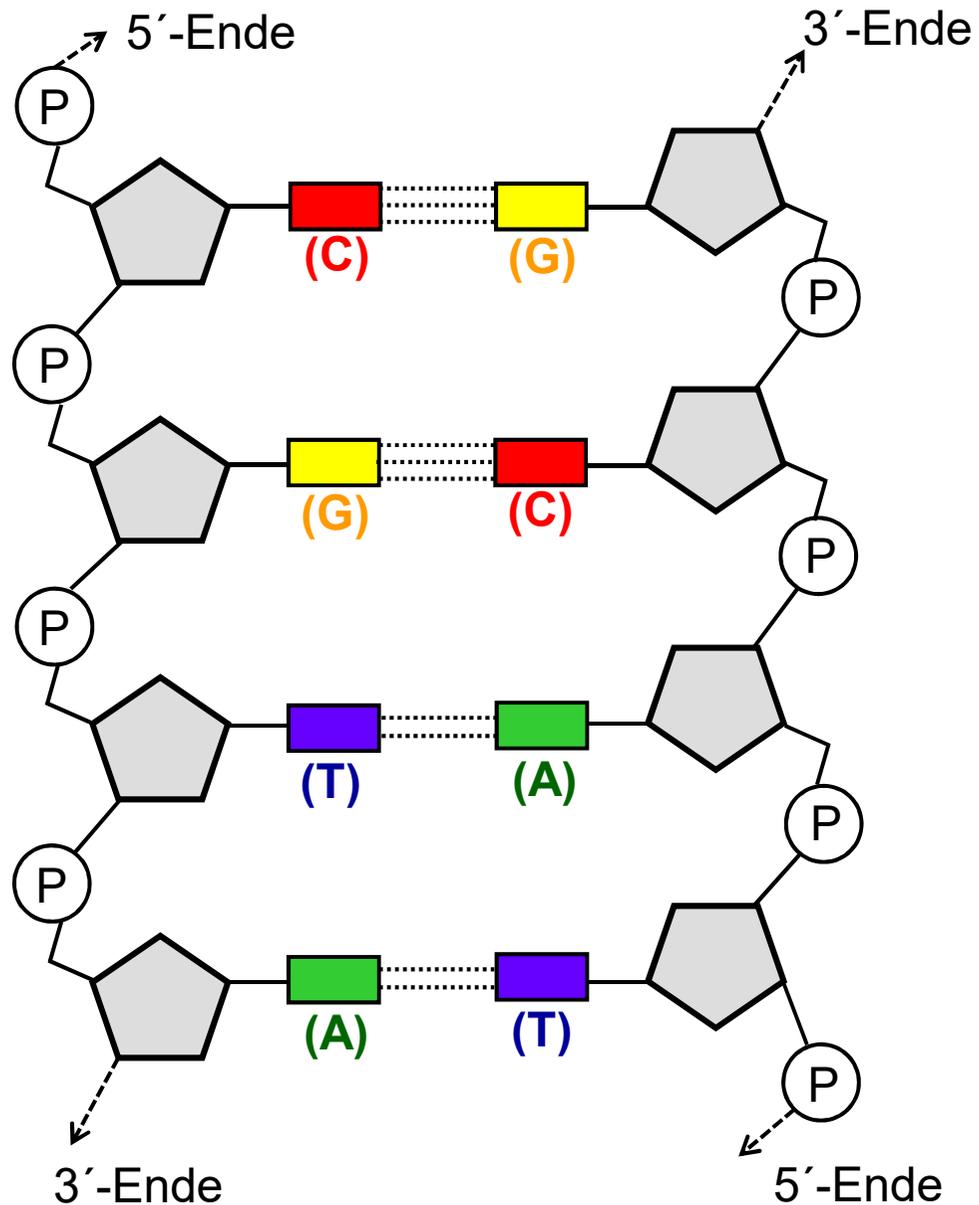
Der Oligonukleotid-Einzelstrang dient durch seine charakteristische **Abfolge der Basen** Adenin (A), Cytosin (C), Thymin (T) und Guanin (G) als **Informationsspeicher**.

Diese Sequenz ist die Basis für eine universelle Programmiersprache (Genetischer Code, u.a. auch der Code für die Proteinsynthese). **Das fixe „Rückgrat“** des Einzelstrangs, bestehend aus Phosphat- und Zuckerresten, **sorgt** durch seine kovalenten Bindungen **für die Stabilität der Information**.



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

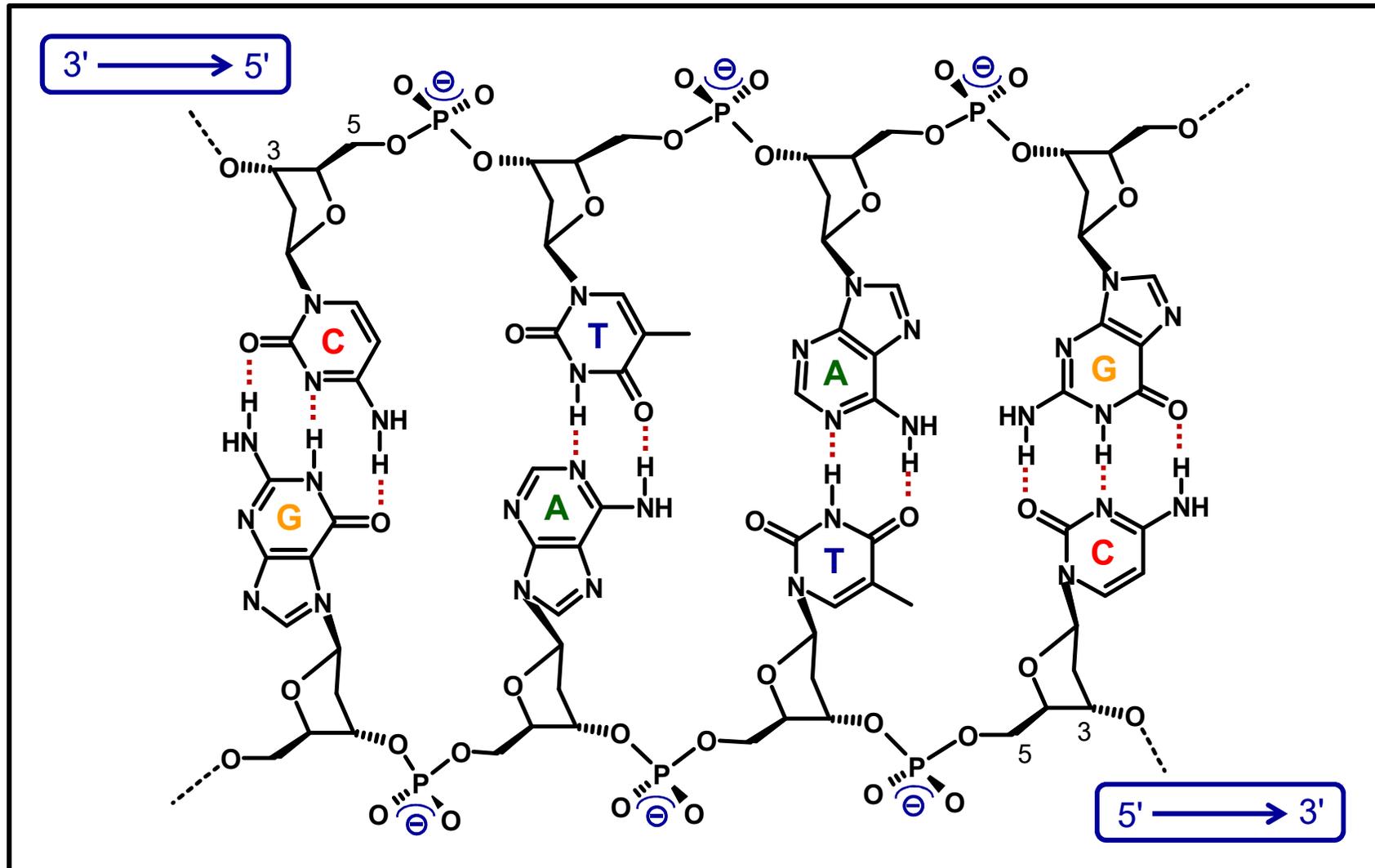
Oligonucleotid-Doppelstrang, DNA-Ausschnitt (Schema):



Komplementäre Basenpaare, deren paarweise Anordnungen sich über 2 oder 3 intermolekulare Wasserstoffbrücken stabilisieren.

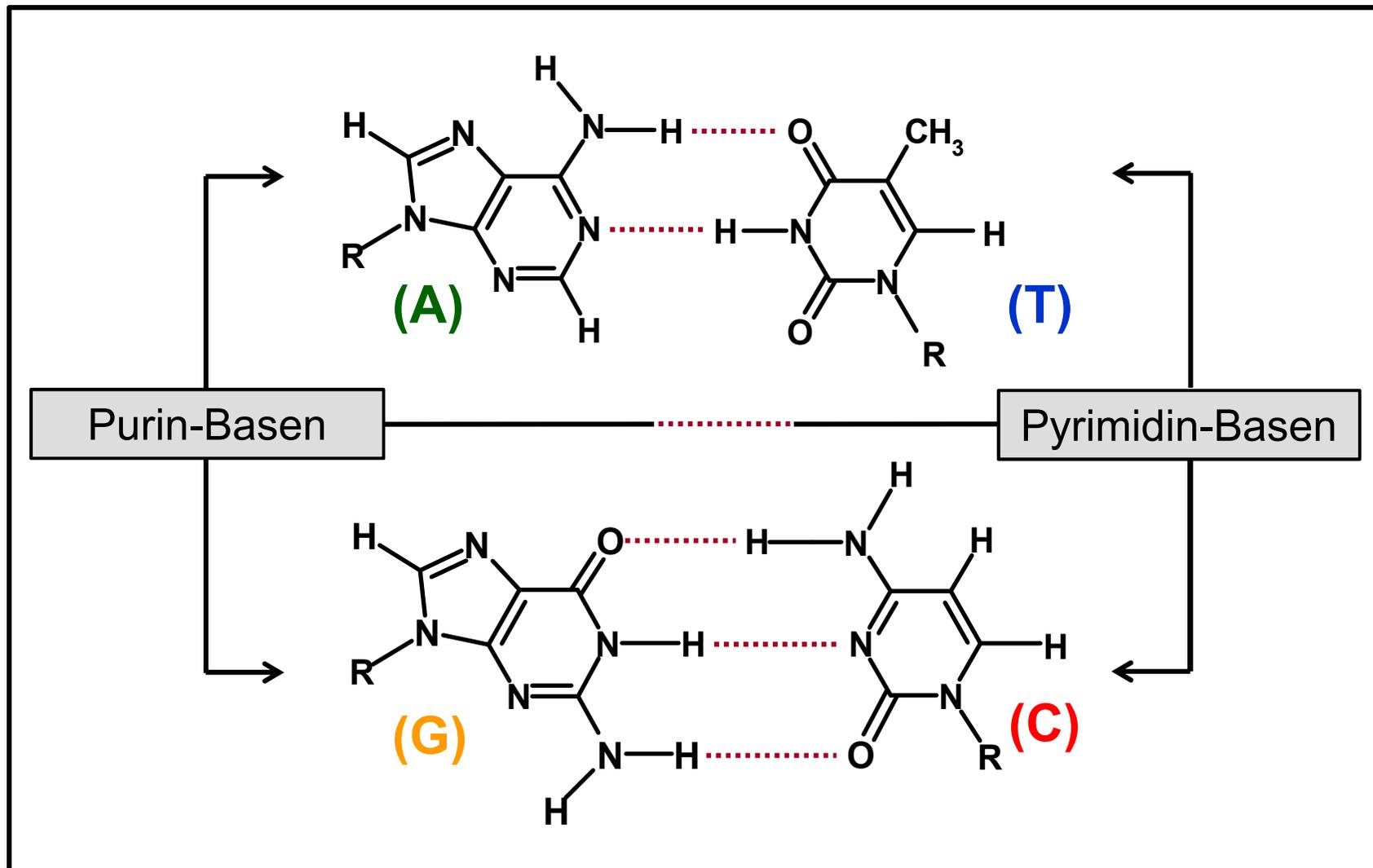
(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

DNA-Molekül (Ausschnitt), vereinfachte Darstellung:



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

H⁺-Brücken zwischen den komplementären DNA-Basen:

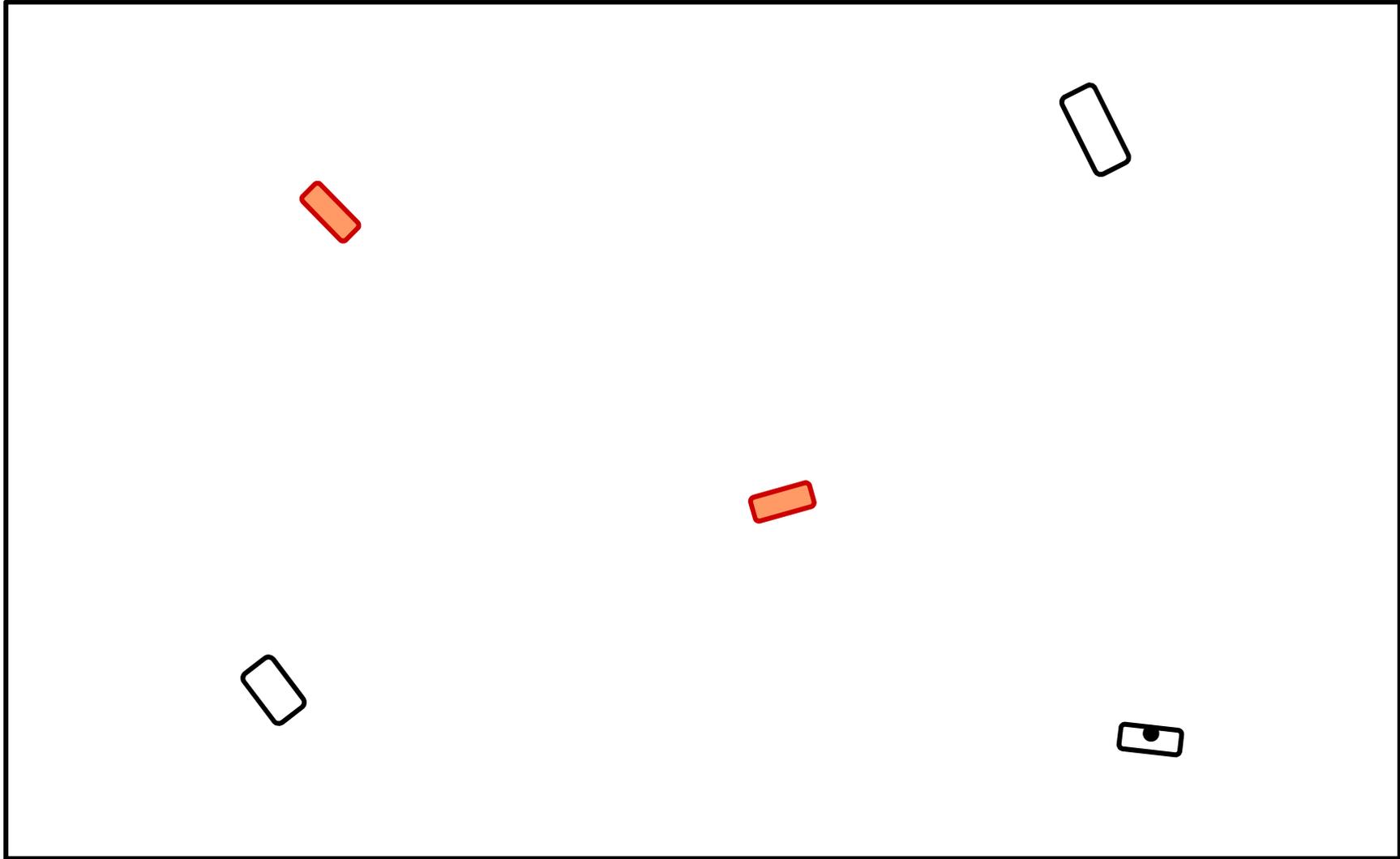


(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

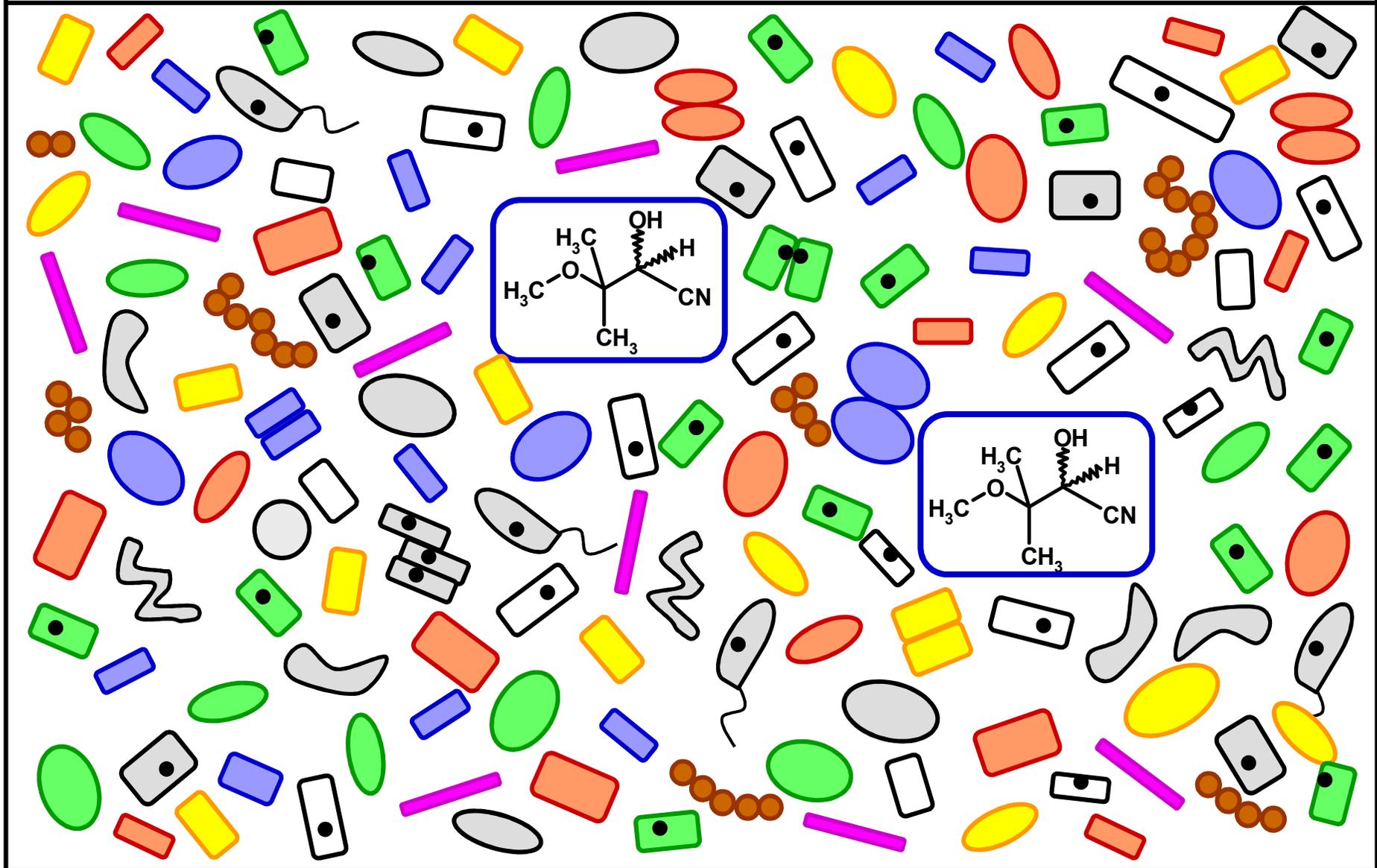
Biodiversität: Mikroben aus einer Bodenprobe.



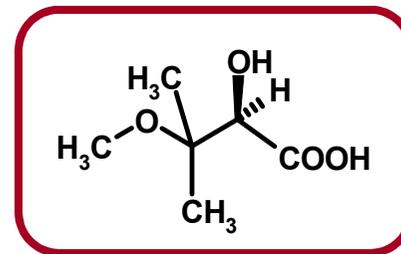
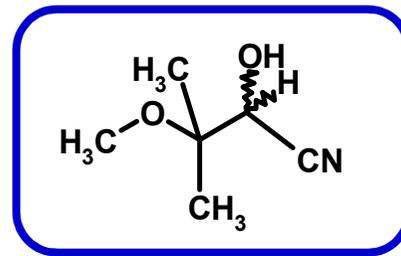
Nachteil: Maximal 3% davon lassen sich im Labor oder im Technikum erfolgreich kultivieren und vermehren!



„Fütterung“ mit 2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butyronitril
als einziger Stickstoff- und Kohlenstoffquelle.

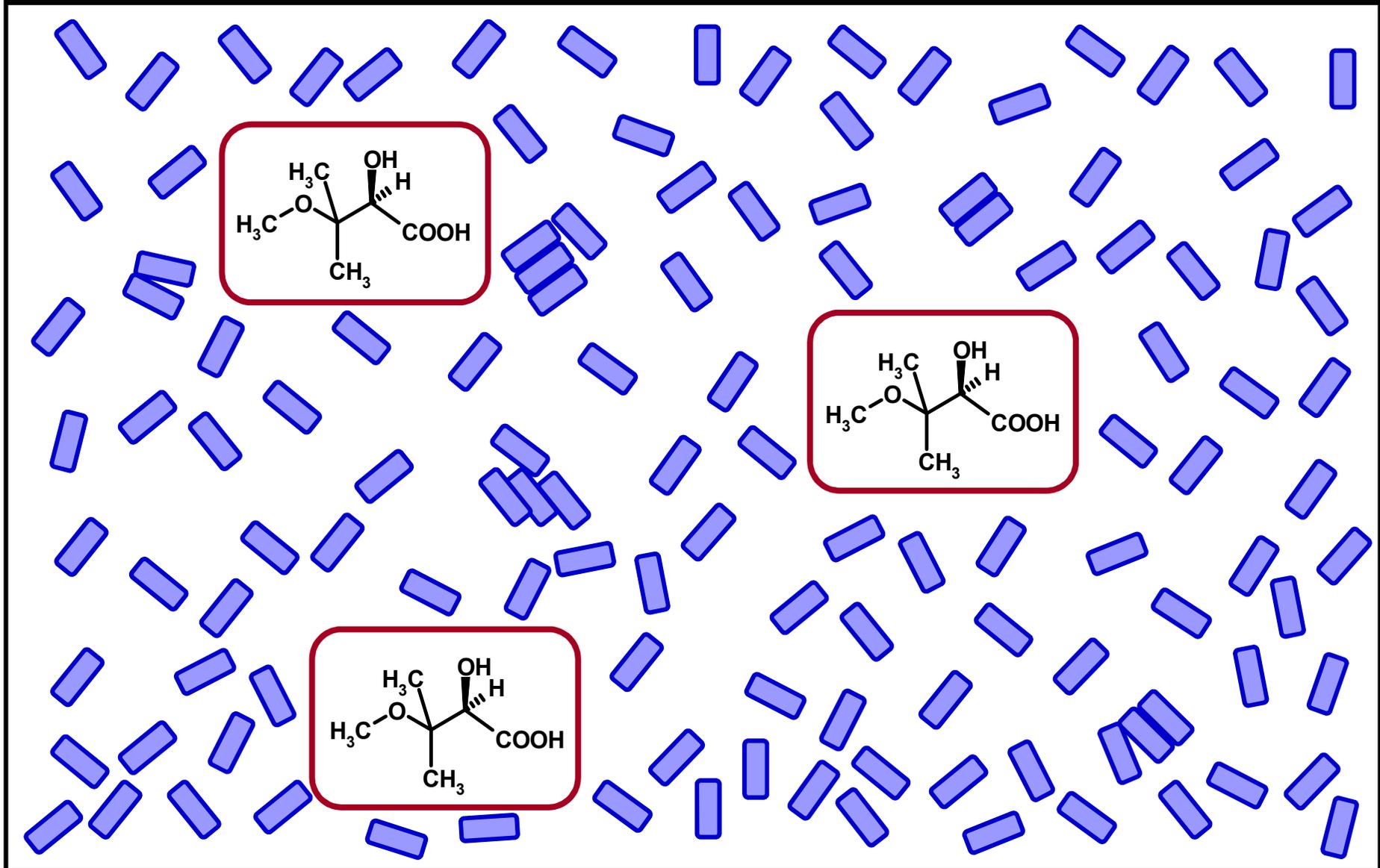


"Survival of the fittest". Diese könnten, u.a. mittels Nitrilase, (R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure produzieren.



„Anreicherungskultur“: f(pH, T, Konz. [C], etc.) →

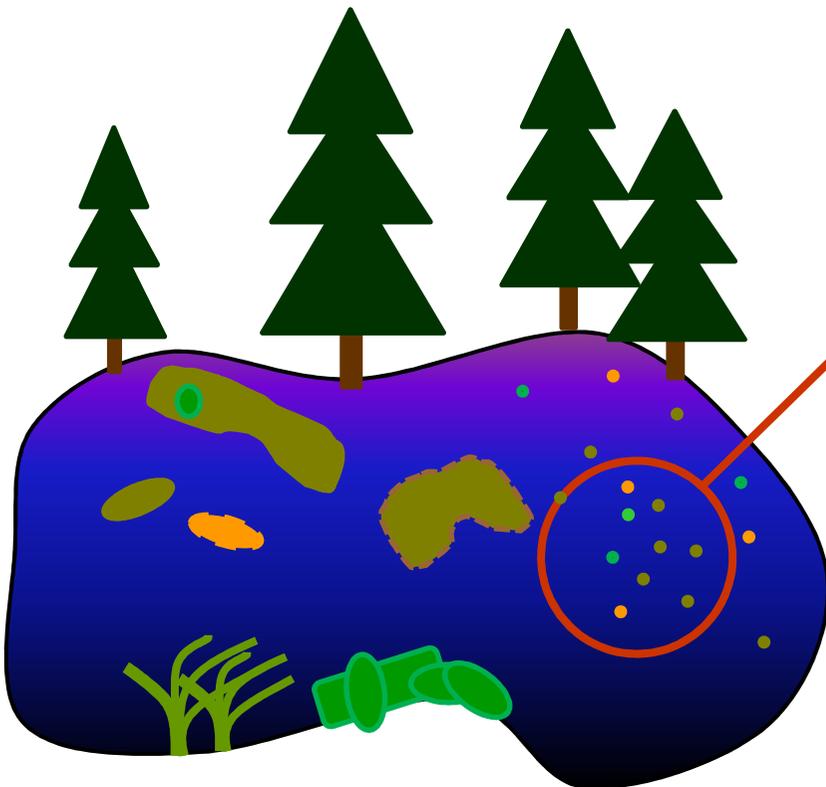
"Survival of the fittest". Diese könnten, u.a. mittels Nitrilase, (R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure produzieren.



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Mikroben aus einem Biotop; Metagenomgewinnung, Schritte:

1) **Entnahme/Aufbereitung** aller Mikroben eines Biotops (Wasserproben/Bodenproben).



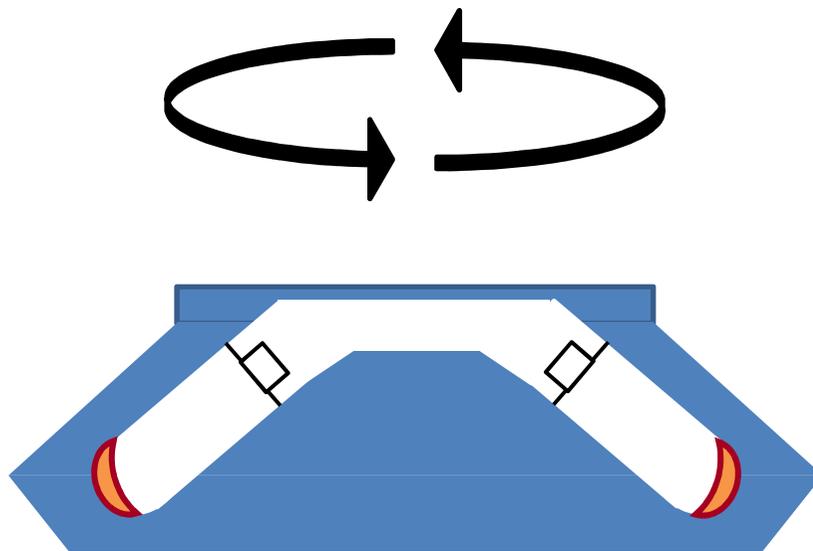
(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Mikroben aus einem Biotop; Metagenomgewinnung, Schritte:

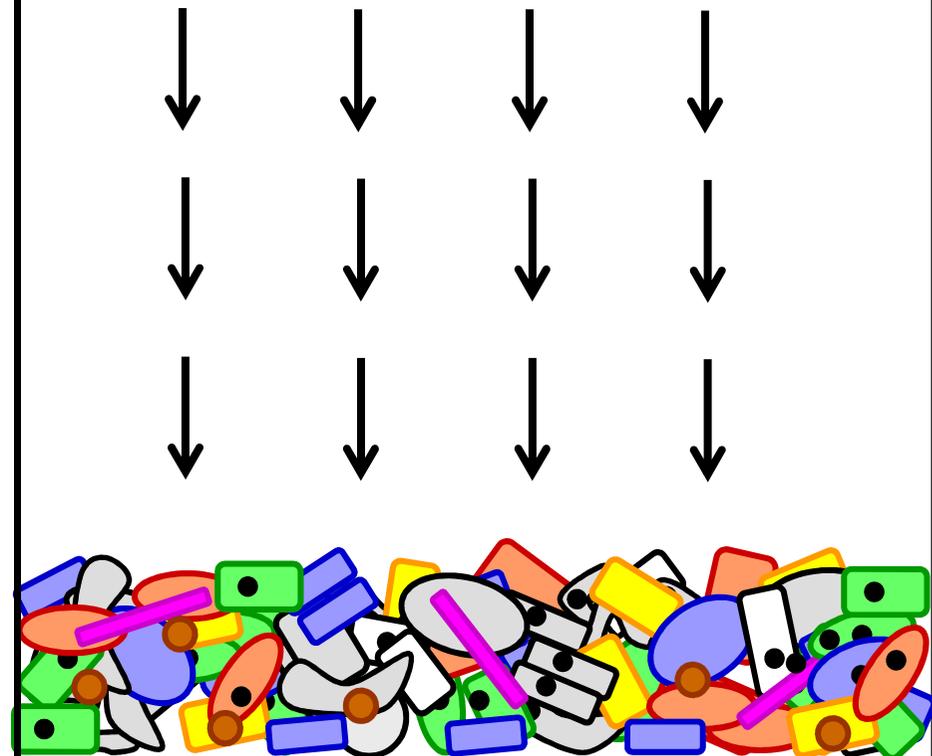
2) Zentrifugierung:

10 Minuten bei 8000 Umdrehungen pro Minute.

Sedimentation aller Mikroben aus der Probe des Biotops.



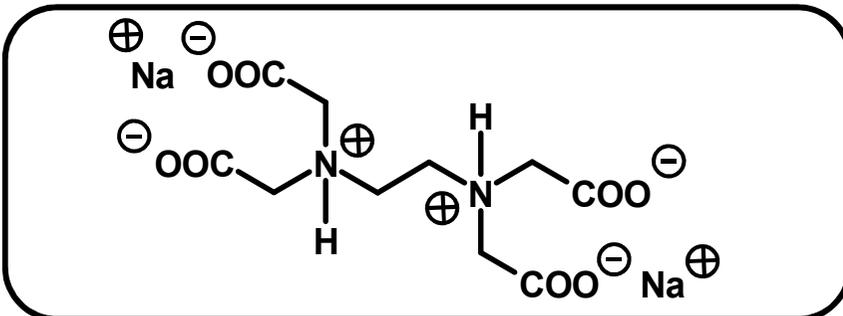
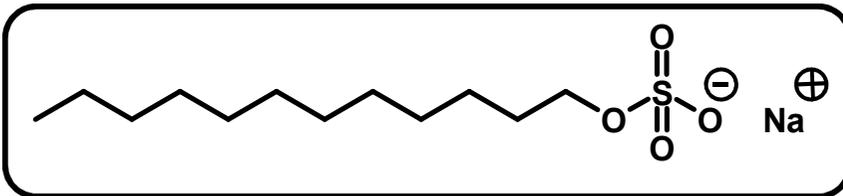
Zentrifugen-Rotor



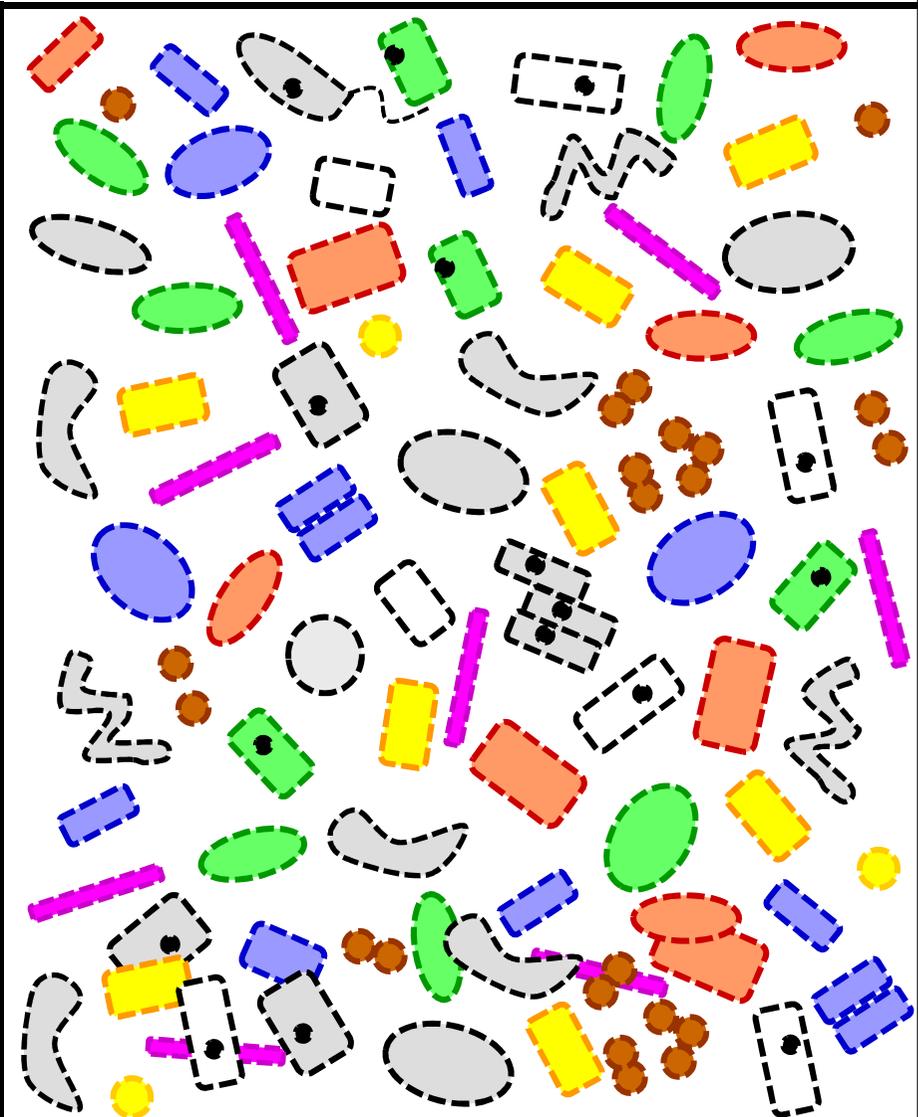
(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Mikroben aus einem Biotop; Metagenomgewinnung, Schritte:

3a) **(Chemische) Teil-Lyse** aller in Wasser suspendierten Zellen.

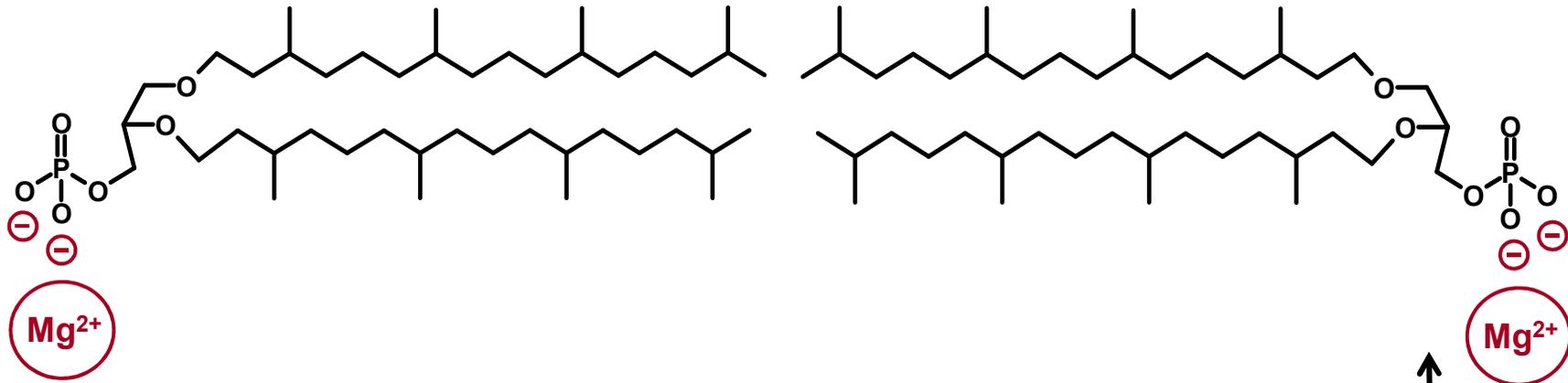


Lysozym: Hydrolytischer Abbau vernetzter Peptidoglykane (Mureine zur Stabilisierung der Zellwand)

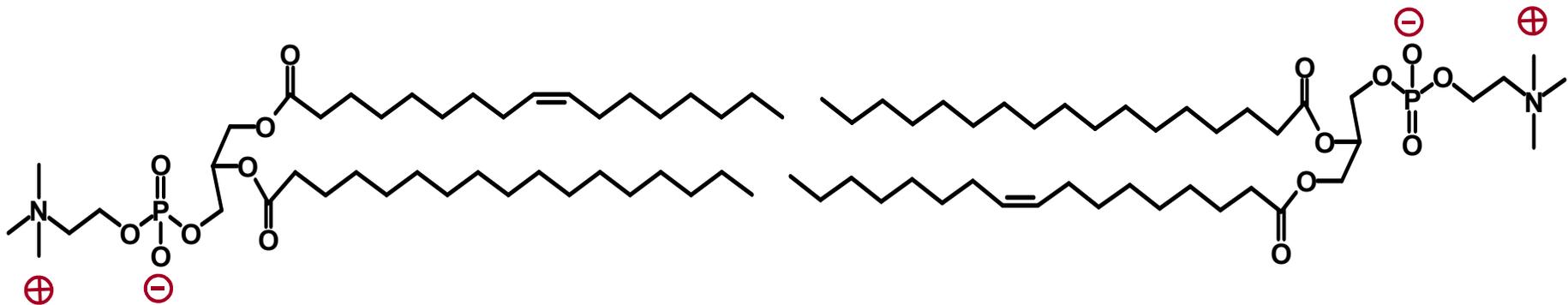


(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Zellmembran von Bakterien, Glycerin-diether/Glycerin-triester:



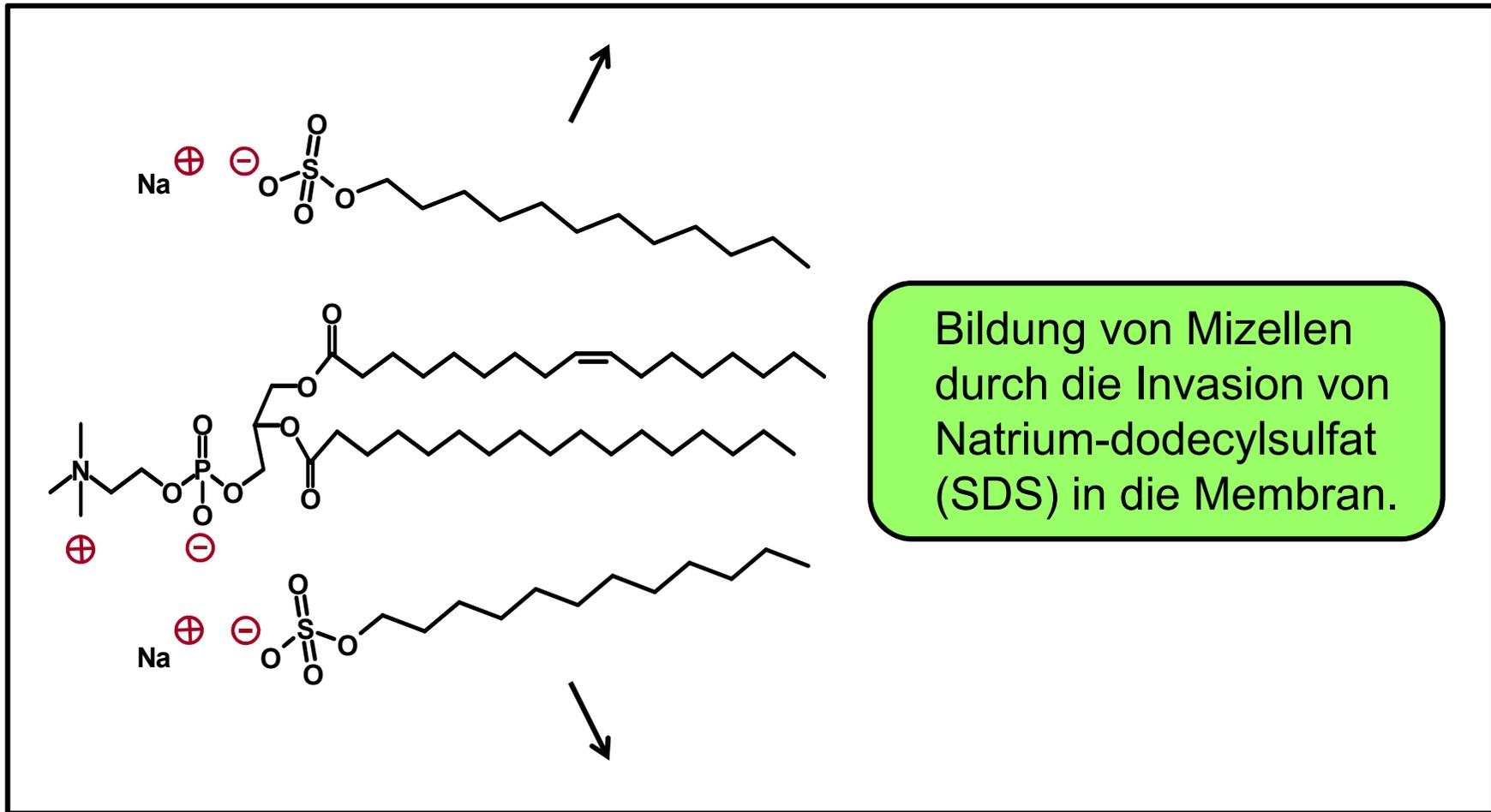
Doppelschicht aus zwei Glycerin-phytanyl-diethern



Zwitterionische Glycerin-triester

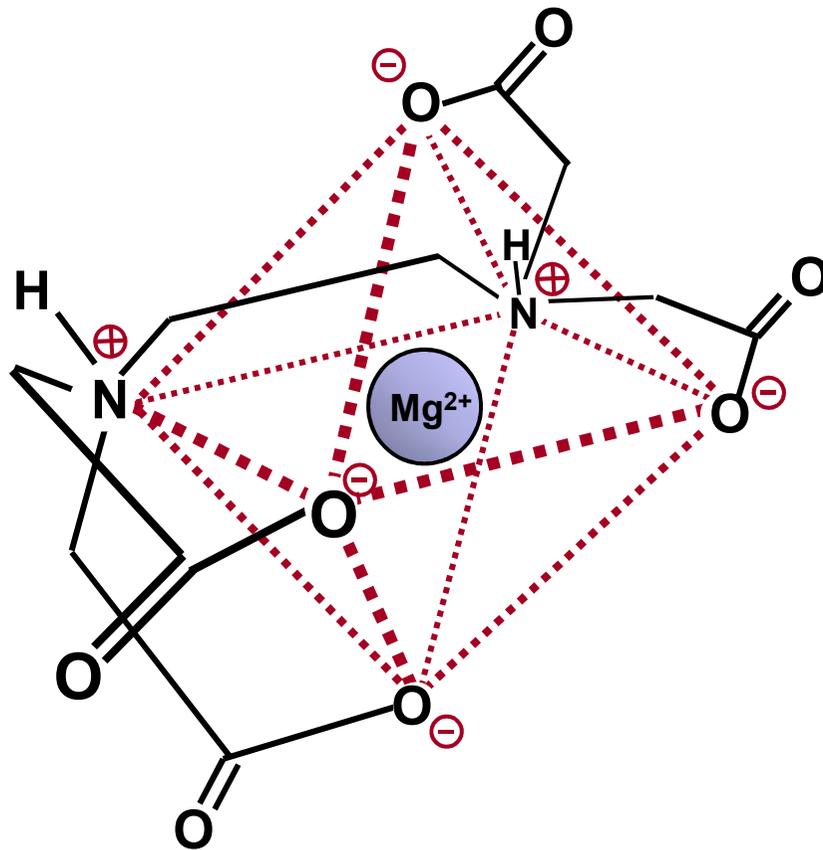
(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Mikroben aus einem Biotop, Lyse der Zellmembran (SDS):



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Mikroben aus einem Biotop, Lyse der Zellmembran (EDTA):

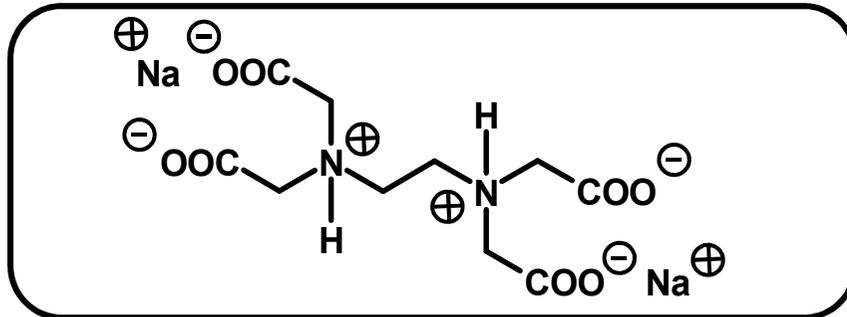
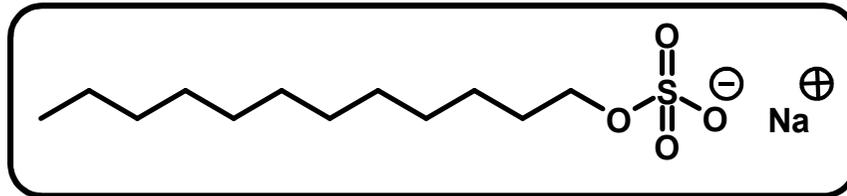


Bildung oktaedrisch koordinierter Magnesiumkomplexe mit Ethylen-diamin-tetraessig-säure (EDTA).

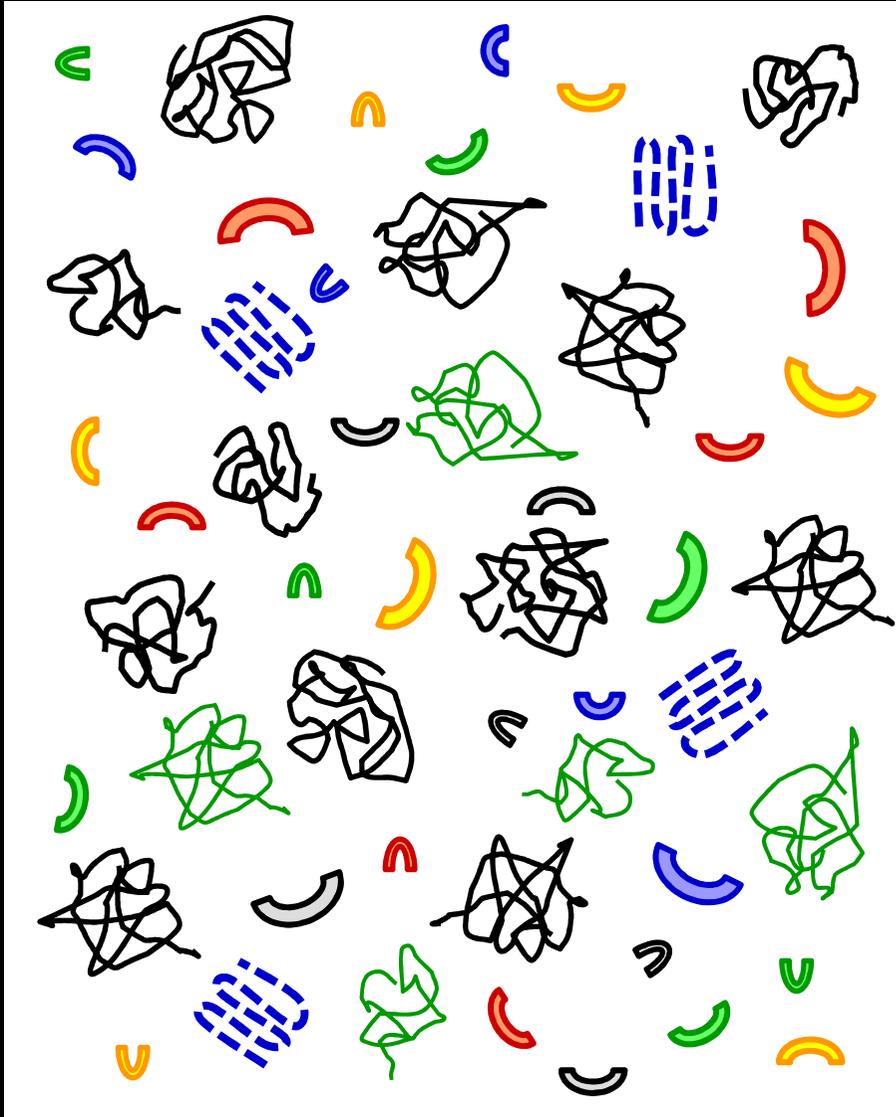
(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Mikroben aus einem Biotop; Metagenomgewinnung, Schritte:

3b) **(Chemische) Lyse** aller in Wasser suspendierten Zellen.



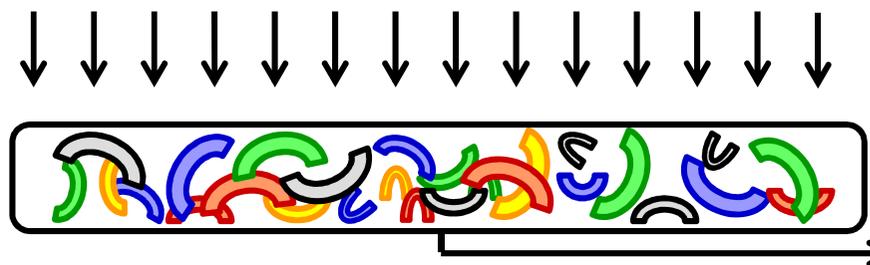
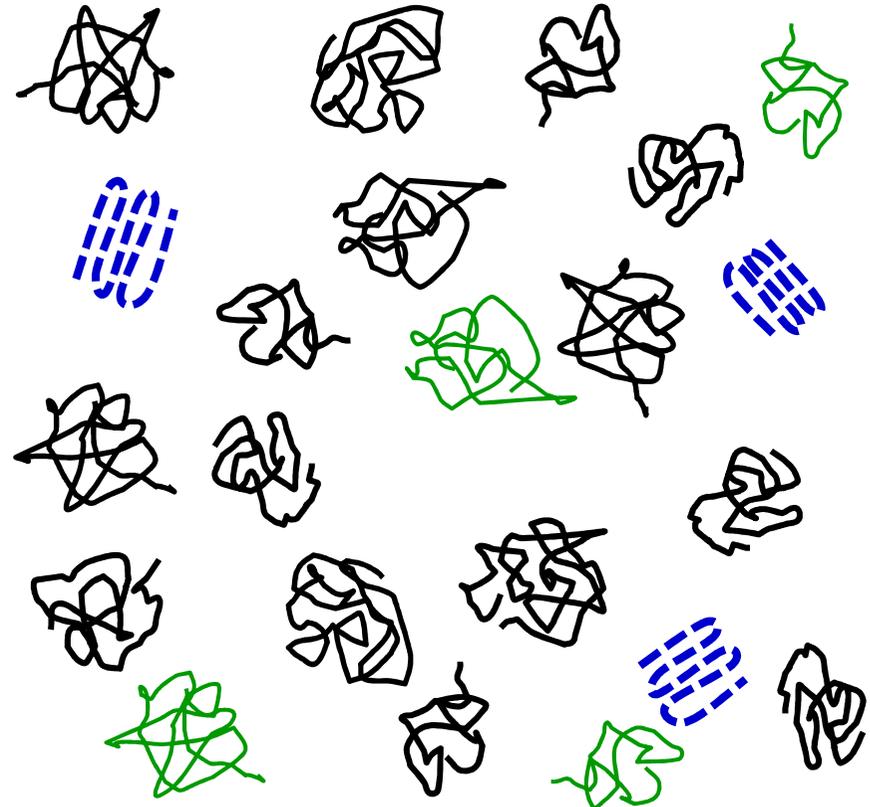
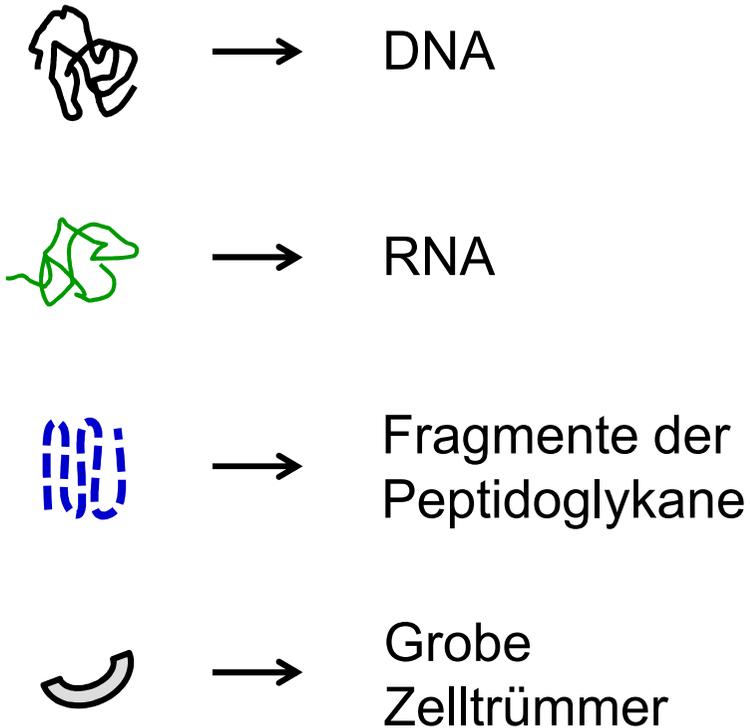
Lysozym: Hydrolytischer Abbau vernetzter Peptidoglykane (Mureine zur Stabilisierung der Zellwand)



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Mikroben aus einem Biotop; Metagenomgewinnung, Schritte:

3c) Zentrifugierung und **Abtrennung** der groben Zelltrümmer:

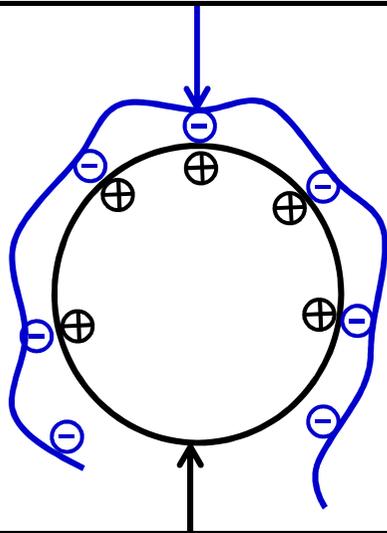


(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

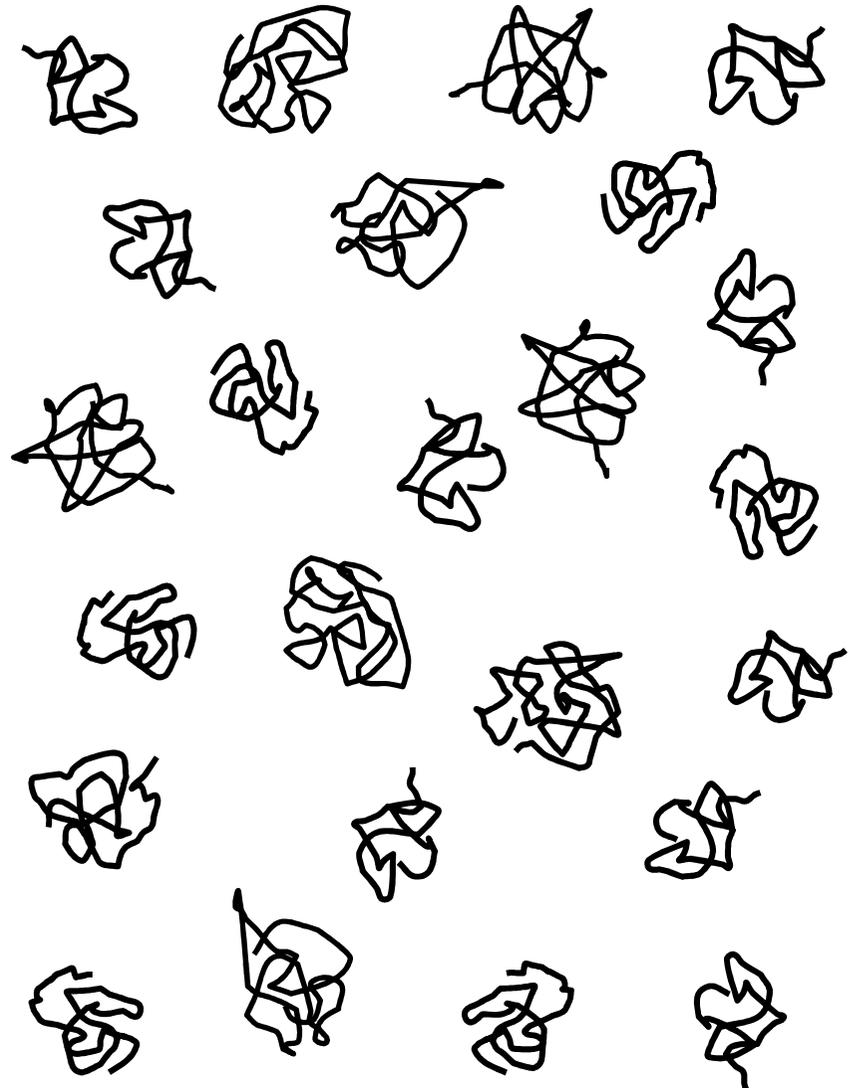
Mikroben aus einem Biotop; Metagenomgewinnung, Schritte:

3d) **Reinigung** der DNA per Ionenaustauscher-Chromatographie: „Metagenom“. →

DNA/RNA/Protein

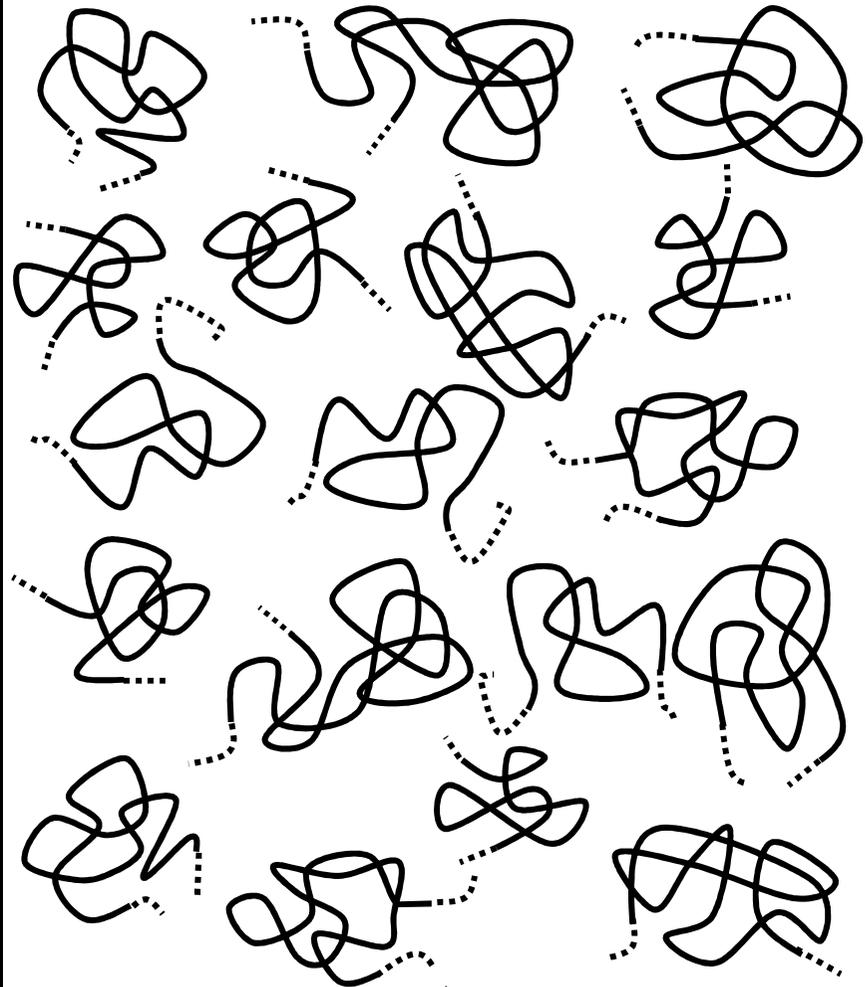


Positiv geladenes Harzteilchen
Elution mit NaCl-Lösungen:
Die *DNA eluiert am Schluss*.



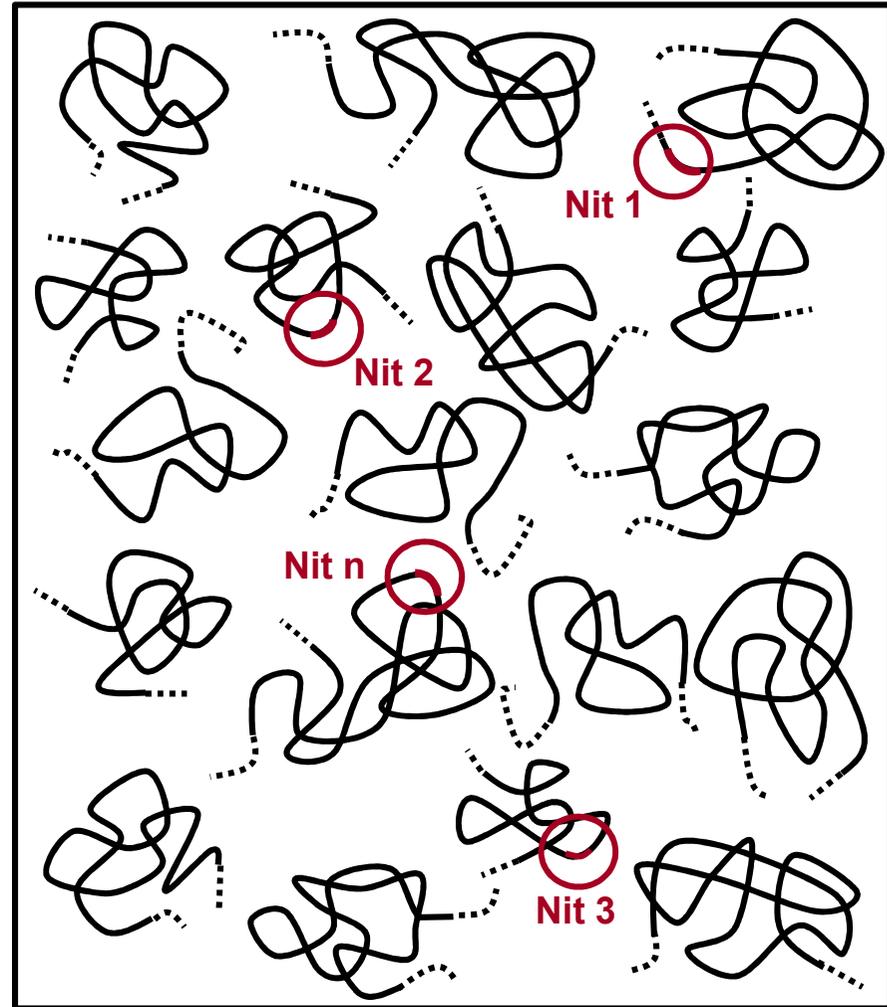
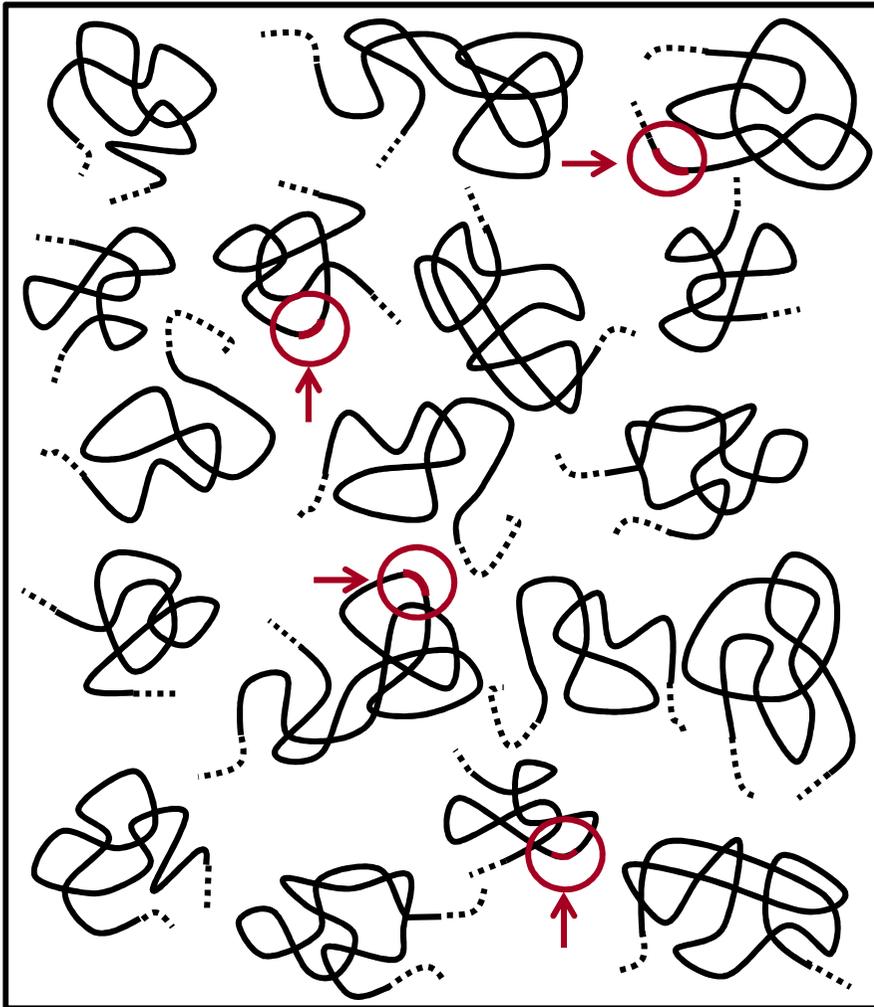
(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Mikroben aus einer Bodenprobe, lysiert; Metagenom:



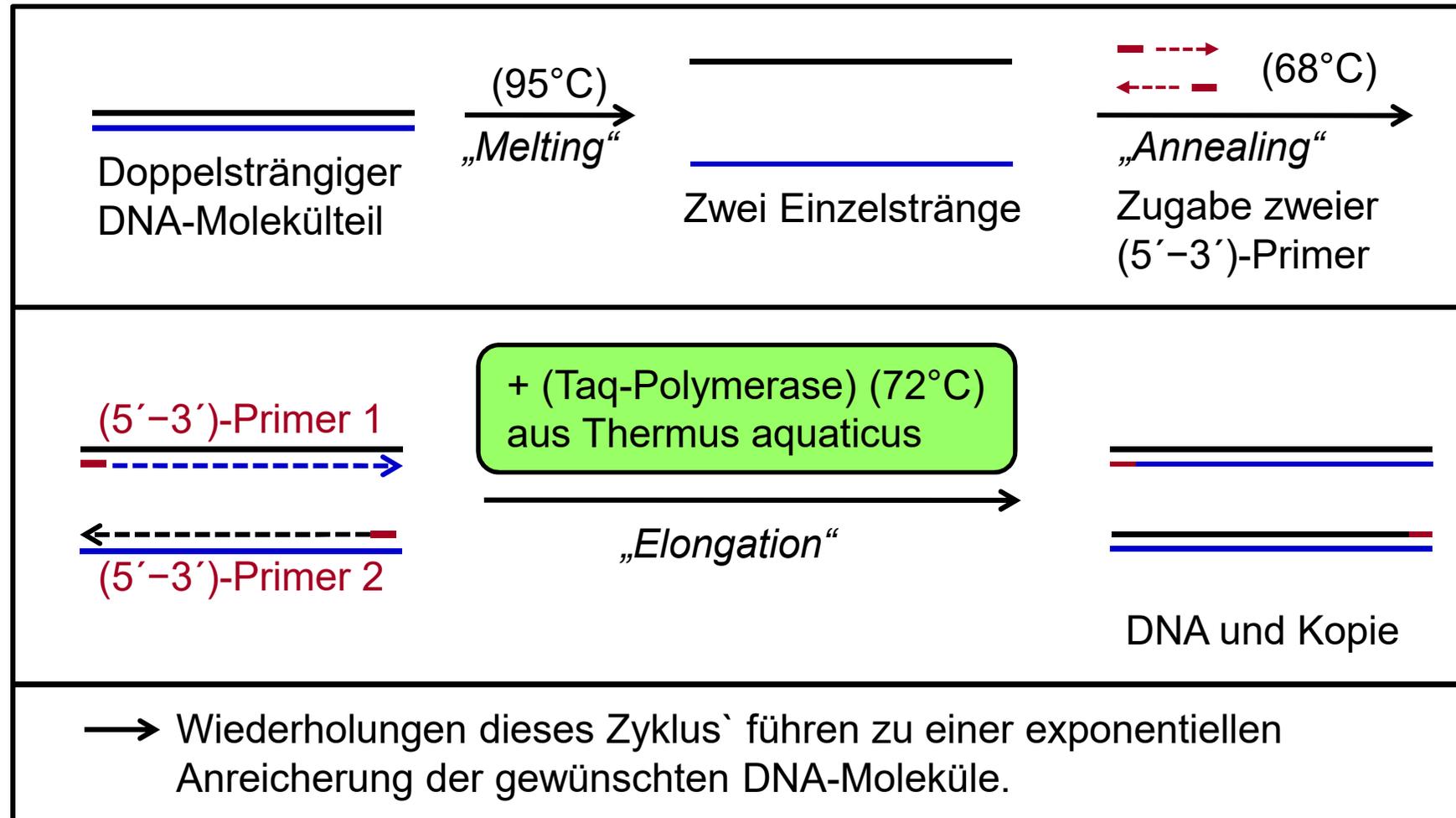
(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Metagenom, Nitrilase-codierende DNA-Regionen: — (Nit n).



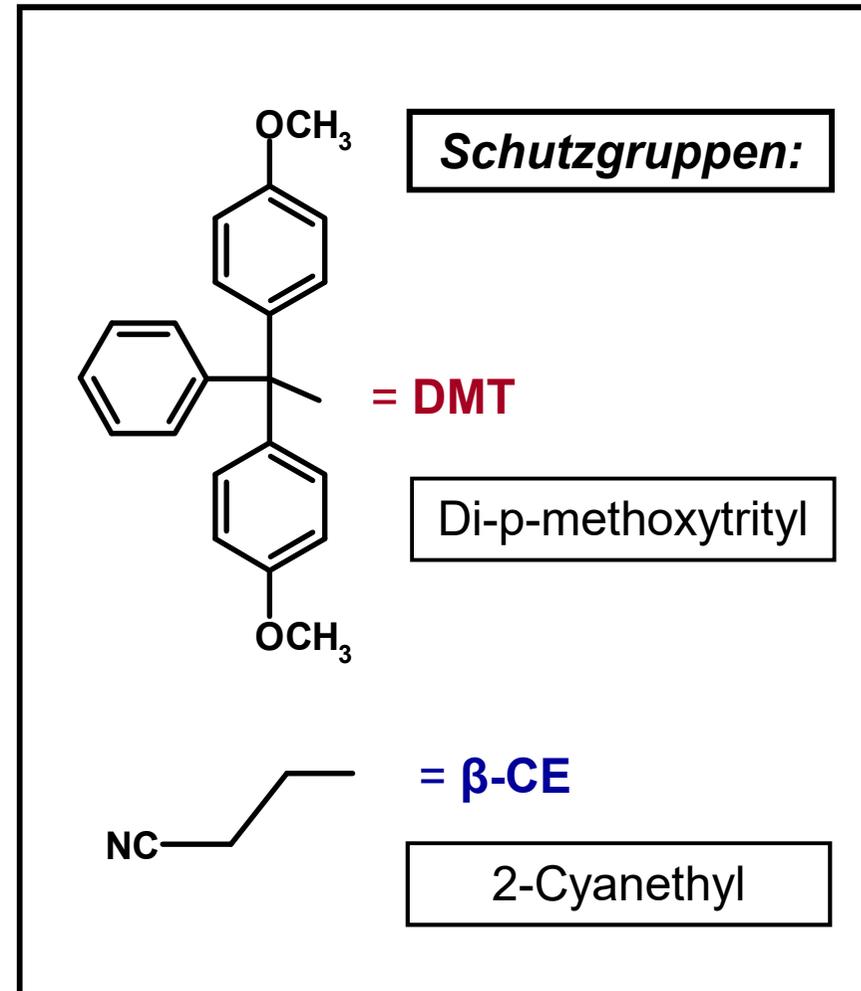
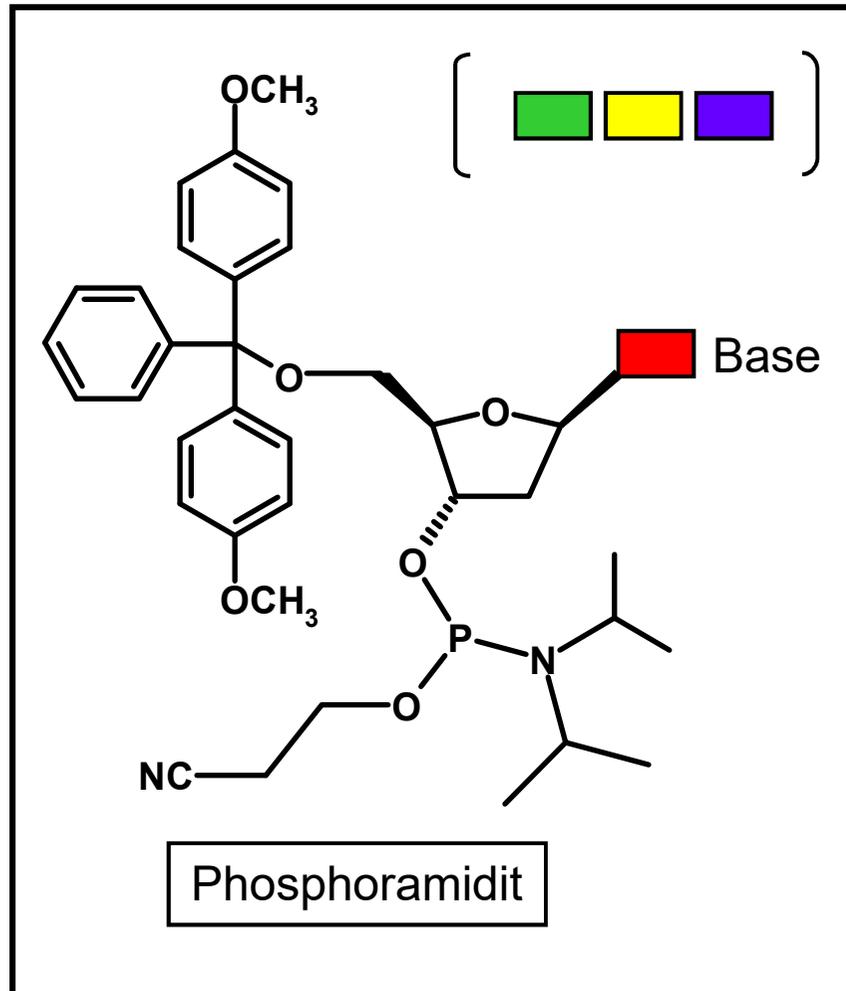
(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

PCR-Methode nach K. Mullis zur Amplifizierung der Nitrilase-codierenden DNA-Fragmente, allgemeines Schema:



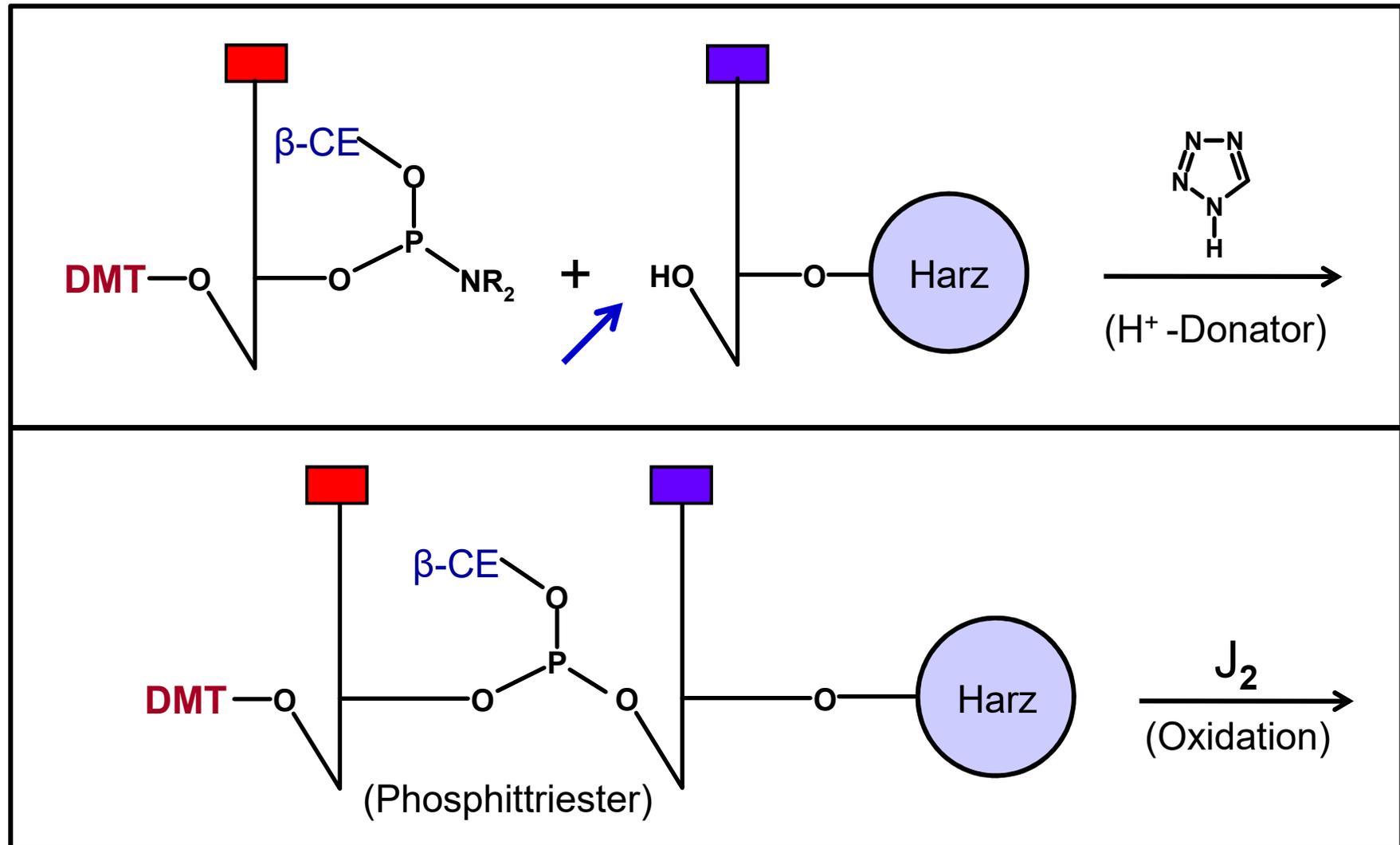
Oligonukleotid-Synthesen für die Nitrilase-Primer

Festphasenmethode (Merrifield-Prinzip, nach R. L. Letsinger):



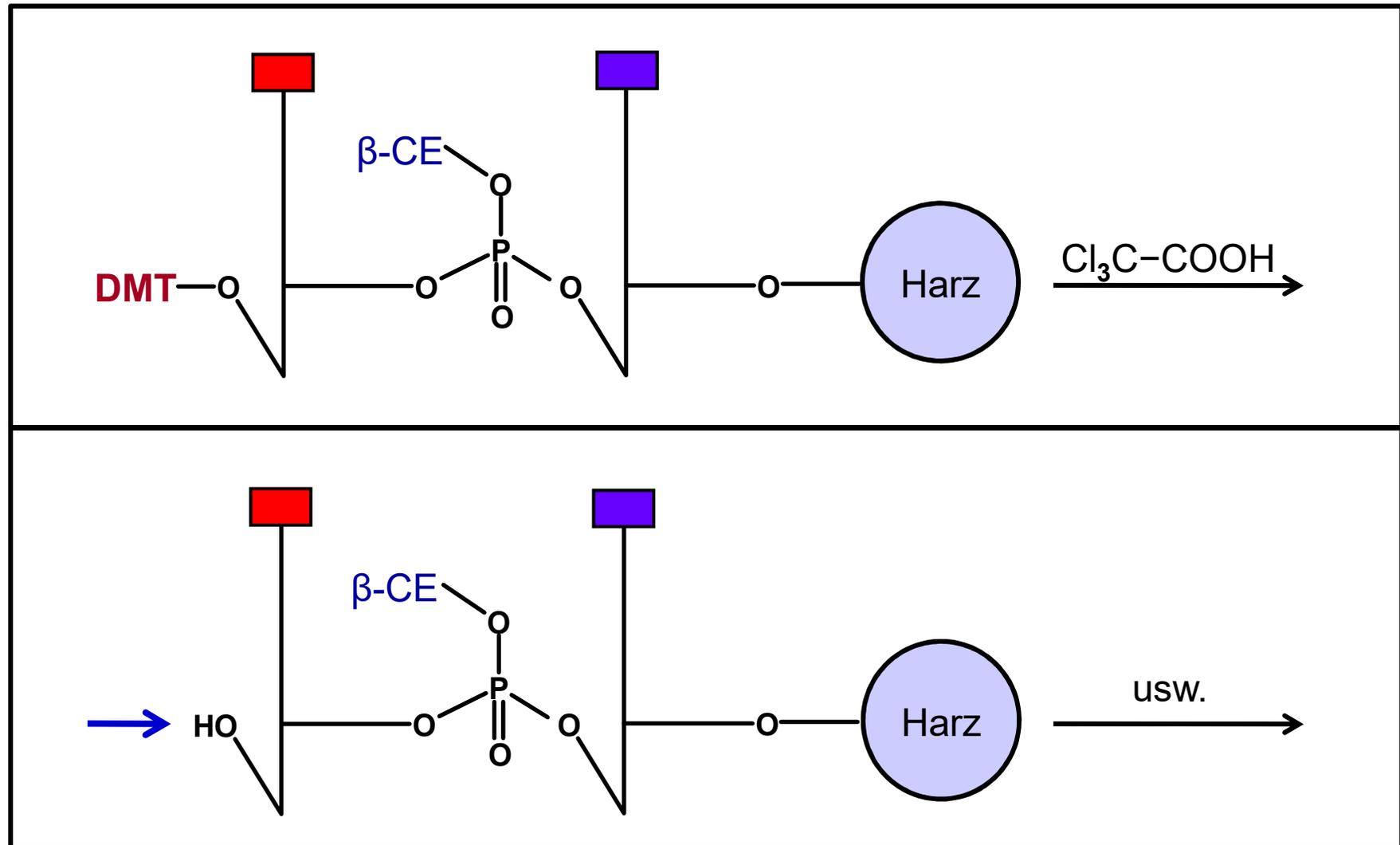
Oligonukleotid-Synthesen für die Nitrilase-Primer

Festphasenmethode (Merrifield-Prinzip, nach R. L. Letsinger):



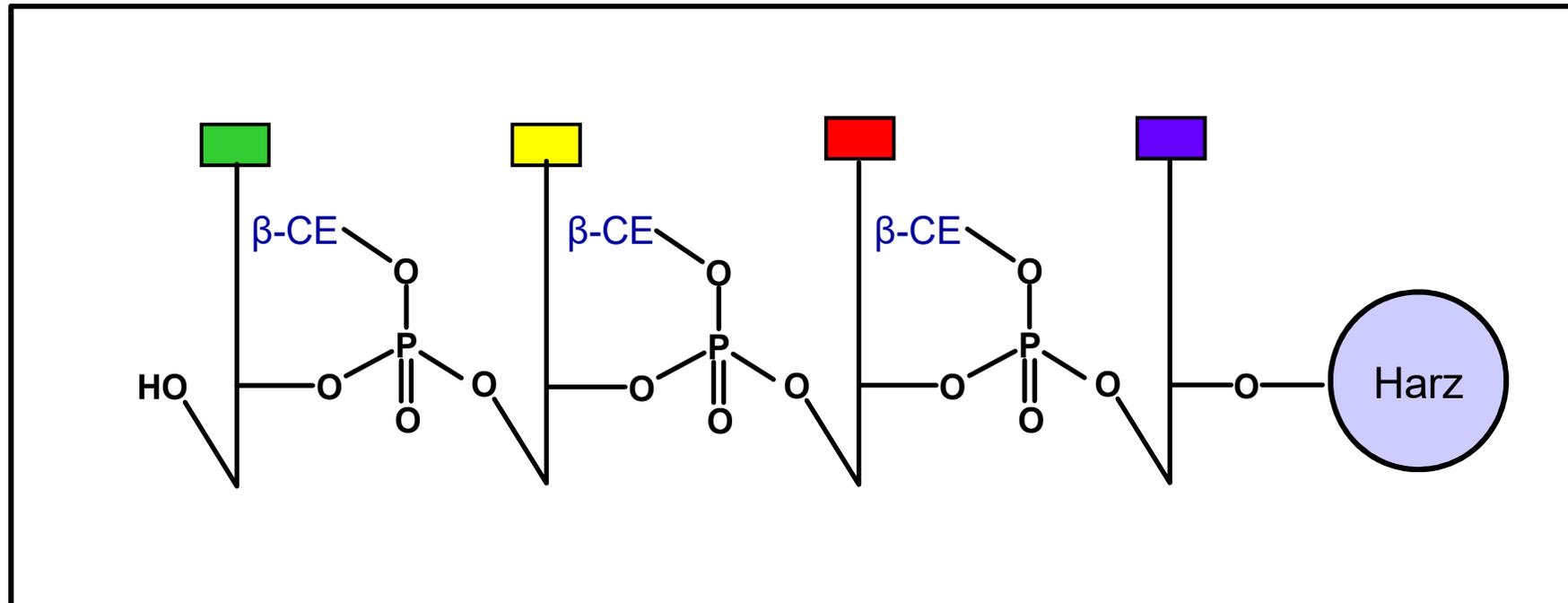
Oligonukleotid-Synthesen für die Nitrilase-Primer

Festphasenmethode (Merrifield-Prinzip, nach R. L. Letsinger):



Oligonukleotid-Synthesen für die Nitrilase-Primer

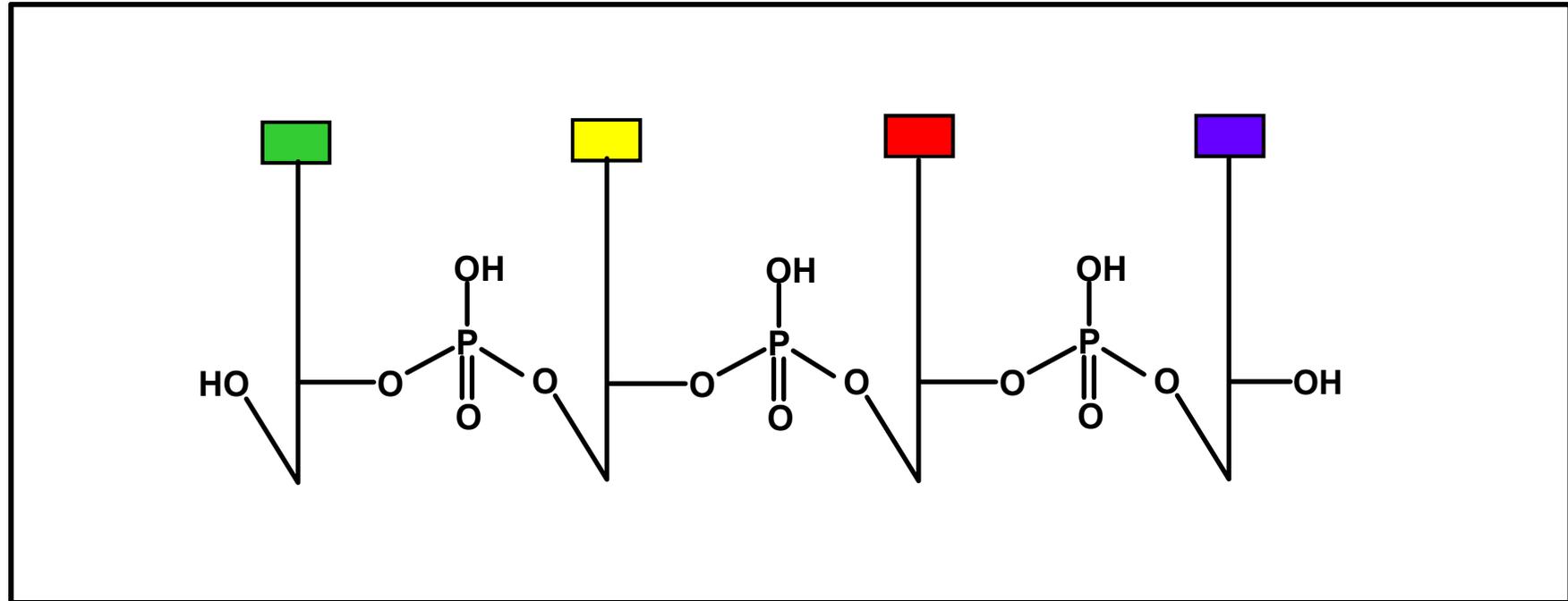
Festphasenmethode (Merrifield-Prinzip, nach R. L. Letsinger):



Zum Schluss der Reaktionsfolge wird NH_3 hinzu gegeben
(Entfernung aller $\beta\text{-CE}$ -Gruppen und Abspaltung vom Harz).

Oligonukleotid-Synthesen für die Nitrilase-Primer

Festphasenmethode (Merrifield-Prinzip, nach R. L. Letsinger):



Die Reinigung des Polynucleotids erfolgt mit HPLC oder durch Elektrophorese an Polyacrylamidgelen.

Käufliche Plasmide für den Einbau von Nitrilase-Genen, jeweils mit einem Resistenz-Gen gegen Kanamycin A:

pNit 01 (Quelle: Invitrogen)

pNit 02 (Quelle: Novagen)

pNit 03 (Quelle: Invitrogen)

pNit 04 (Quelle: Invitrogen)

pNit 05 (Quelle: Novagen)

pNit 06 (Quelle: Novagen)

pNit 07 (Quelle: Invitrogen)

pNit 08 (Quelle: Novagen)

pNit 09 (Quelle: Novagen)

pNit 10 (Quelle: Invitrogen)

pNit 11 (Quelle: Novagen)

pNit 12 (Quelle: Invitrogen)

Organismen mit aktivierbaren Nitrilase-Genen, welche sich mit PCR-Primern klonieren lassen:

Arabidopsis thaliana (Ackerschmalwand)

Brassica napus (Raps)

Zea mays (Mais)

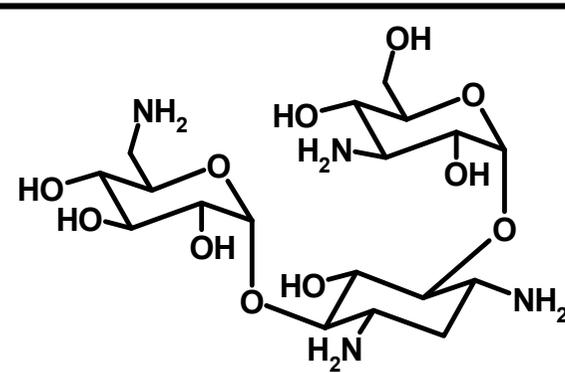
Bordetella bronchiseptica (Keuchhusten-Erreger)

Escherichia coli (Darm-Bakterium)

Lactobacillus plantarum (Fermentierte Lebensmittel)

Rhodospseudomonas palustris (Purpurbakterium)

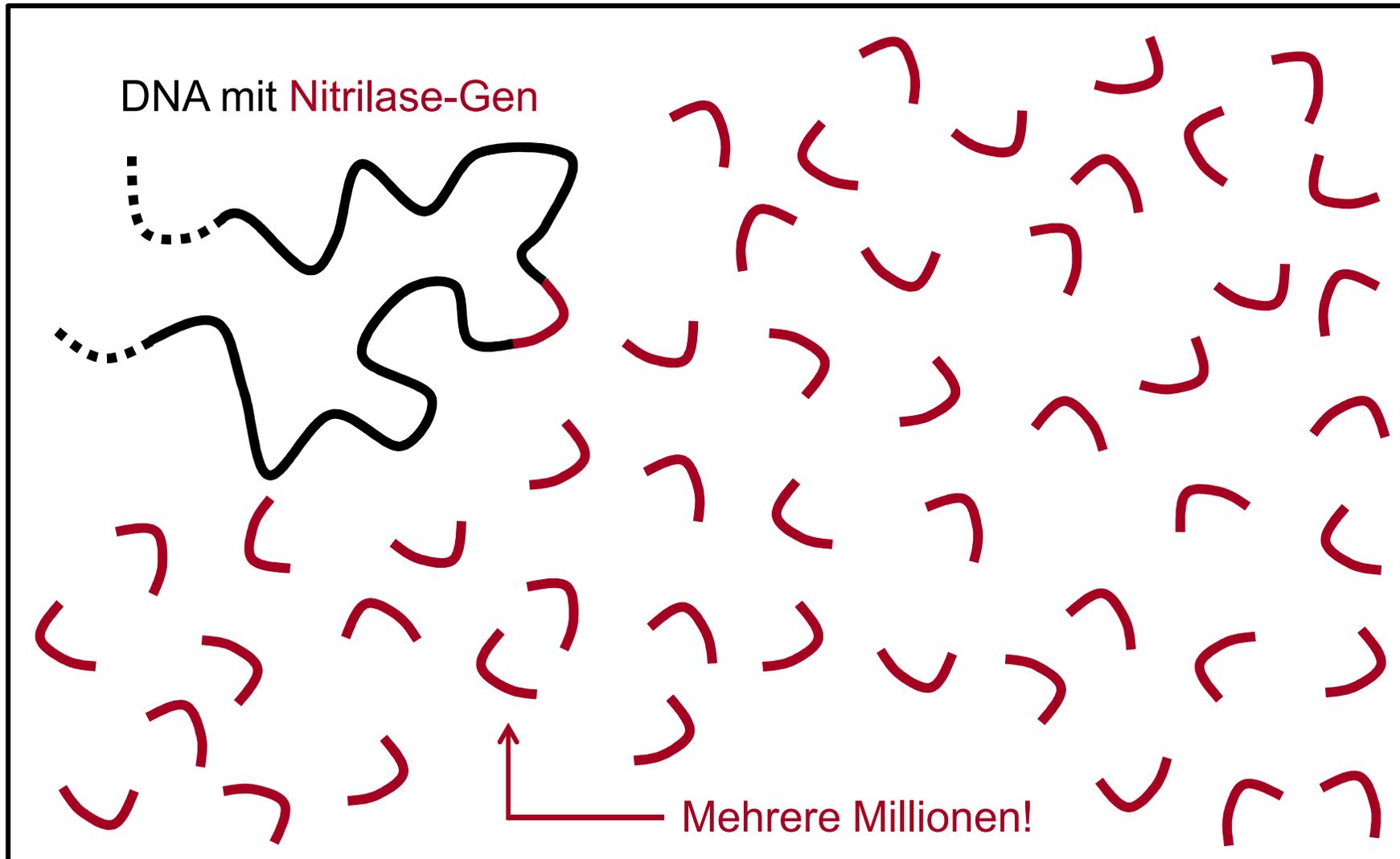
Oryza sativa (Reis)



Kanamycin: Aminoglycosid-Antibioticum, Hemmstoff der ribosomalen Proteinsynthese.

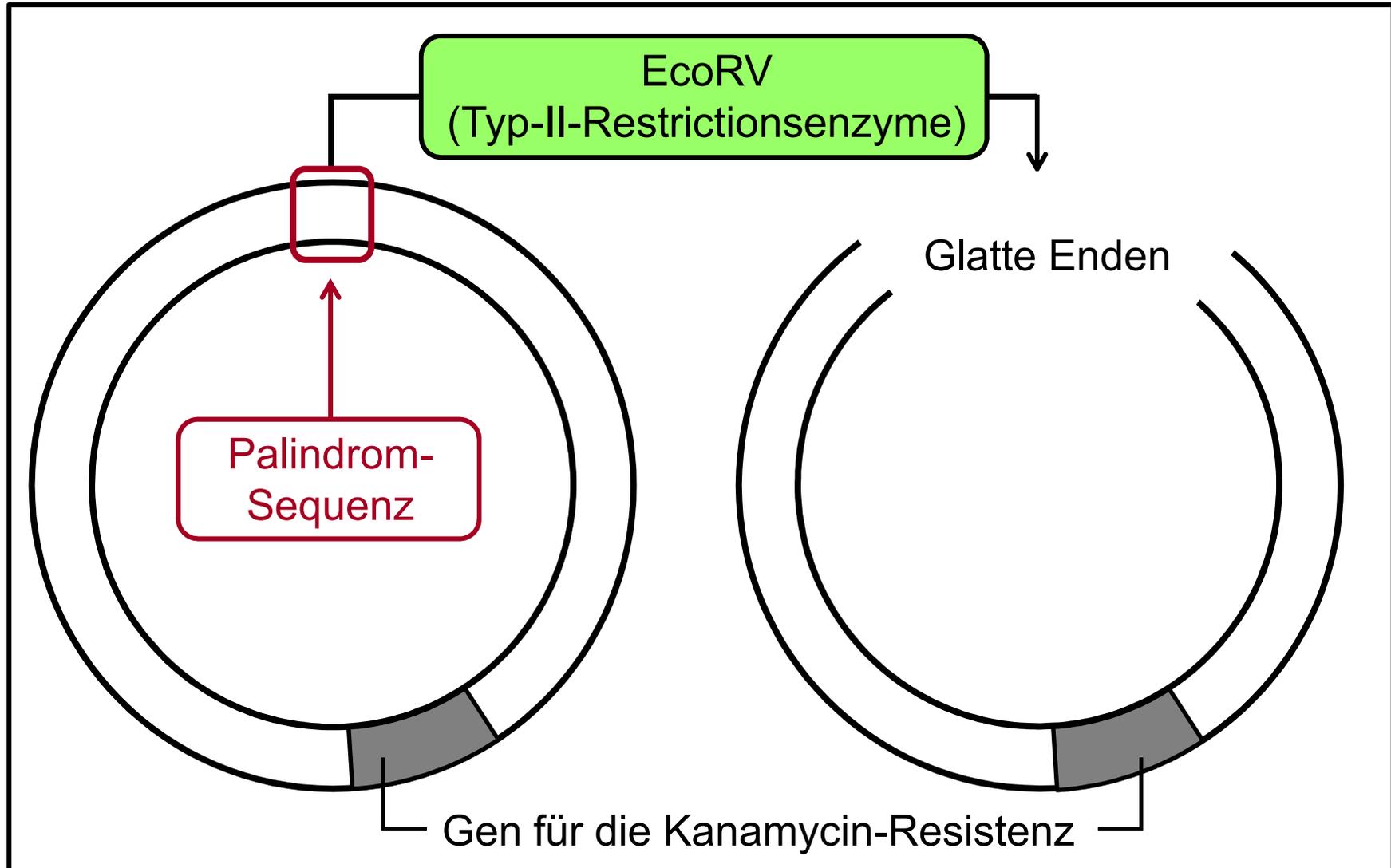
(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Genisolierung durch PCR-Technik (Amplifikation):



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

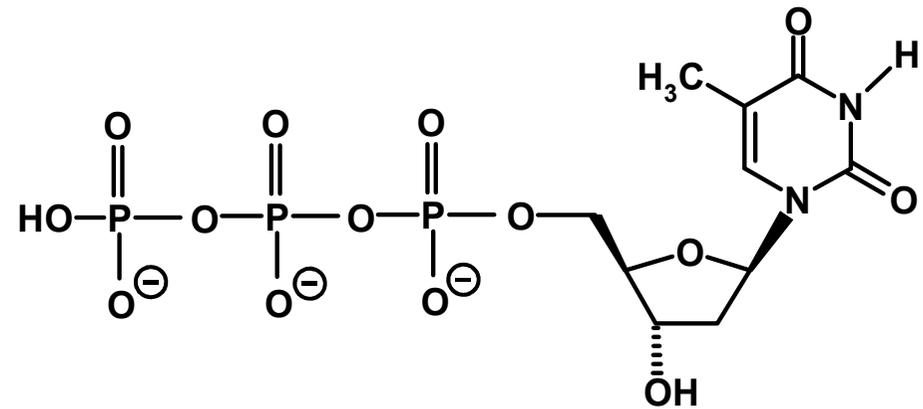
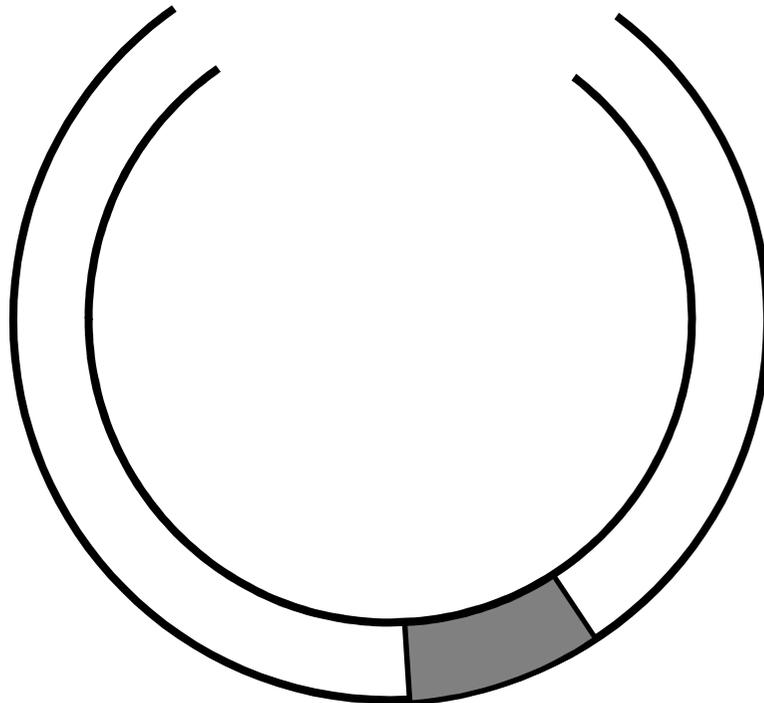
Restriktionsspaltung eines Plasmids („Gerader Schnitt“):



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Synthese des Vektors mit überhängendem Thymidin (T):

2'-Desoxythymidin-5'-triphosphat (dTTP)

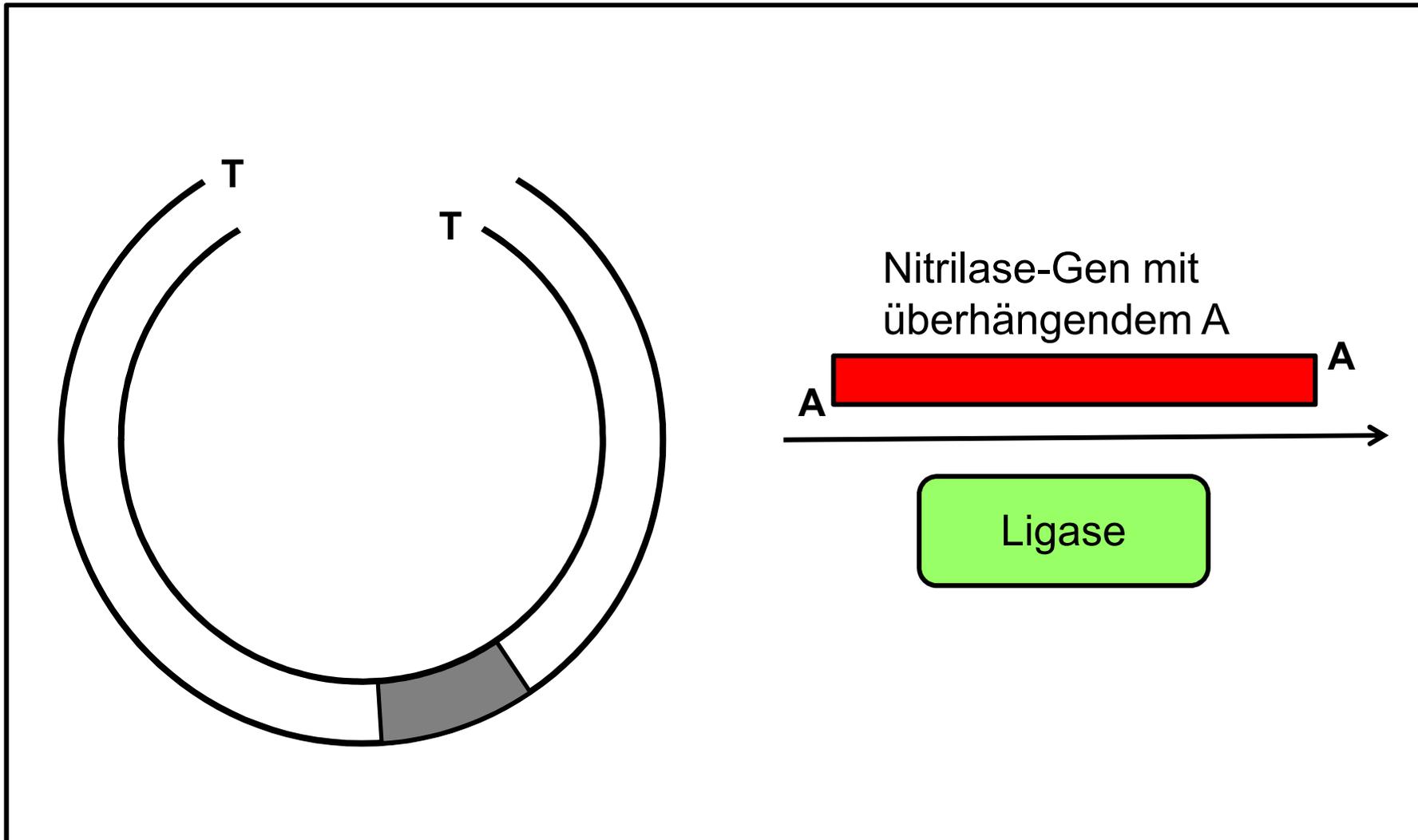


Taq-Polymerase

(Abwesenheit von Primern!)

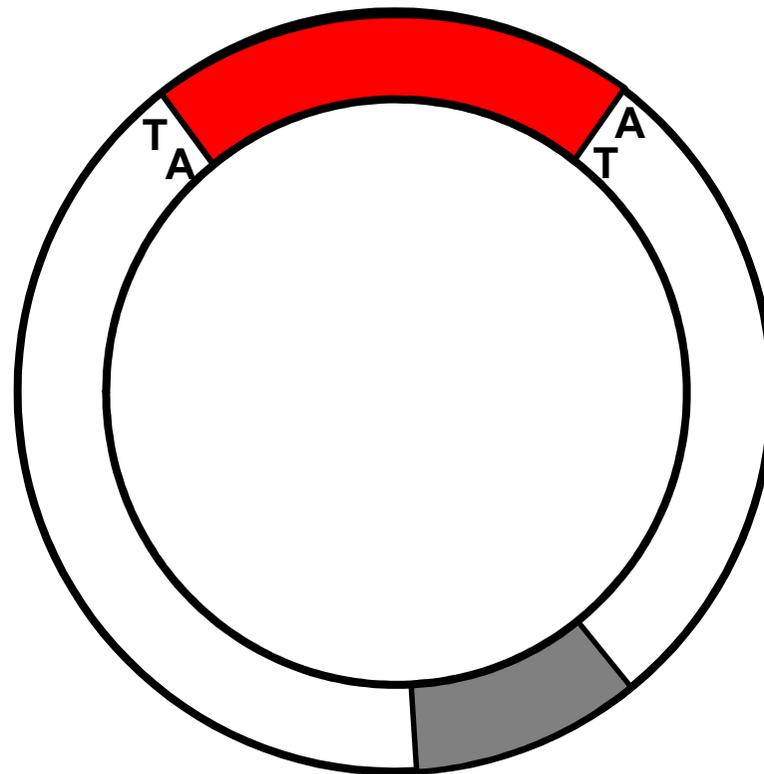
(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Ligation mit dem per PCR amplifizierten Nitrilase-Gen:

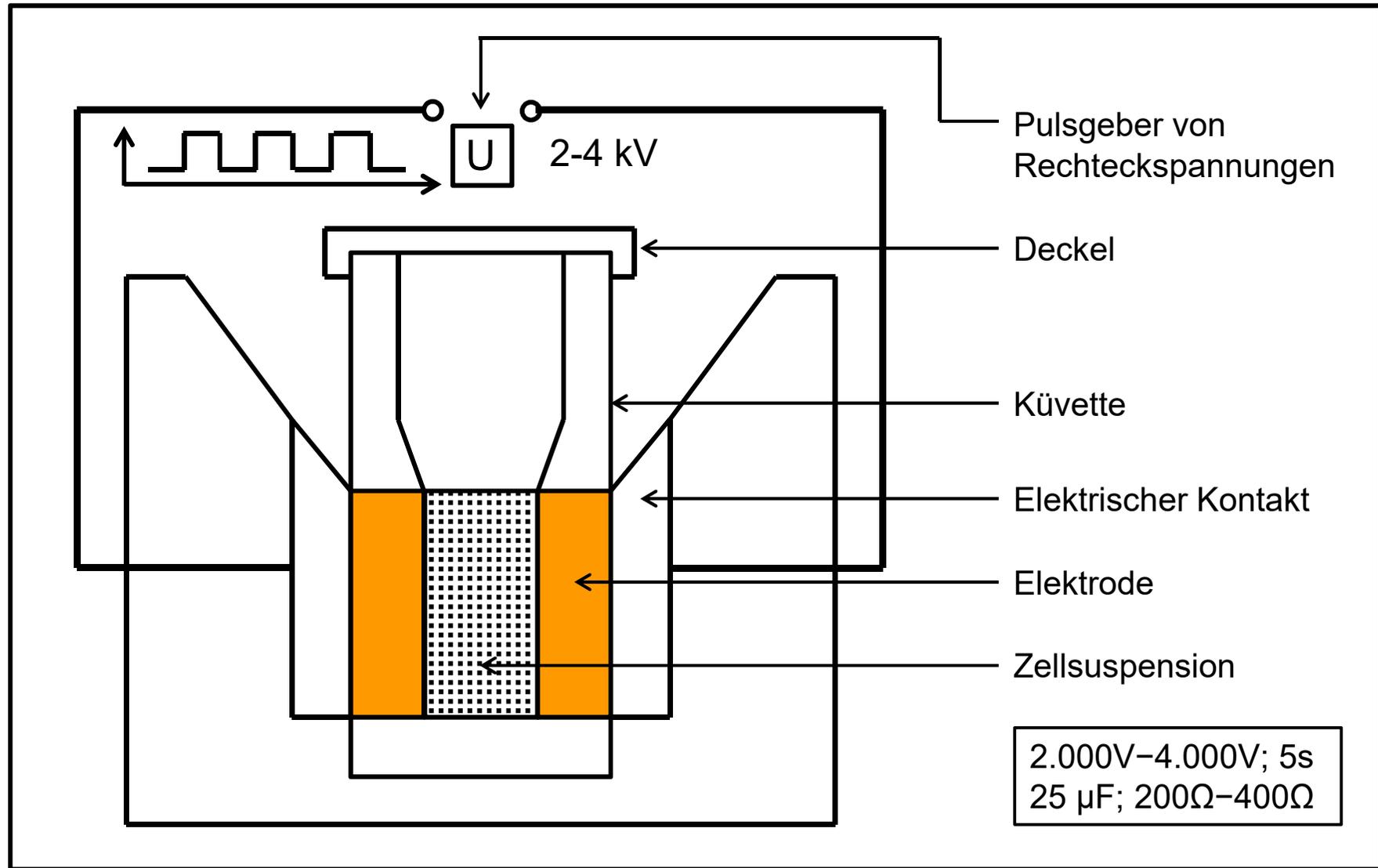


(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Plasmid-Vektor, mit dem eingebauten Nitrilase-Gen:

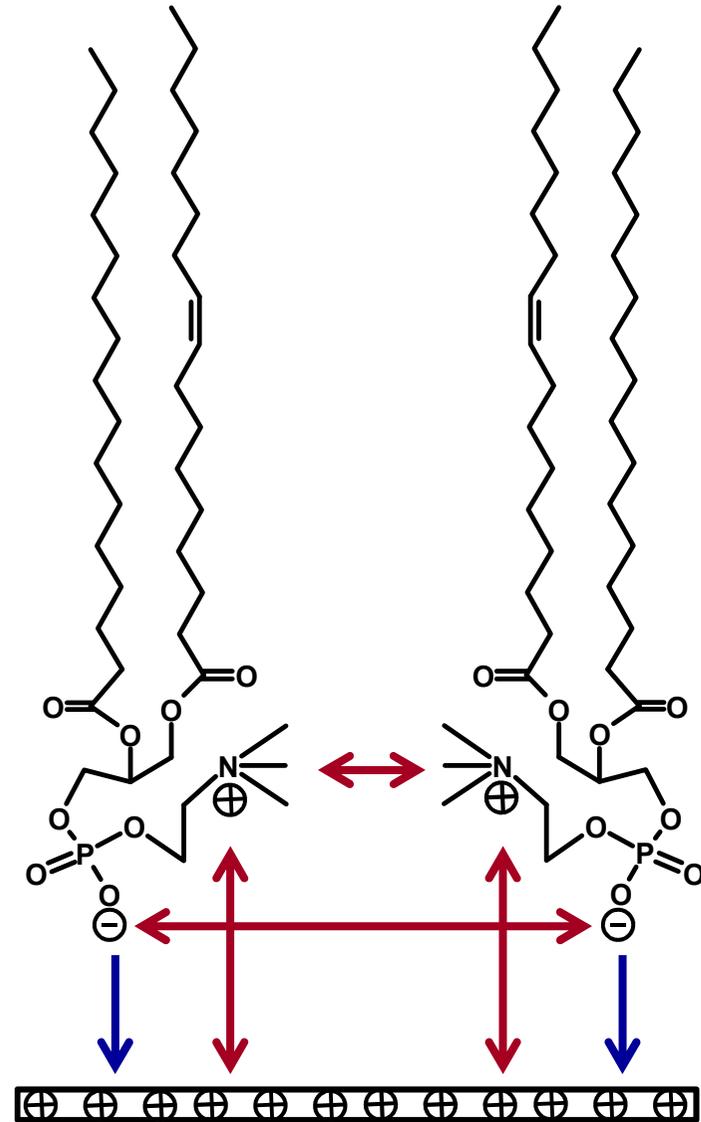
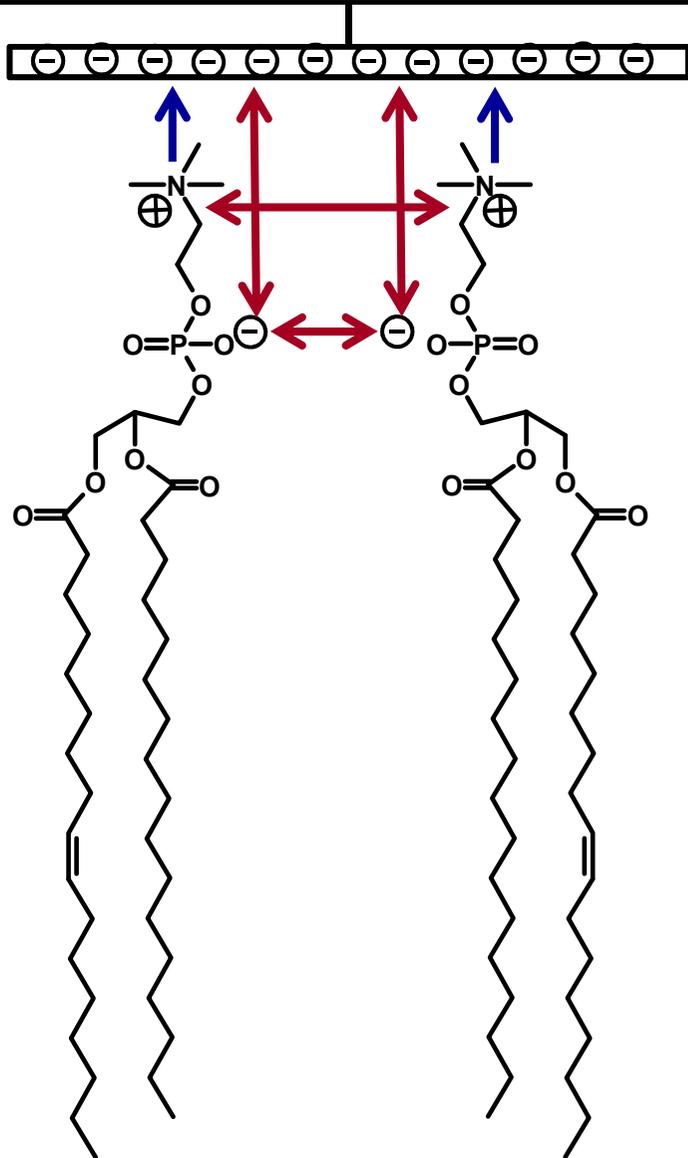


Elektroporator zum Einschleusen (Transfektion) von Plasmiden in Wirtszellen durch die poröse Phospholipid-Membran:



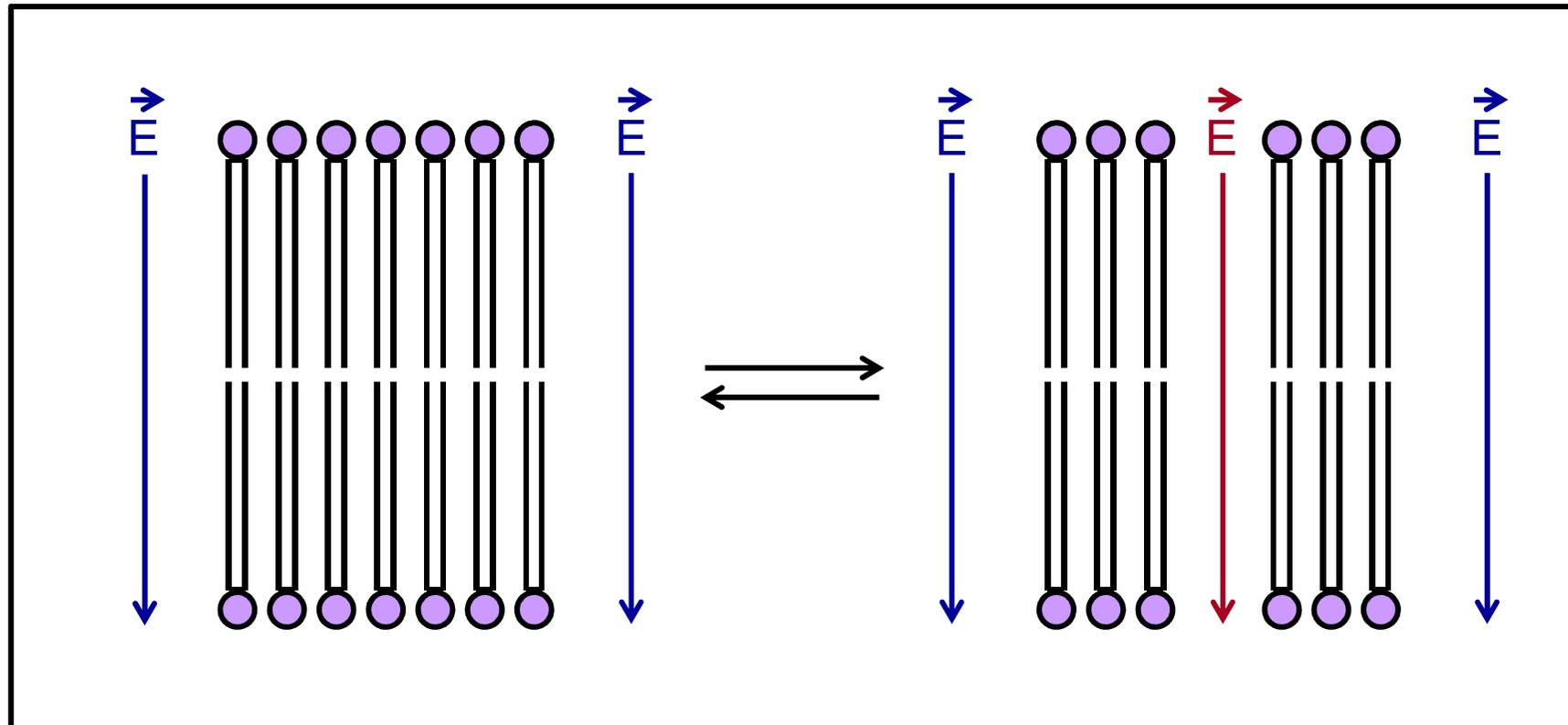
Plasmid-Transfektion mittels **Elektroporation**, $U = 3.000V$, 5 s

Wirksame Kräfte: **Anziehung** \rightarrow **Abstoßung** \leftrightarrow



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Elektroporation, physikalischer Mechanismus (?):

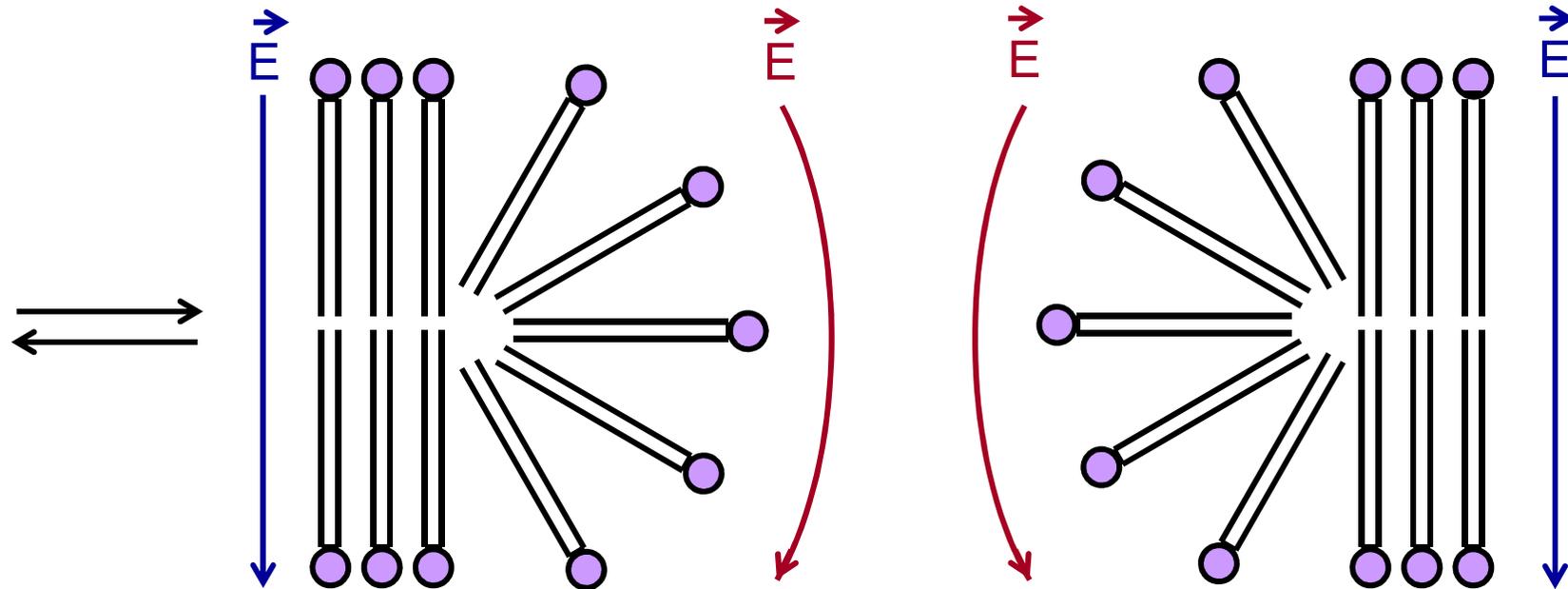


Intakte Doppelschicht als
zweidimensionale Flüssigkeit.

Hydrophobe Pore durch **laterales
Aufreißen** der Doppelschicht.

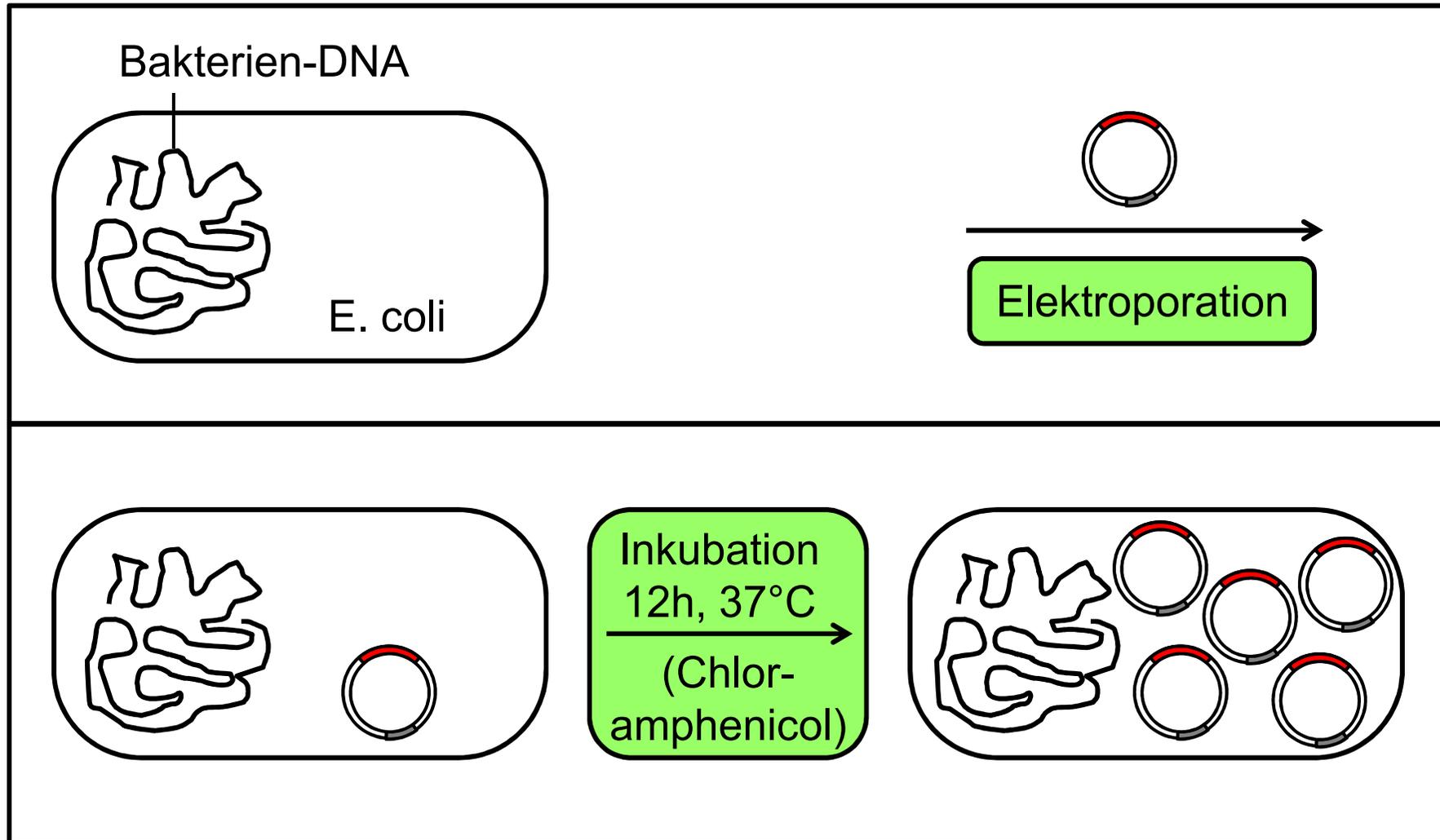
(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Elektroporation, physikalischer Mechanismus (?):



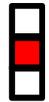
Hydrophile Pore: Das induzierte Membranpotenzial auf der Zelloberfläche leitet einen „**Dielektrischen Zusammenbruch**“ ein.

Elektroporation zur Einschleusung des rekombinierten Plasmids in die Wirtszelle; Selektive Vermehrung des neuen Plasmids in der Wirtszelle in Gegenwart von Chloramphenicol.



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Punktmutierte Nitrilase-DNA durch (mutierte) Primer und PCR:



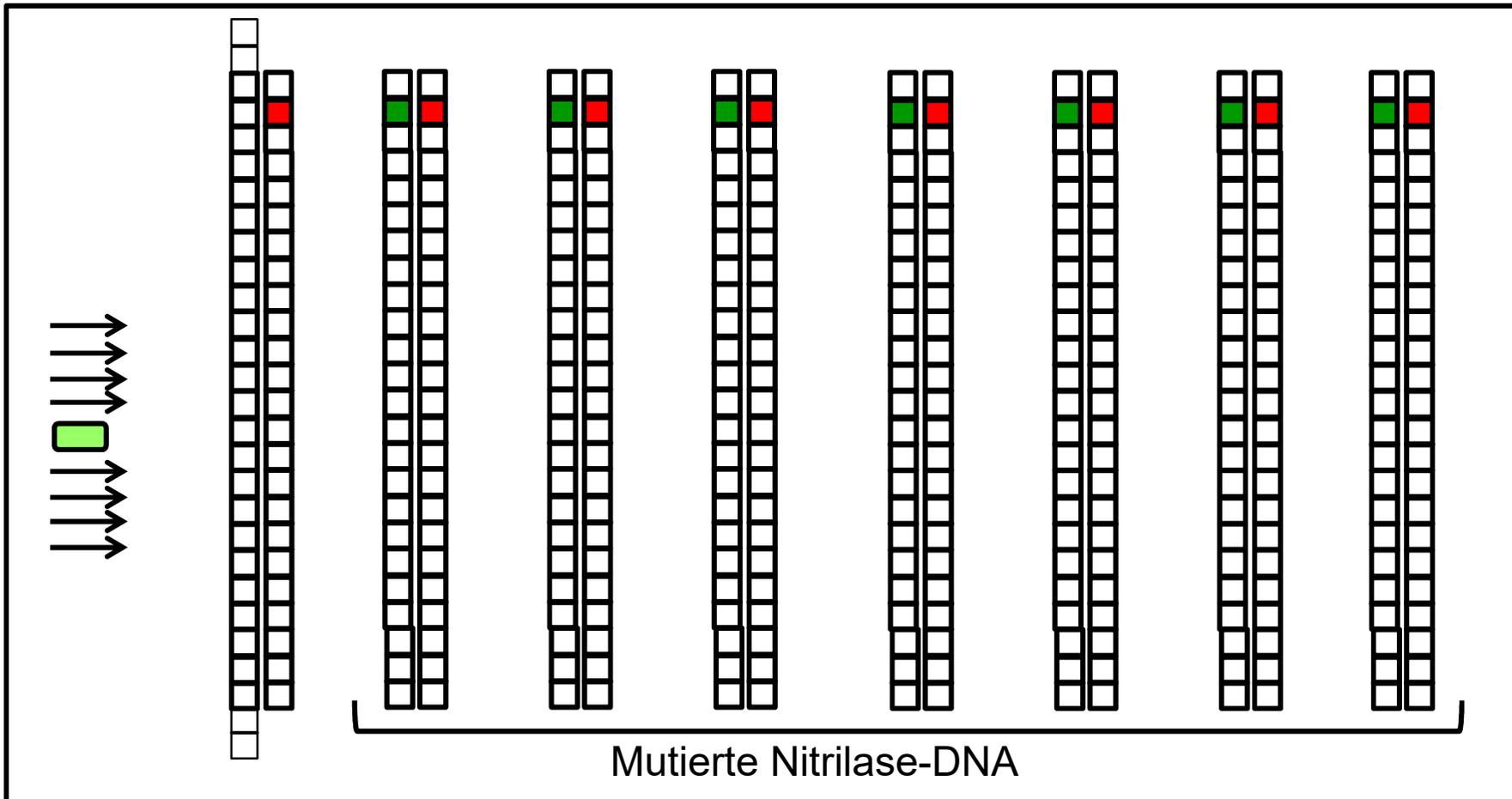
Mutierter Primer



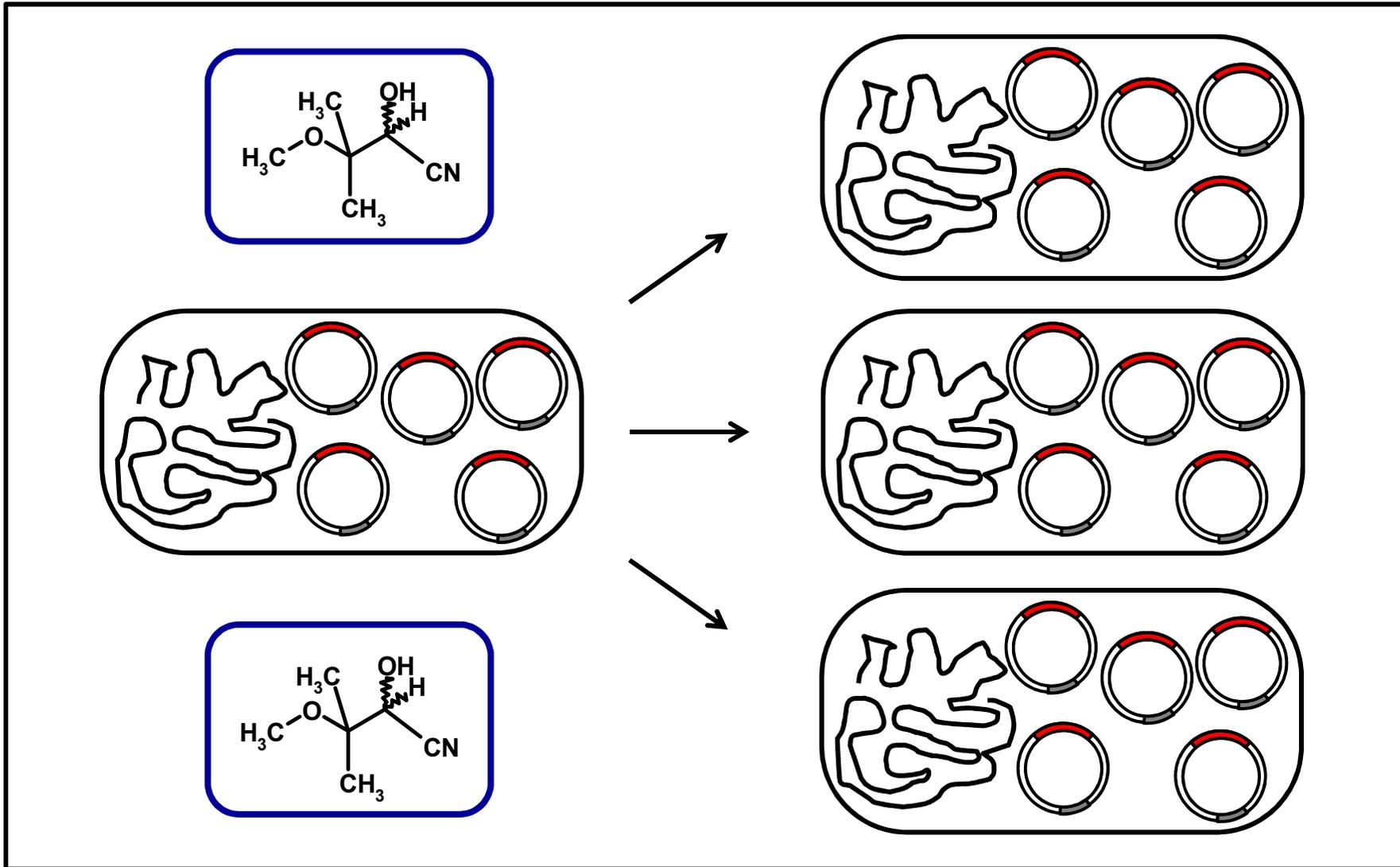
Normaler Primer



DNA-Polymerase

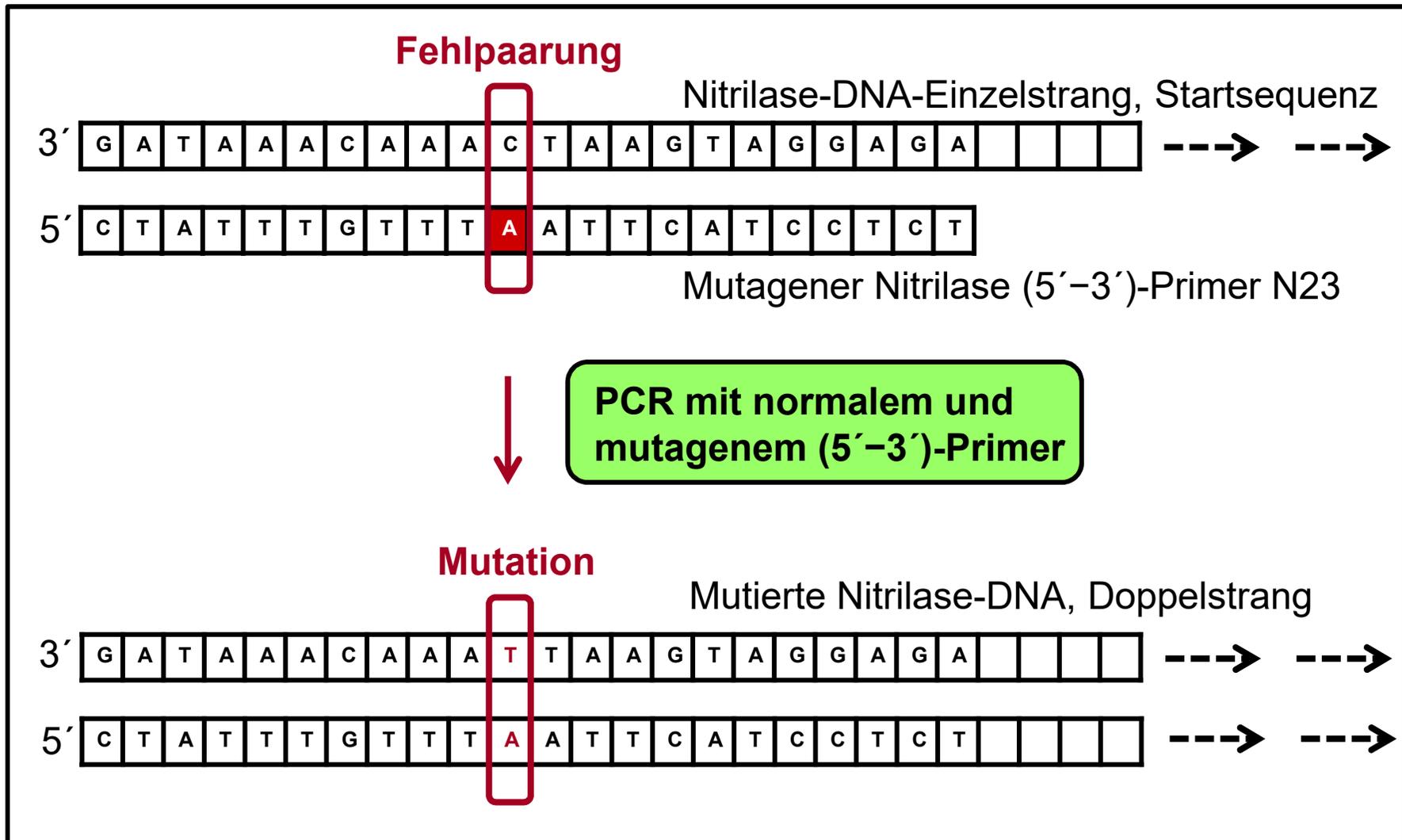


Vermehrung der Wirtszelle mit der rekombinierten Plasmid-DNA. Das Nährmedium enthält Kanamycin.



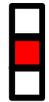
(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Punktmutierte Nitrilase-DNA durch (5′-3′)-Primer N23 und PCR:



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Punktmutierte Nitrilase-DNA durch (mutierte) Primer und PCR:



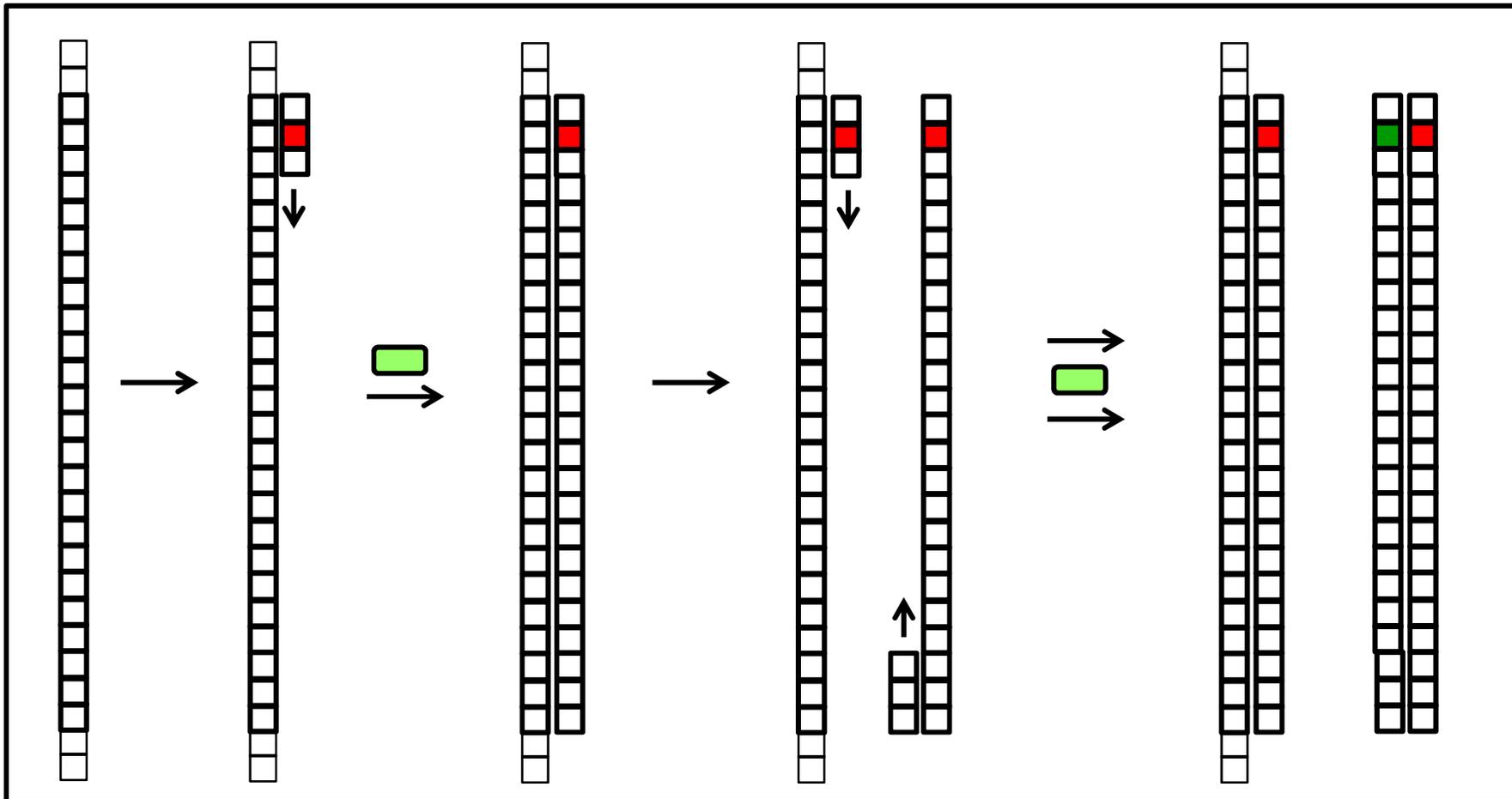
Mutierter Primer



Normaler Primer

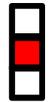


DNA-Polymerase



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Punktmutierte Nitrilase-DNA durch (mutierte) Primer und PCR:



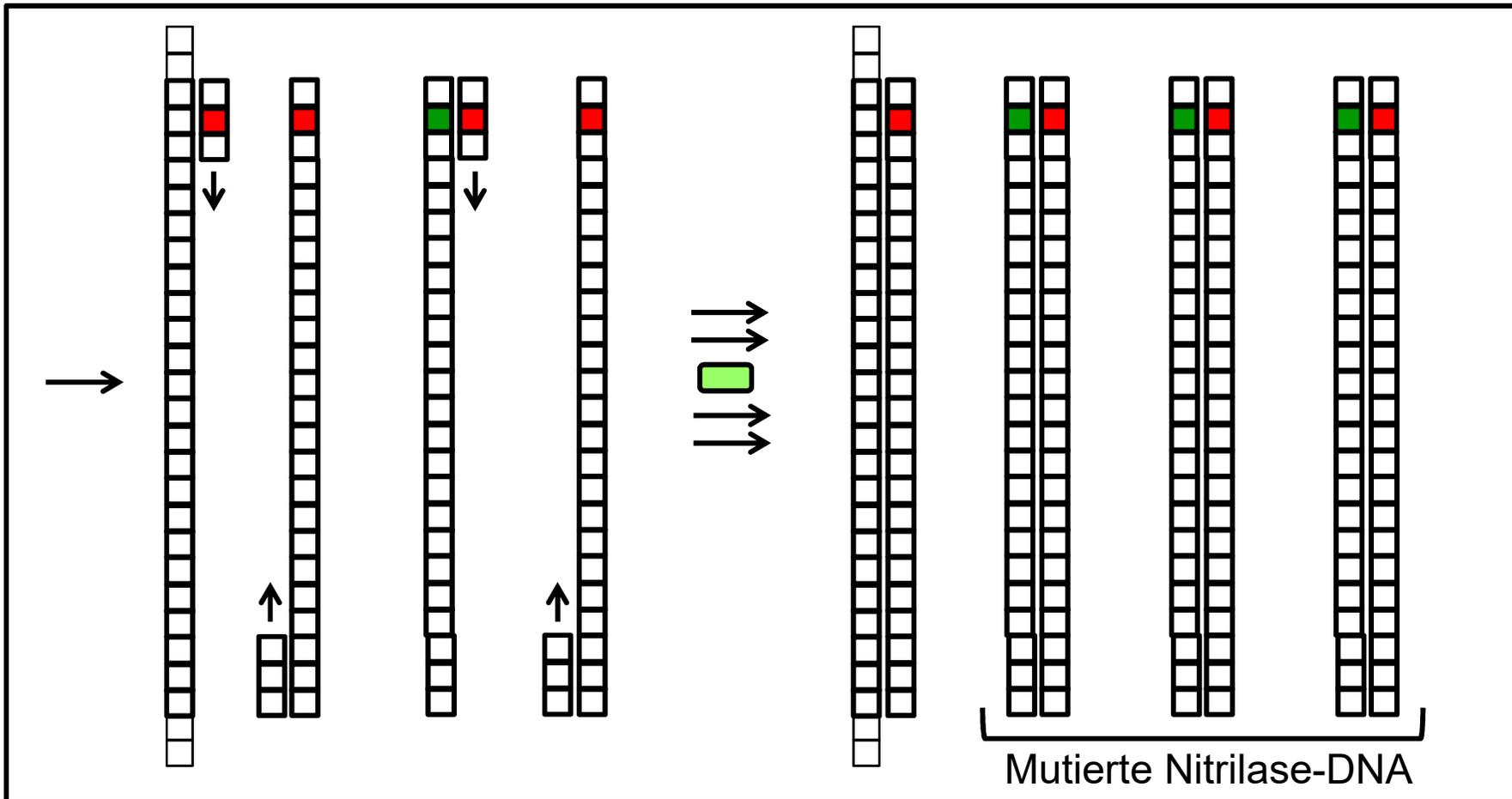
Mutierter Primer



Normaler Primer

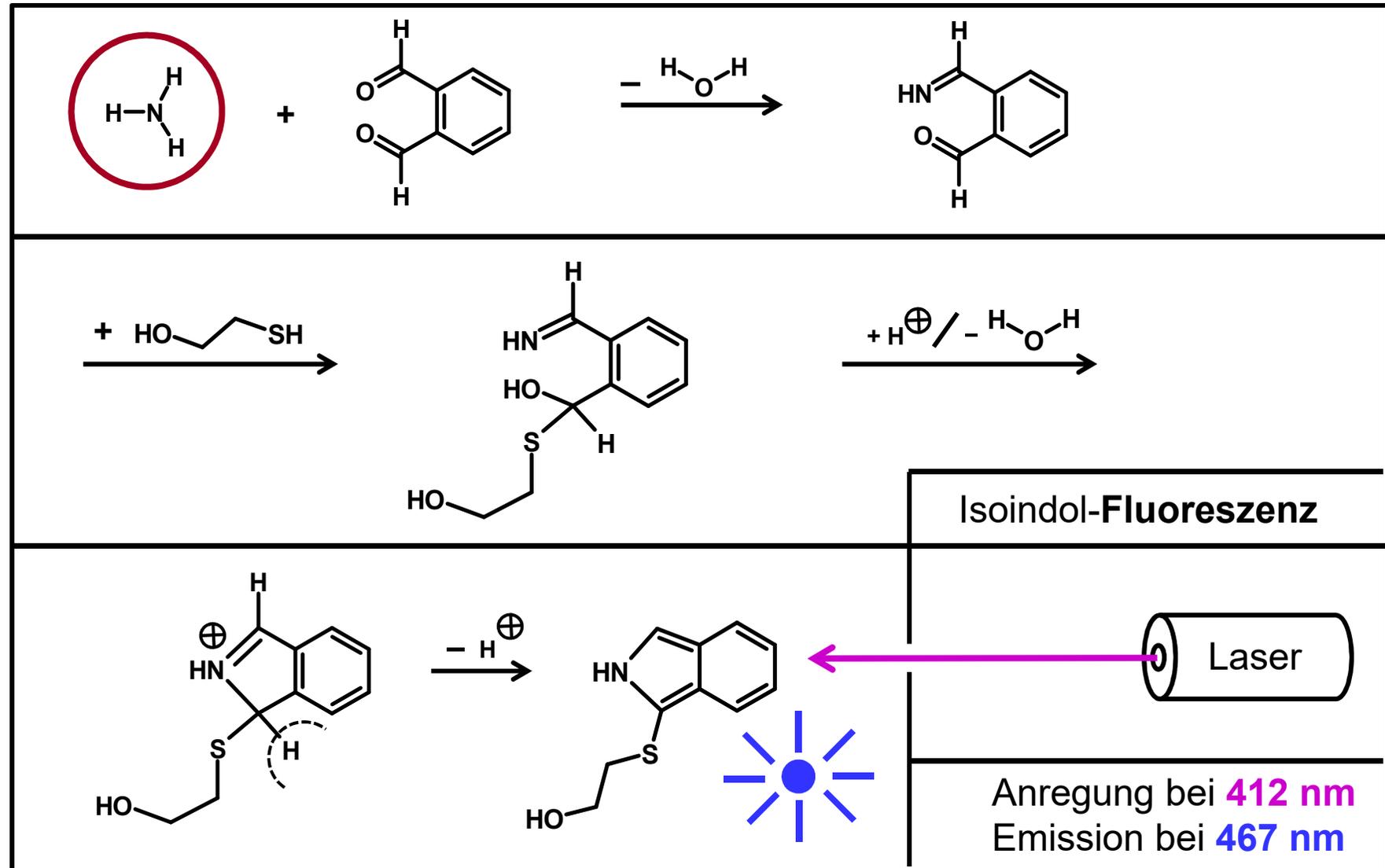


DNA-Polymerase



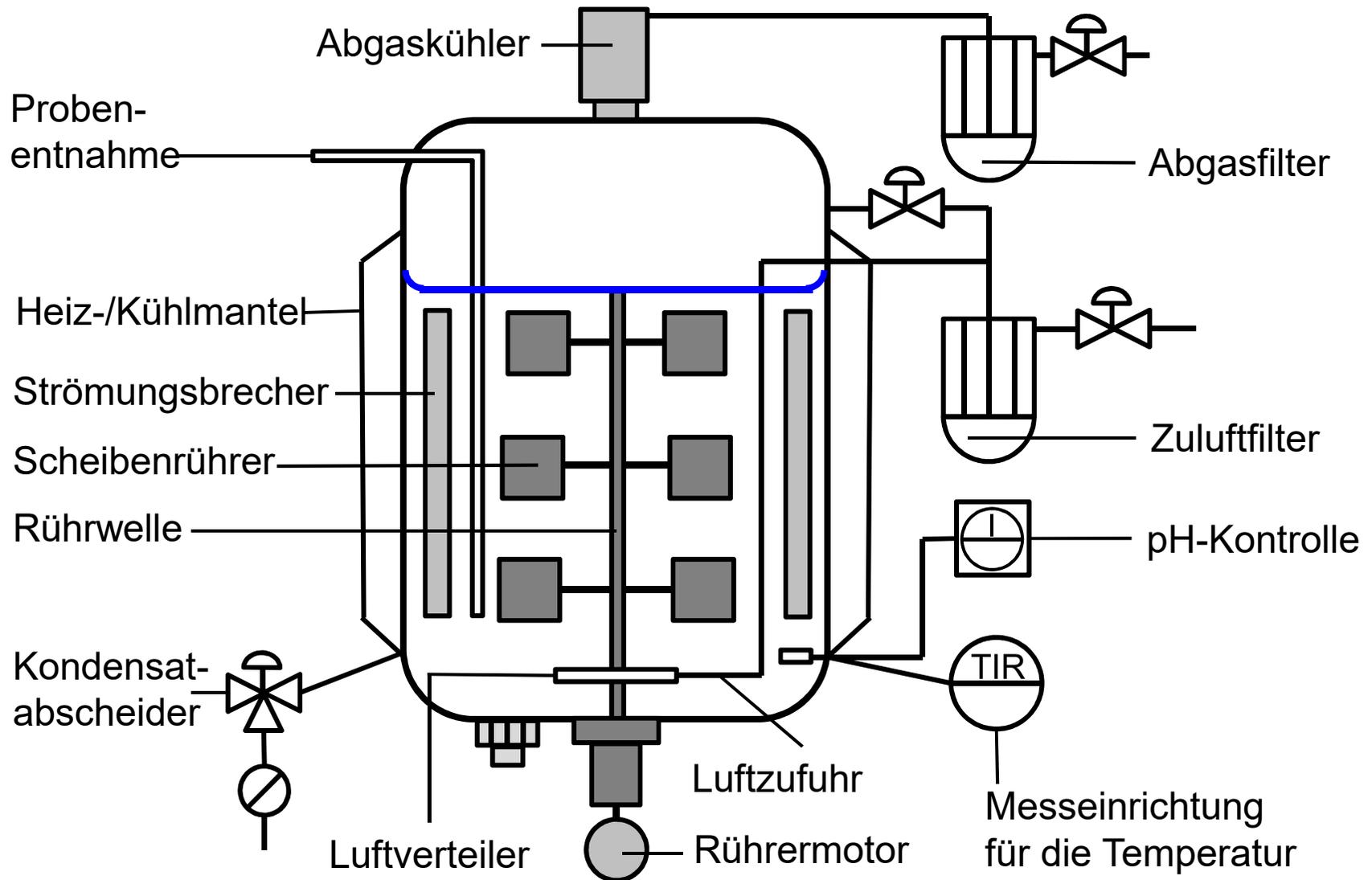
(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Messung der Nitrilase-Aktivitäten durch Isoindol-Fluorimetrie:



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Scale-up; Rührkesselreaktor nach Sternad (STR, $H/D \approx 2-3$):



(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Scale-up; Rührkesselreaktor nach Sternad (STR, H/D \approx 2-3):

Fassungsvermögen

- Laborreaktoren (< 50 l)
- Versuchsreaktoren (50 – 5.000 l)
- Betriebsreaktoren (> 5.000 l bis zu 1.500.000 l)

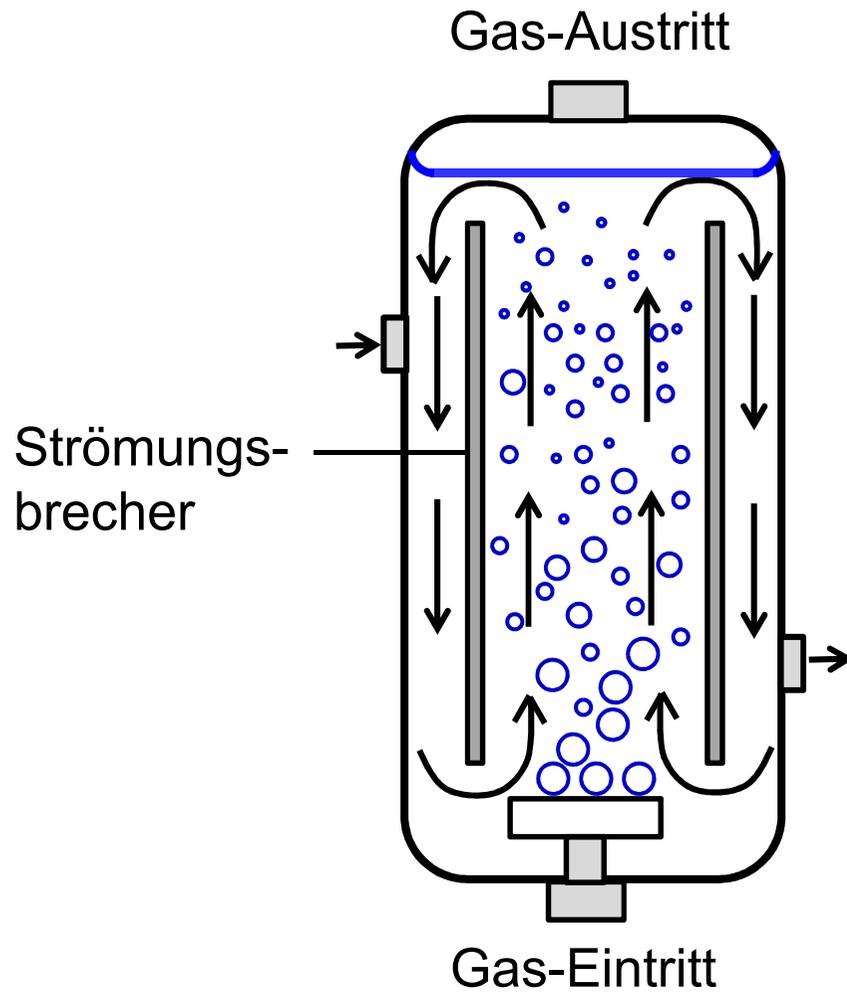
Verfahrenstechnik

- Batchbetrieb
- Kontinuierlich, mit intern oder extern integrierter Membran.

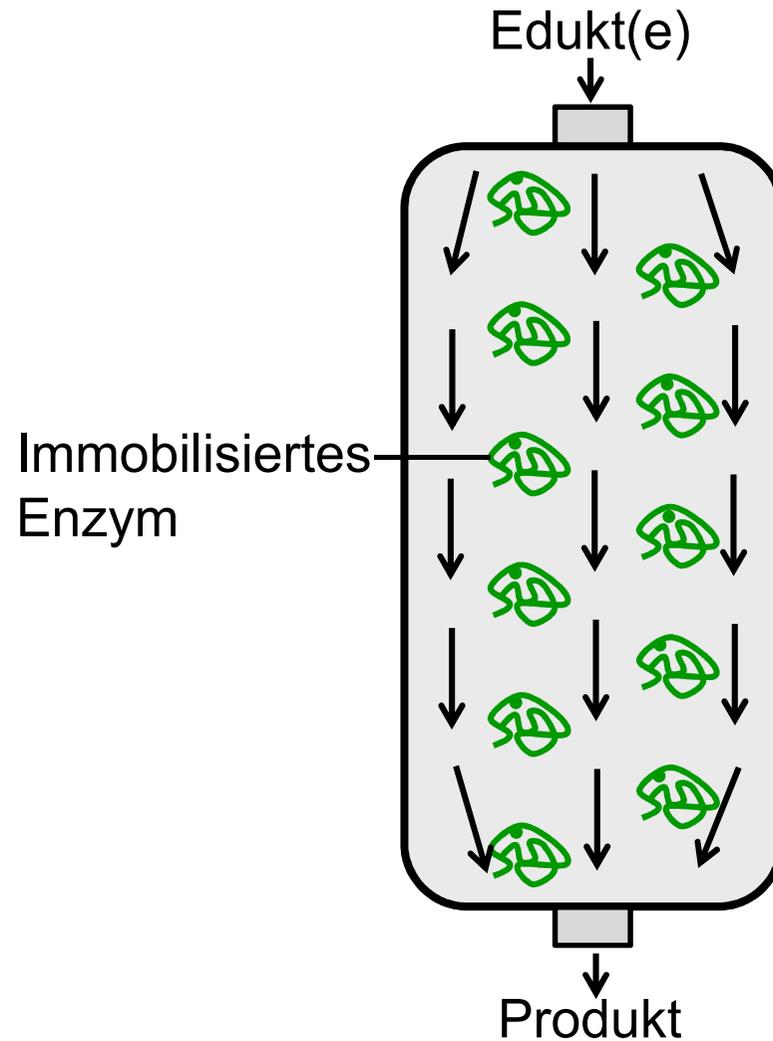
(R)-2-Hydroxy-3-methoxy-3-methyl-butansäure

Scale-up; Bioreaktoren, Typen, allgemeine Funktionsweisen:

Air-Lift-Bioreaktor

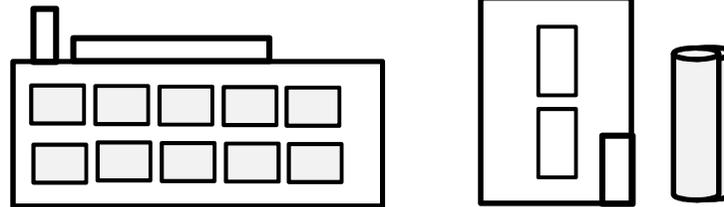


Festbett-Bioreaktor



Die Firma, in der die neue Carbonsäuresynthese stattfinden soll.

FuE-Projekt „Nitrilase-katalysierte Synthese...“



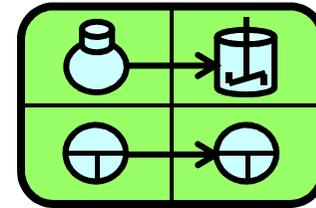
Die Biotech-Firma „[...] GmbH 2“:

Start-up-Betrieb mit europaweit 77 Mitarbeitern, davon 15(Bio) Chemiker, 7 Mikrobiologen, 13 Ingenieure (FH), 4 Ingenieure (TU).

Eigene Forschung und Entwicklung mit angegliederten Technika zur Produktion. Seit 8 Jahren in FuE, Scale-up und der Fertigung von ChiPros mittels weißer Biotechnologie aktiv.

Spezialitäten: Enantiomerenreine, optisch aktive Carbonsäuren, Carbonsäureester und Amine als Zwischenprodukte für neue Arzneimittel- und Pflanzenschutzwirkstoffe.

FuE-Projektmanagement in der Chemieindustrie



Lerninhalt →

**P3: Neue metallorganische Gerüst-
materialien zur Gasspeicherung.**

(Chemie und Technik)

Beispiel P3

Innovationsvorhaben P3:



**„Neue metallorganische Gerüst-
materialien zur Gasspeicherung“.**

(Chemie und Technik)

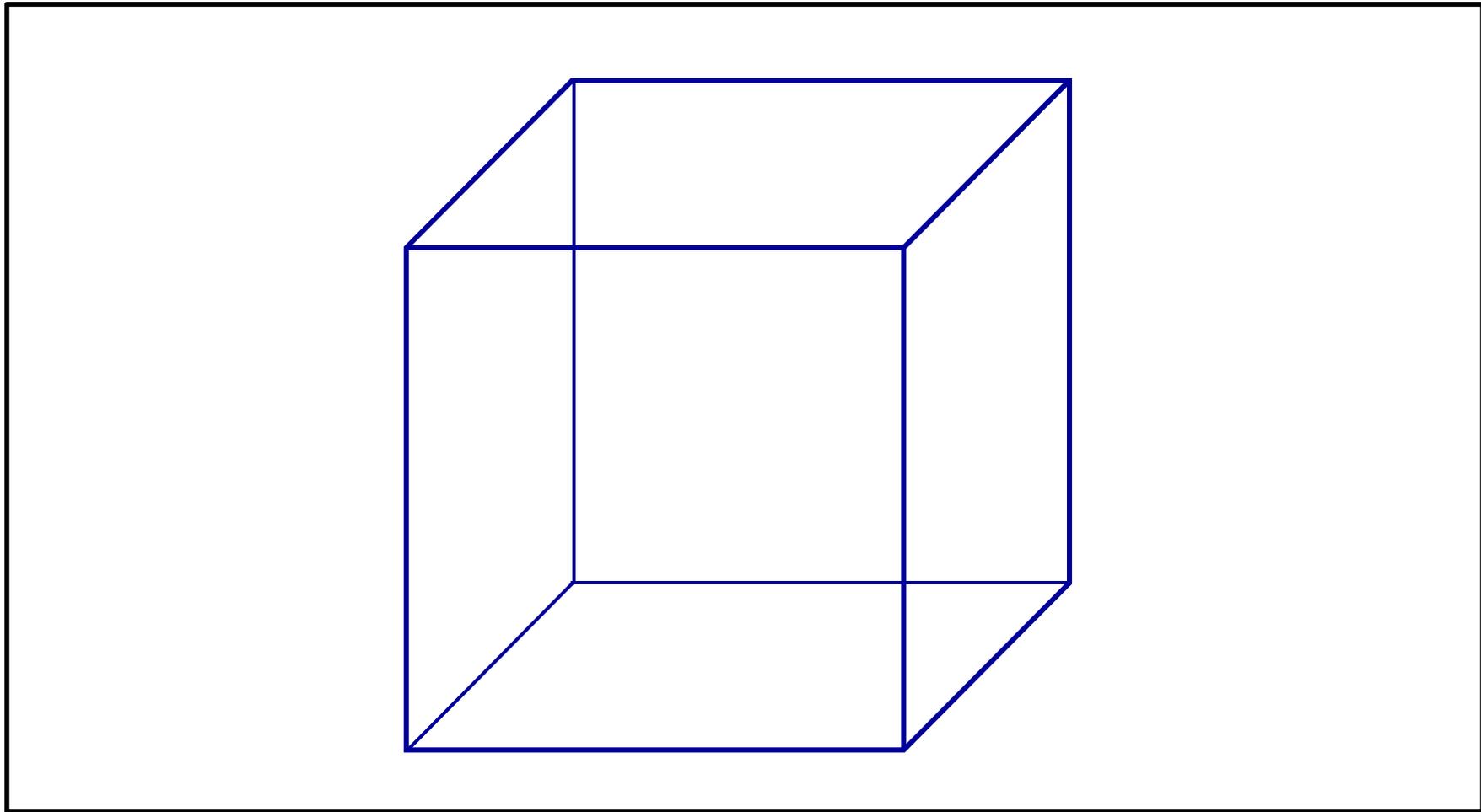
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

- **Poröse Koordinationspolymere.**
- **„Gerüstbau“ für Nano-Architekturen.**
- **Technische Eigenschaften.**

- Festkörper höchster Porosität, kaum „Totvolumina“.
- Riesige Oberflächen pro Gramm Material.
- Flexible, „dehnbare“ Gitter.
- Stabilität gegen Gitter-Verwindungen/Gitter-Brüche.
- Hohe Beweglichkeit von Gastmolekülen in den Poren.
- Eignung als „Atom- bzw. Molekülsiebe“.
- Nanocontainer für Trennung, Speicherung, Katalyse.

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

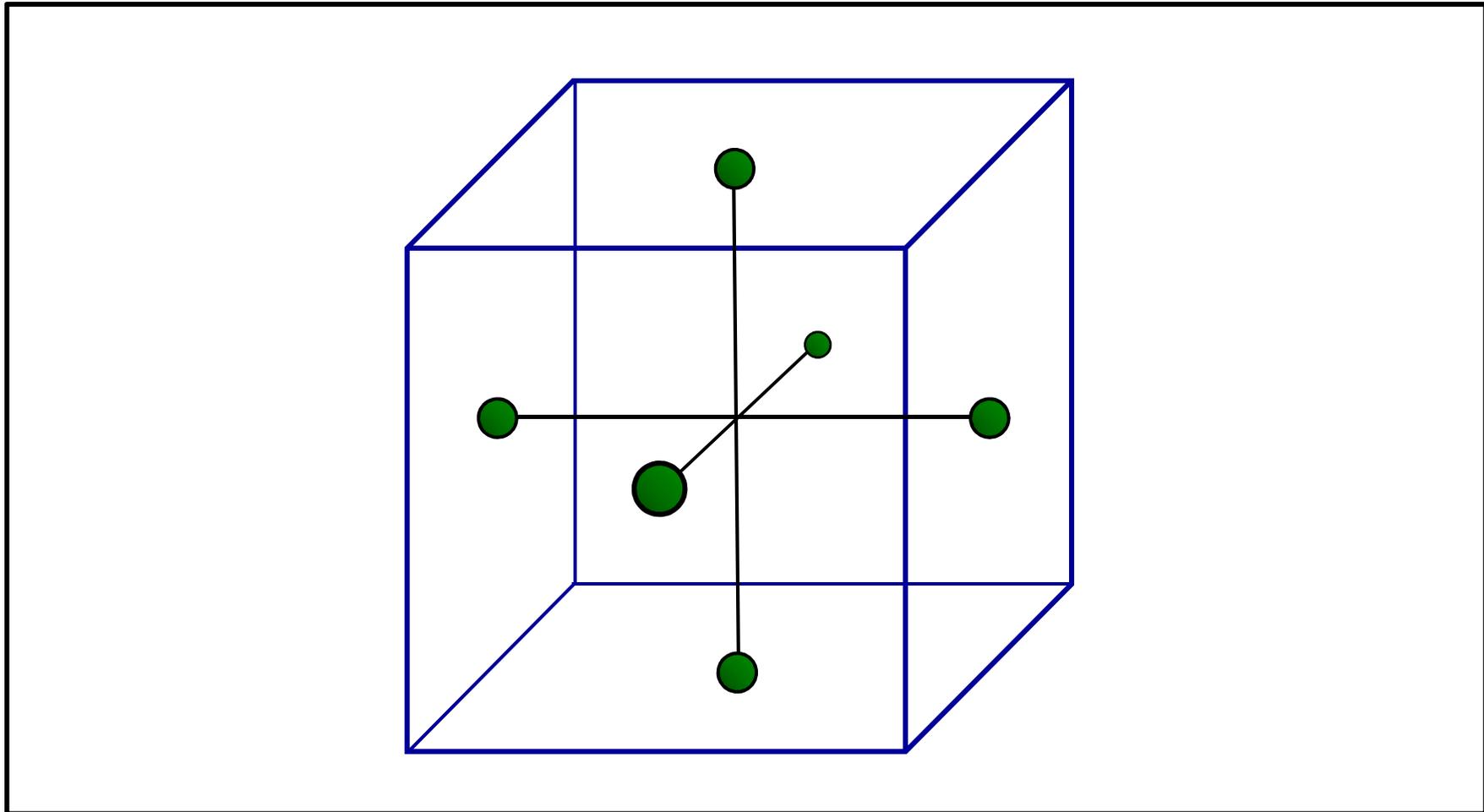
Hexaeder, perspektivische Wiedergabe:



(Platonische Körper: Reguläre Polyeder, Kubus)

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

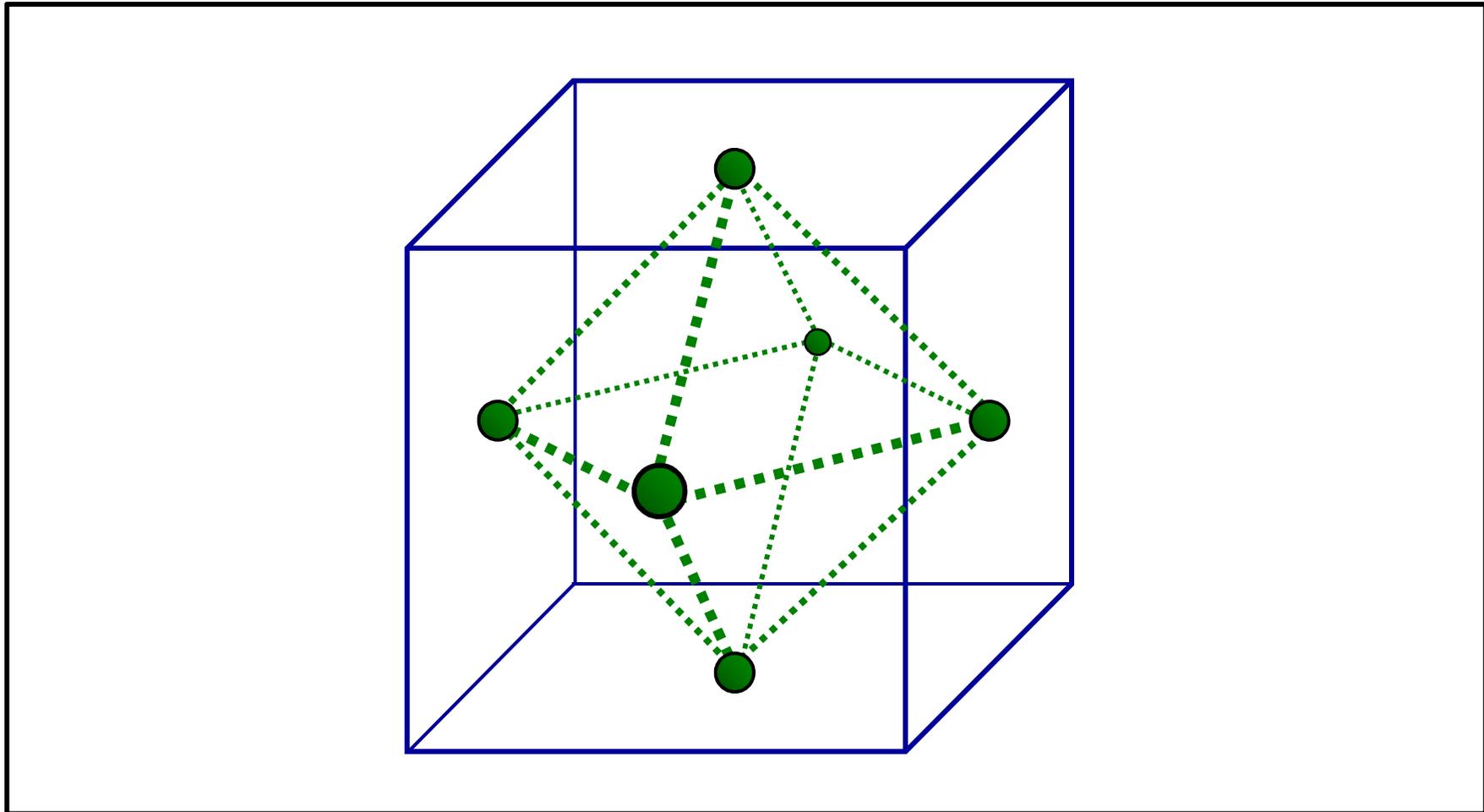
Oktaeder im Hexaeder, perspektivische Wiedergabe:



(Platonische Körper: Reguläre Polyeder, Kubus)

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

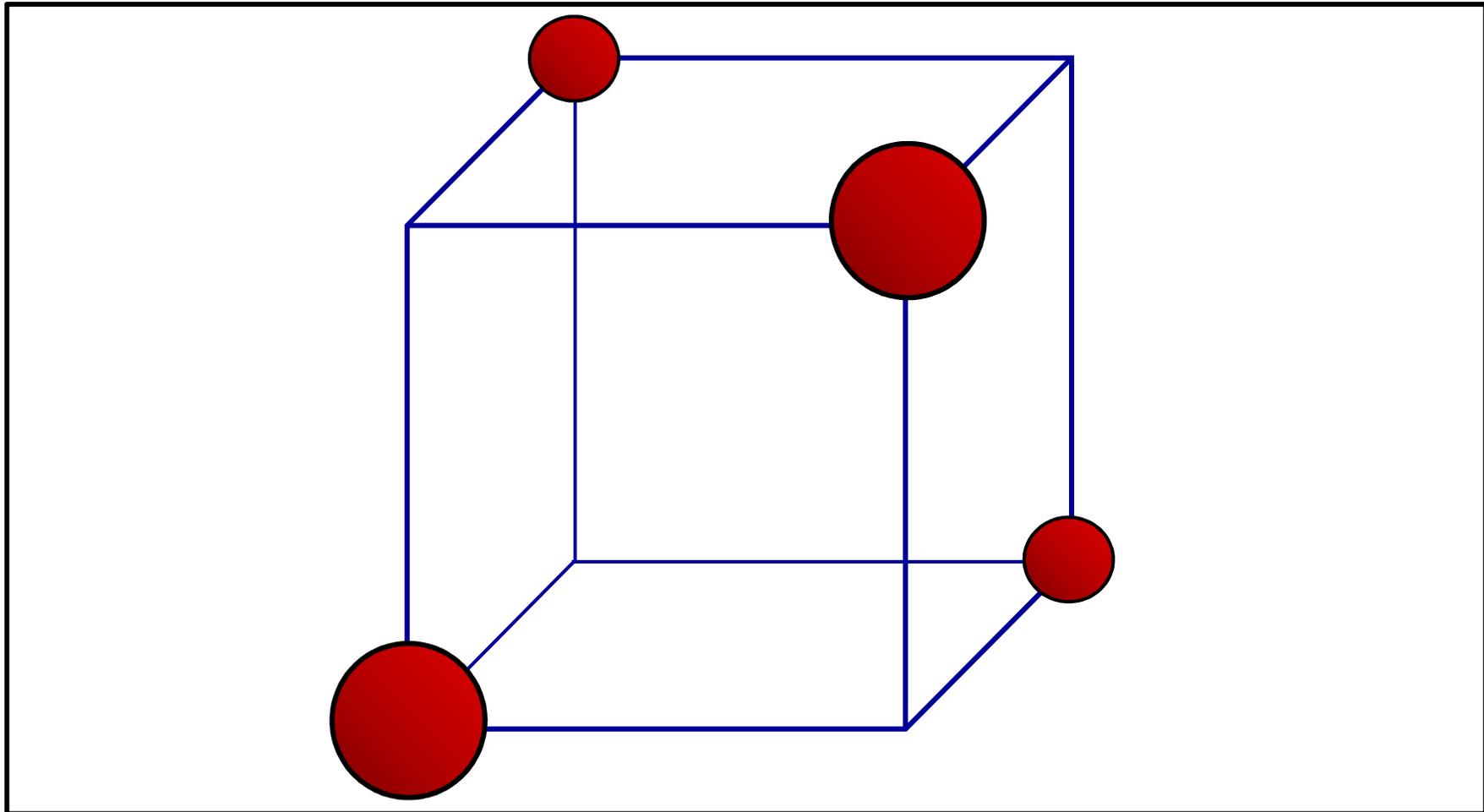
Oktaeder im Hexaeder, perspektivische Wiedergabe:



(Platonische Körper: Reguläre Polyeder, Kubus)

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

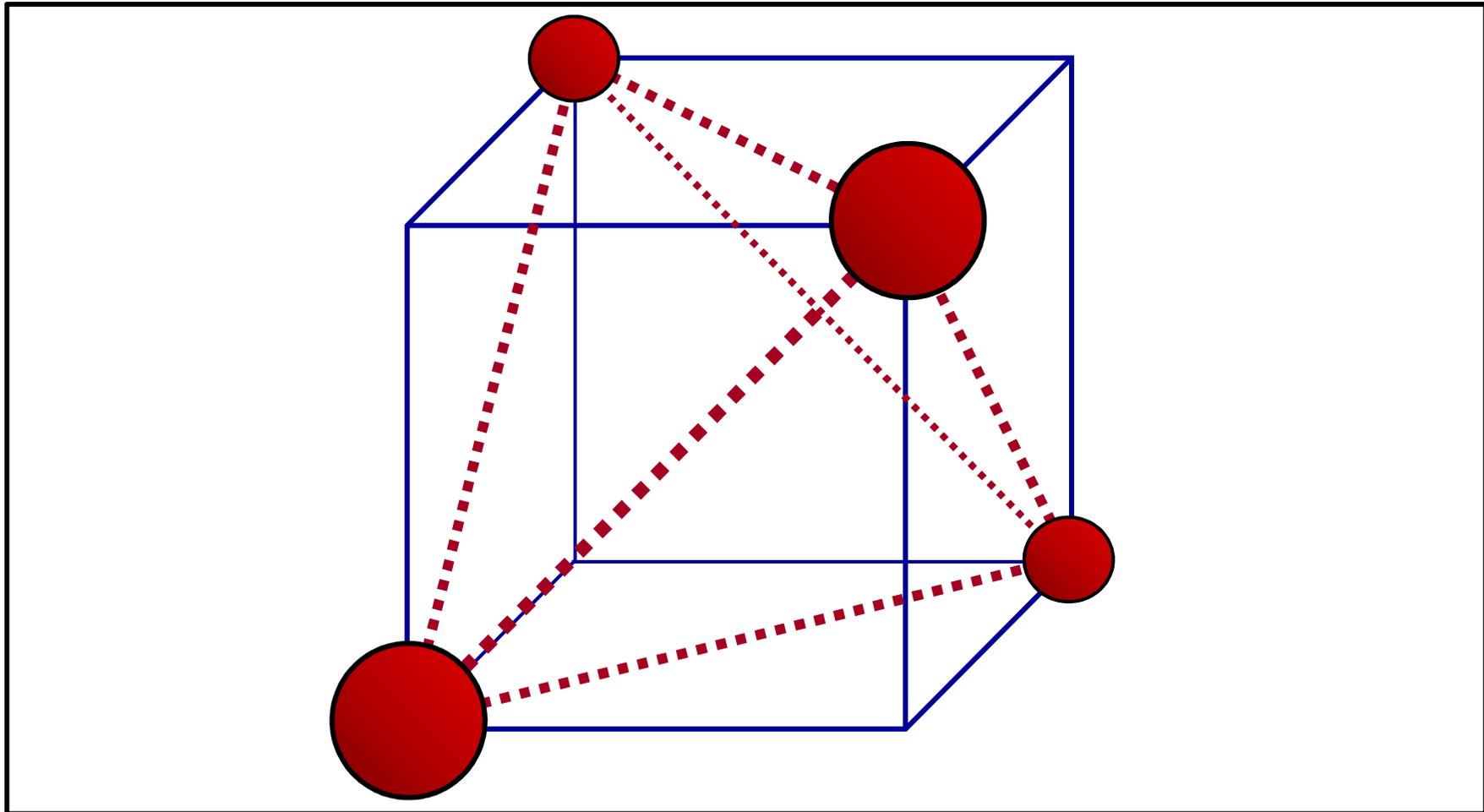
Tetraeder im Hexaeder, perspektivische Wiedergabe:



(Platonische Körper: Reguläre Polyeder, Kubus)

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

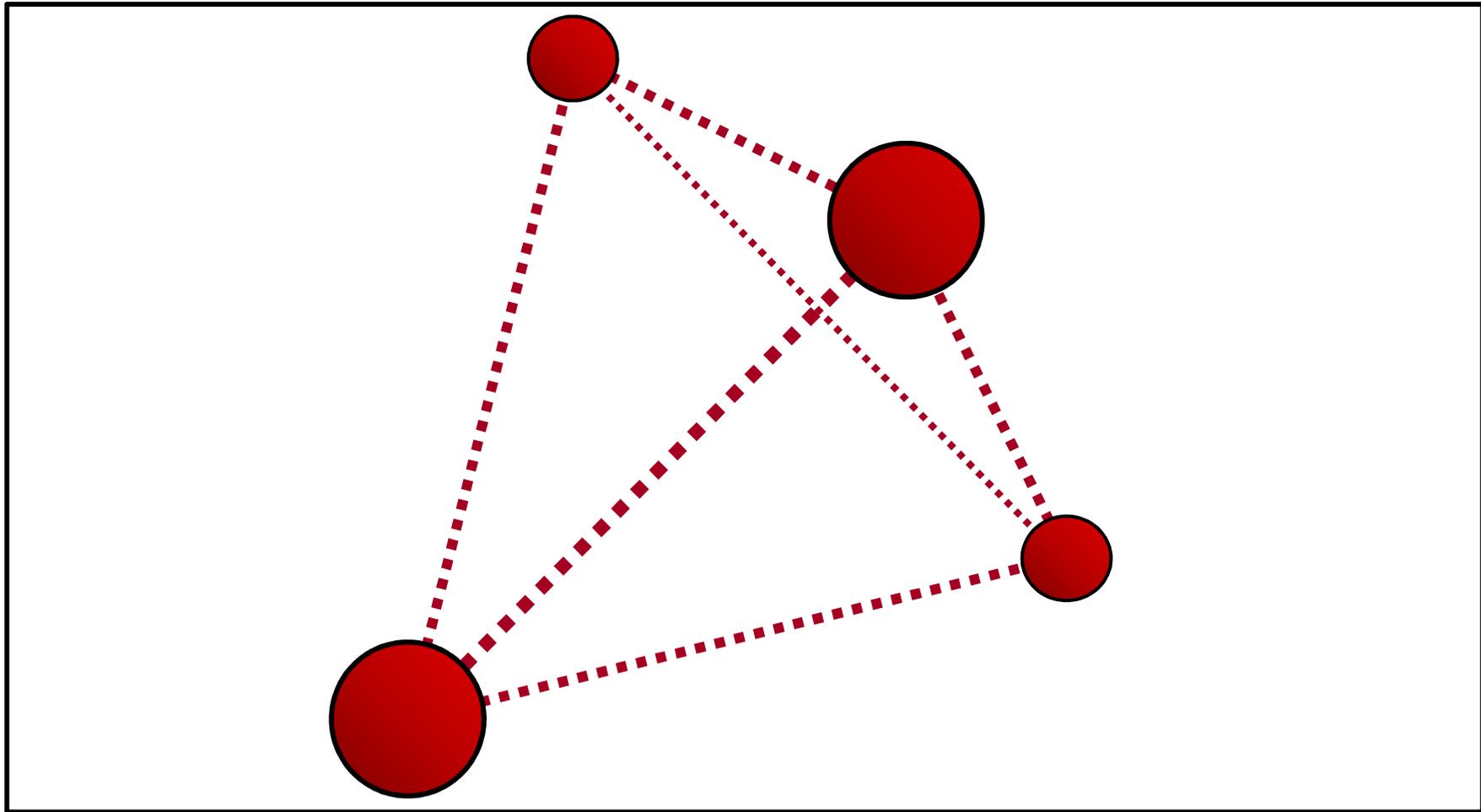
Tetraeder im Hexaeder, perspektivische Wiedergabe:



(Platonische Körper: Reguläre Polyeder, Kubus)

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

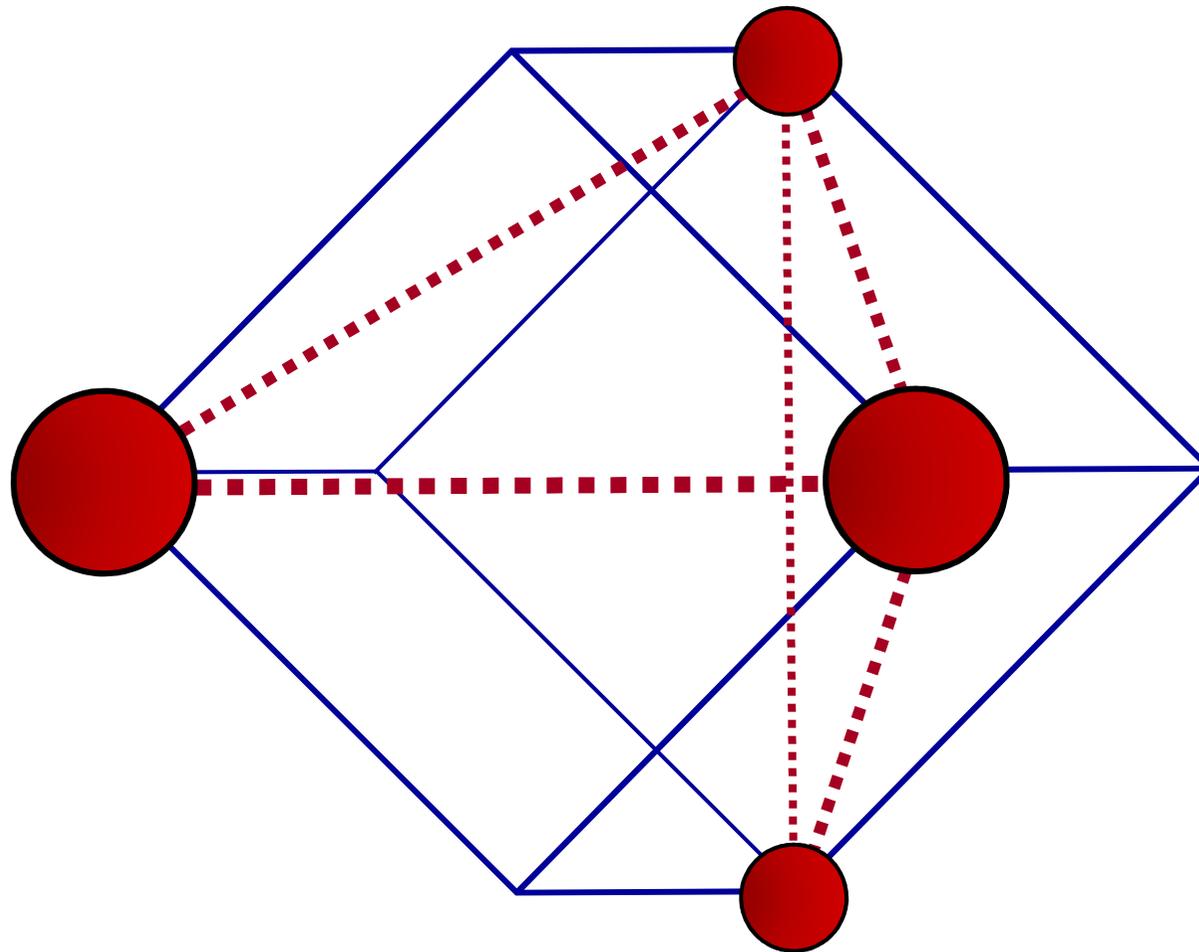
Tetraeder, perspektivische Wiedergabe:



(Platonische Körper: Reguläre Polyeder, „Vierflach“)

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

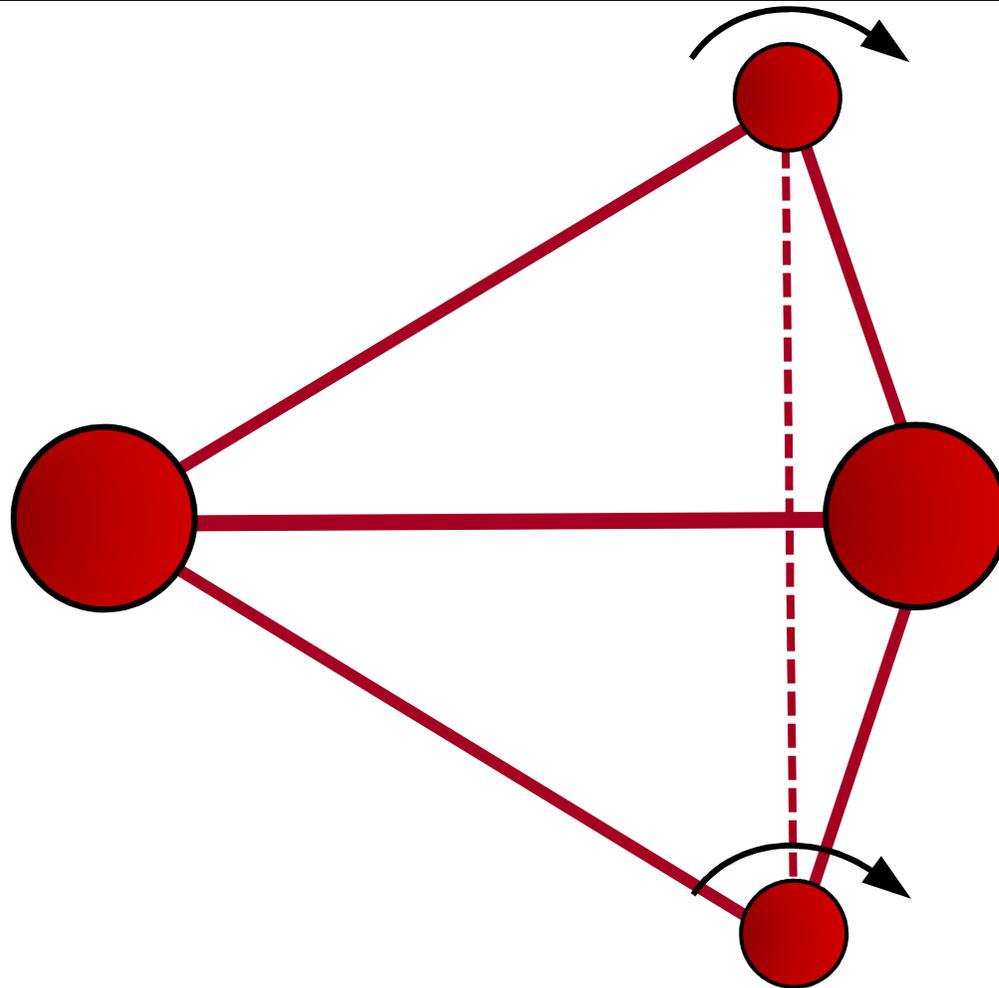
Tetraeder im Hexaeder, perspektivische Wiedergabe:



(Platonische Körper: Reguläre Polyeder, Kubus)

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

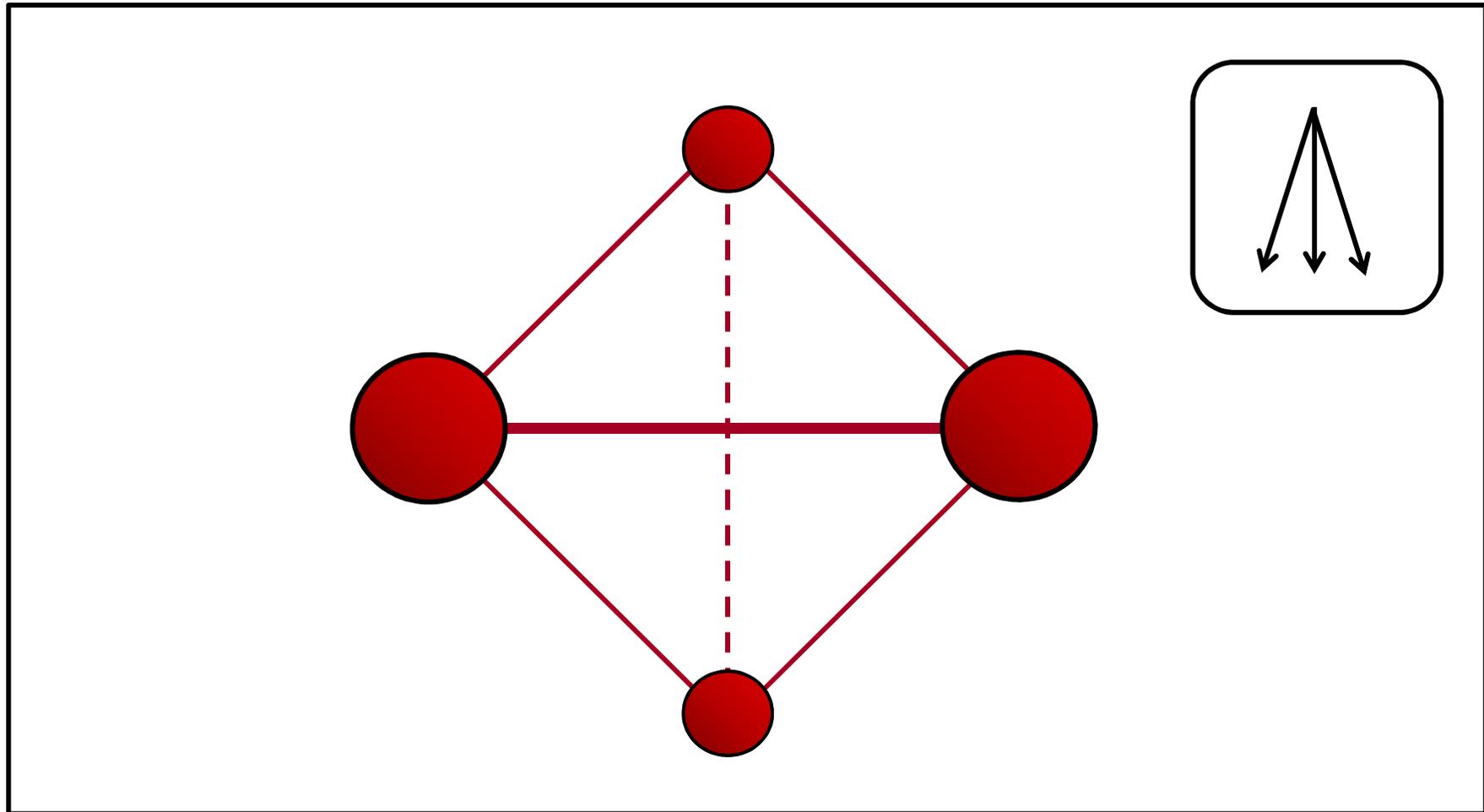
Tetraeder, perspektivische Wiedergabe:



(Platonische Körper: Reguläre Polyeder, „Vierflach“)

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

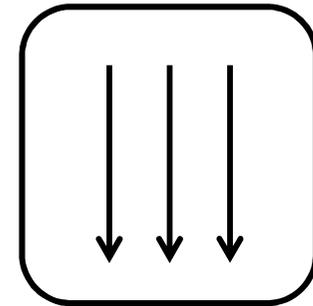
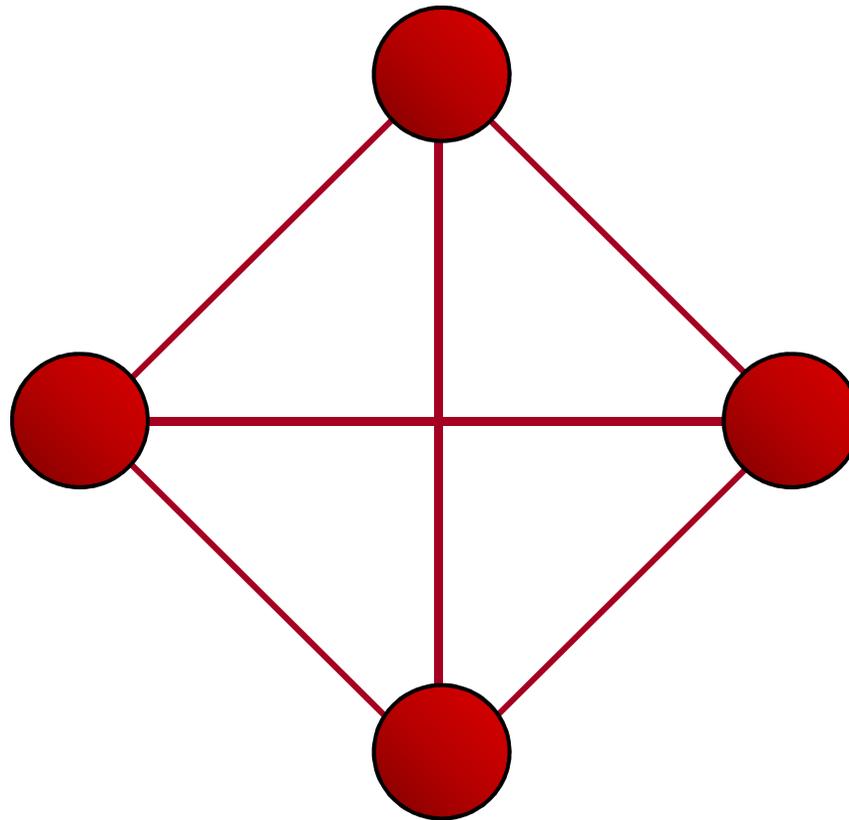
Tetraeder, perspektivische Wiedergabe: 4 Ecken + 6 Kanten.



(Platonische Körper: Reguläre Polyeder, „Vierflach“)

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

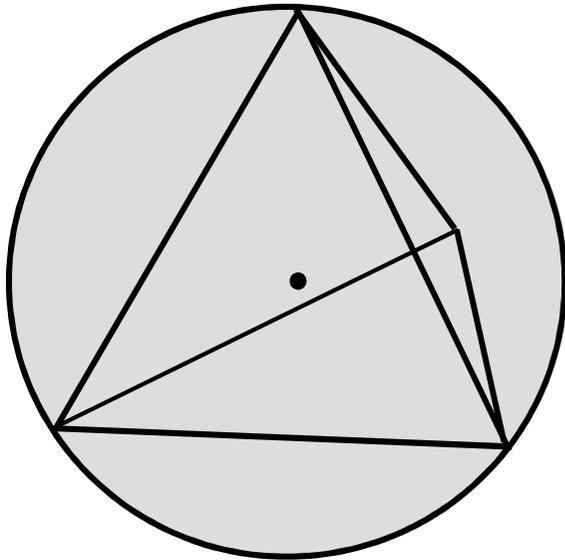
Tetraeder, Parallelprojektion: 4 Ecken + 6 Kanten.



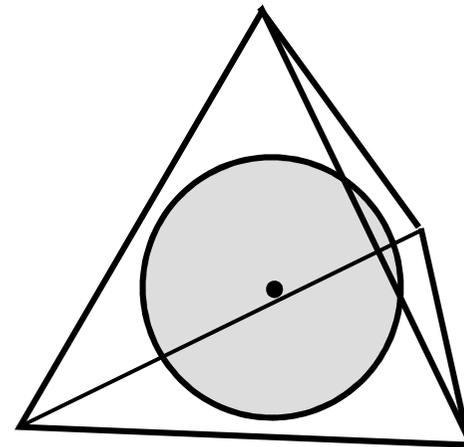
(Platonische Körper: Reguläre Polyeder, „Vierflach“)

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Tetraeder, Außenkugel, Innenkugel:



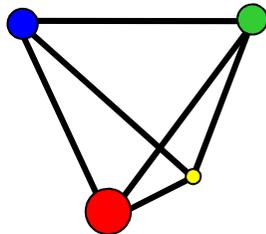
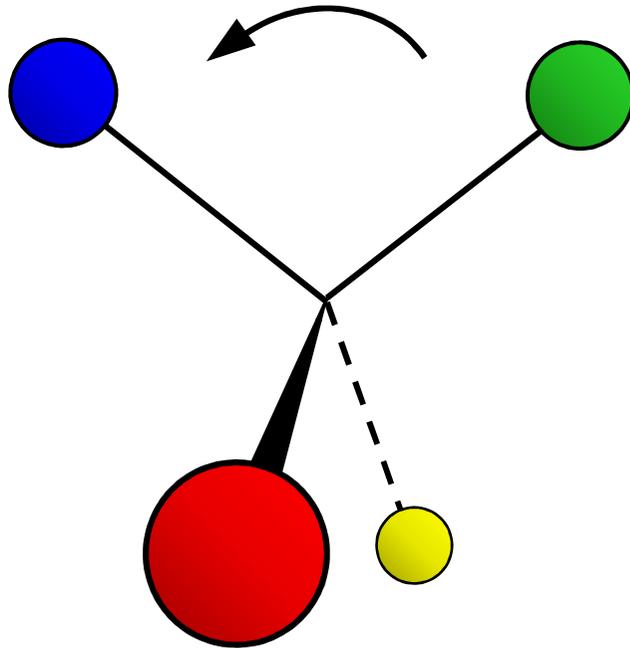
Außenkugel



Innenkugel

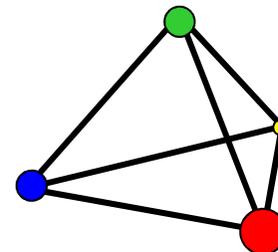
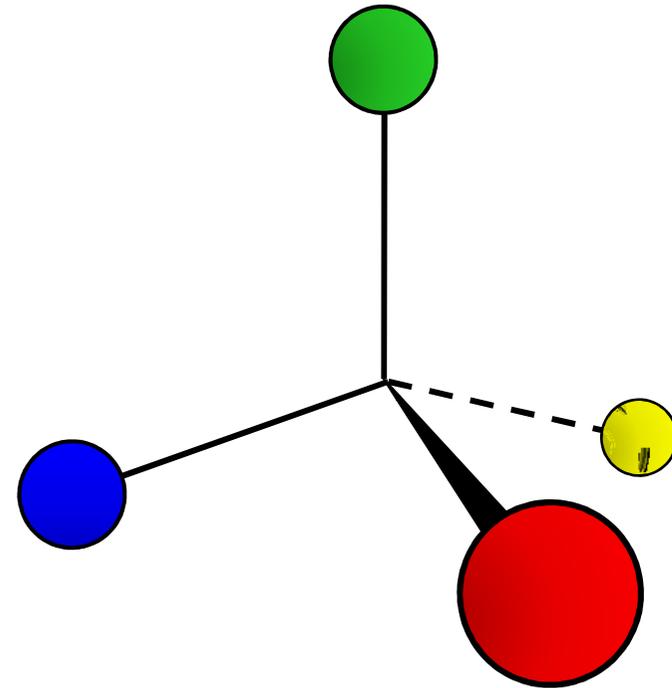
Vier Atome in den Ecken eines Tetraeders:

4 Ecken
4 Außenkugel-Radien



4 Ecken
6 Kanten

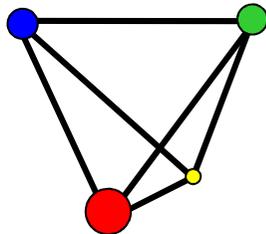
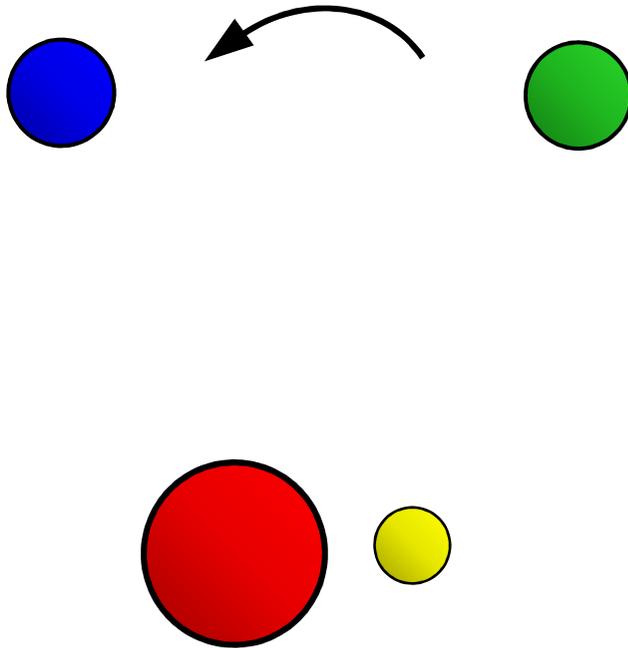
4 Ecken
4 Außenkugel-Radien



4 Ecken
6 Kanten

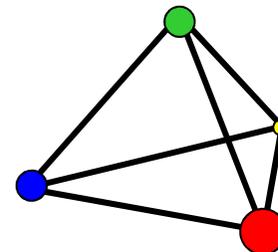
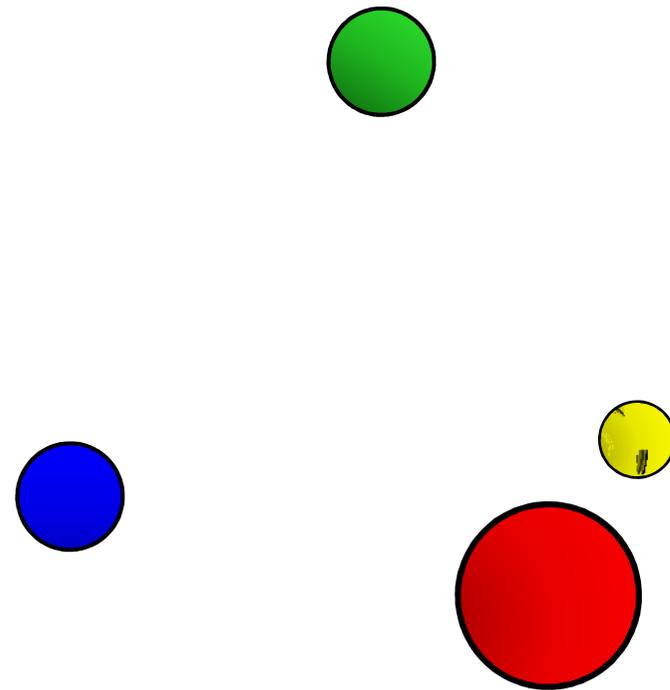
Vier Atome in den Ecken eines Tetraeders:

4 verschiedene Ecken



4 Ecken
6 Kanten

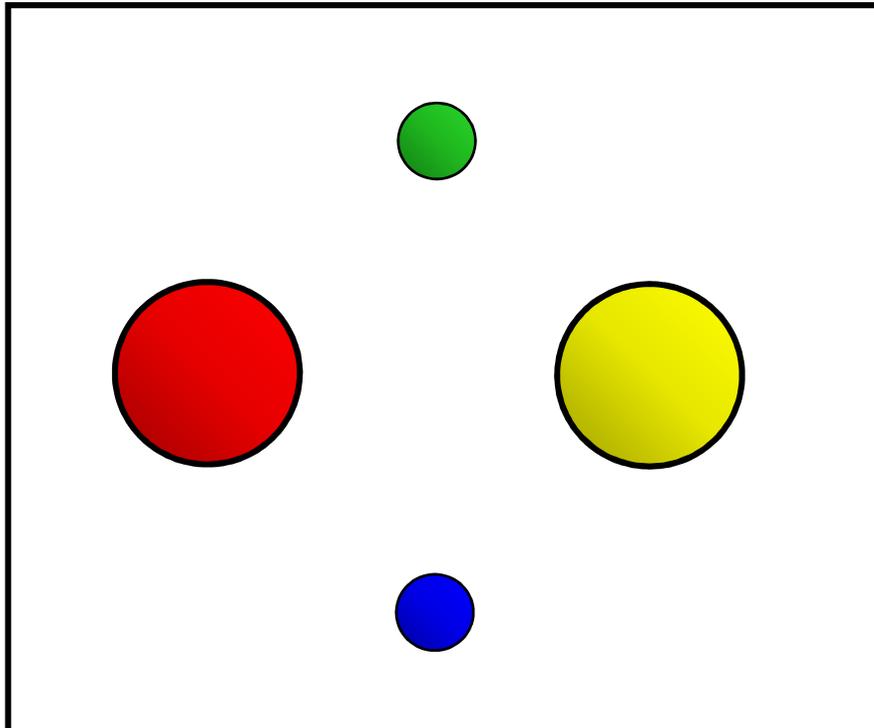
4 verschiedene Ecken



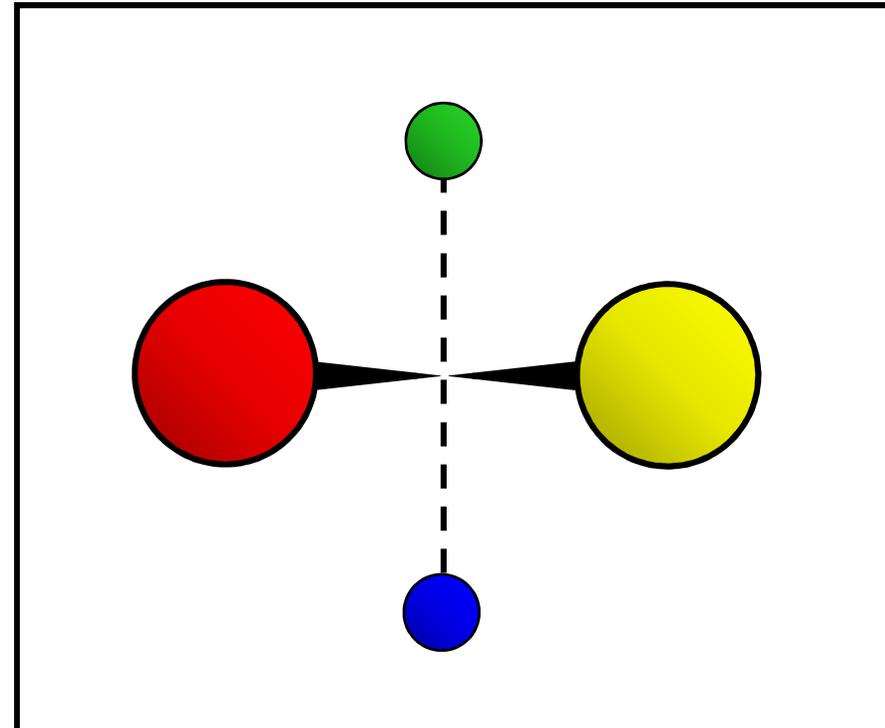
4 Ecken
6 Kanten

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Strukturprinzip, Atome in den Ecken eines Tetraeders:



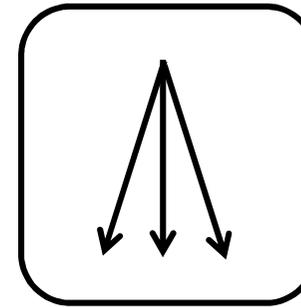
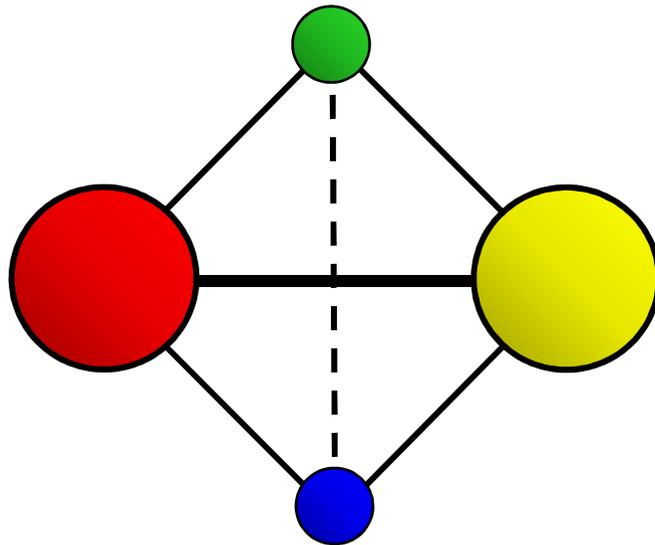
4 verschiedene Atome,
perspektivische Darstellung



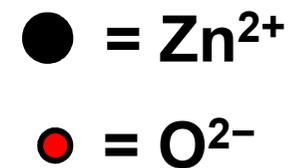
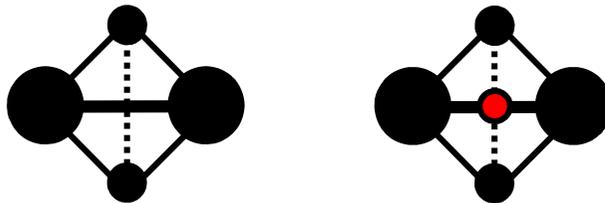
Mit den 4 Außenkugel-Radien,
perspektivische Darstellung

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Strukturprinzip, Atome in den Ecken eines Tetraeders:

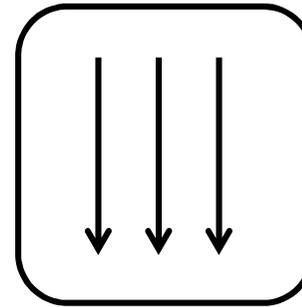
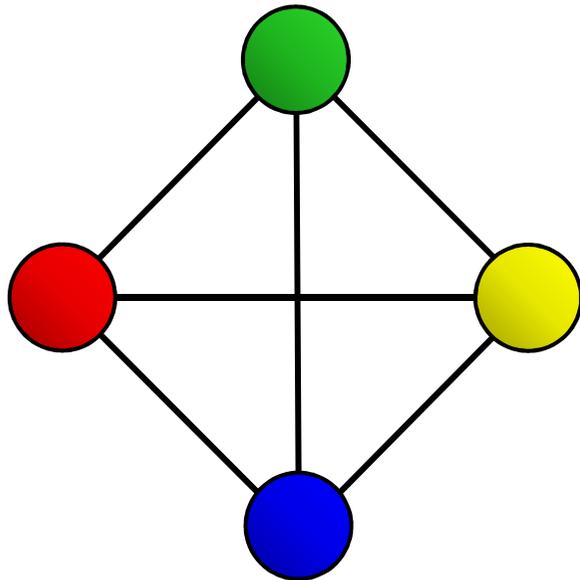


Perspektivisch:
6 Kanten, 4 Ecken

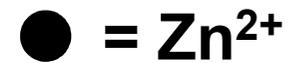
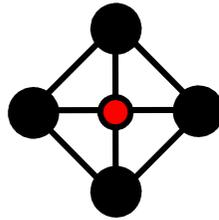
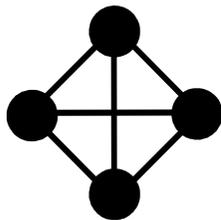


Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Atome in den Ecken eines Tetraeders, Parallelprojektion:

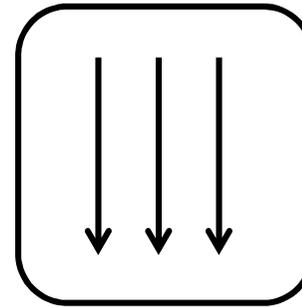
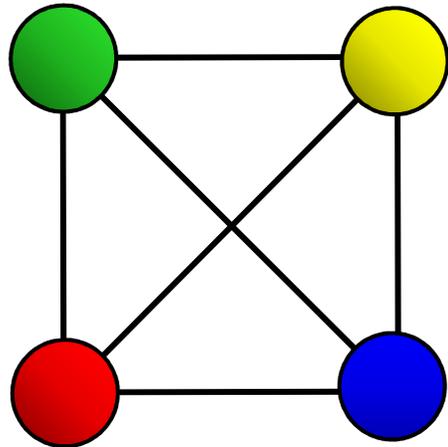


Parallelprojektion:
6 Kanten + 4 Ecken

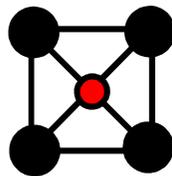
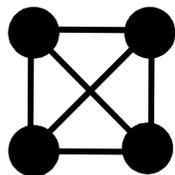


Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Atome in den Ecken eines Tetraeders, Parallelprojektion:

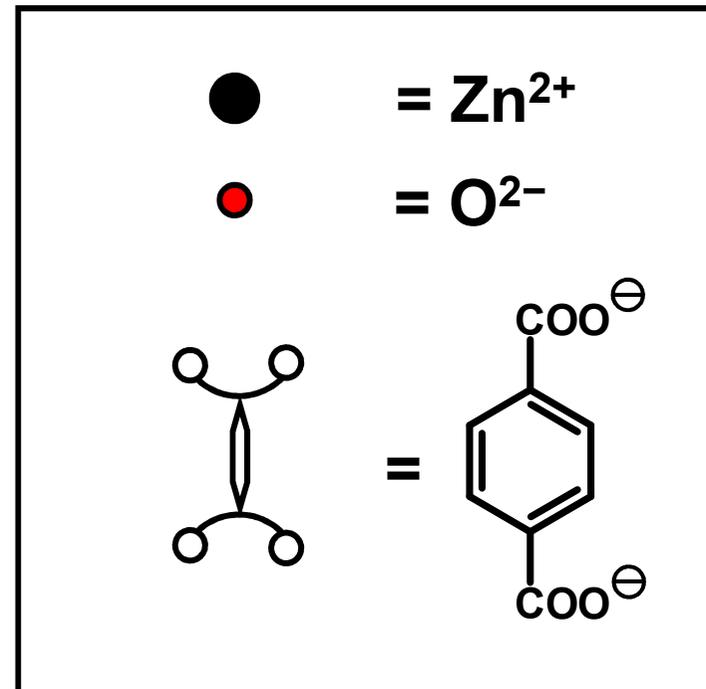
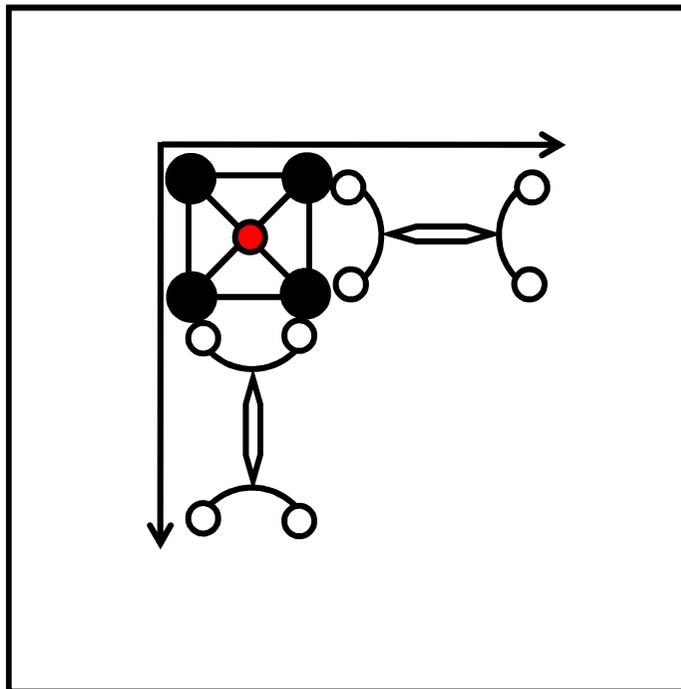
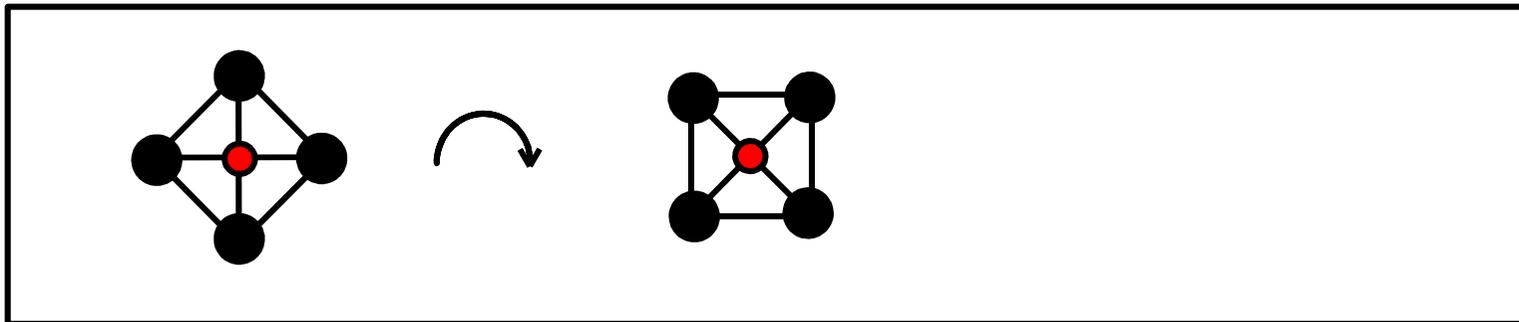


Parallelprojektion:
6 Kanten + 4 Ecken



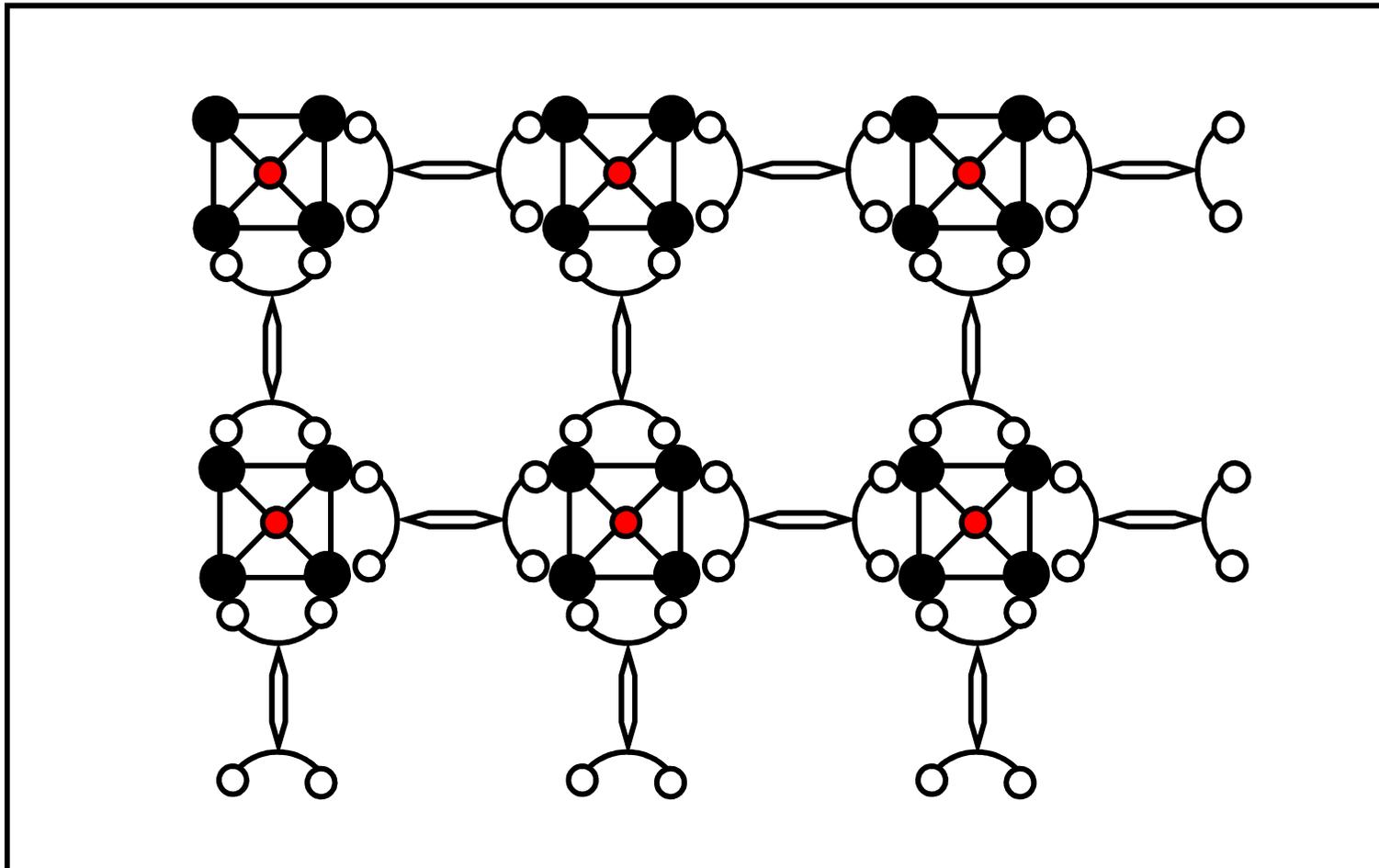
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Benzol-1,4-dicarbonsäure als „Brückenligand“:



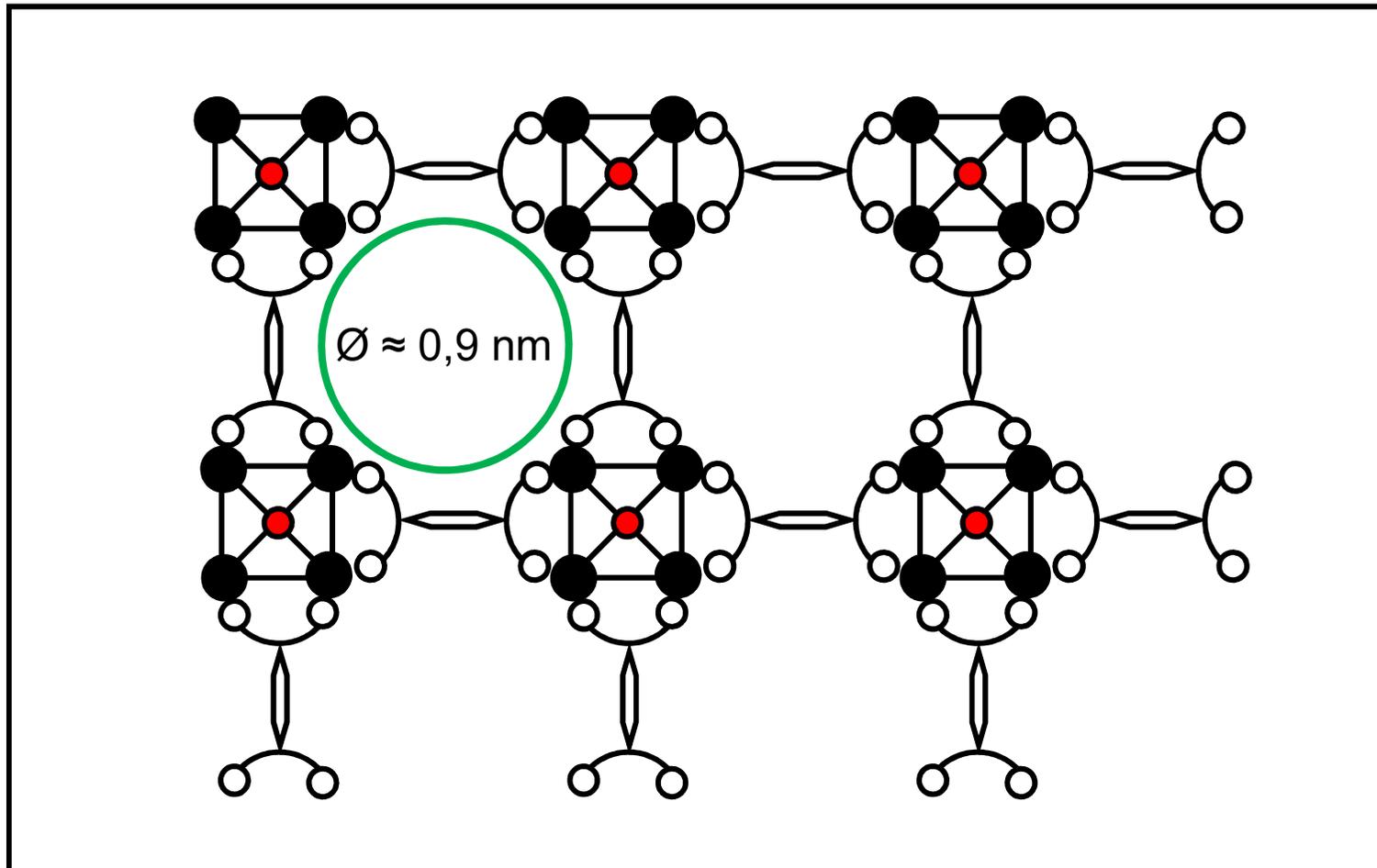
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Benzol-1,4-dicarbonsäure als „Brückenligand“:



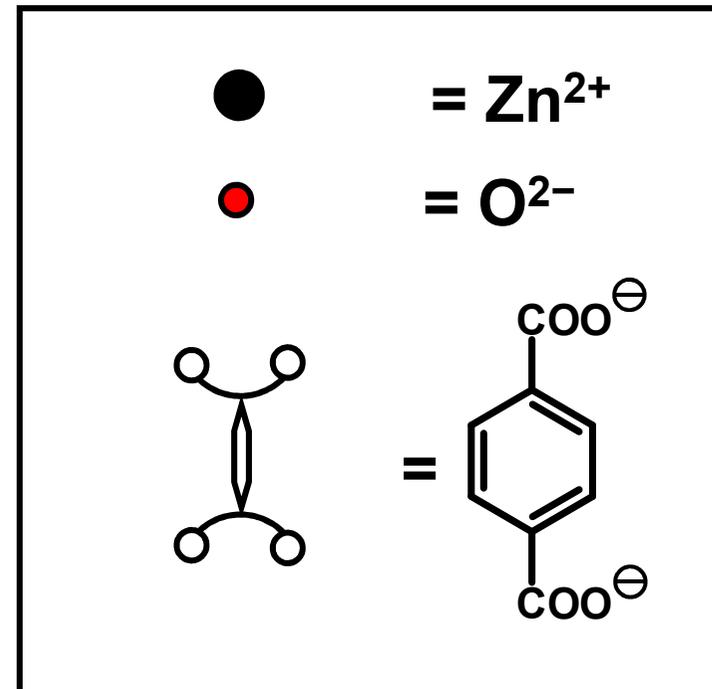
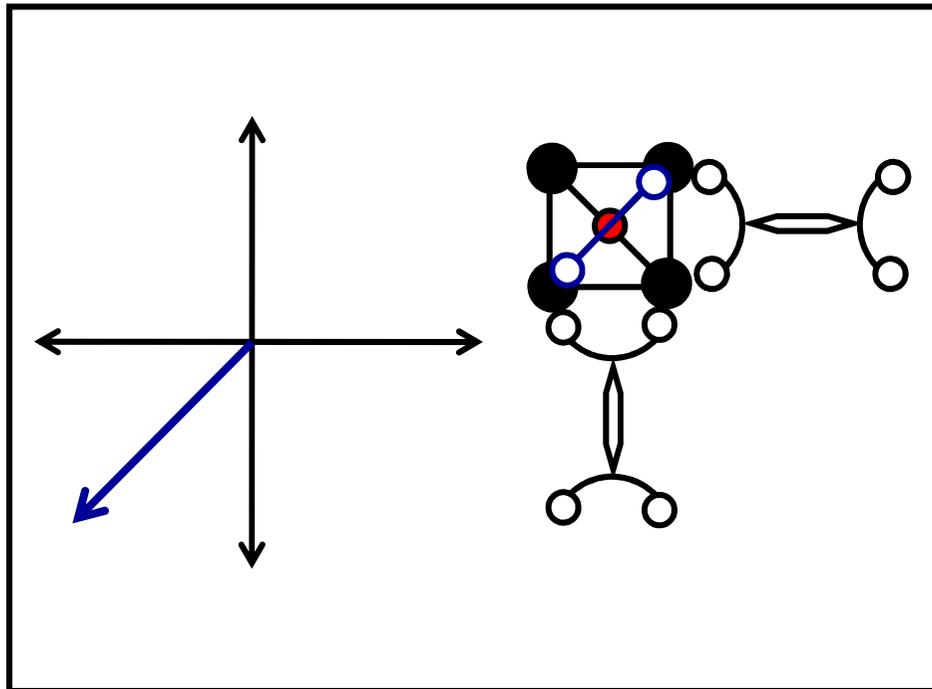
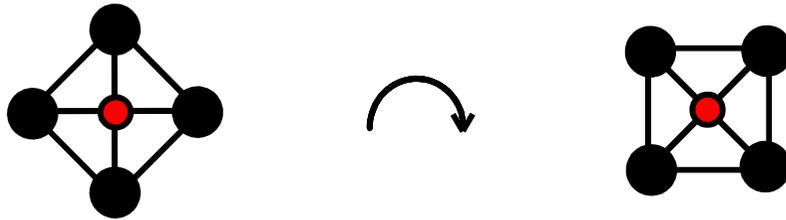
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Benzol-1,4-dicarbonsäure als „Brückenligand“:



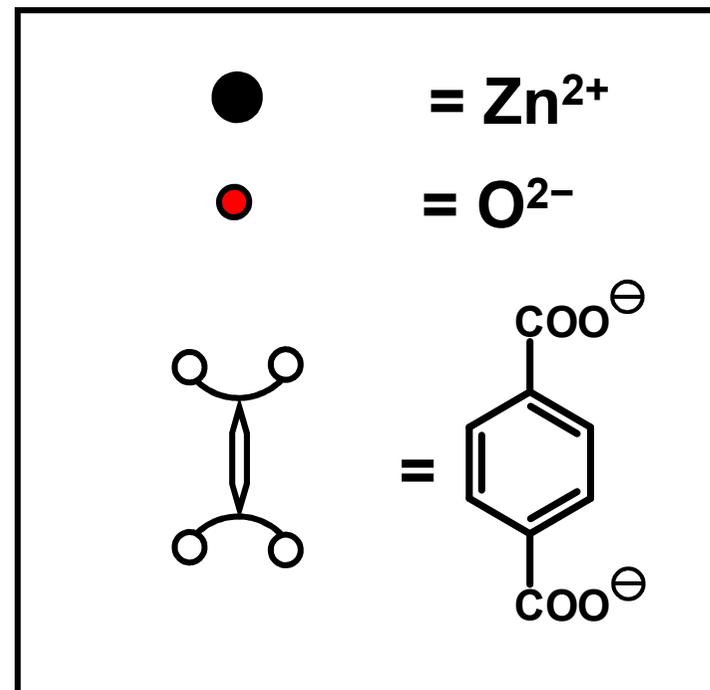
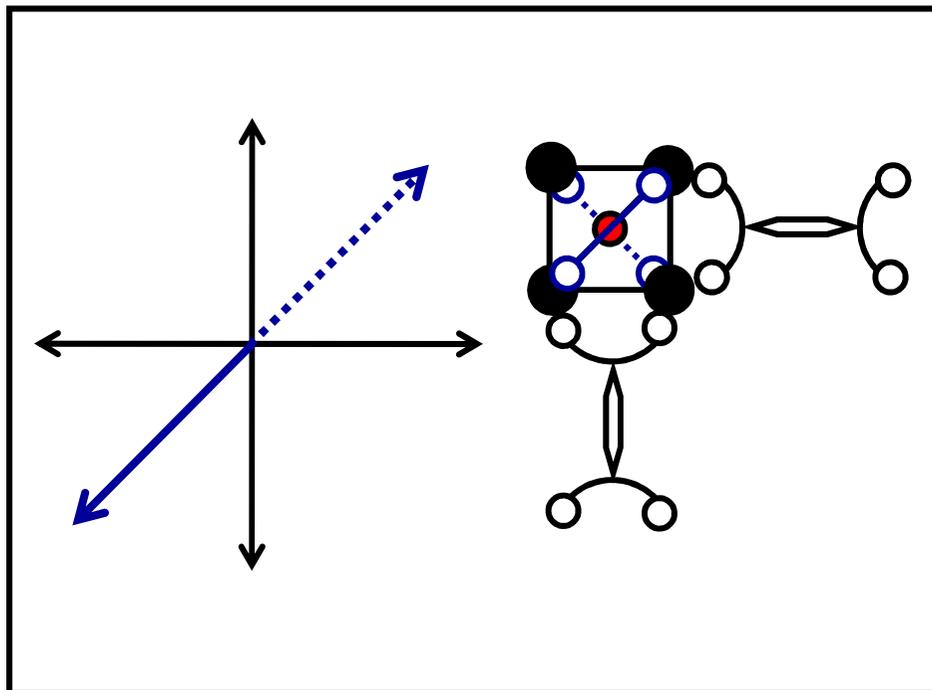
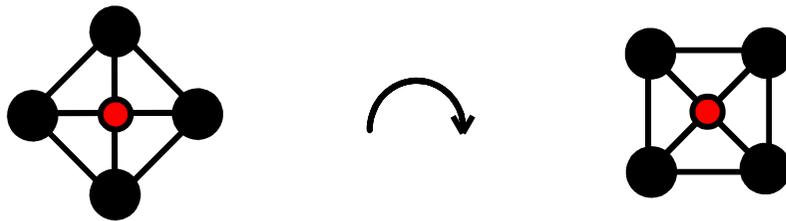
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Benzol-1,4-dicarbonsäure als „Brückenligand“:



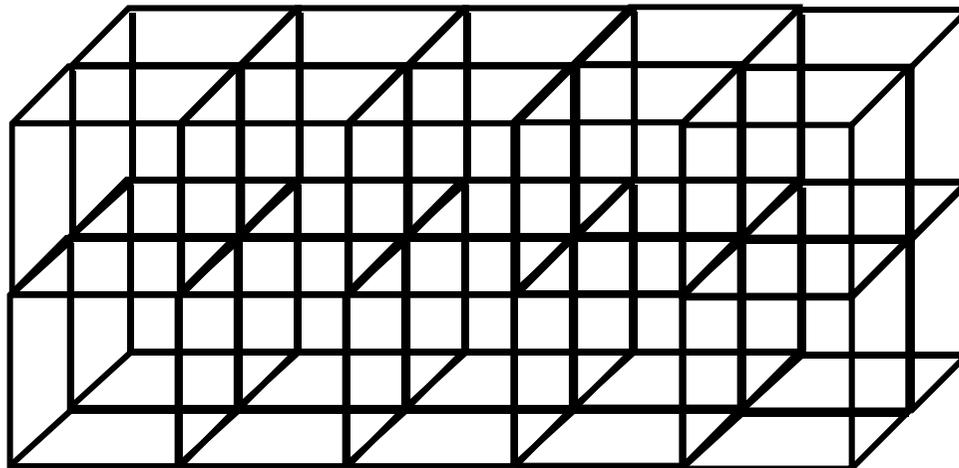
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Benzol-1,4-dicarbonsäure als „Brückenligand“:



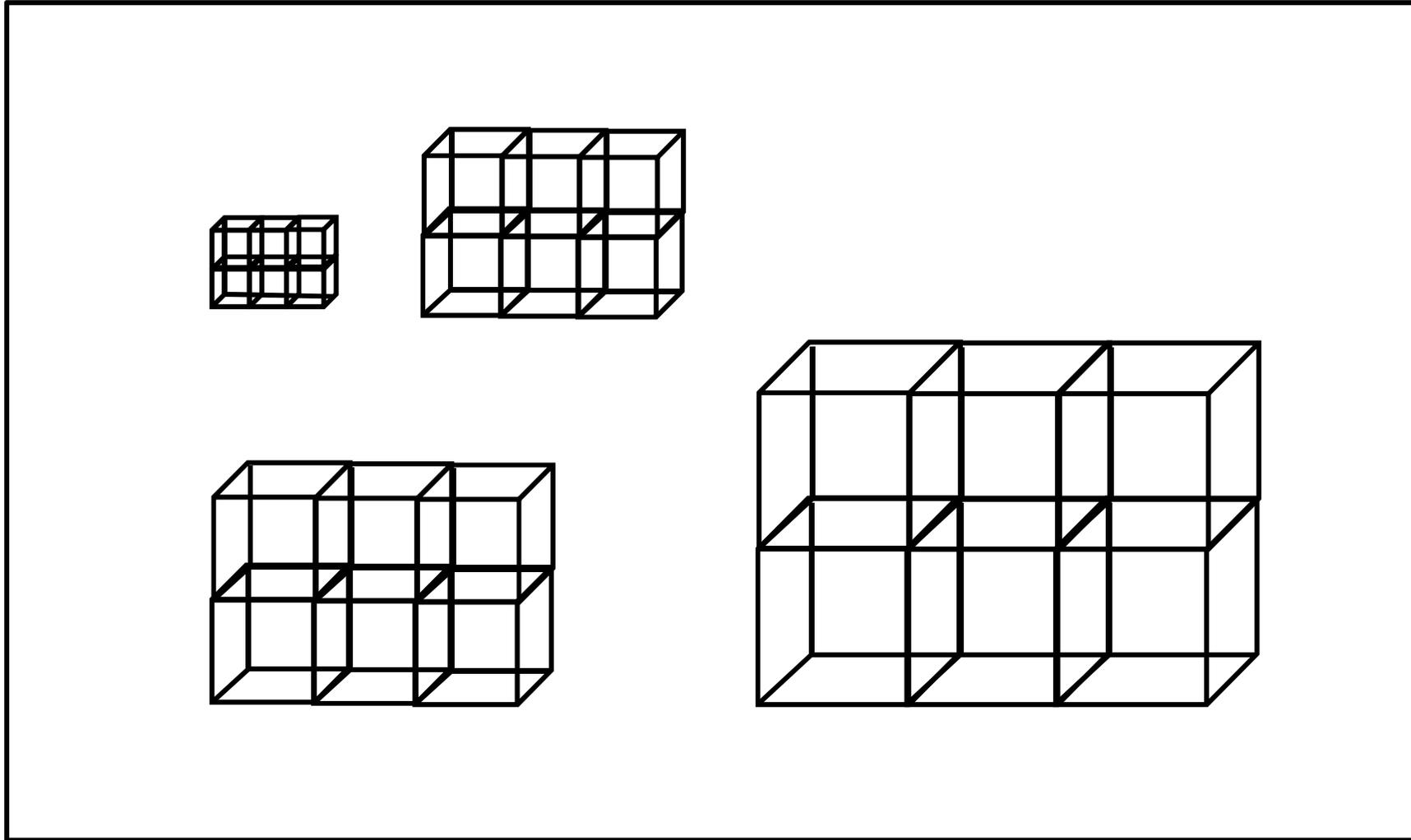
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Strukturprinzip: 3D-Netzwerkausschnitt:



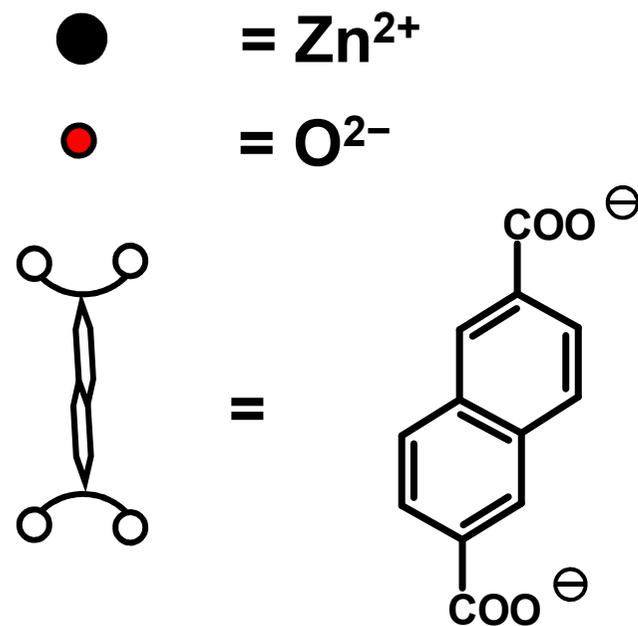
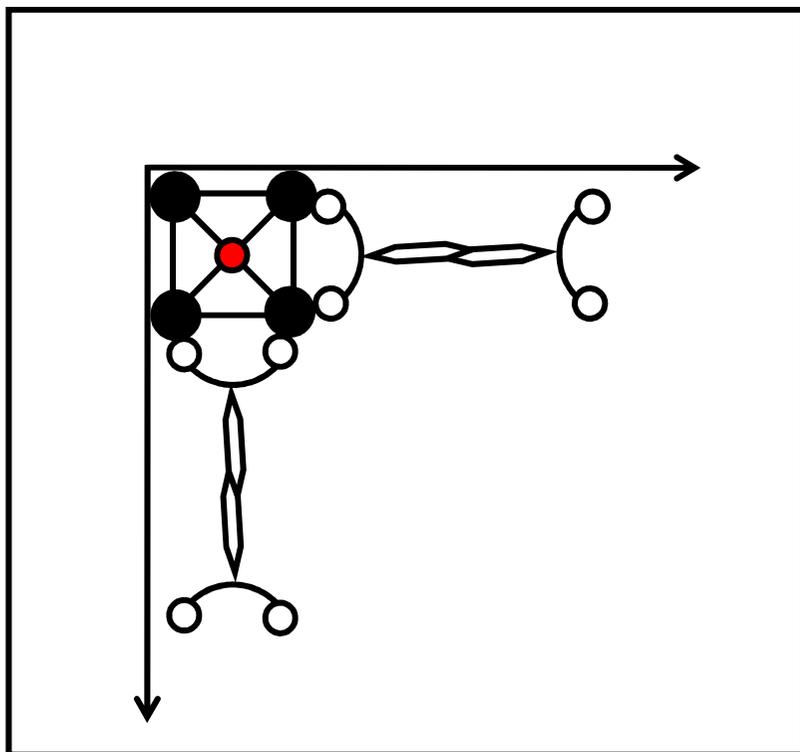
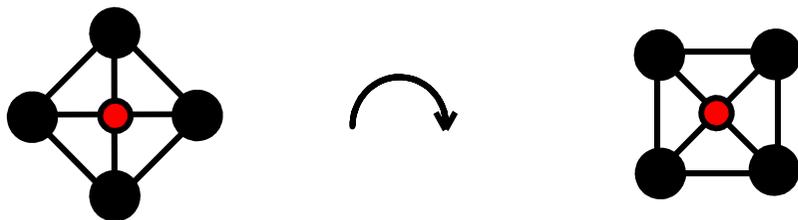
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Strukturprinzip: Isoretikuläre Netzwerke → „IRMOFs“.



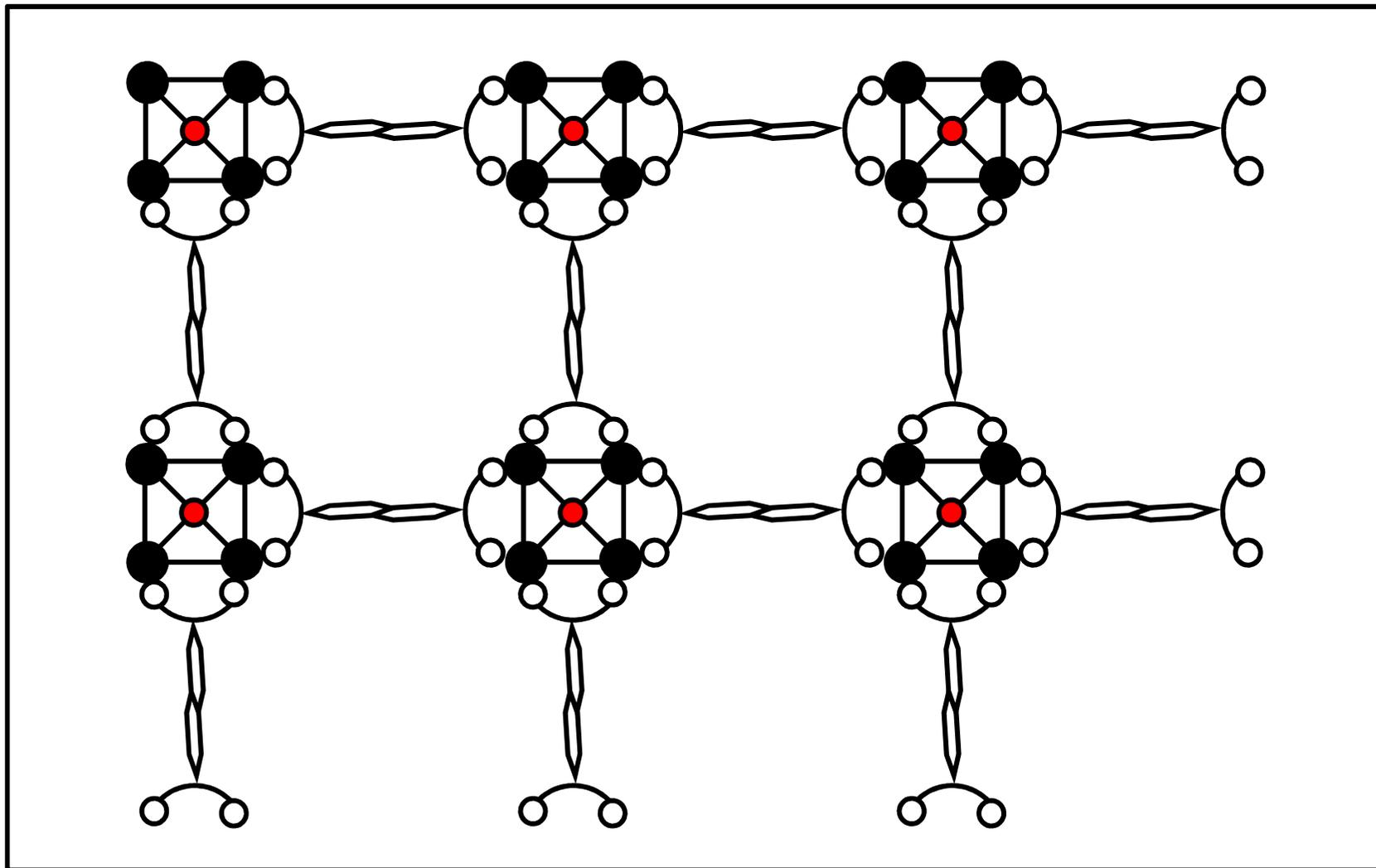
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Naphthalin-2,6-dicarbonsäure als „Brückenligand“:



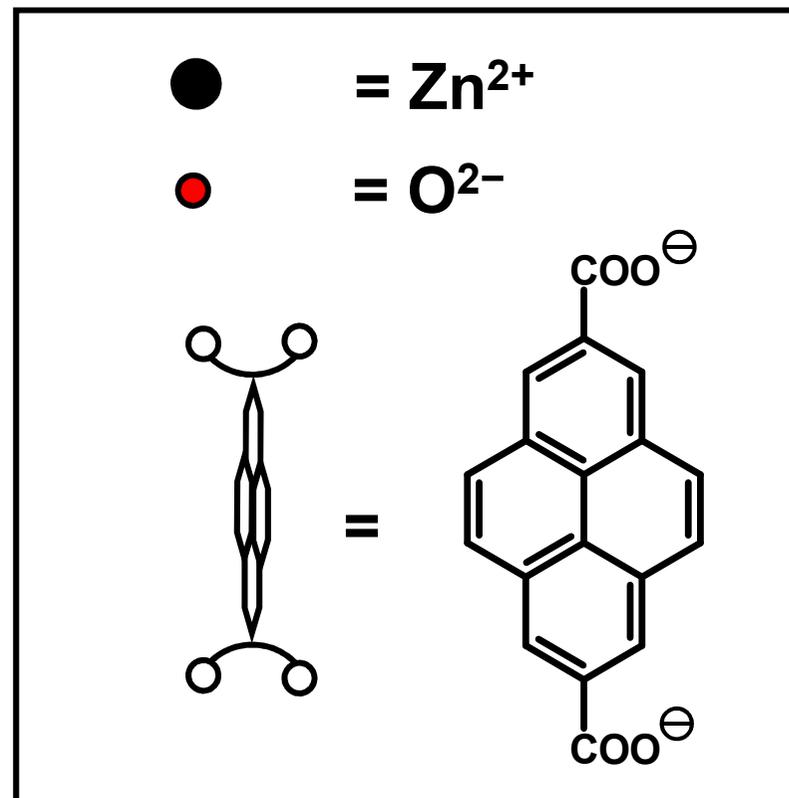
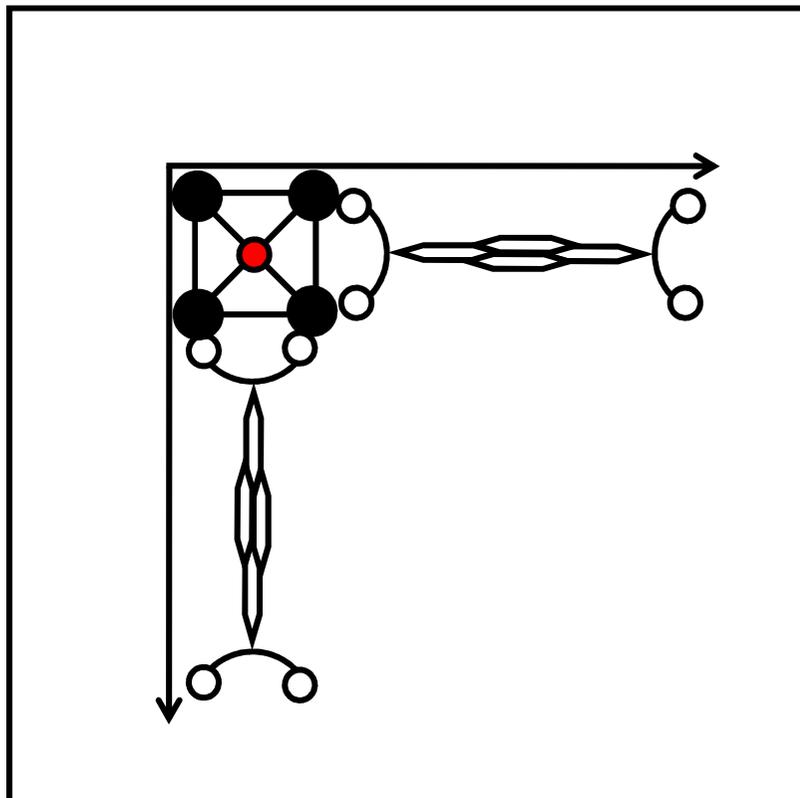
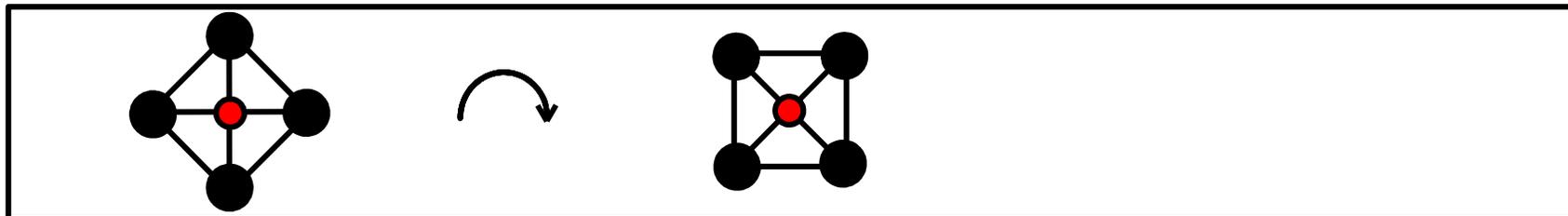
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Naphthalin-2,6-dicarbonsäure als „Brückenligand“:



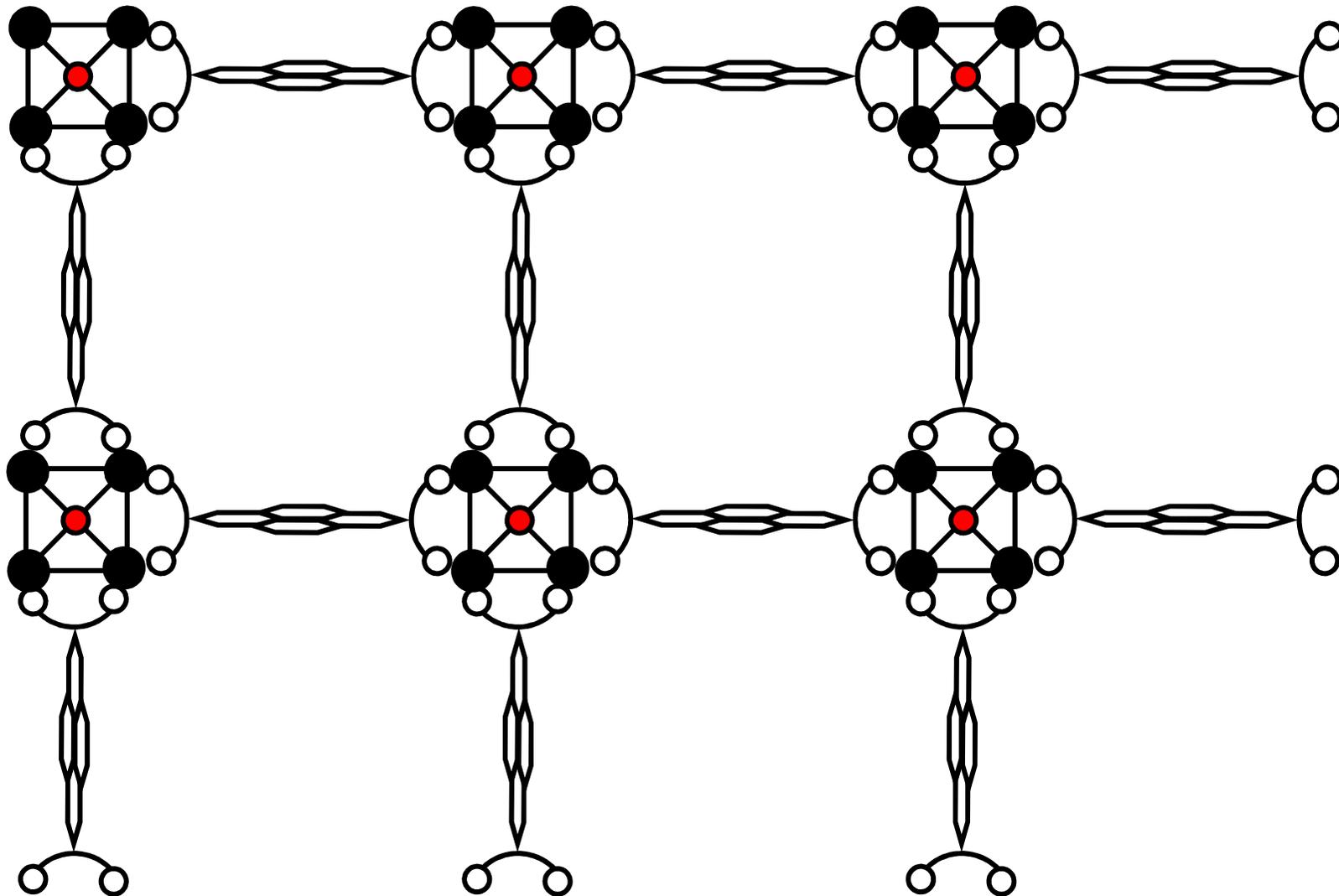
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Pyren - 2,7- dicarbonsäure als „Brückenligand“:



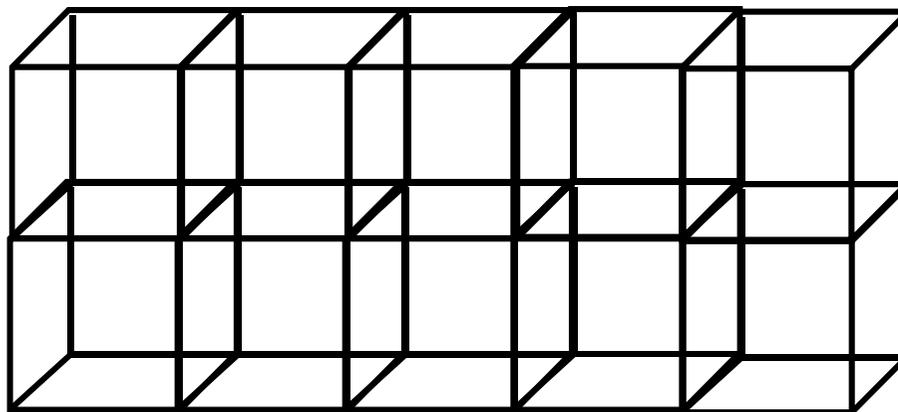
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Pyren - 2,7- dicarbonsäure als „Brückenligand“:



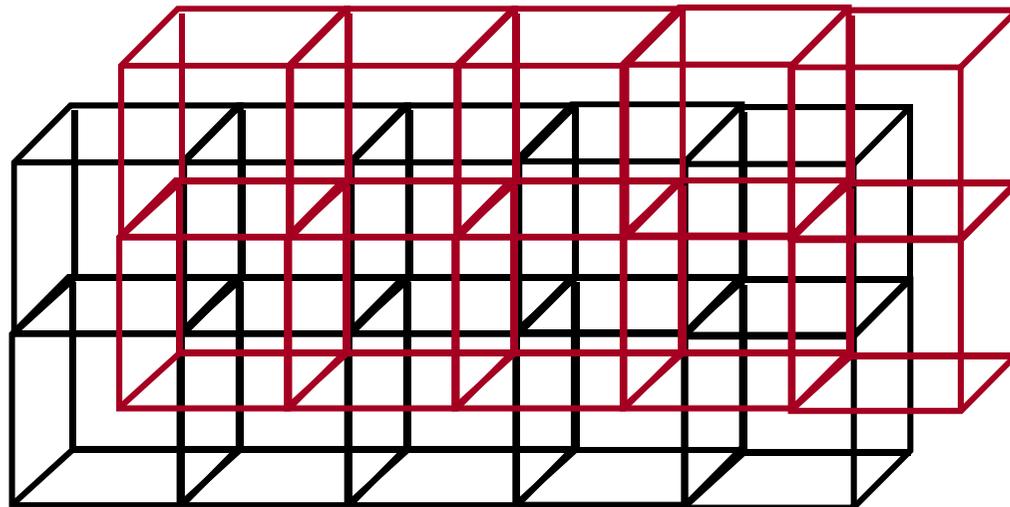
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Katenation der Netzwerke; Einzelgitter, dreidimensional:

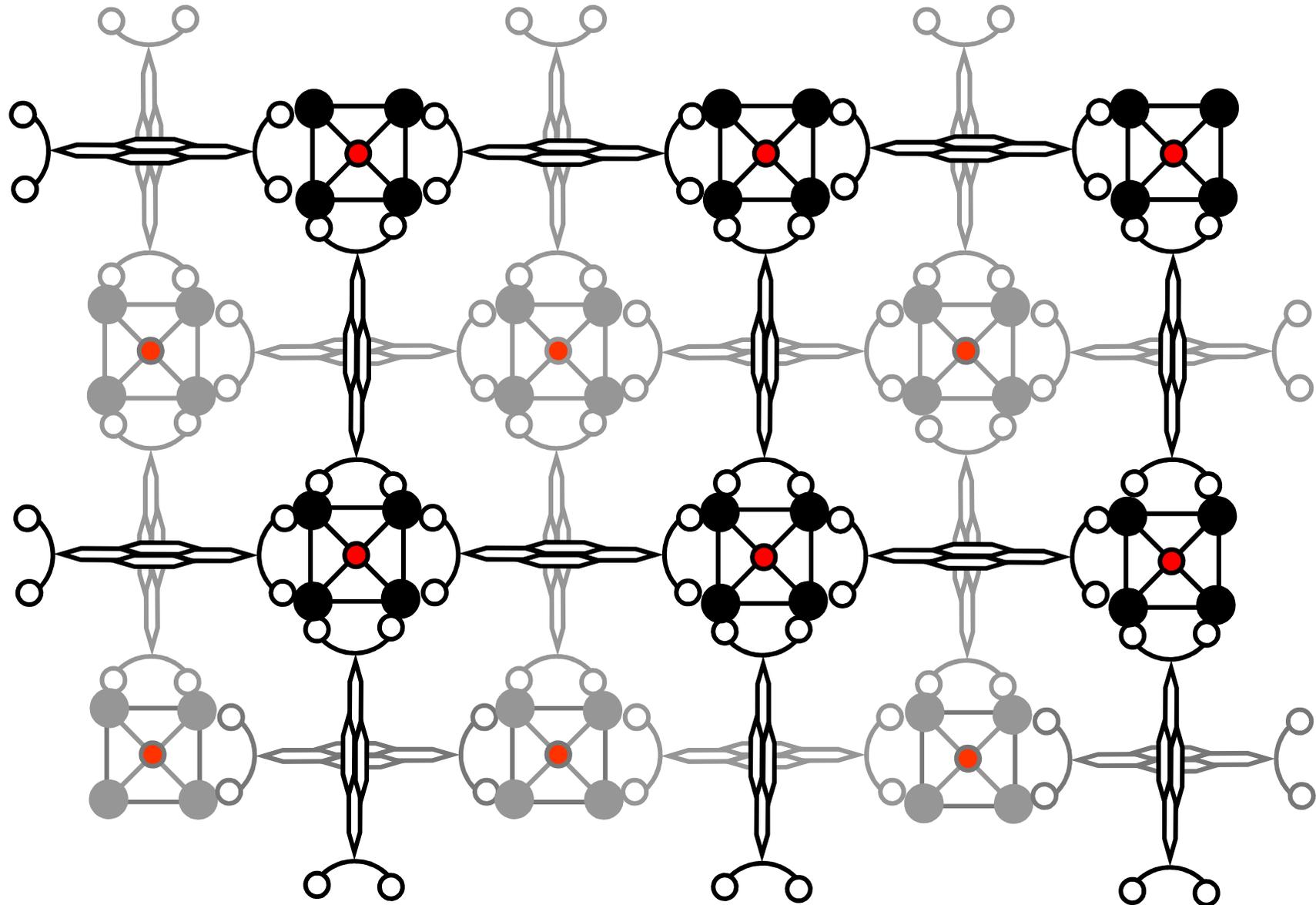


Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Katenation der Netzwerke; Duplex-Gitter, dreidimensional:

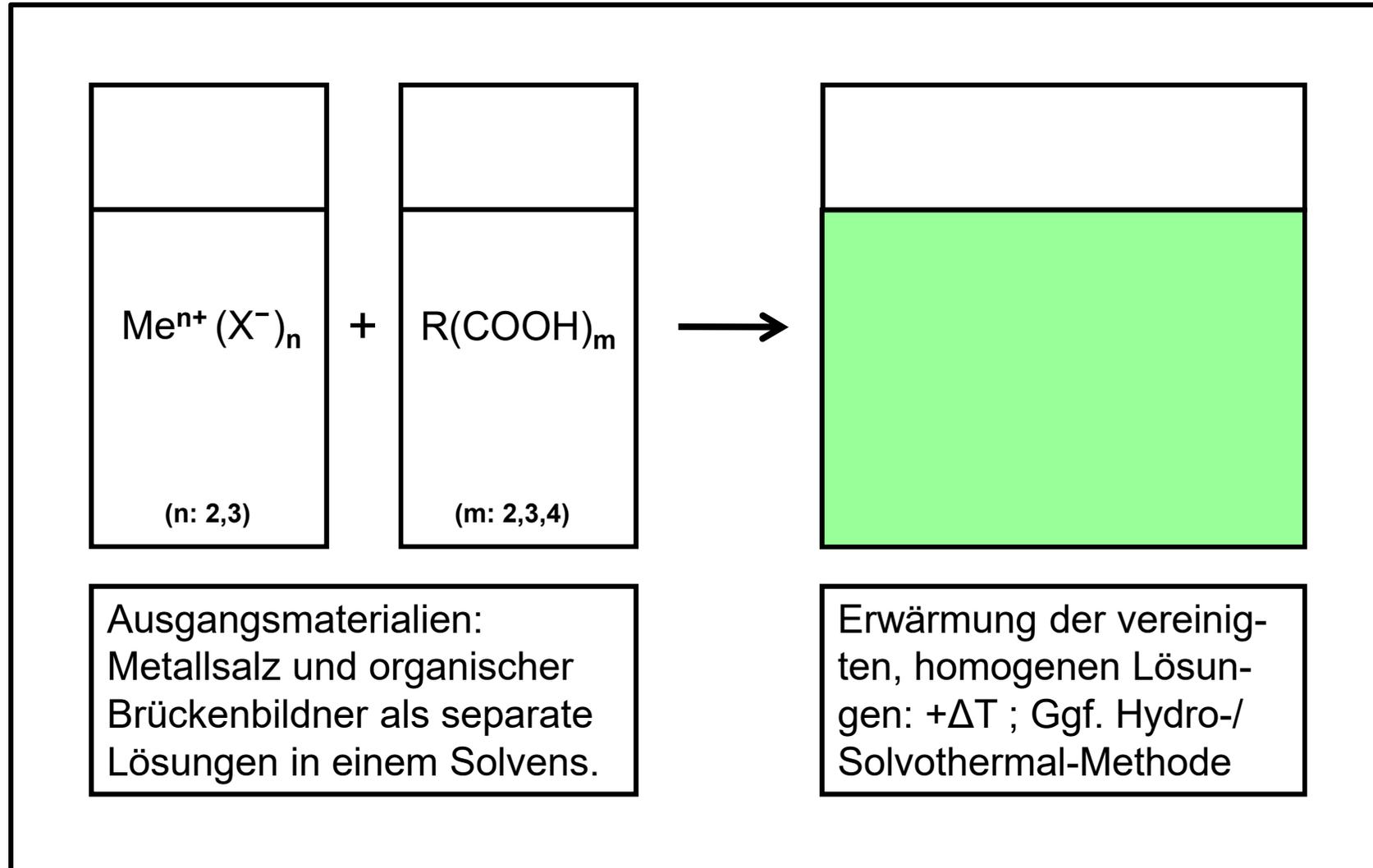


Pyren-2,7-dicarbonsäure als „Brückenligand“: Katenation.



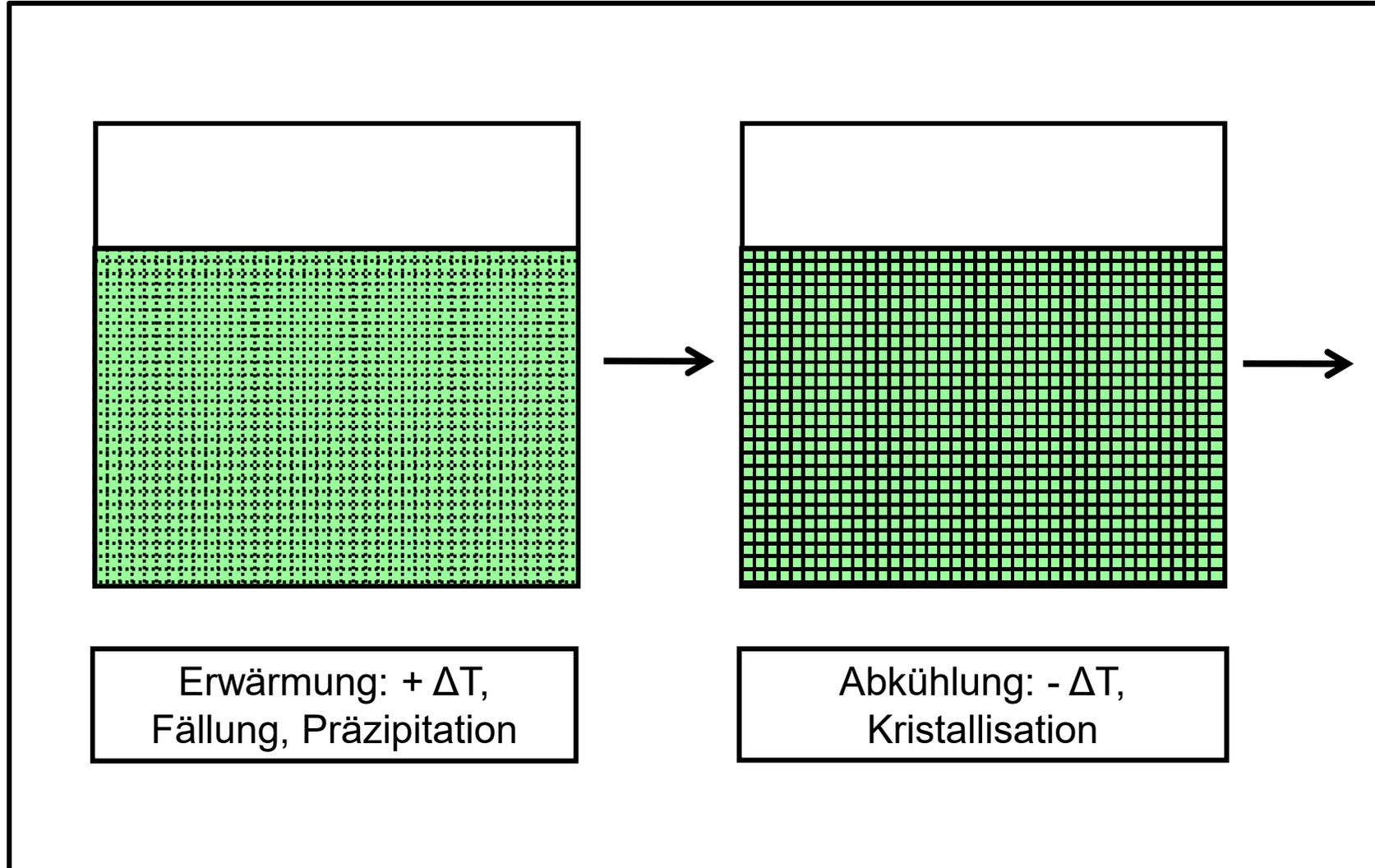
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Metal-Organic Frameworks, Herstellung (Im Labor):



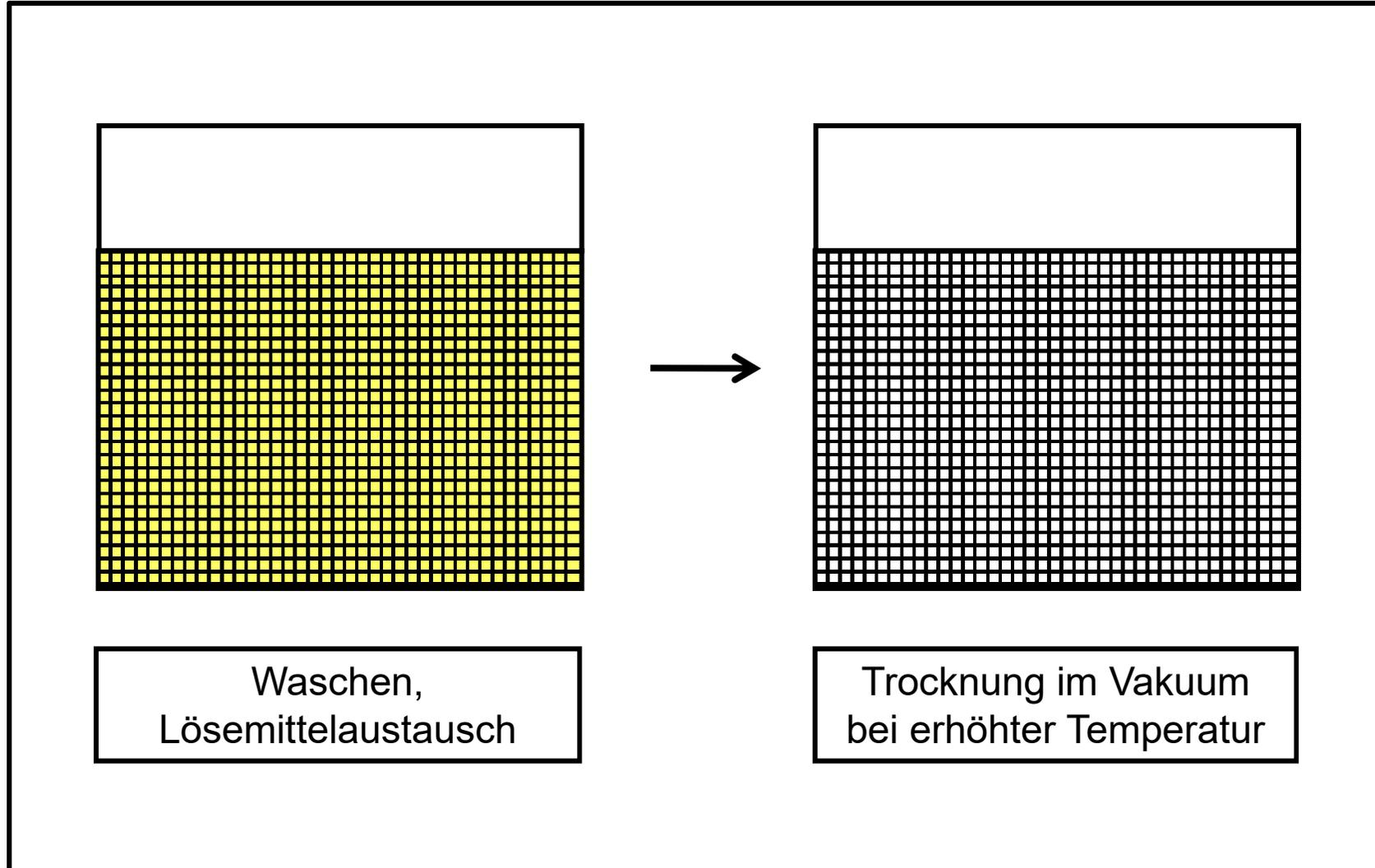
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Metal-Organic Frameworks, Herstellung (Im Labor):



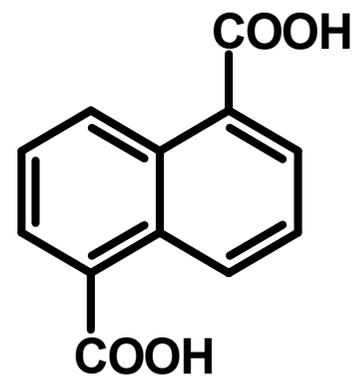
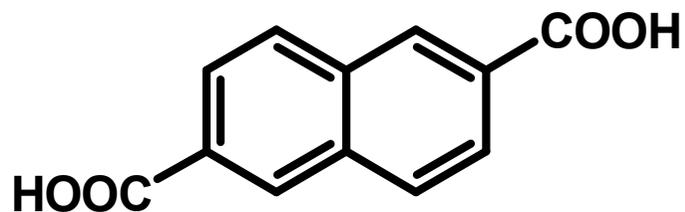
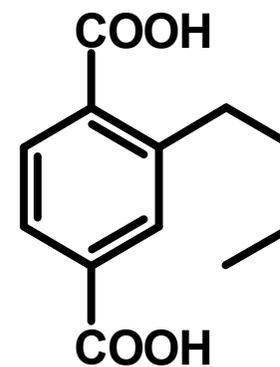
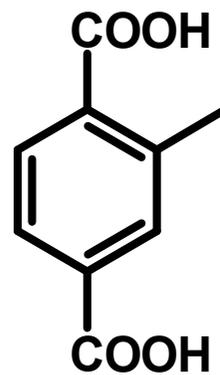
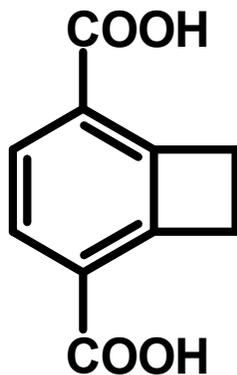
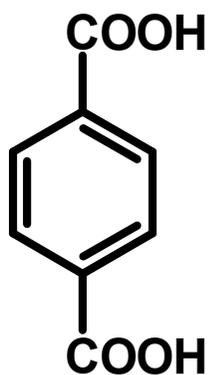
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Metal-Organic Frameworks, Herstellung (Im Labor):



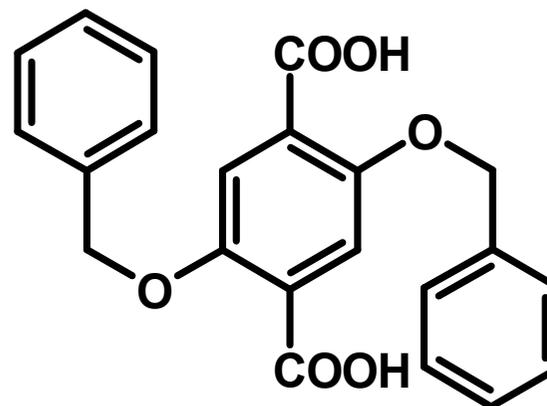
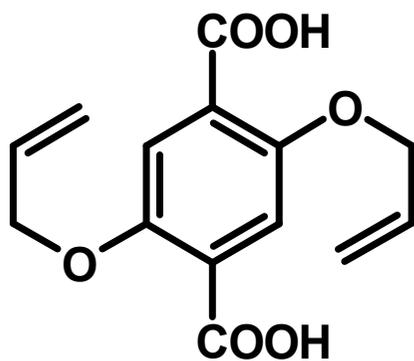
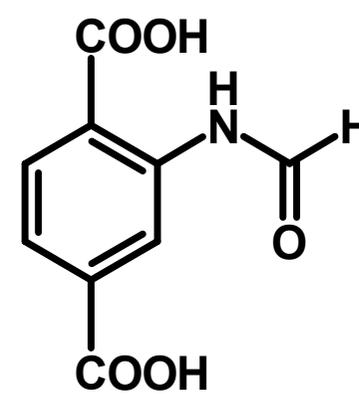
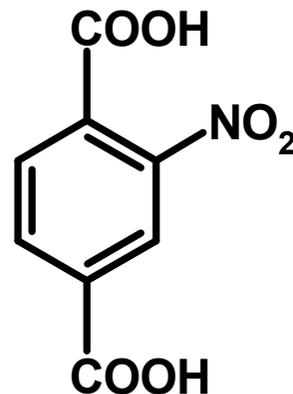
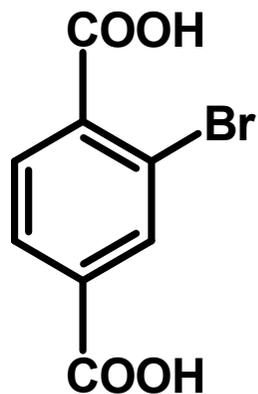
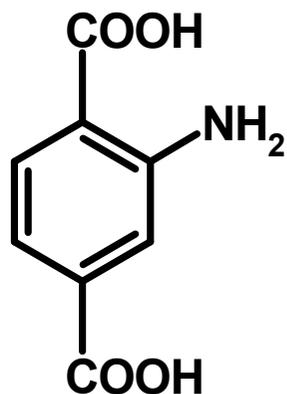
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Dicarbonsäuren als starre „Brückenliganden“:



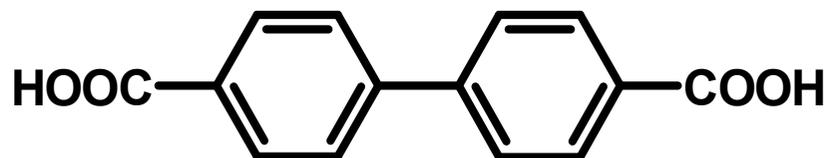
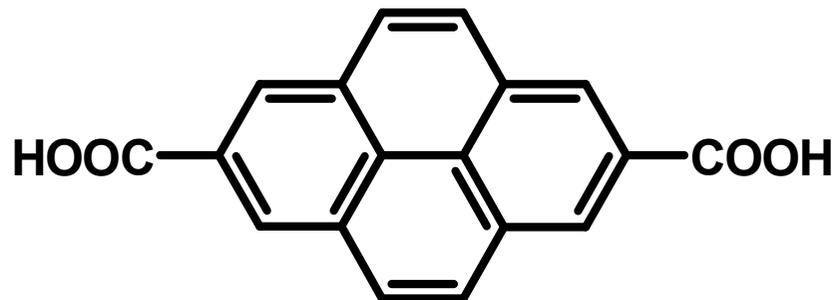
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Dicarbonsäuren als starre „Brückenliganden“:



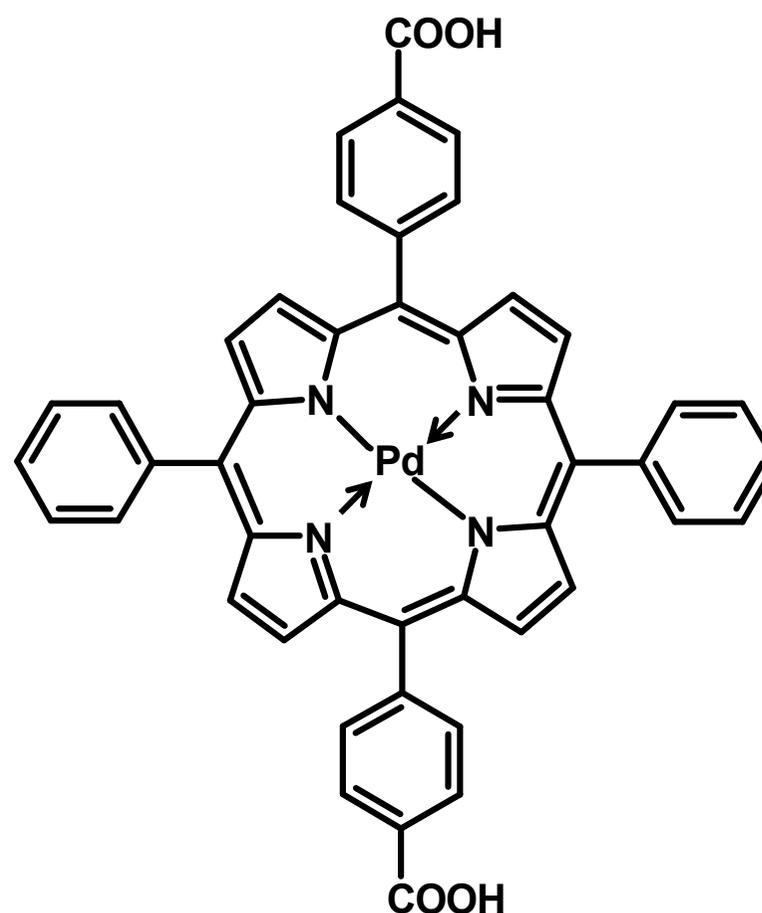
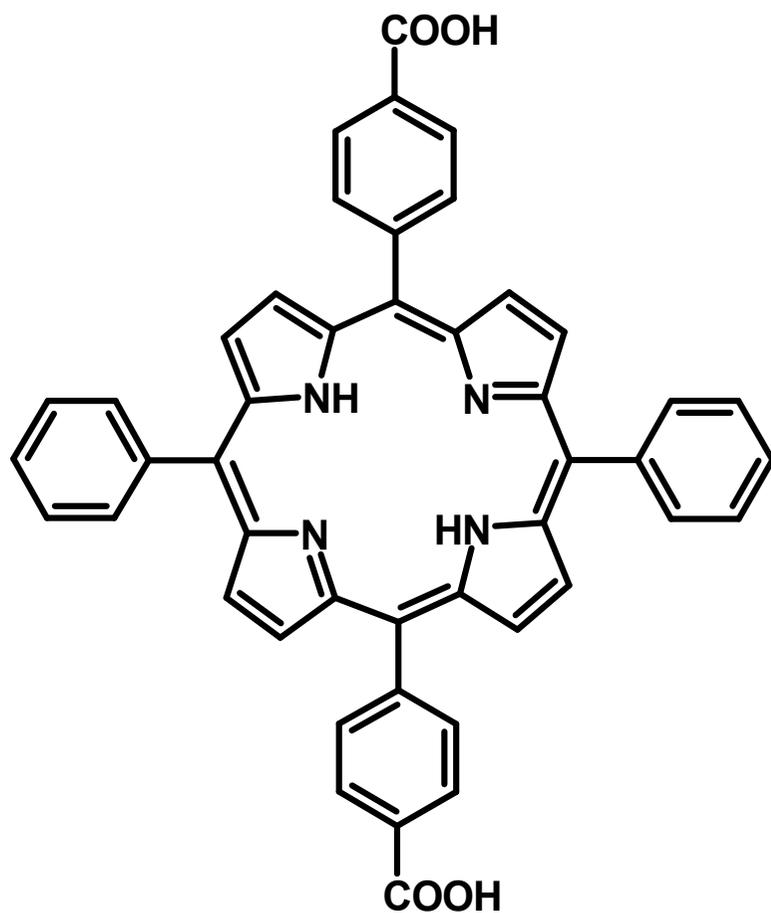
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Dicarbonsäuren als starre „Brückenliganden“:



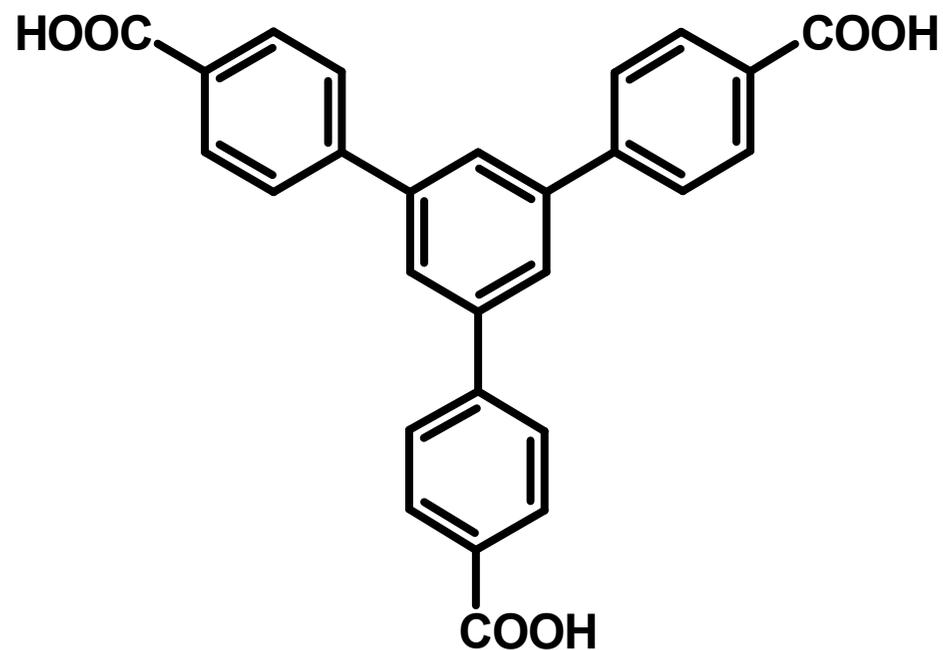
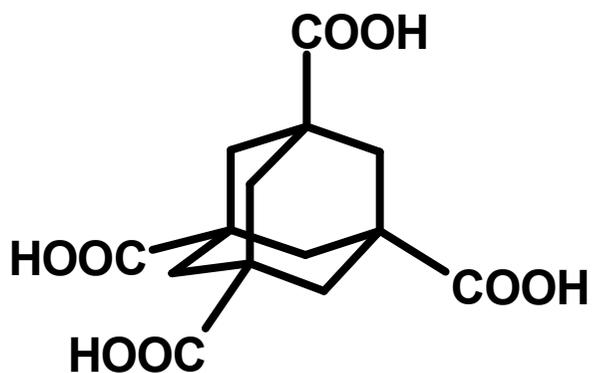
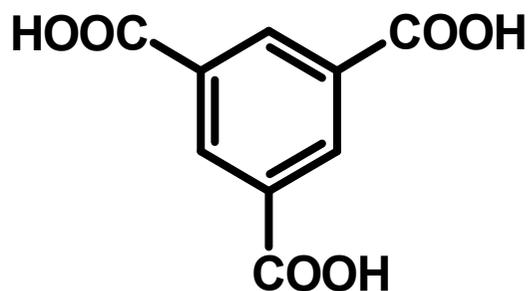
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Dicarbonsäuren als starre „Brückenliganden“:



Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

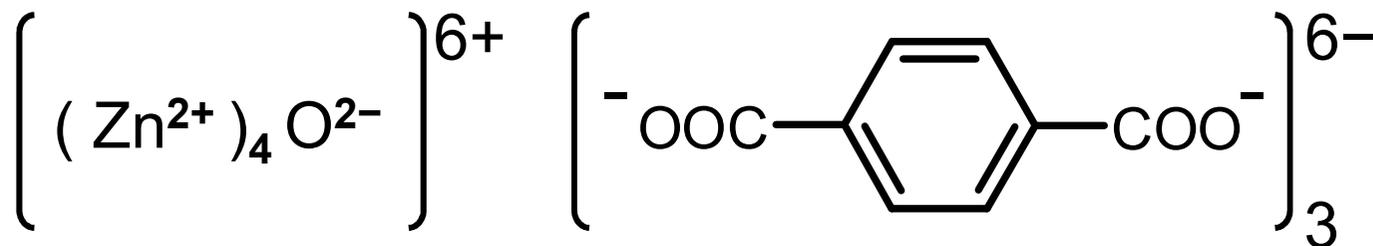
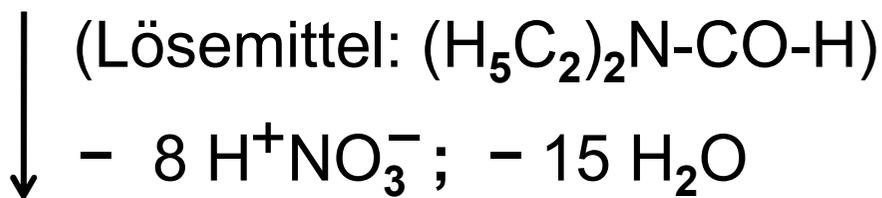
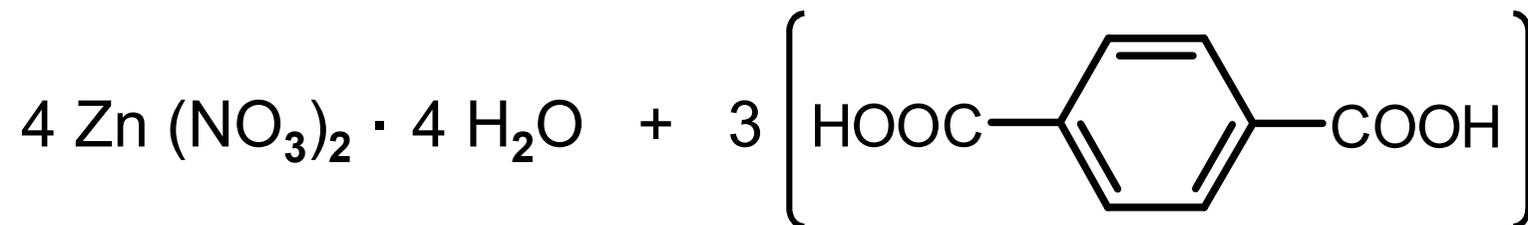
Typische Tricarbonsäure-Brückenliganden; Tetracarbonsäure-Brückenligand:



4,4',4''-Benzol-1,3,5-triyl-tribenzoesäure
(„BTB“)

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

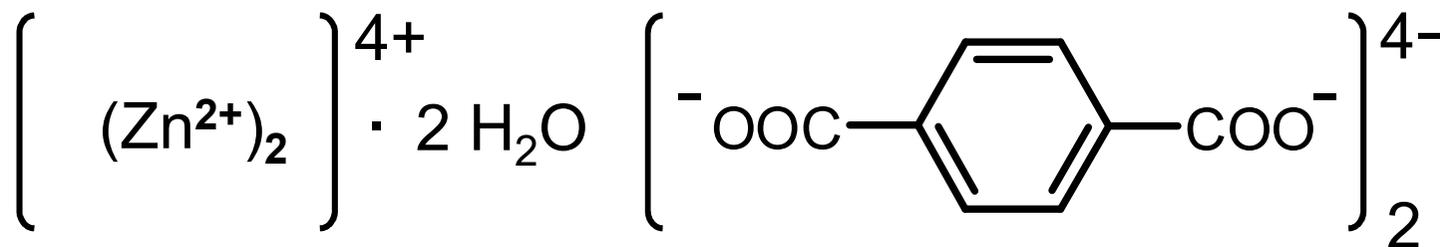
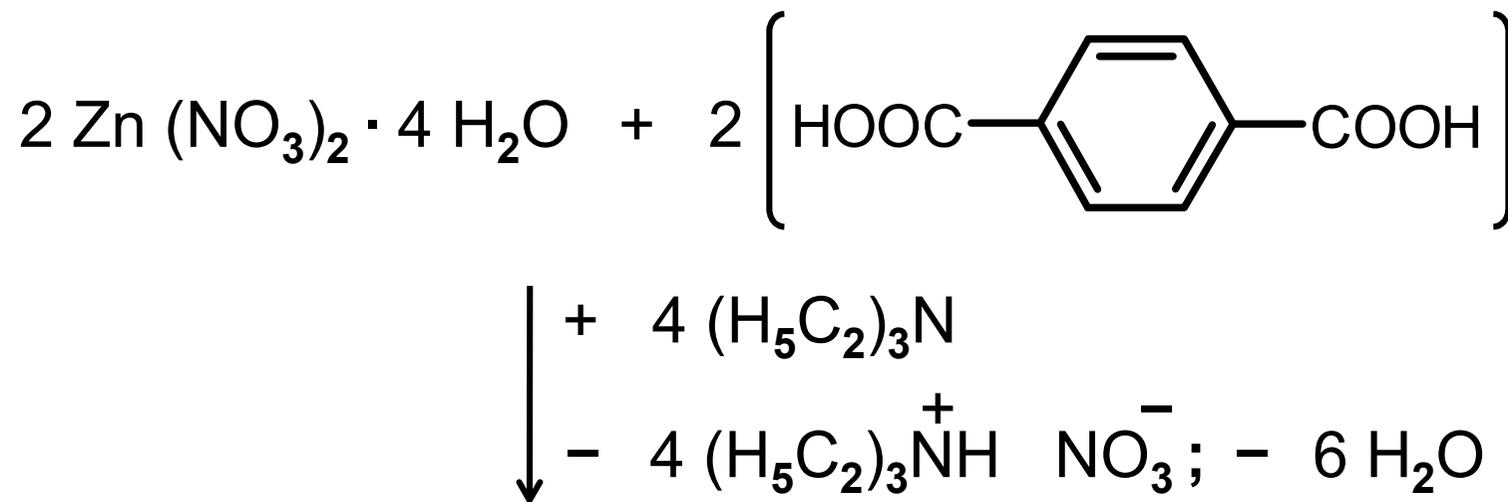
Synthese von MOF 5:



„MOF 5“

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

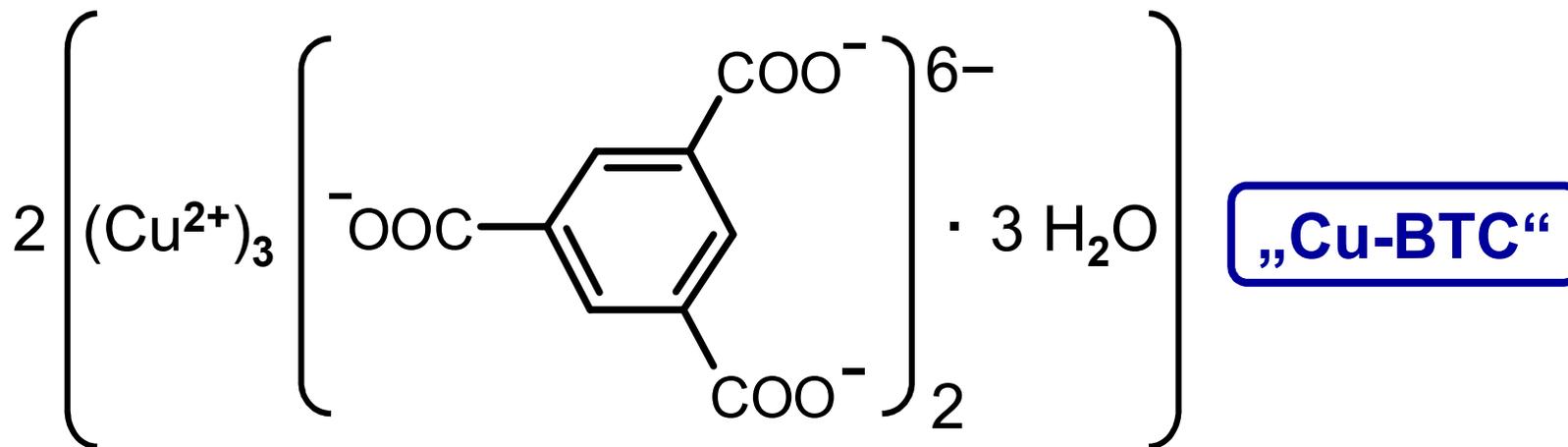
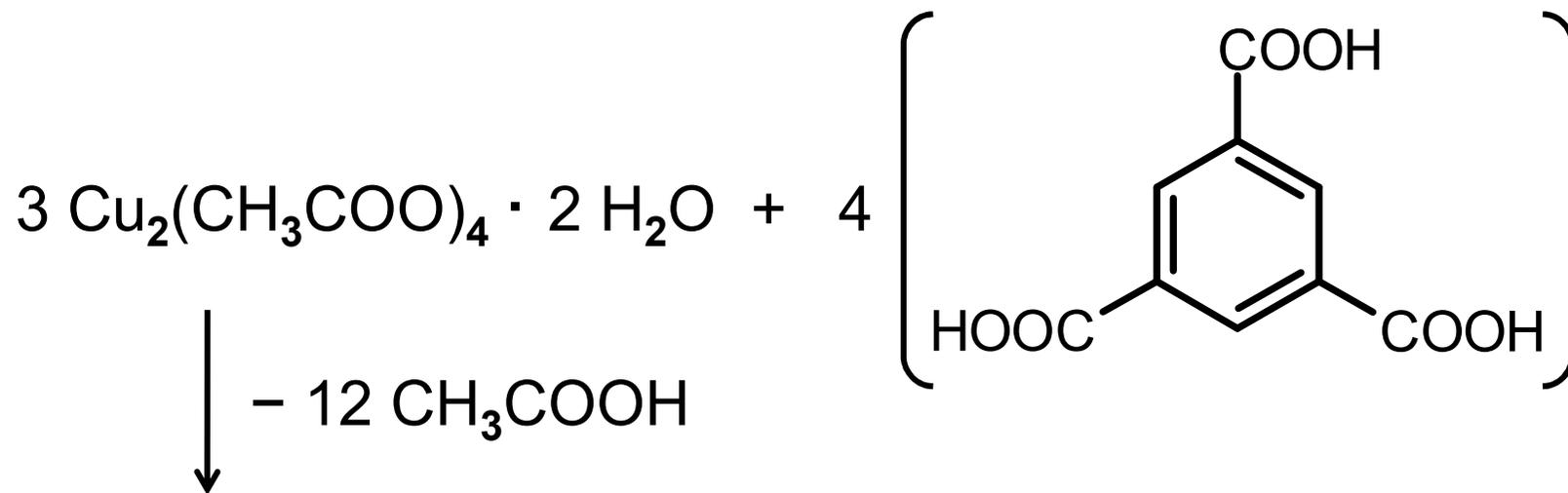
Synthese von MOF 2:



„MOF 2“

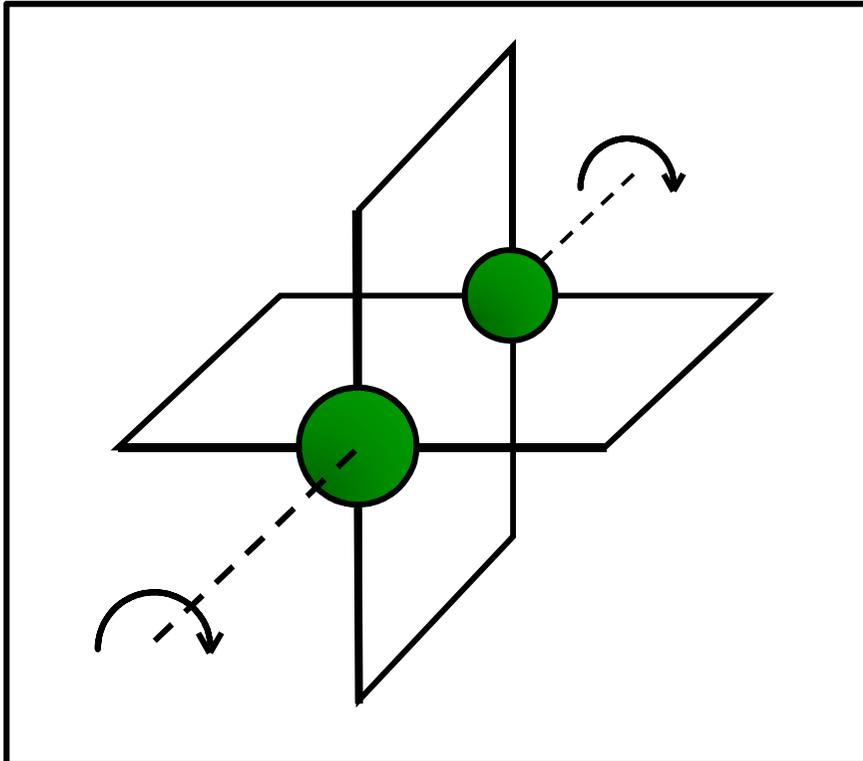
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Synthese von Cu-BTC-MOF:

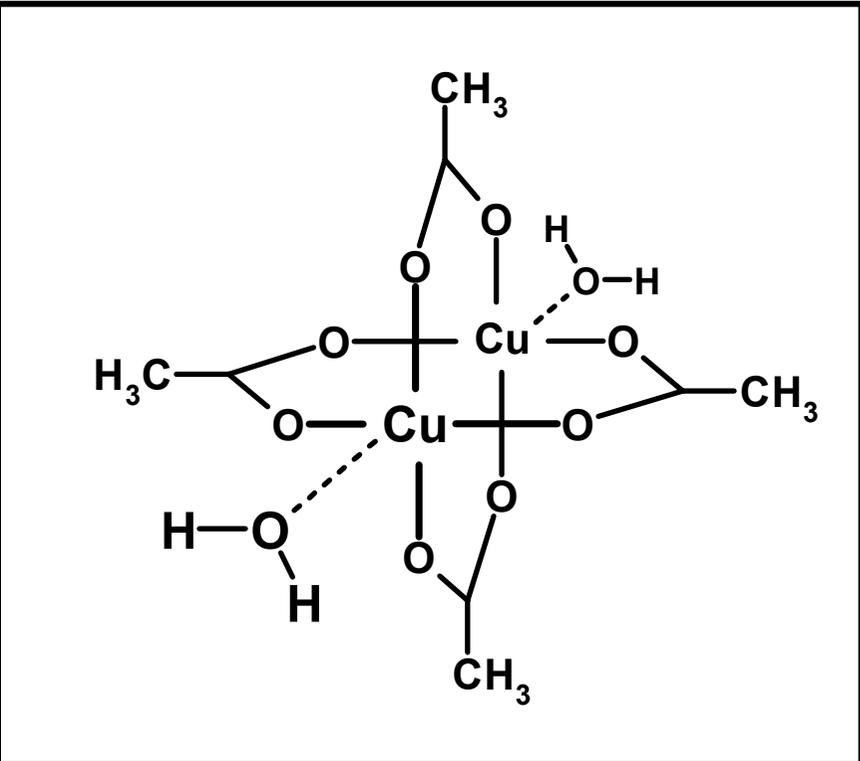


Schaufelrad-Struktur von Kupfer (II)-acetat:

$\text{Cu}_2(\text{CH}_3\text{COO})_4 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ (Hollemann Wiberg, Lehrbuch der Anorganischen Chemie, 103. Auflage, de Gruyter, 2016).



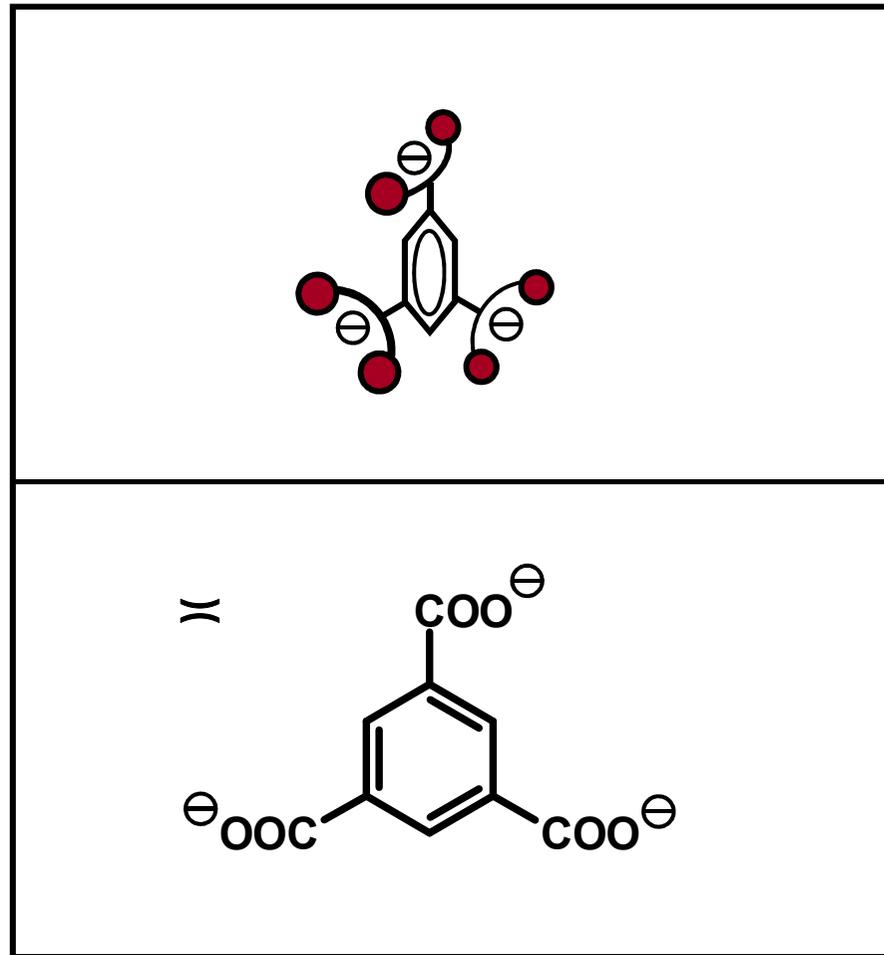
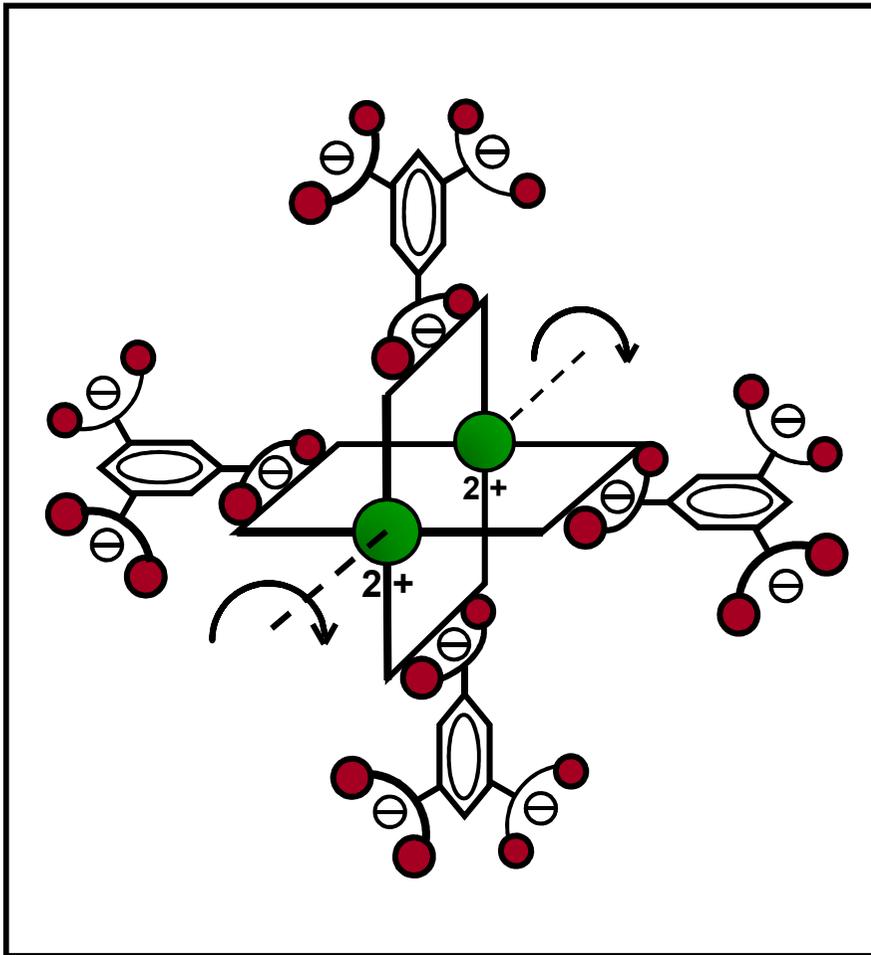
„Paddle-Wheel“



Kupfer (II)-acetat

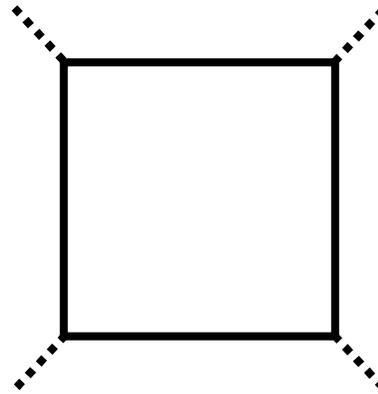
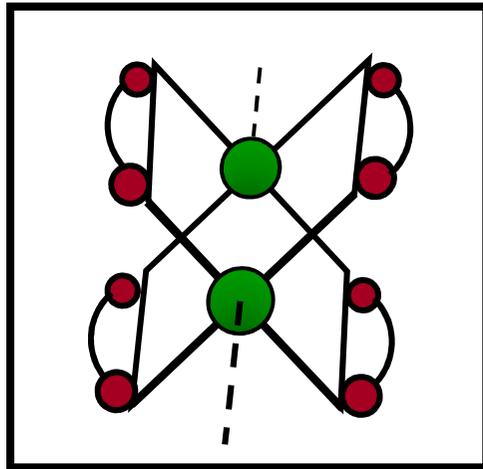
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Schaufelrad-Struktur von Bausteinen des Cu-BTC, MOF 199, HKUST-1 (Hong Kong University of Science and Technology):

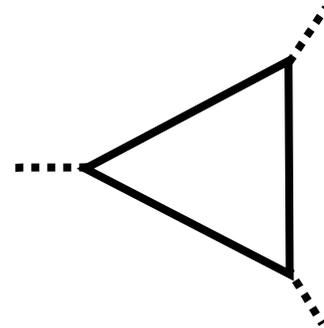
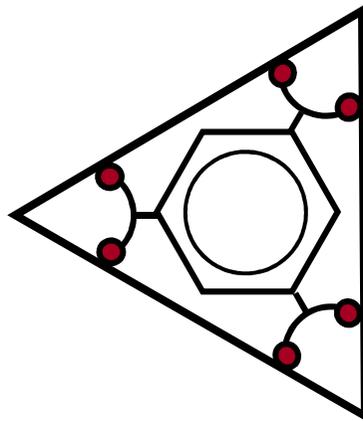


Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

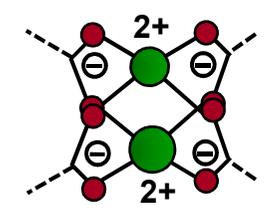
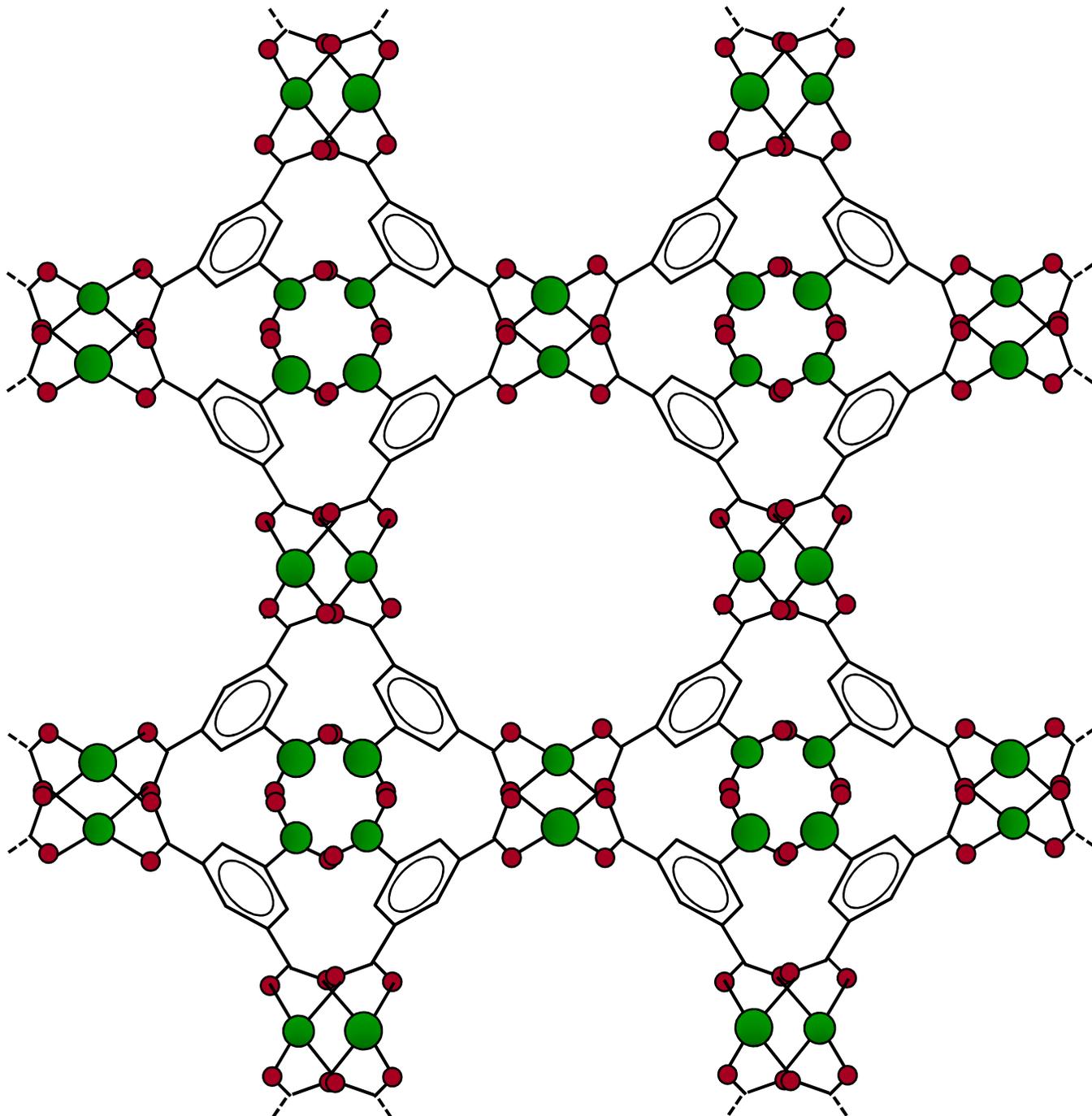
Schaufelrad-Struktur von Bausteinen des Cu-BTC, MOF 199, HKUST-1 (Hong Kong University of Science and Technology):



Orthogaler
Baustein



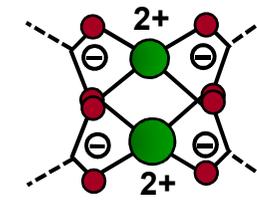
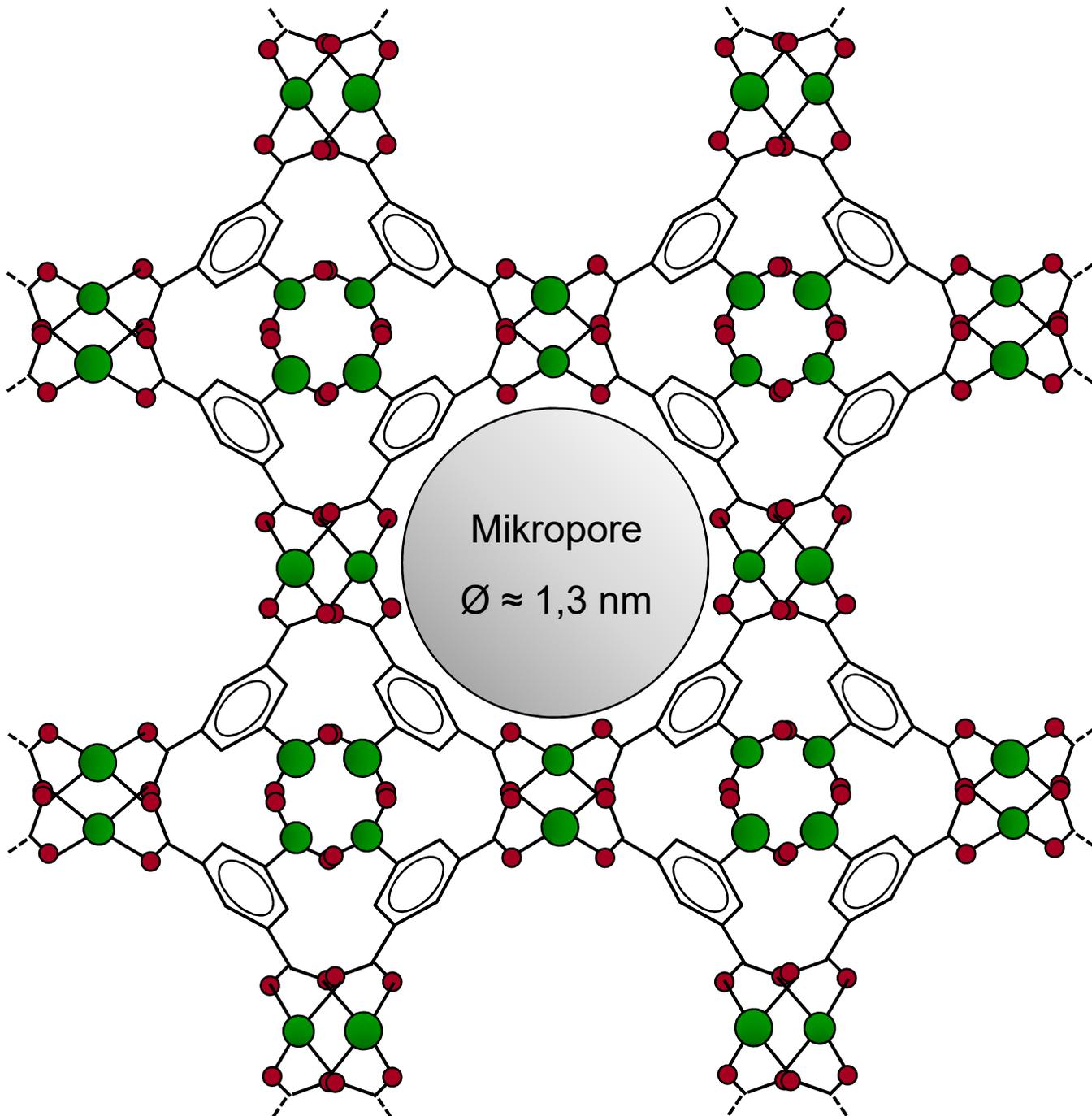
Trigonaler
Baustein



"Paddle-Wheel"

HKUST-1,
(MOF-199)
(Cu-BTC),
Ausschnitt

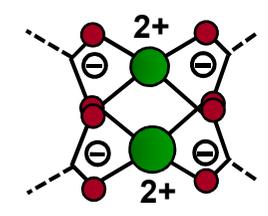
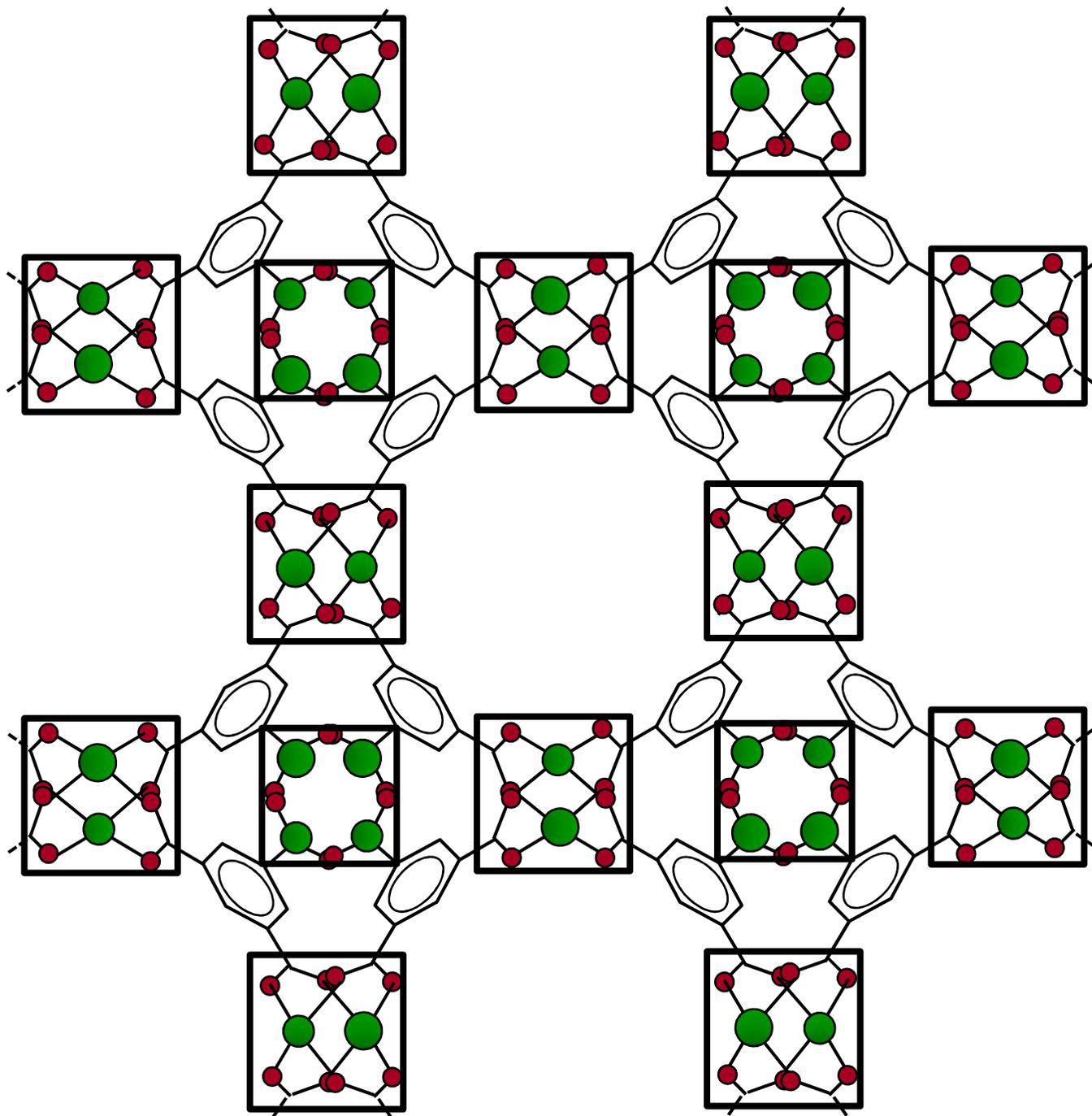
(Vereinfachtes
Strukturschema)



"Paddle-Wheel"

HKUST-1,
 (MOF-199)
 (Cu-BTC),
 Ausschnitt

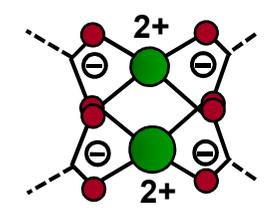
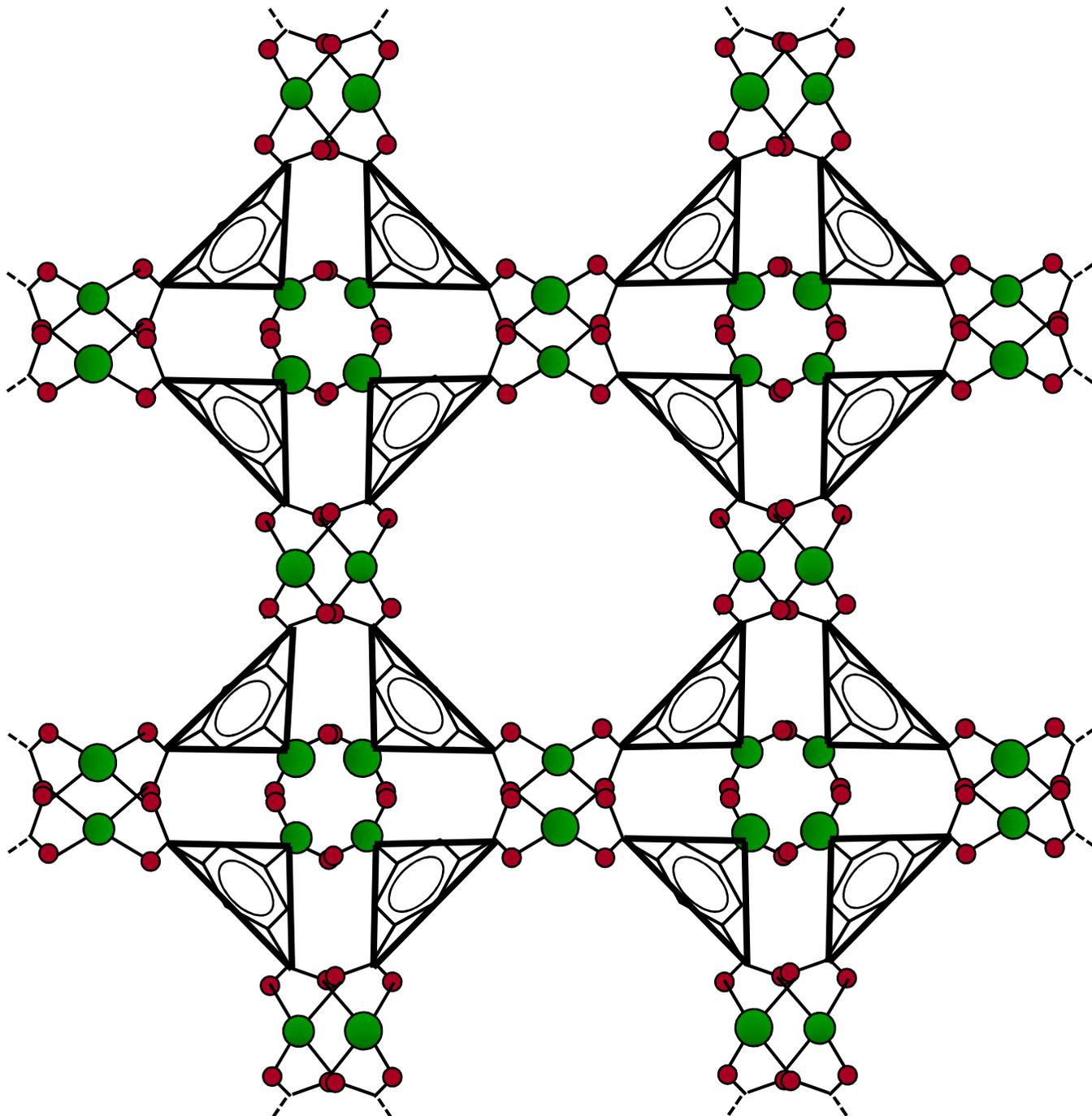
(Vereinfachtes
 Strukturschema)



"Paddle-Wheel"

HKUST-1,
(MOF-199)
(Cu-BTC),
Ausschnitt

(Orthogonale
Bausteine)



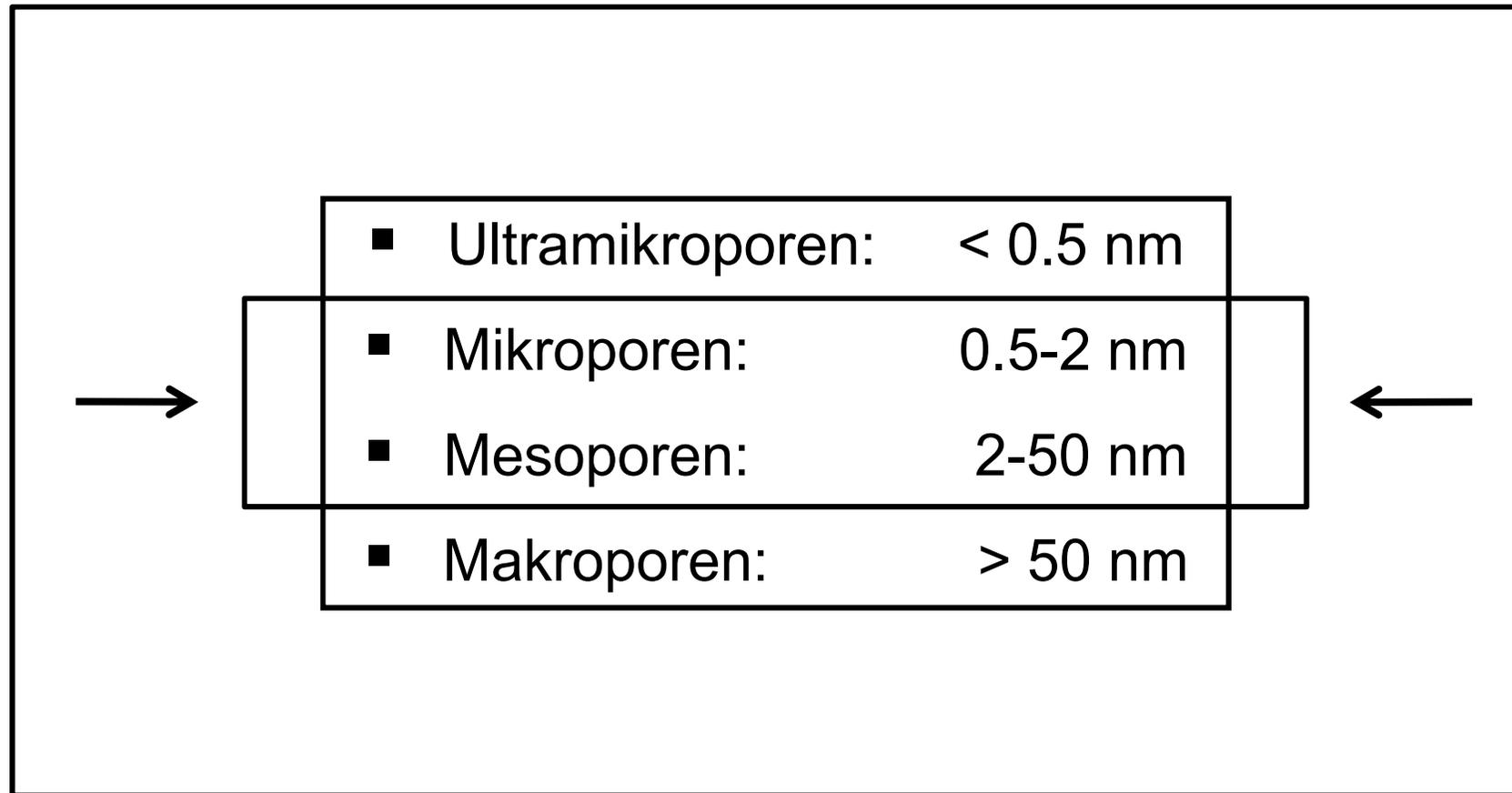
"Paddle-Wheel"

HKUST-1,
(MOF-199)
(Cu-BTC),
Ausschnitt

(Trigonale
Bausteine)

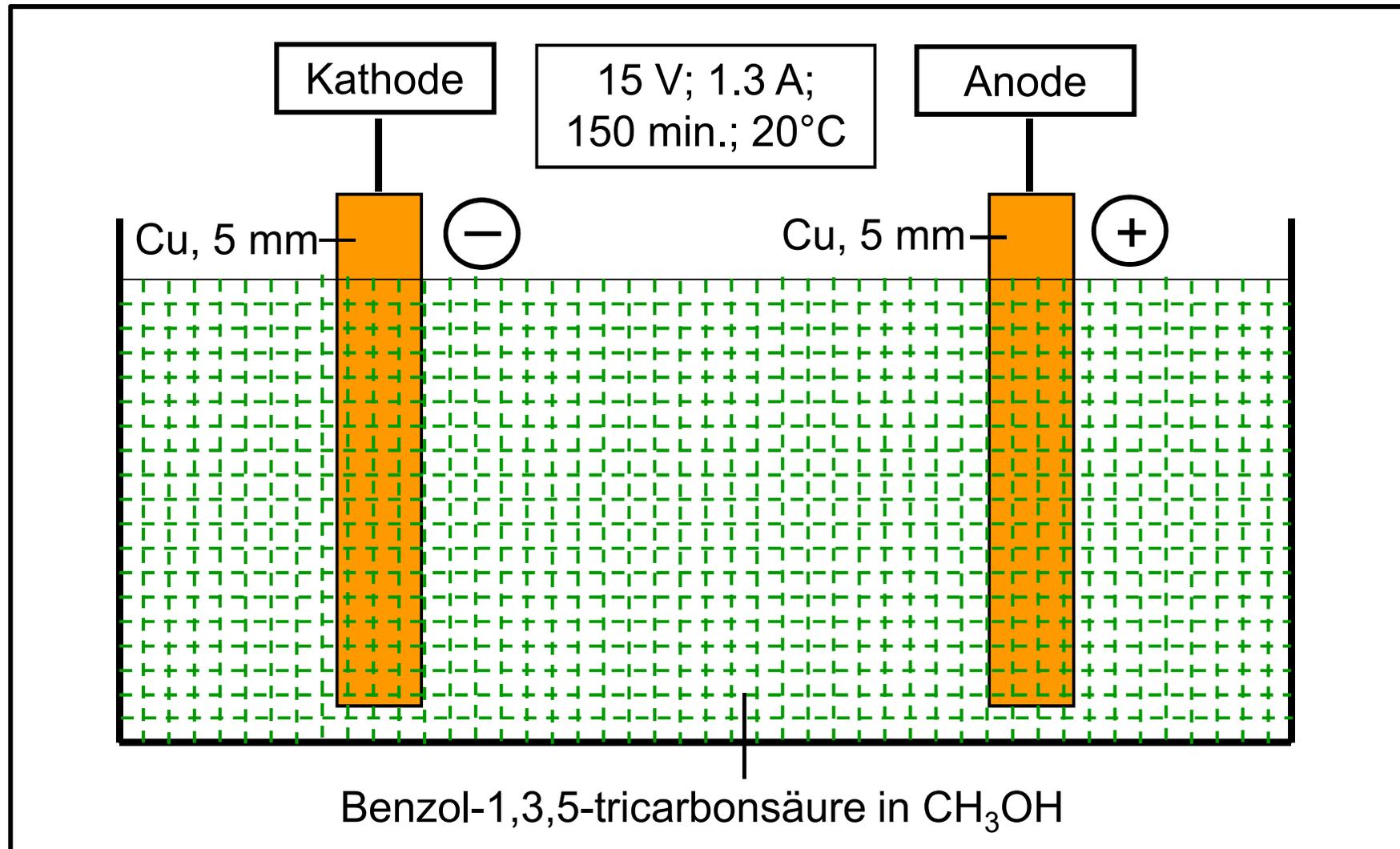
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Klassifizierung von Poren nach ihrer Größe:



Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

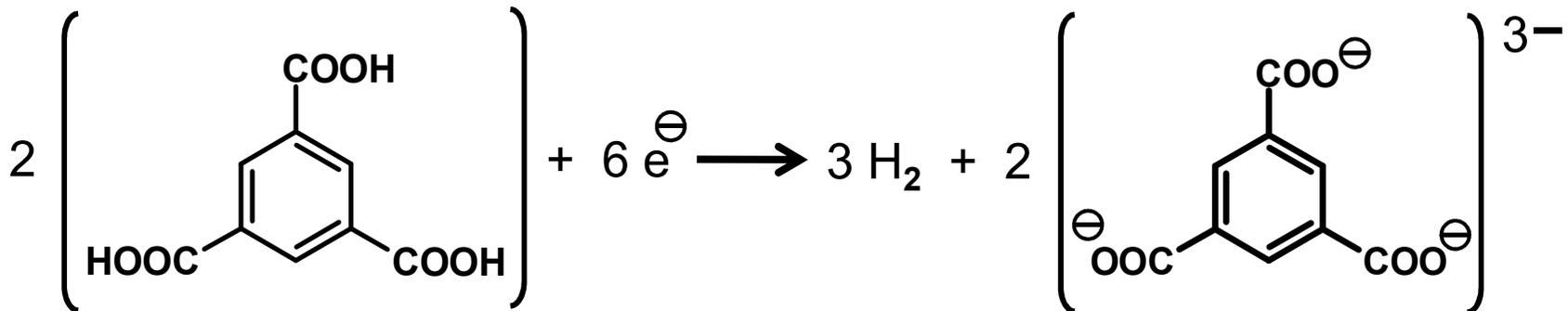
Elektrochemische Synthese von Cu-BTC-MOF:



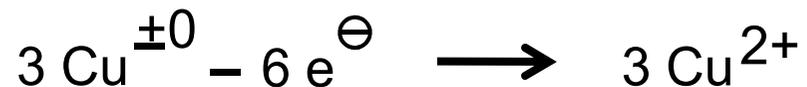
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Elektrochemische Synthese von Cu-BTC-MOF:

Kathodenreaktionen



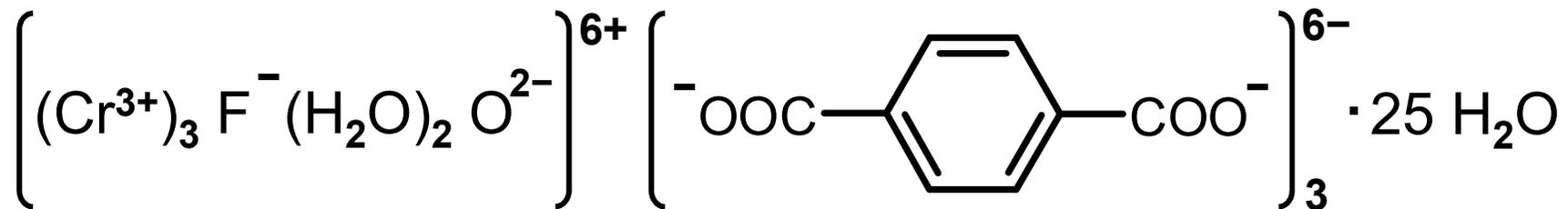
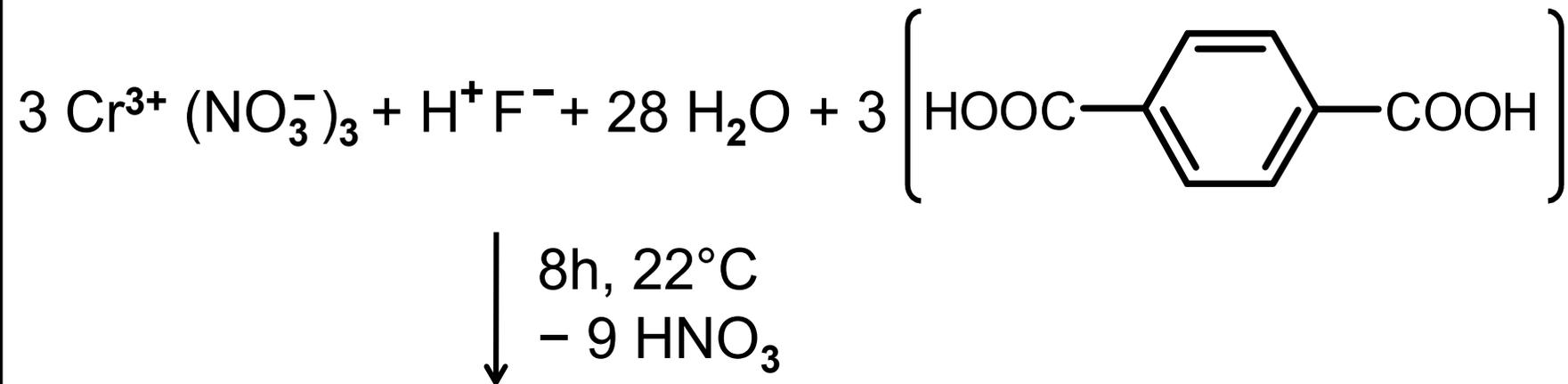
Anodenreaktion



Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

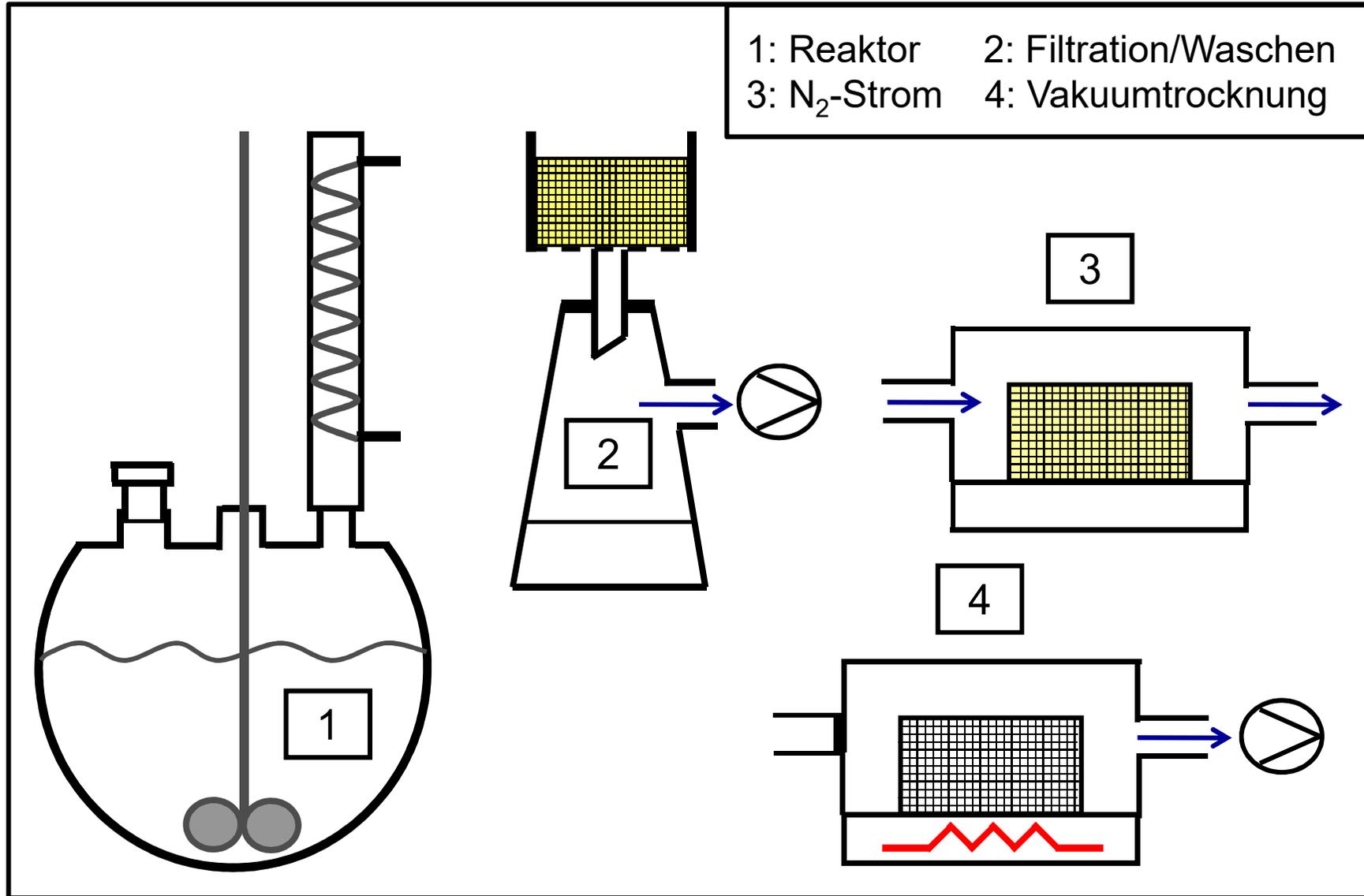
Synthese von „MIL 101“

„MIL“, Matériaux de l'Institut Lavoisier, Versailles, France:



„MIL 101“, weist Mesoporen mit \varnothing von $\approx 2,9\text{--}3,4$ nm auf!

Metal-Organic Frameworks, Synthese (Labor):



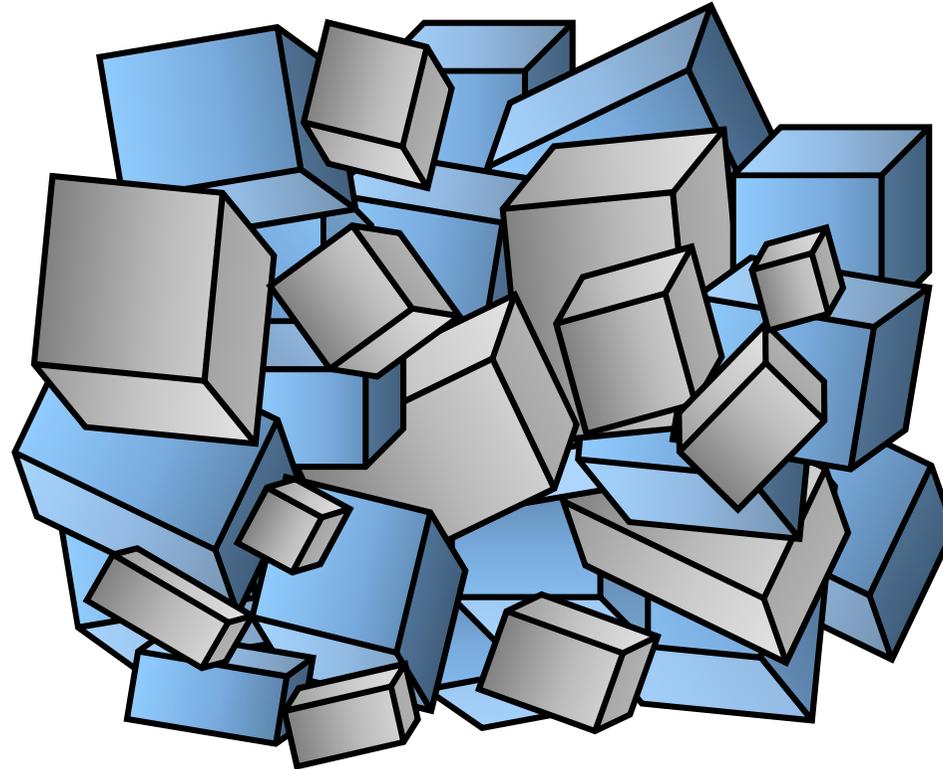
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Synthese von MOF 5, Arbeitsvorschrift:

In a glass reactor equipped with a reflux condenser and a teflon-lined stirrer, 41g of terephthalic acid and 193g of zinc nitrate tetrahydrate (Merck) were dissolved in 5.650g of diethylformamide (BASF, < 100 ppm water) and heated up to 130°C for 4 hours. After 45 minutes, crystallization started and the formerly clear solution turned slightly opaque.

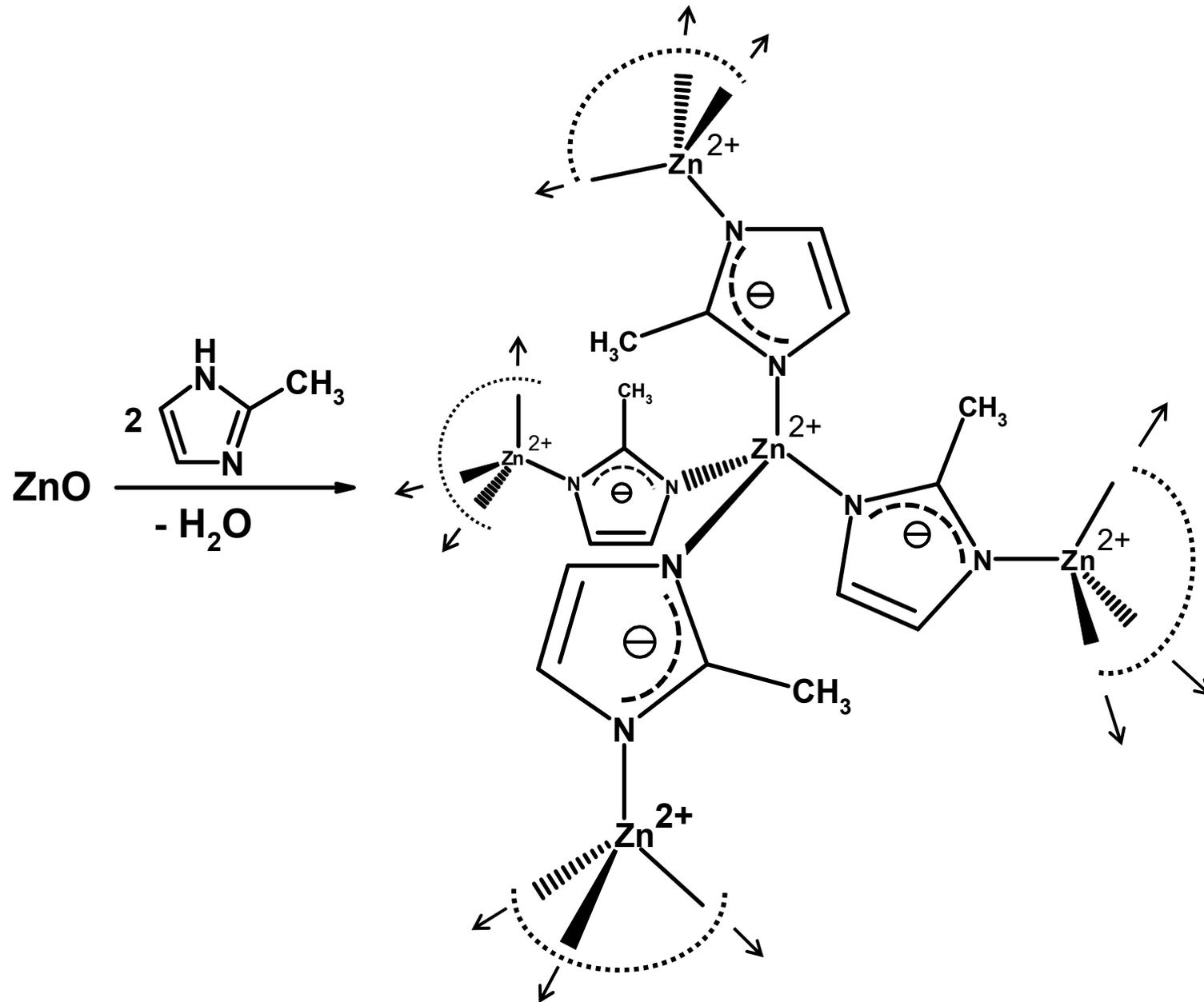
After a total of 4 hours, the reaction product was cooled down to room temperature. The solid was filtered off, washed three times with 1 liter of dry acetone and dried under a stream of flowing nitrogen. Finally, the product was activated at 60°C for at least 3 hours under a reduced pressure of < 0.2 mbar.

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung



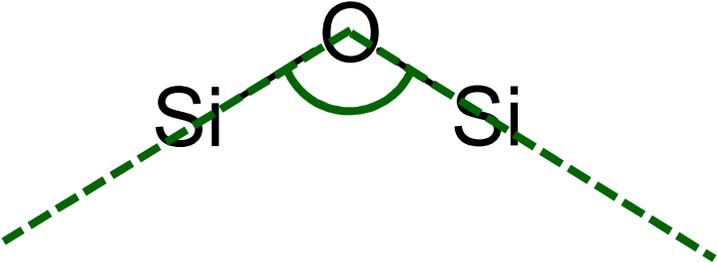
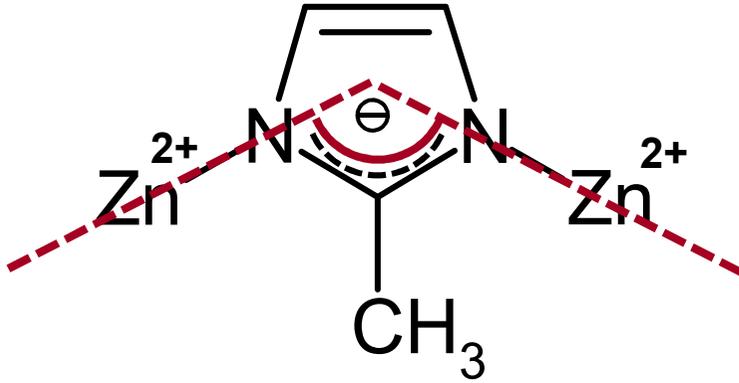
MOF 5: Ansicht unter dem Elektronenmikroskop (Skizze).

Zeolitic Imidazolate Framework, ZIF-8, Strukturausschnitt:



Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

**Zeolitic Imidazolate Framework (ZIF);
Strukturelle Ähnlichkeit mit anorganischen Zeolithen:**

Zeolith-Fragment	ZIF-8-Fragment
	
\sphericalangle Si-O-Si: 145°	\sphericalangle Zn ²⁺ -Im ⁻ -Zn ²⁺ : 145°

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Technische Anwendungen dieser porösen Materialien:

- Trägermaterialien für die Heterogenkatalyse.
- Immobilisierung (chiraler) homogener Katalysatoren.
- Nanoreaktoren.
- „Gussformen“ im Nanomaßstab.
- Slow-Release-Formulierungen, Drug-Release.
- Lumineszenz-Strahler.
- Gasreinigung.
- Gastrennung.
- Gasspeicherung.

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

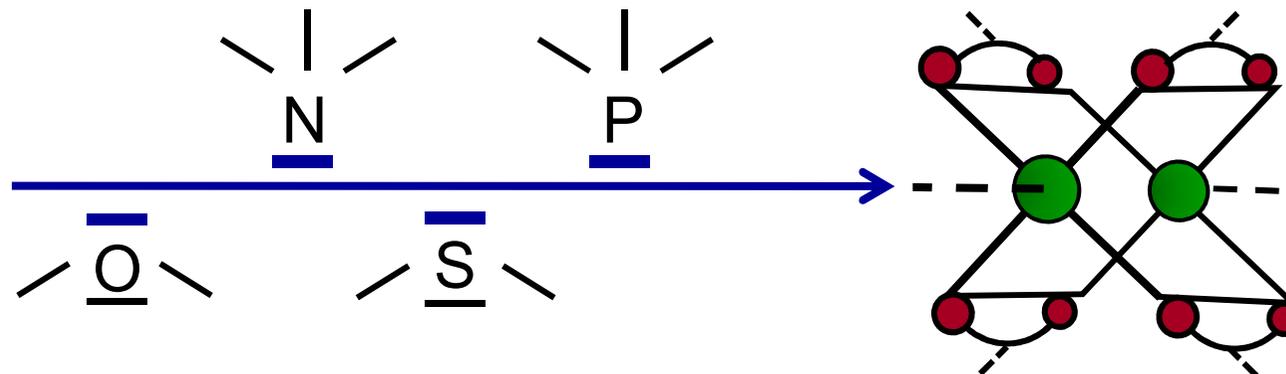
Technische Anwendungen dieser porösen Materialien:

- Trägermaterialien für die Heterogenkatalyse.
- Immobilisierung (chiraler) homogener Katalysatoren.
- Nanoreaktoren.
- „Gussformen“ im Nanomaßstab.
- Slow-Release-Formulierungen, Drug-Release.
- Lumineszenz-Strahler.
- **Gasreinigung.**
- **Gastrennung.**
- Gasspeicherung.

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

Gasreinigung:

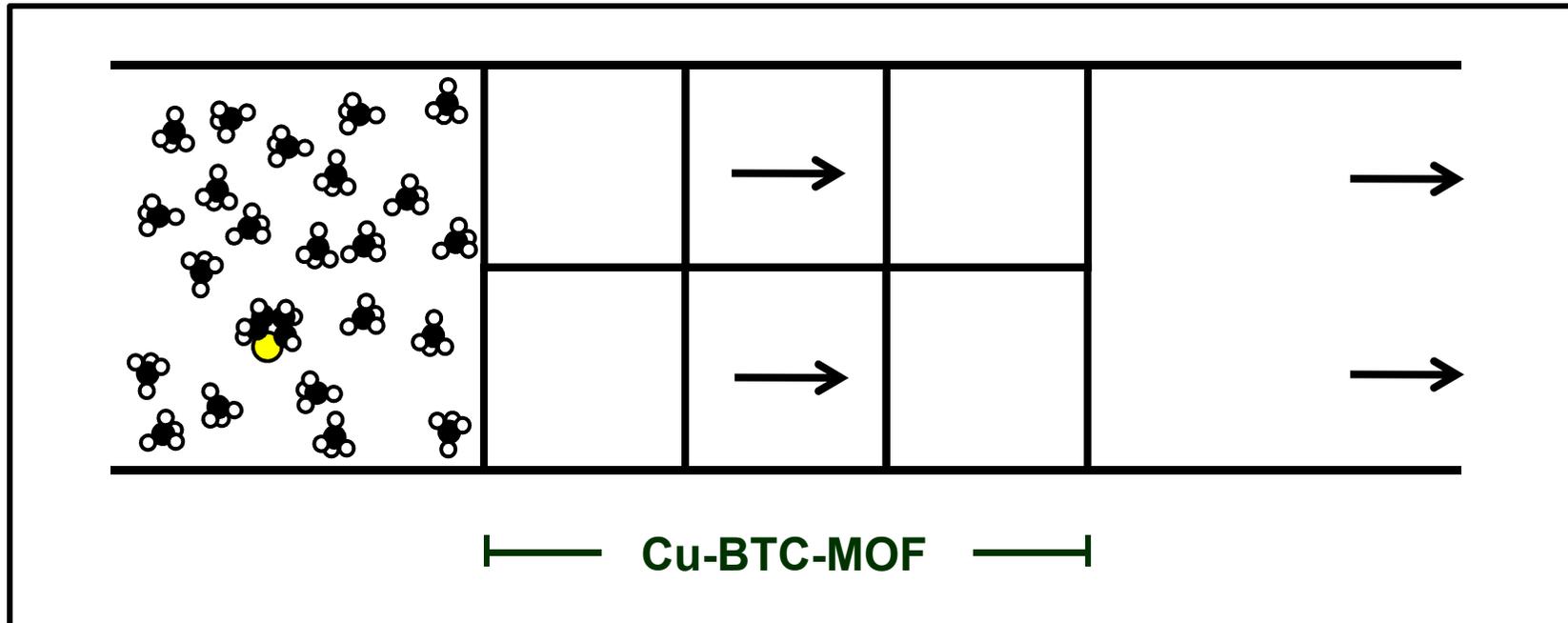
- Kontinuierliche Gasreinigung durch selektive Adsorption von (polaren) Verunreinigungen an den Oberflächen von MOFs.
- Detektierbarkeit per Farbwechsel (blau → grün → blau).
- Regenerierbarkeit von Cu-BTC-MOFs.
- Reinigung von Erdgas/Methan mit Cu-BTC-MOFs. Entfernung von schwefelhaltigen Verunreinigungen.



Verunreinigungen: NR_3 ; NH_3 ; H_2O ; ROH ; R_1OR_2 ; R_1OOR_2

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

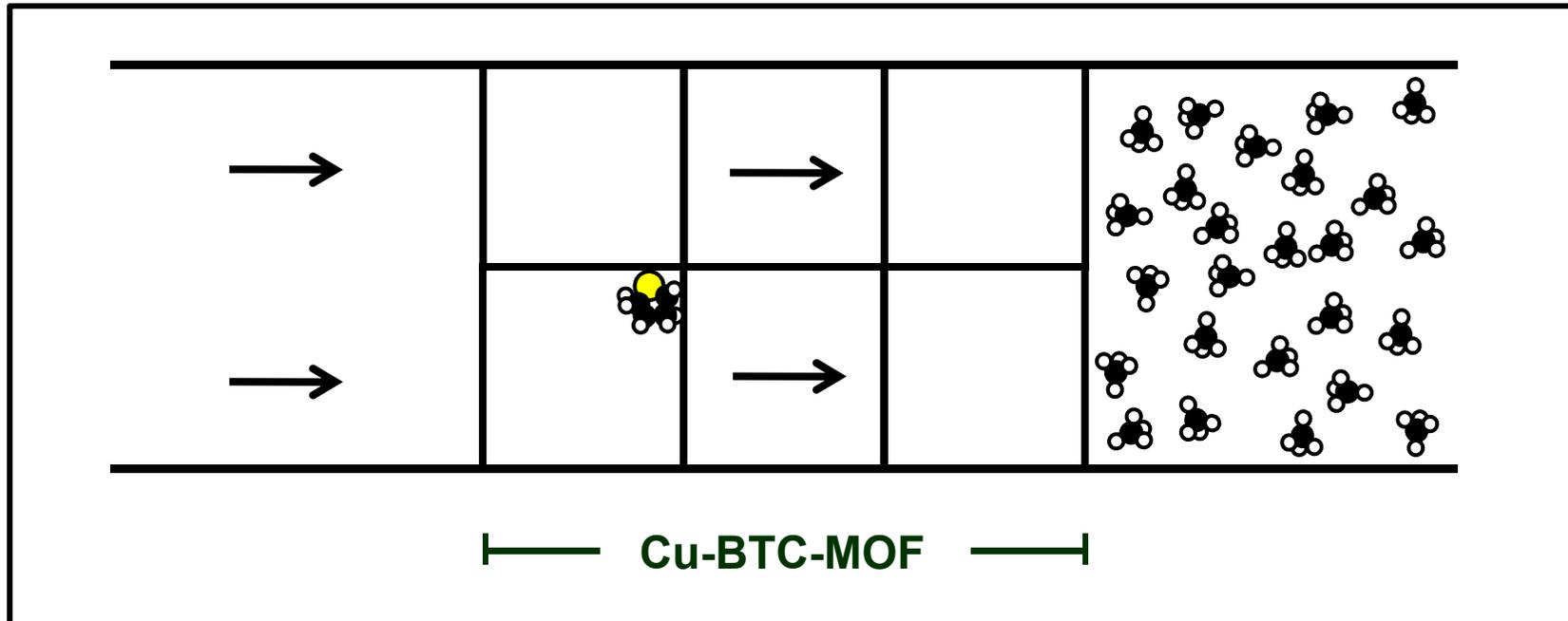
Gasreinigung mit HKUST-1: $\text{Cu}_3 [\text{BTC}]_2 \cdot 3 \text{H}_2\text{O}$:



13 ppm, 25°C

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

Gasreinigung mit HKUST-1: $\text{Cu}_3 [\text{BTC}]_2 \cdot 3 \text{H}_2\text{O}$:



0 ppm, 25°C

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

Gastrennung:

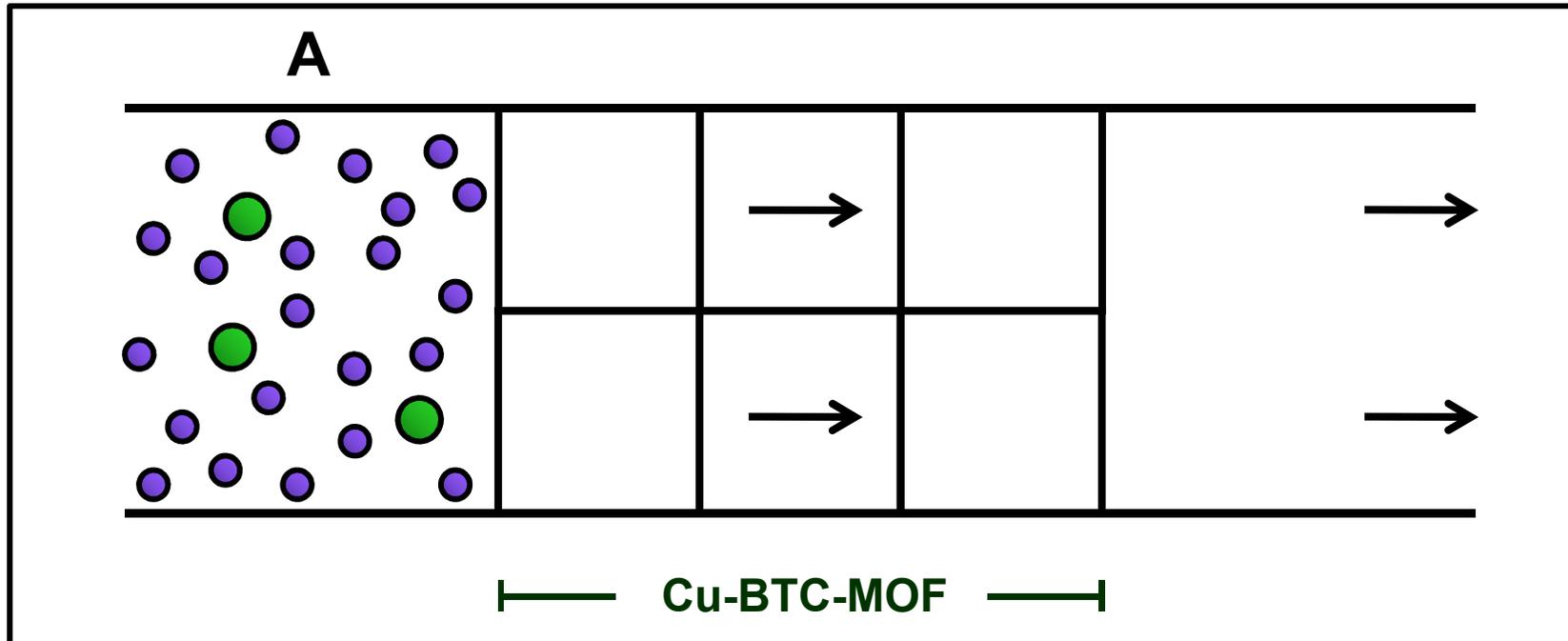
- Gastrennungen mittels kryogener Destillation sind sehr aufwändig.
- Druckwechsel-Adsorptionen an MOFs (HKUST-1) sind als „Atomsiebe“ wesentlich einfacher und kostengünstiger.
- Trennung von Krypton und Xenon durch „Pressure-Swing-Separation“.

(Xenon: Narkosegas im Operationsraum (OP))

(Krypton: Inertgas in Leuchtmitteln).

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

Gasttrennung von Krypton (●) und Xenon (●):

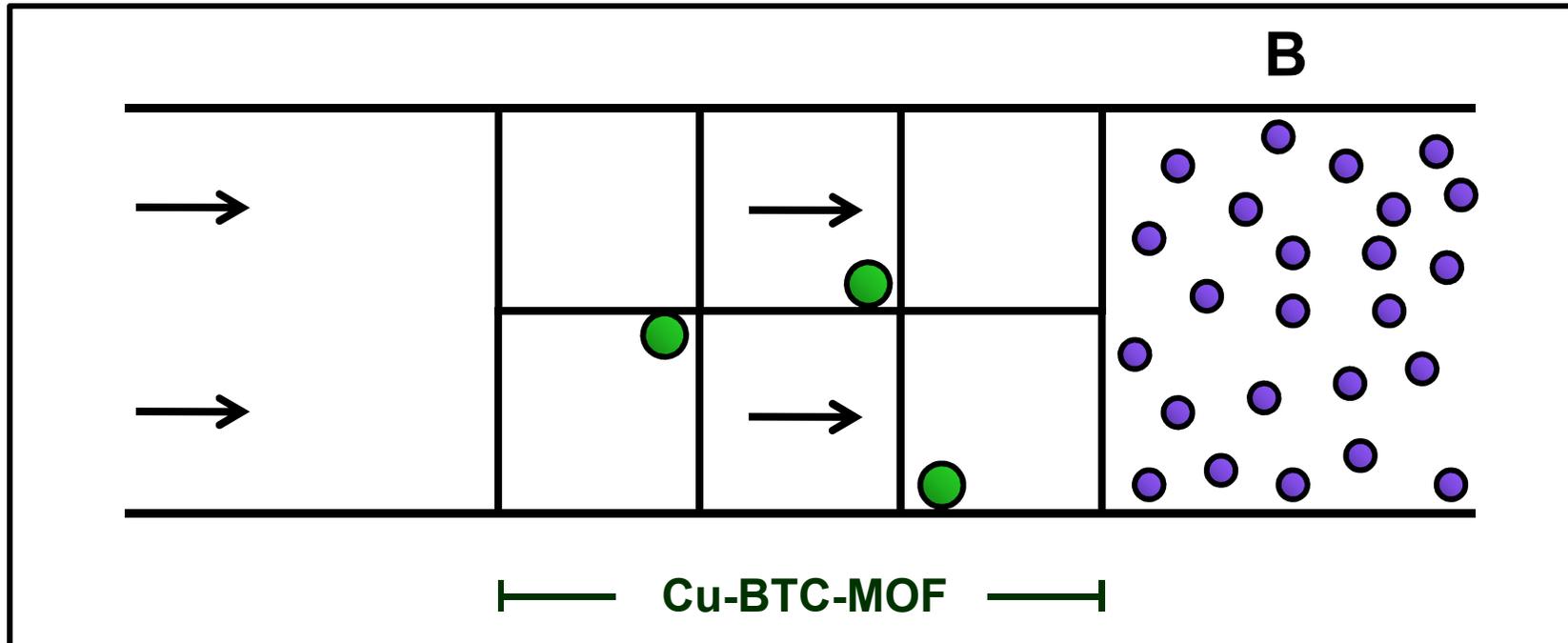


A: 94 Mol-% Krypton, 6 Mol-% Xenon.

Trennbedingungen: 55°C, 40 bar, Flussrate: 60l/h.

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

Gastrennung von Krypton (●) und Xenon (●):

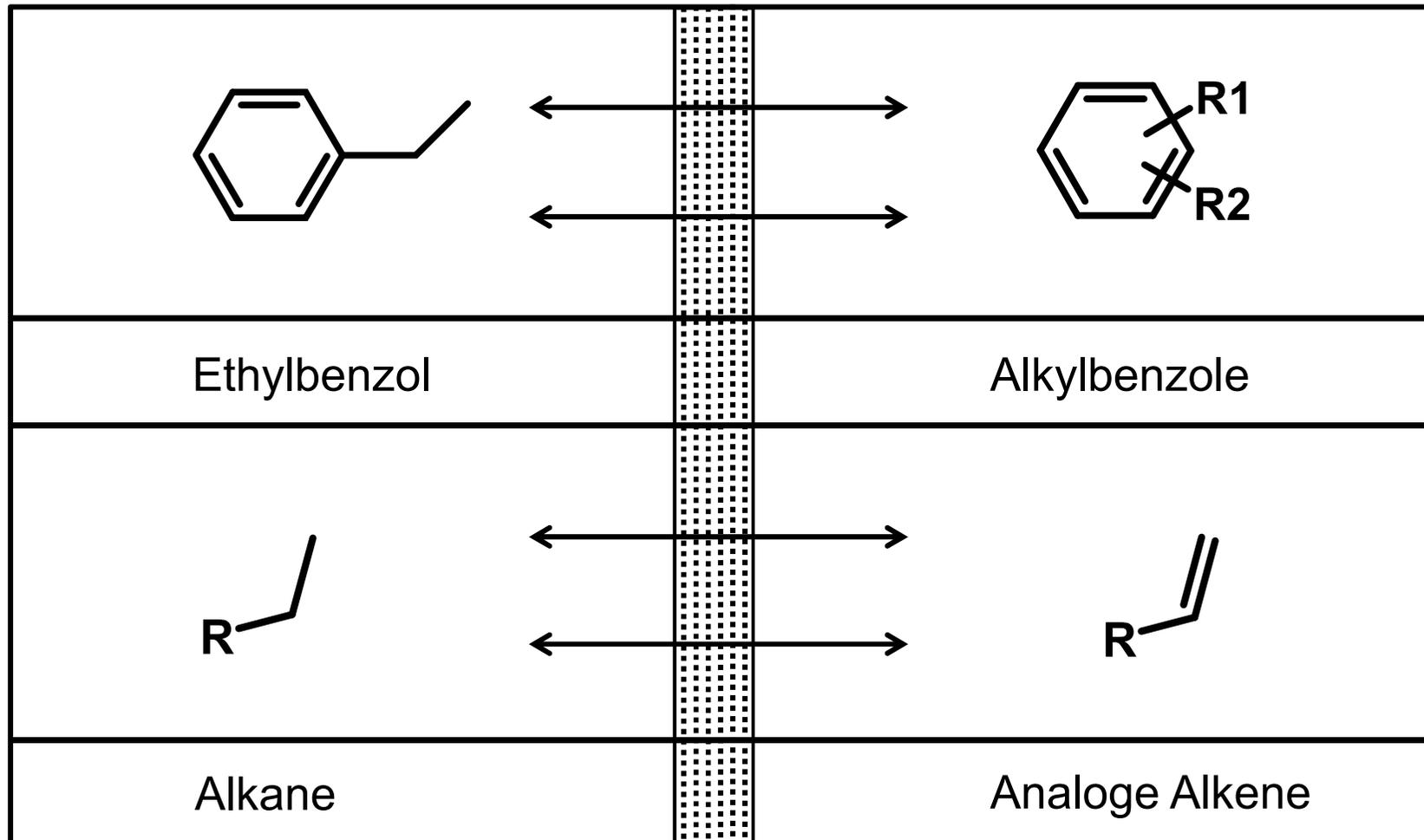


B: Krypton mit maximal 0,01% Xenon.

Trennbedingungen: 55°C, 40 bar, Flussrate: 60l/h.

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

Weitere Stofftrennungen mittels MIL-47 bzw. MIL-53:



Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur Gasspeicherung

Technische Anwendungen dieser porösen Materialien:

- Trägermaterialien für die Heterogenkatalyse.
- Immobilisierung (chiraler) homogener Katalysatoren.
- Nanoreaktoren.
- „Gussformen“ im Nanomaßstab.
- Slow-Release-Formulierungen, Drug-Release.
- Lumineszenz-Strahler.
- Gasreinigung.
- Gastrennung.
- **Gasspeicherung.**

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

Zielanwendung „Wasserstoffwirtschaft“: H₂-Speicherung für den Betrieb von Fahrzeugen unter (geringem) Druck durch eine effiziente H₂-Adsorption innerhalb von Poren oder dem Innern von Kanälen, möglichst bei Umgebungstemperatur.

- Druckgasspeicherung von H₂ im entsprechenden Behältern bei **p ≈ 500-700 bar**: Diese ist nachteilig für den Antrieb von Fahrzeugen: **Explosionsgefahr bei einem Crash!**



- **Kryo-Speicherung** von flüssigem H₂ bei p ≈ 200 bar und T ≈ 50-75 K.

- Drucklose, adsorptive **Kryo-Speicherung** von Wasserstoff in **porösen Materialien**, wie MOF`s, bereits bei 50 K (T_s H₂: 20 K).



Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

Zielanwendung „Wasserstoffwirtschaft“: H₂-Speicherung für den Betrieb von Fahrzeugen unter (geringem) Druck durch eine effiziente H₂-Adsorption innerhalb von Poren oder dem Innern von Kanälen, möglichst bei Umgebungstemperatur.

Sollwert für die H₂-Speicherung im Jahr 2017 laut US-Energiebehörde „Department of Energy (DOE)“:

→ Die **volumetrische Kapazität** der verwendeten Speicher-materialien sollte **zwischen 30g und 70 g H₂ pro Liter** liegen.

→ MOFs, die sich für die Wasserstoffspeicherung bei Brennstoffzellen von Kraftfahrzeugen verwenden lassen, sollten im **Temperaturbereich -20°C bis +40°C** und **Drücken zwischen 1 und 100 bar** funktionieren. Solche physikalischen Bedingungen gelten für Anwendungen in Kraftfahrzeugen als sicher.

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

Gasspeicherung von Wasserstoff, H₂.

Wasserstoff-Brennstoffzelle, Basisreaktion:



Vorteile

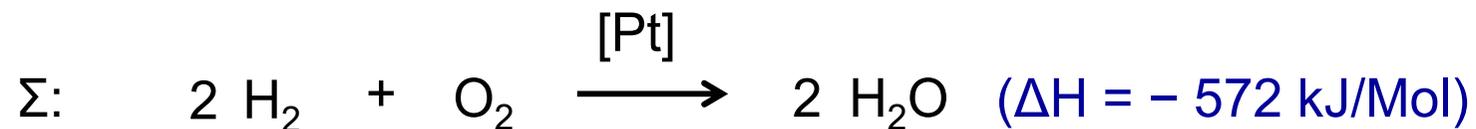
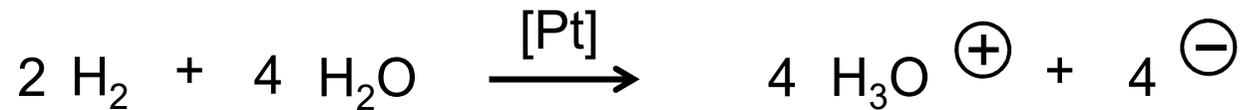


- Saubere Reaktion mit O₂ zu Wasser.
- Wirkungsgrad ca. 50% über dem des Benzinverbrennungsmotors.
- Hohe gravimetrische Energiedichte: ca. 120 MJ/kg.

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

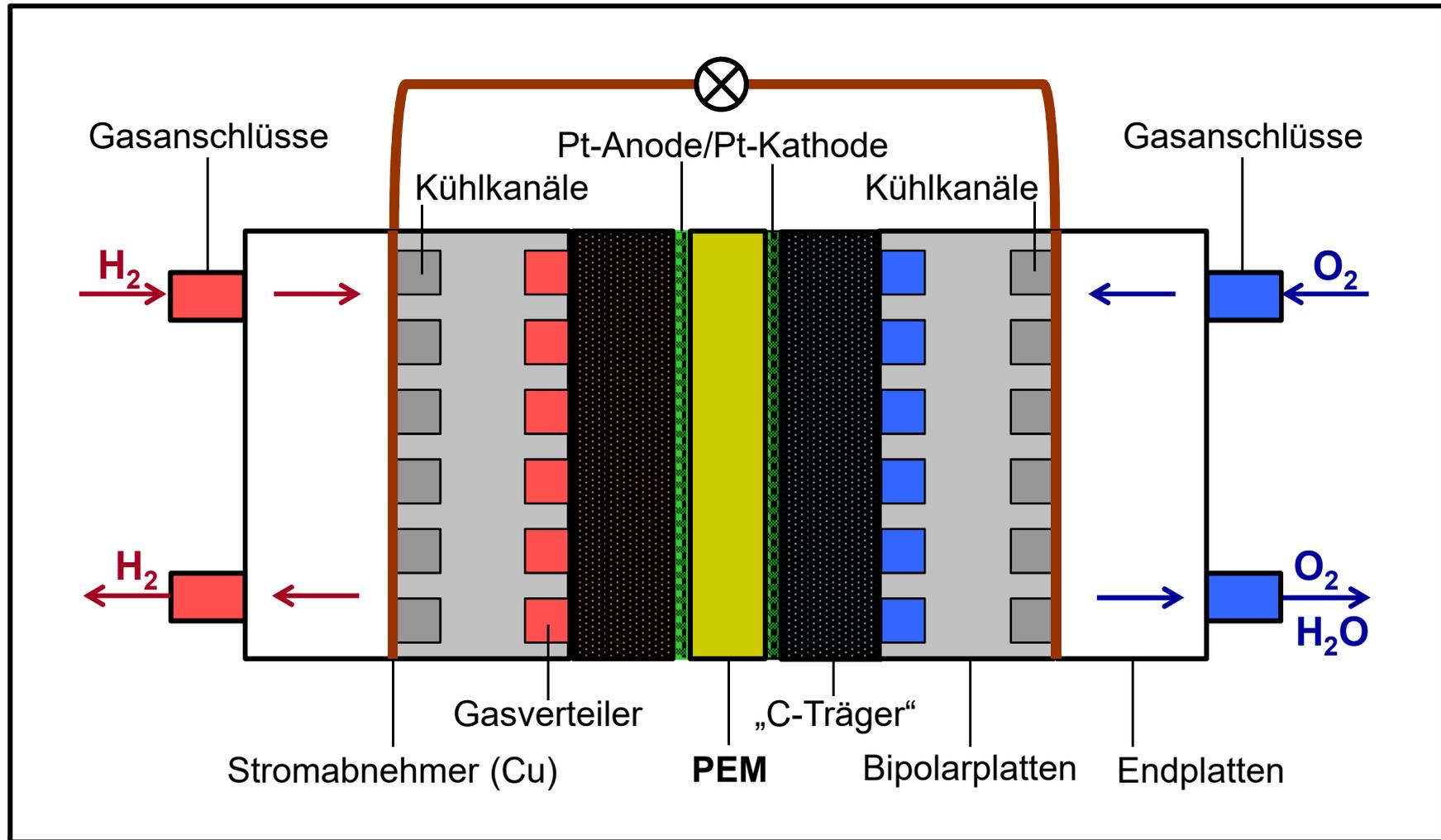
Gasspeicherung von Wasserstoff, H₂.

Wasserstoff-Brennstoffzelle, Teilreaktionen, Bilanz:



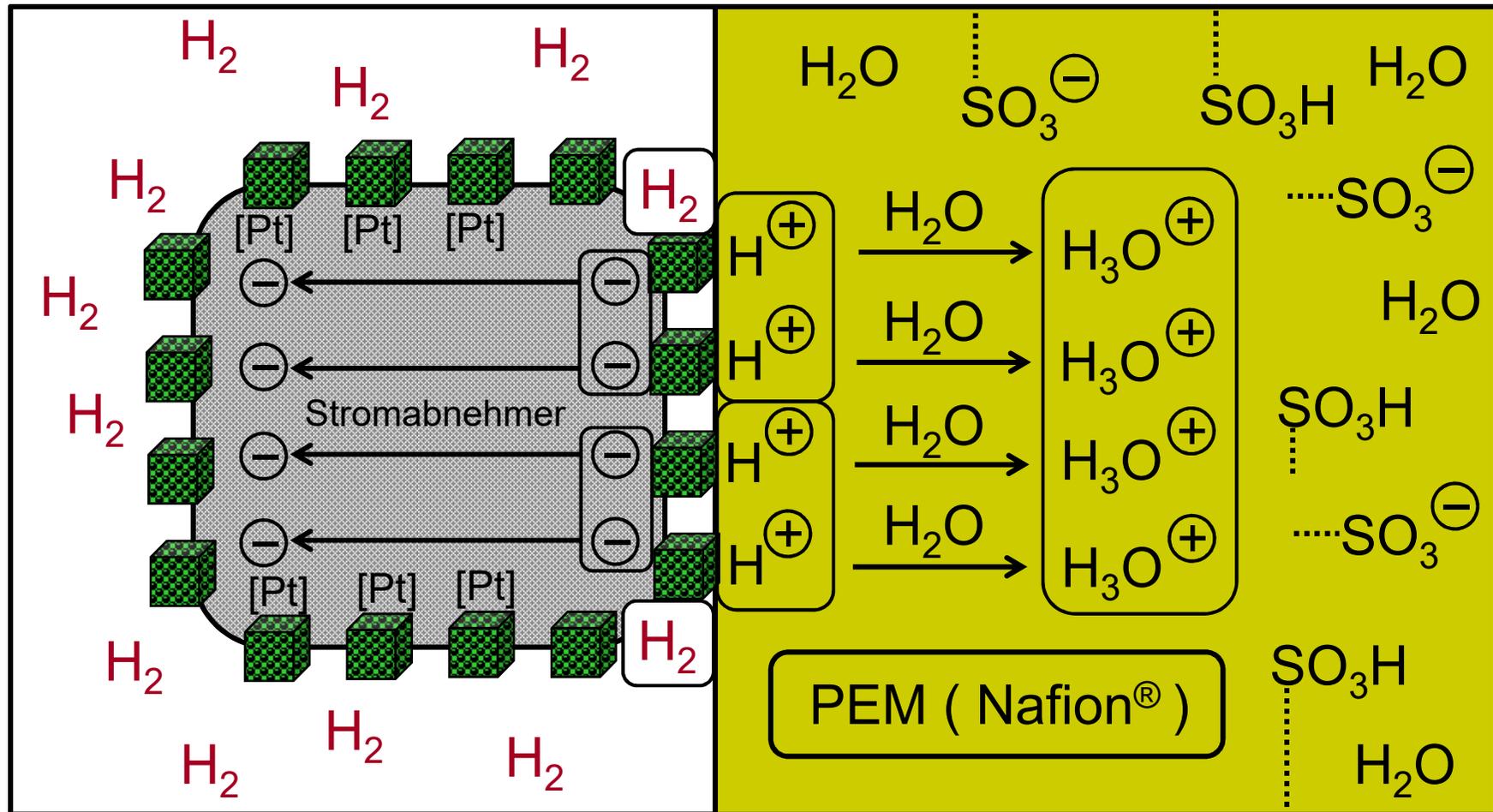
Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), Aufbau:



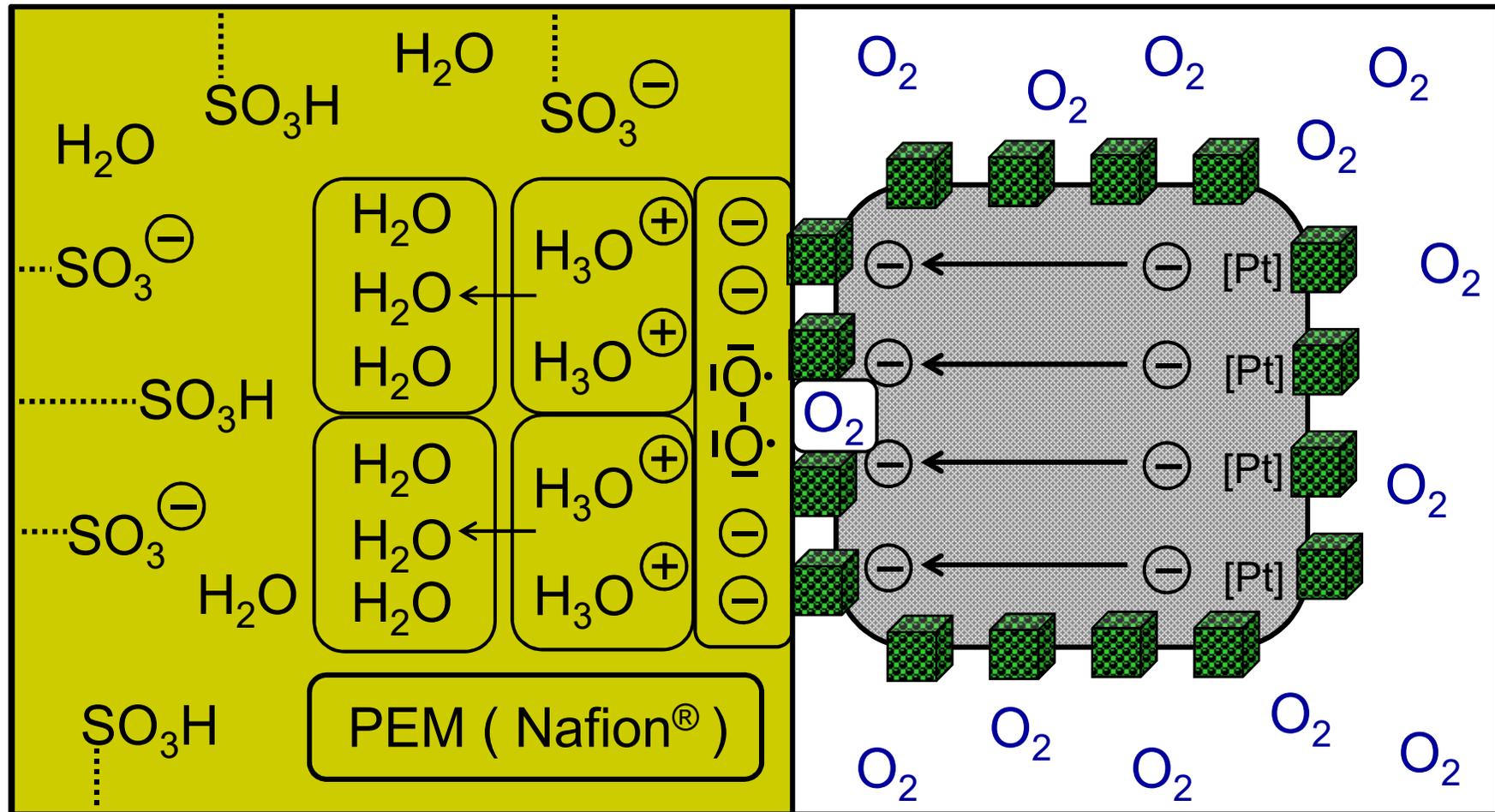
PEM-Brennstoffzelle, Anode: Oxidation von Wasserstoff.

Einzelteil eines porösen „Kohlenstoffträgers“ ($\varnothing \approx 40\text{nm}$) mit Pt-Nanopartikeln ($\varnothing \approx 4\text{nm}$) an seiner Oberfläche (Schema):



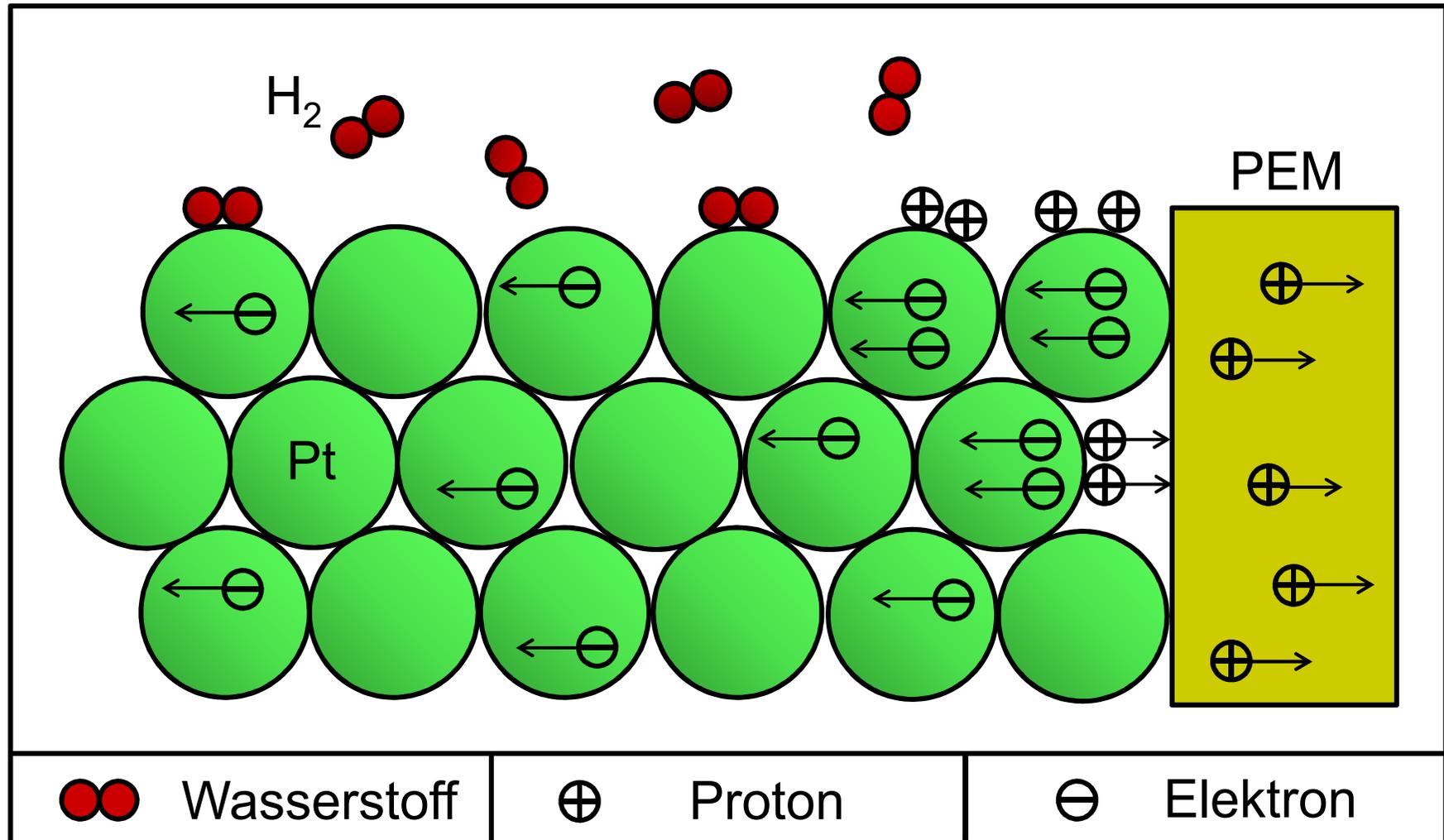
PEM-Brennstoffzelle, Kathode: Reduktion von Sauerstoff.

Einzelteil eines porösen „Kohlenstoffträgers“ ($\varnothing \approx 40\text{nm}$) mit Pt-Nanopartikeln ($\varnothing \approx 4\text{nm}$) an seiner Oberfläche (Schema):



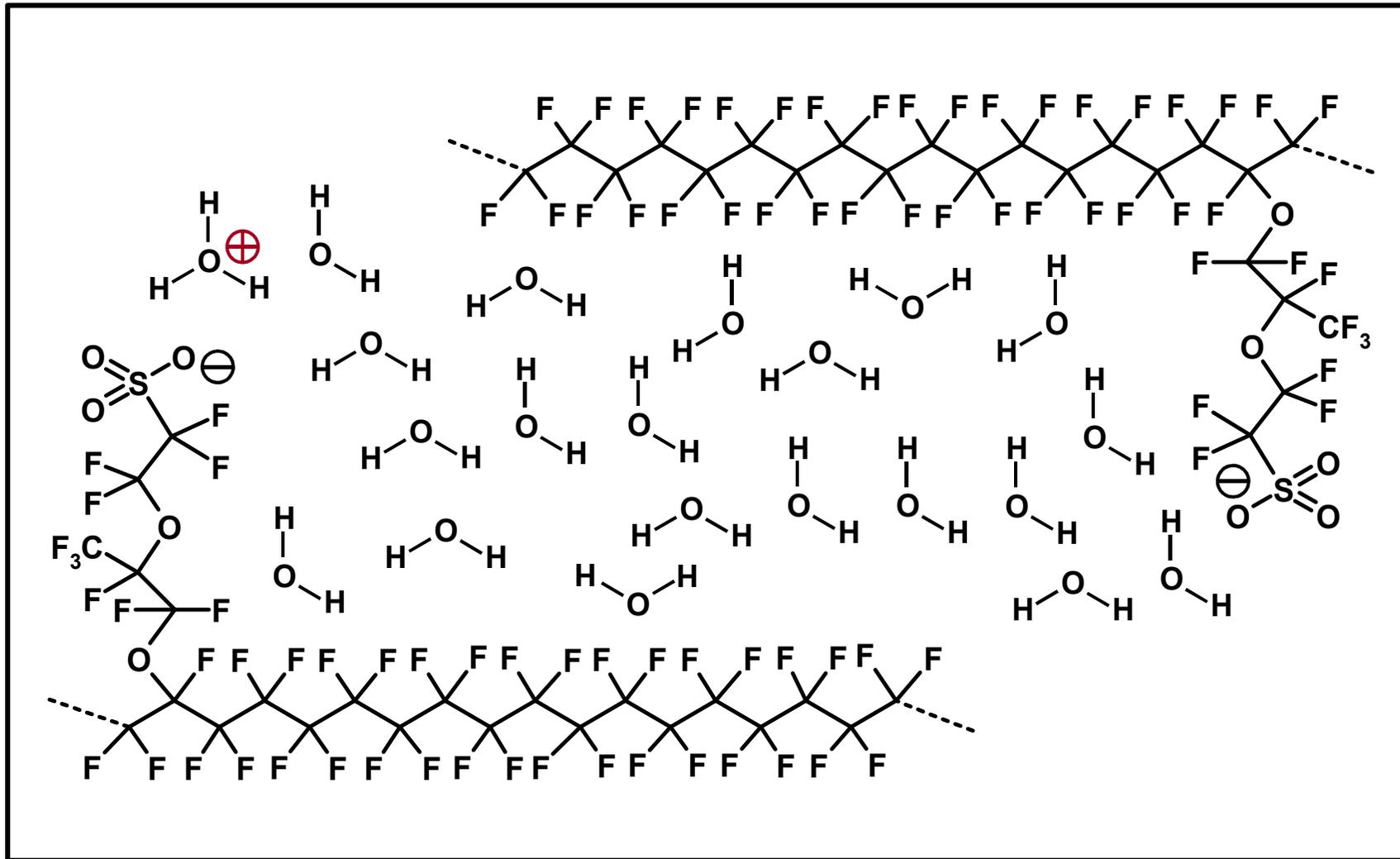
PEM-Brennstoffzelle, Anode: Oxidation von Wasserstoff.

Platin-Nanopartikel, Elektronen-/Protonentransfer (Schema):



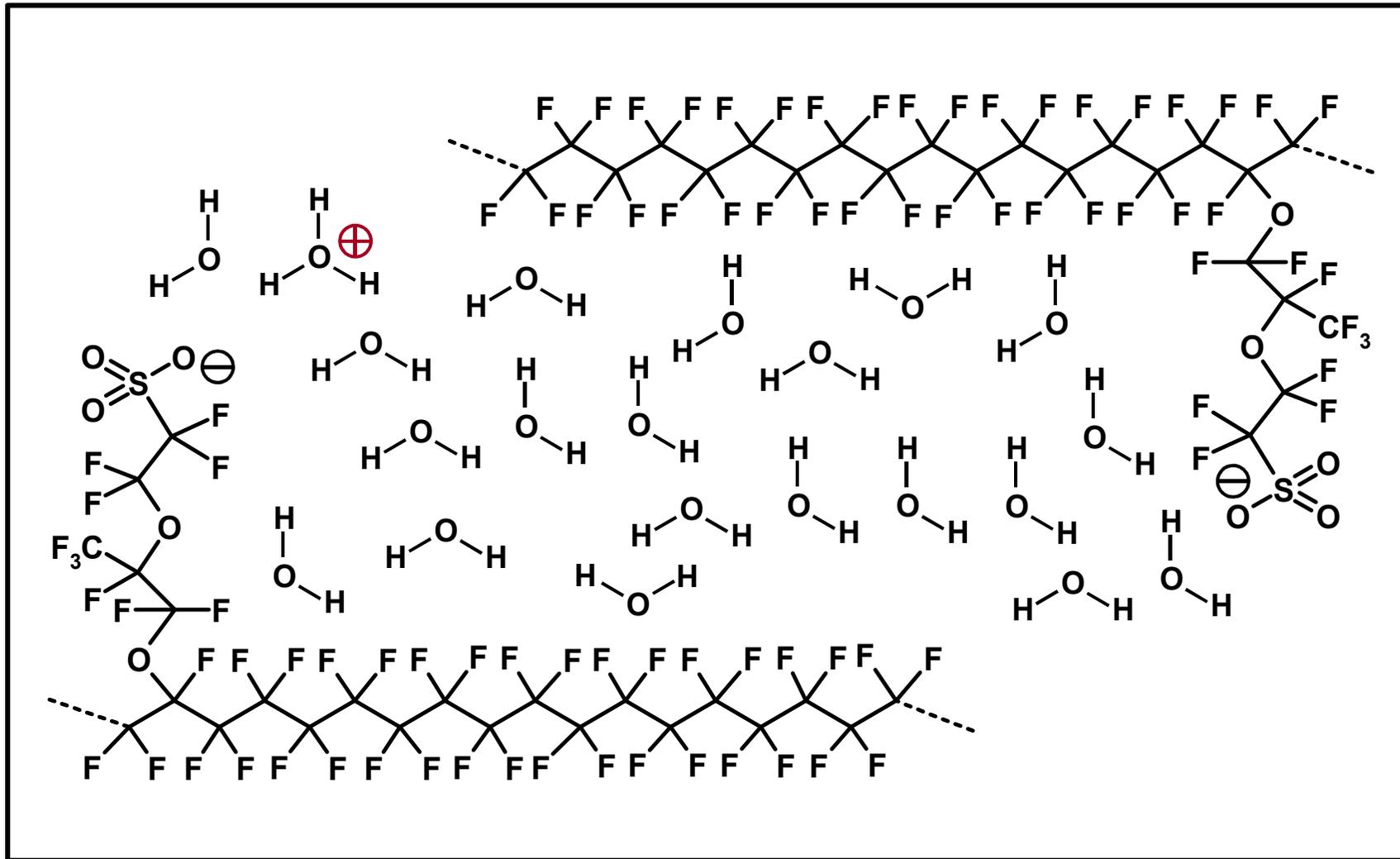
Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), PEM.

Protonenleitung in einer Wasserdomäne von Nafion[®] (idealisiert):



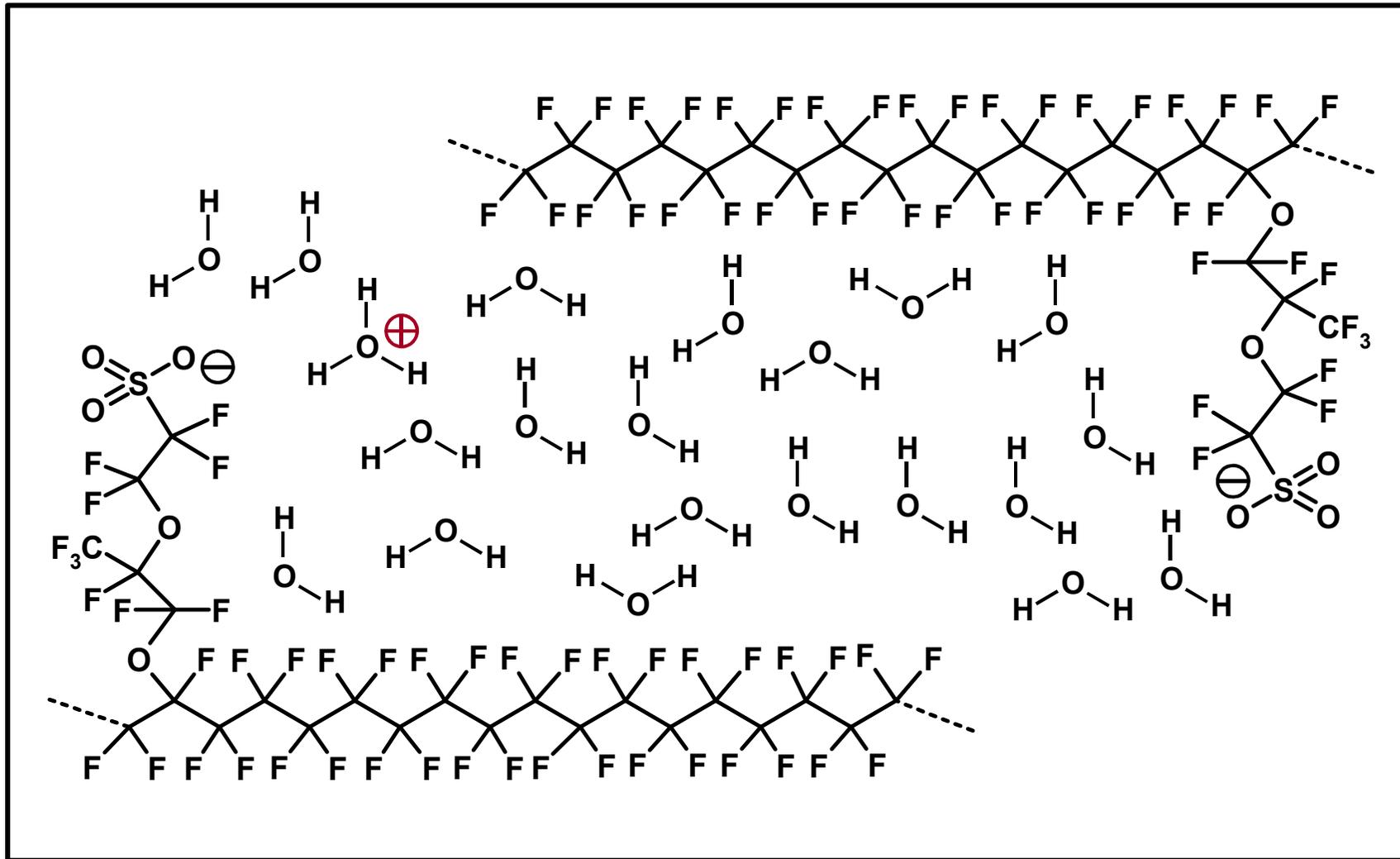
Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), PEM.

Protonenleitung in einer Wasserdomäne von Nafion[®] (idealisiert):



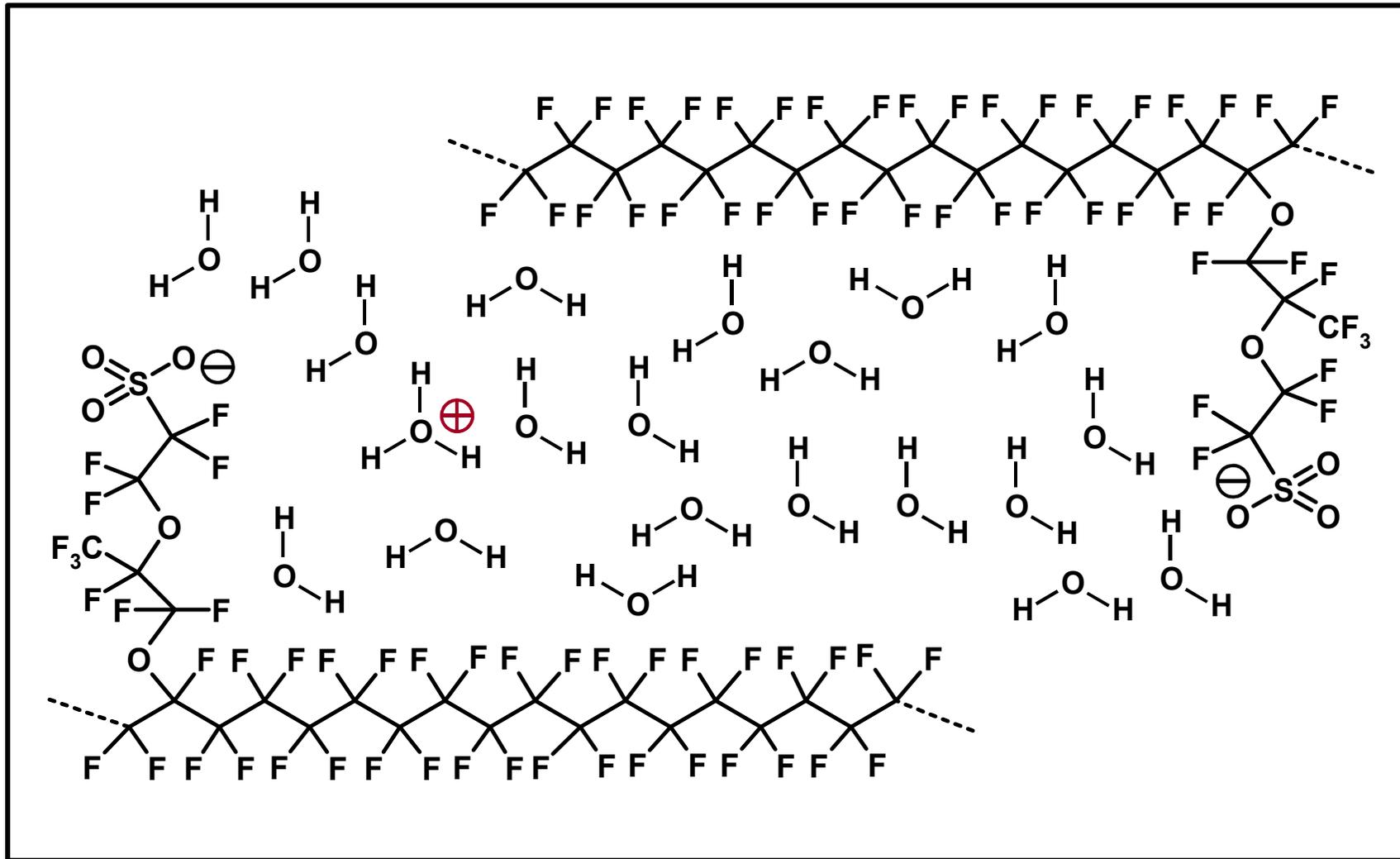
Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), PEM.

Protonenleitung in einer Wasserdomäne von Nafion[®] (idealisiert):



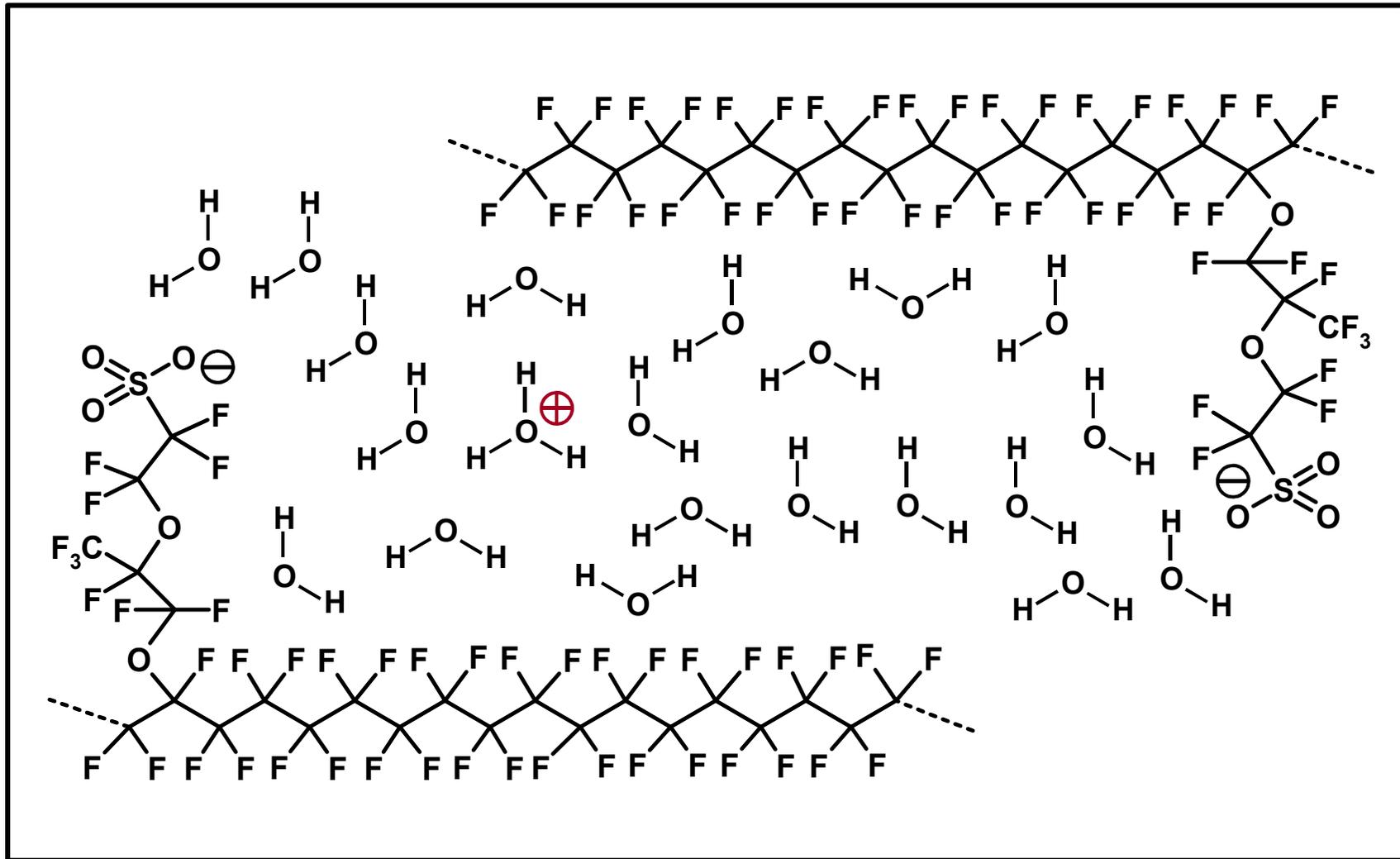
Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), PEM.

Protonenleitung in einer Wasserdomäne von Nafion[®] (idealisiert):



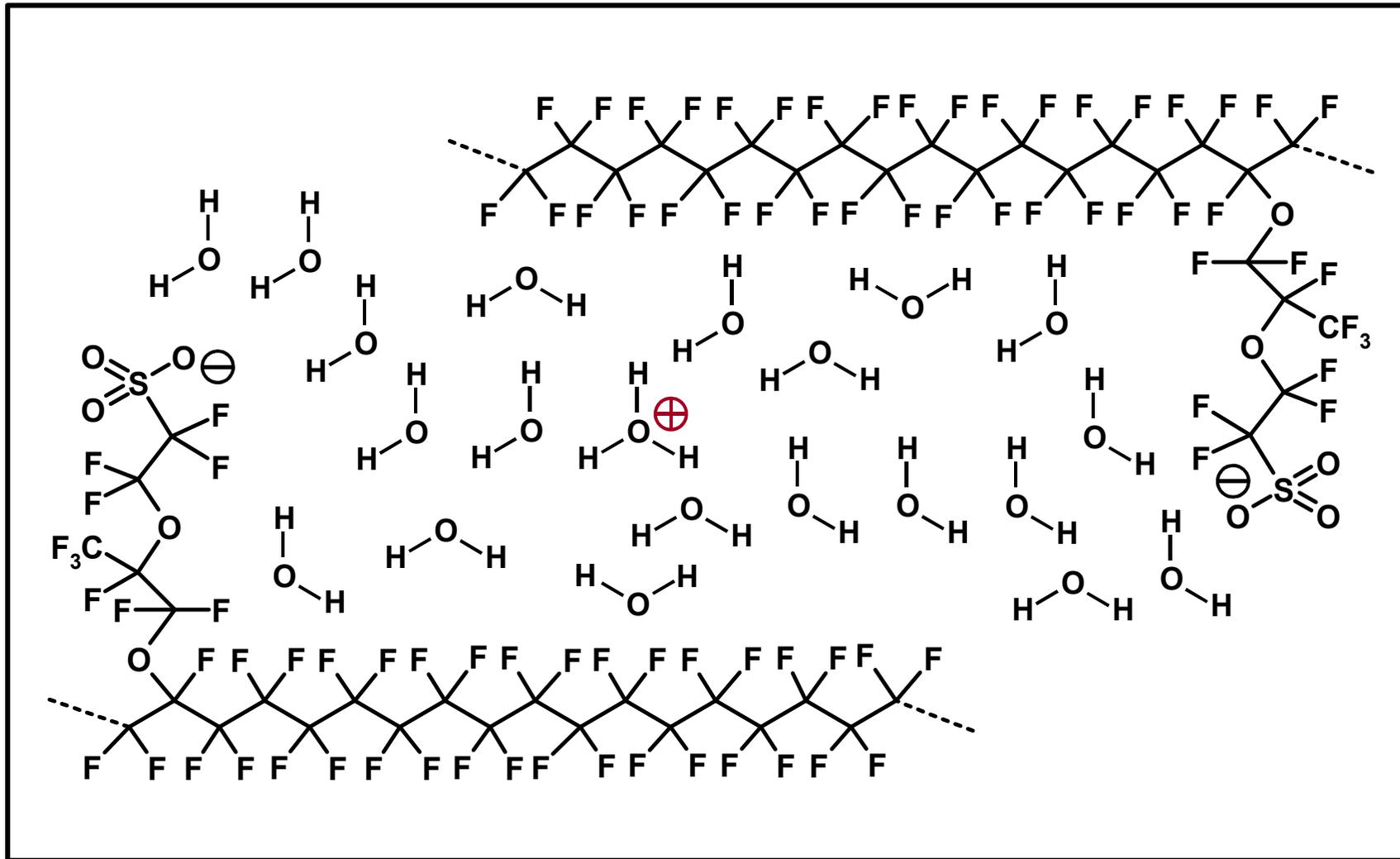
Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), PEM.

Protonenleitung in einer Wasserdomäne von Nafion[®] (idealisiert):



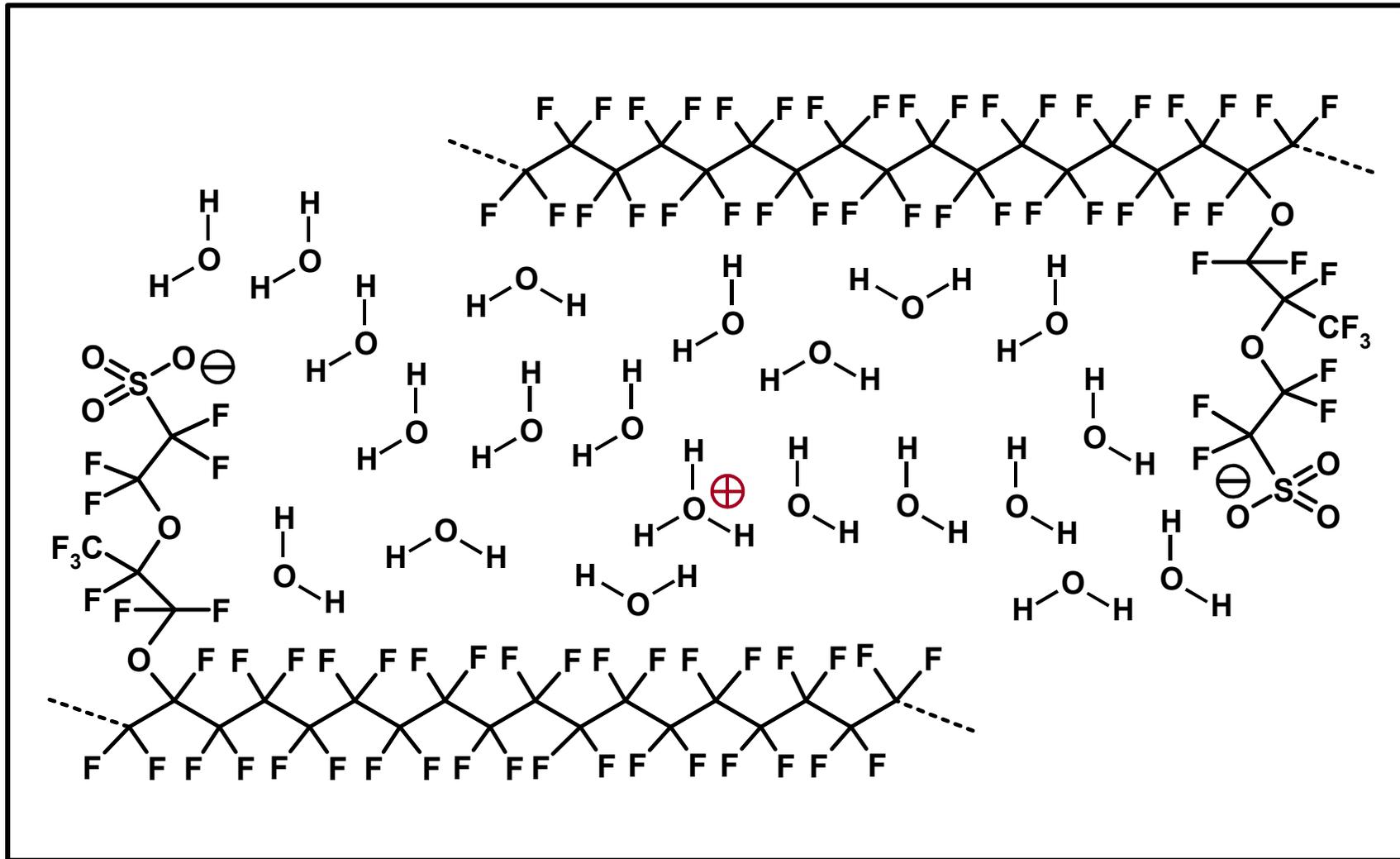
Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), PEM.

Protonenleitung in einer Wasserdomäne von Nafion[®] (idealisiert):



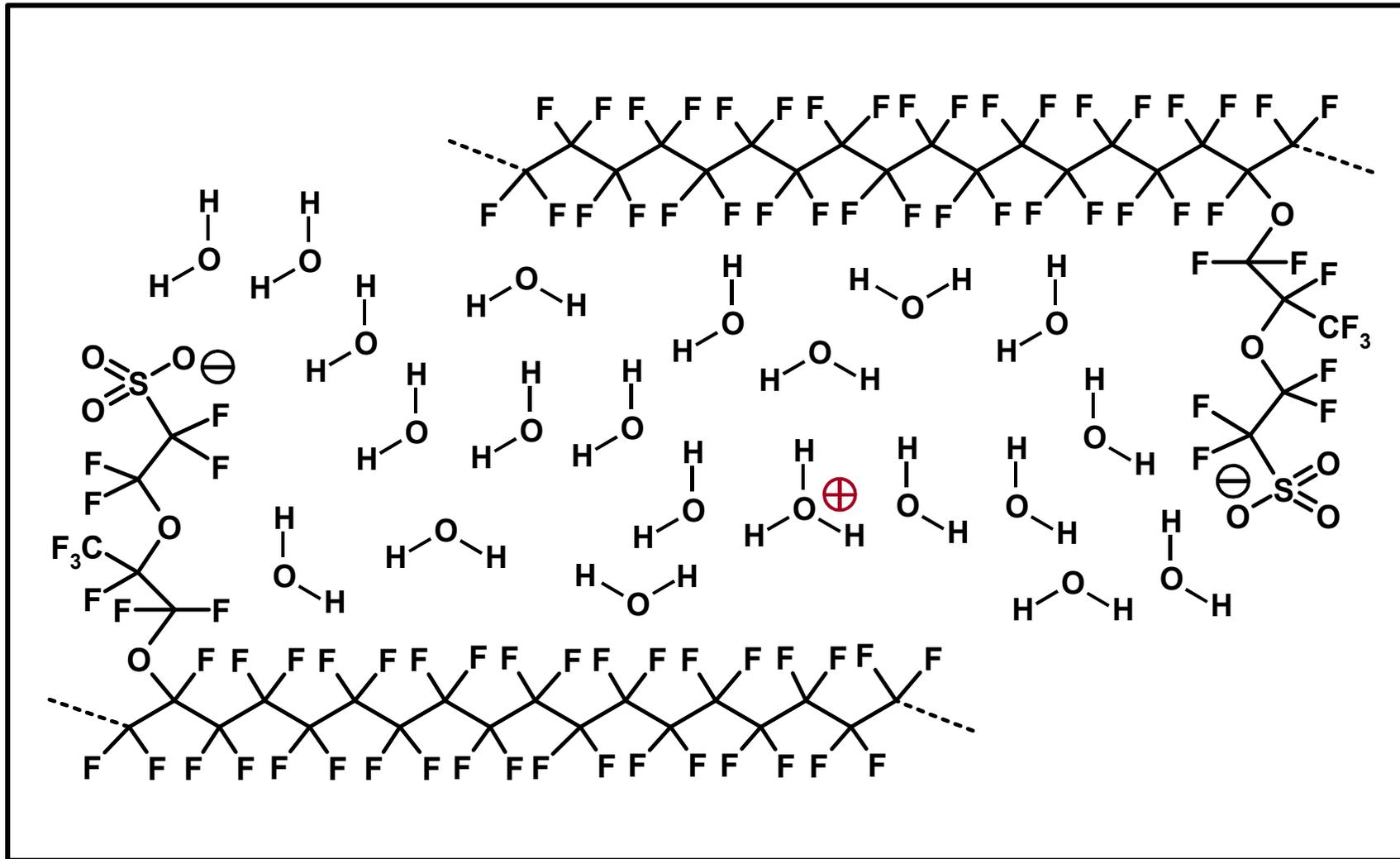
Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), PEM.

Protonenleitung in einer Wasserdomäne von Nafion[®] (idealisiert):



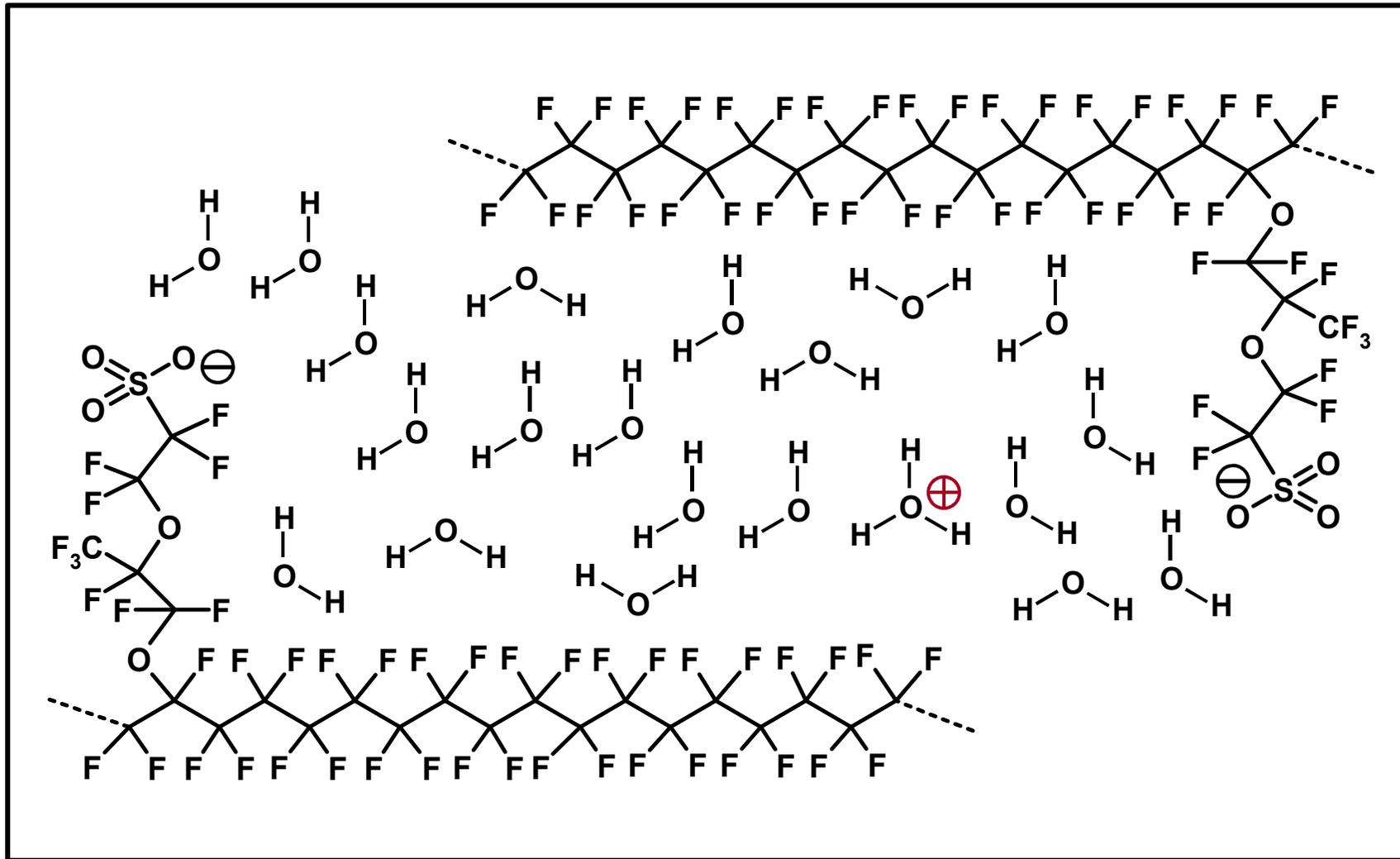
Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), PEM.

Protonenleitung in einer Wasserdomäne von Nafion[®] (idealisiert):



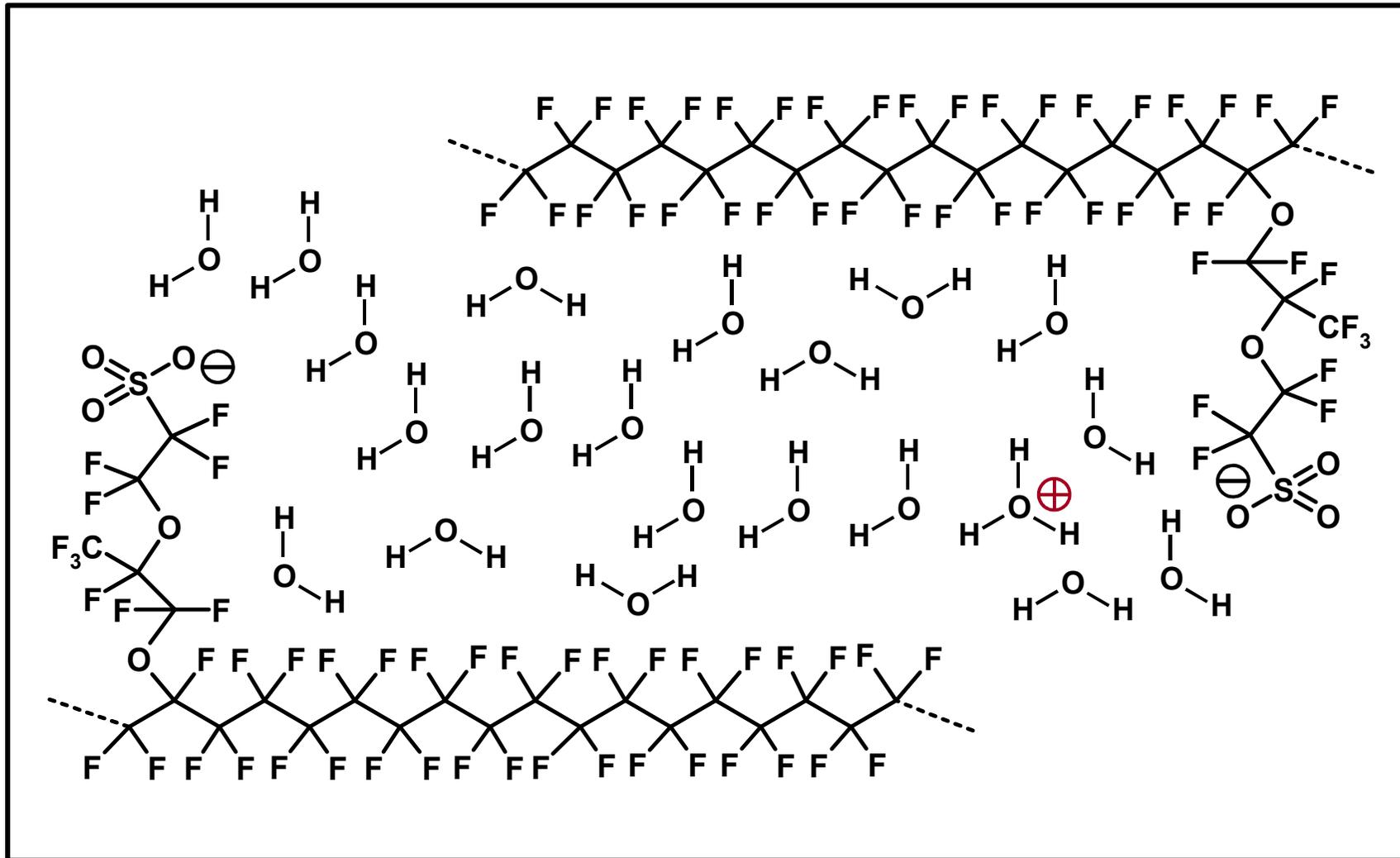
Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), PEM.

Protonenleitung in einer Wasserdomäne von Nafion[®] (idealisiert):



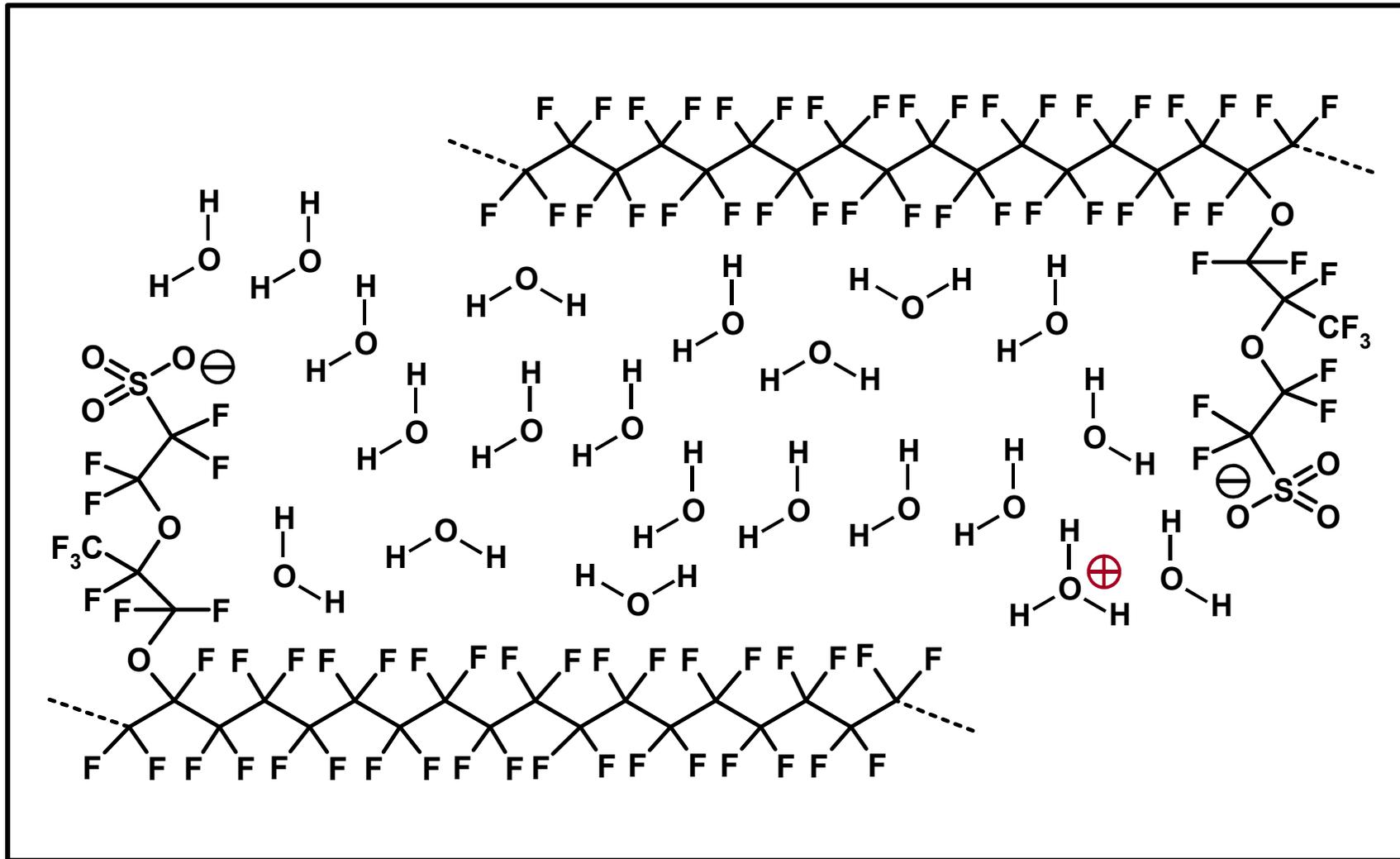
Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), PEM.

Protonenleitung in einer Wasserdomäne von Nafion[®] (idealisiert):



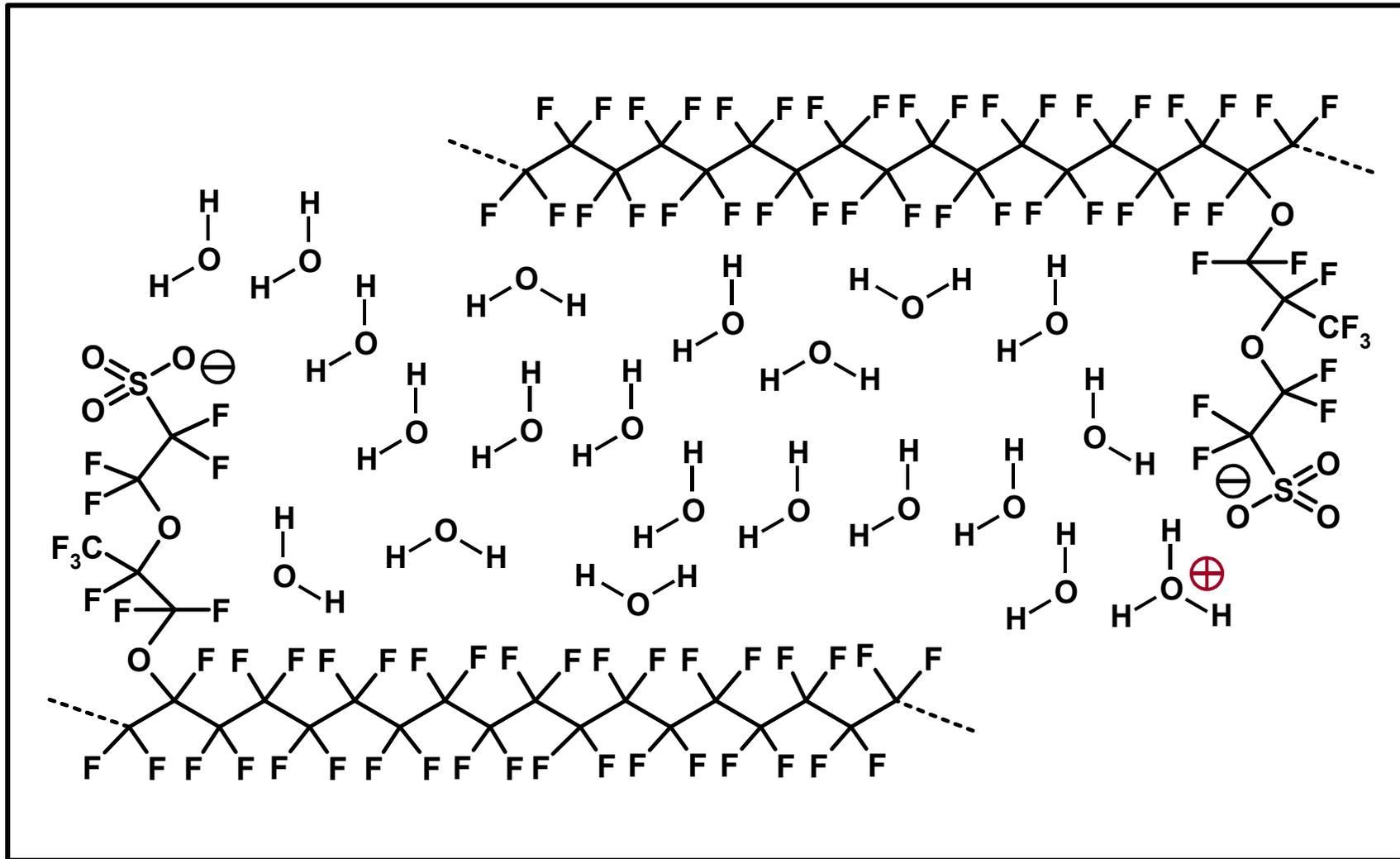
Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), PEM.

Protonenleitung in einer Wasserdomäne von Nafion[®] (idealisiert):



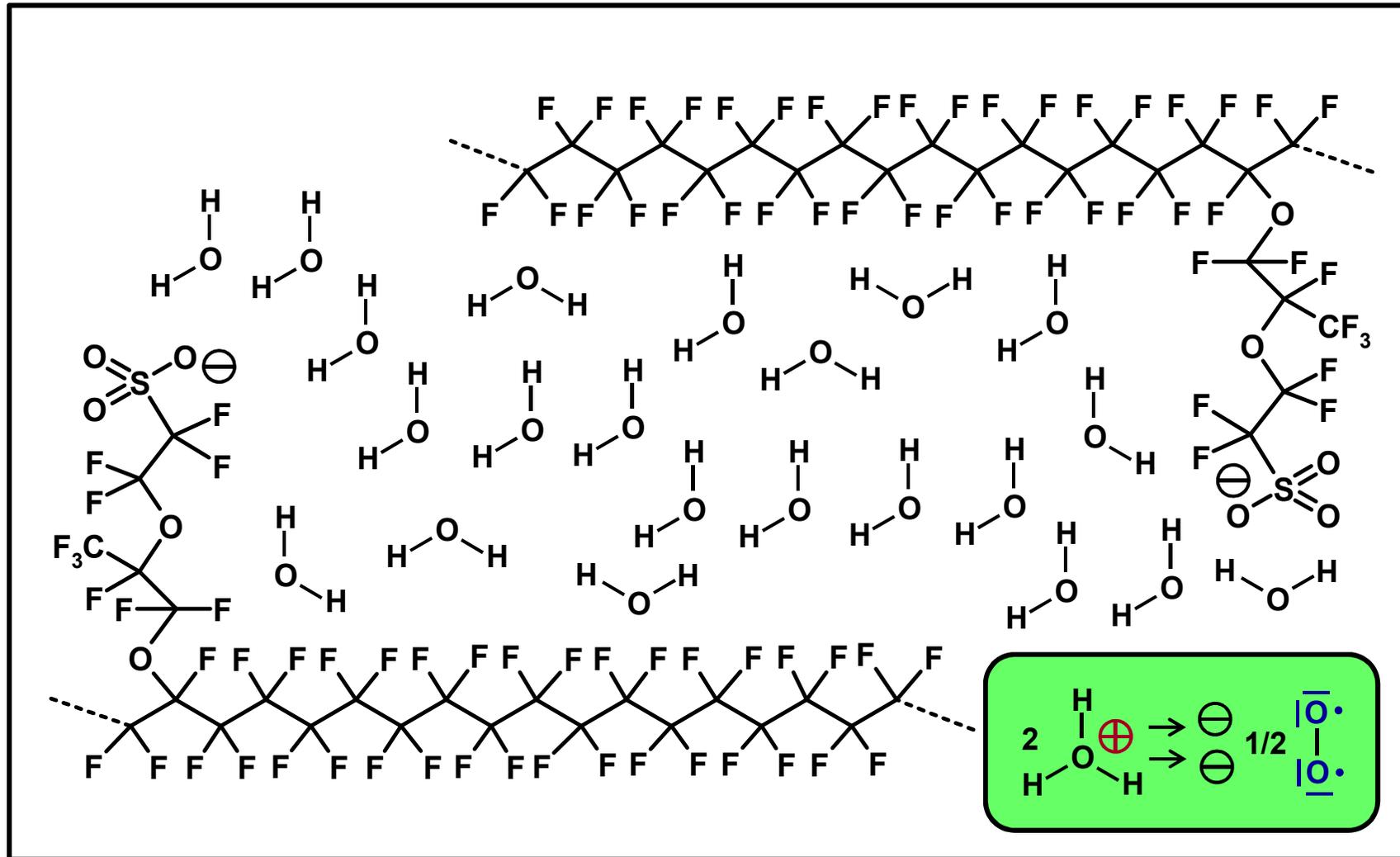
Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), PEM.

Protonenleitung in einer Wasserdomäne von Nafion[®] (idealisiert):



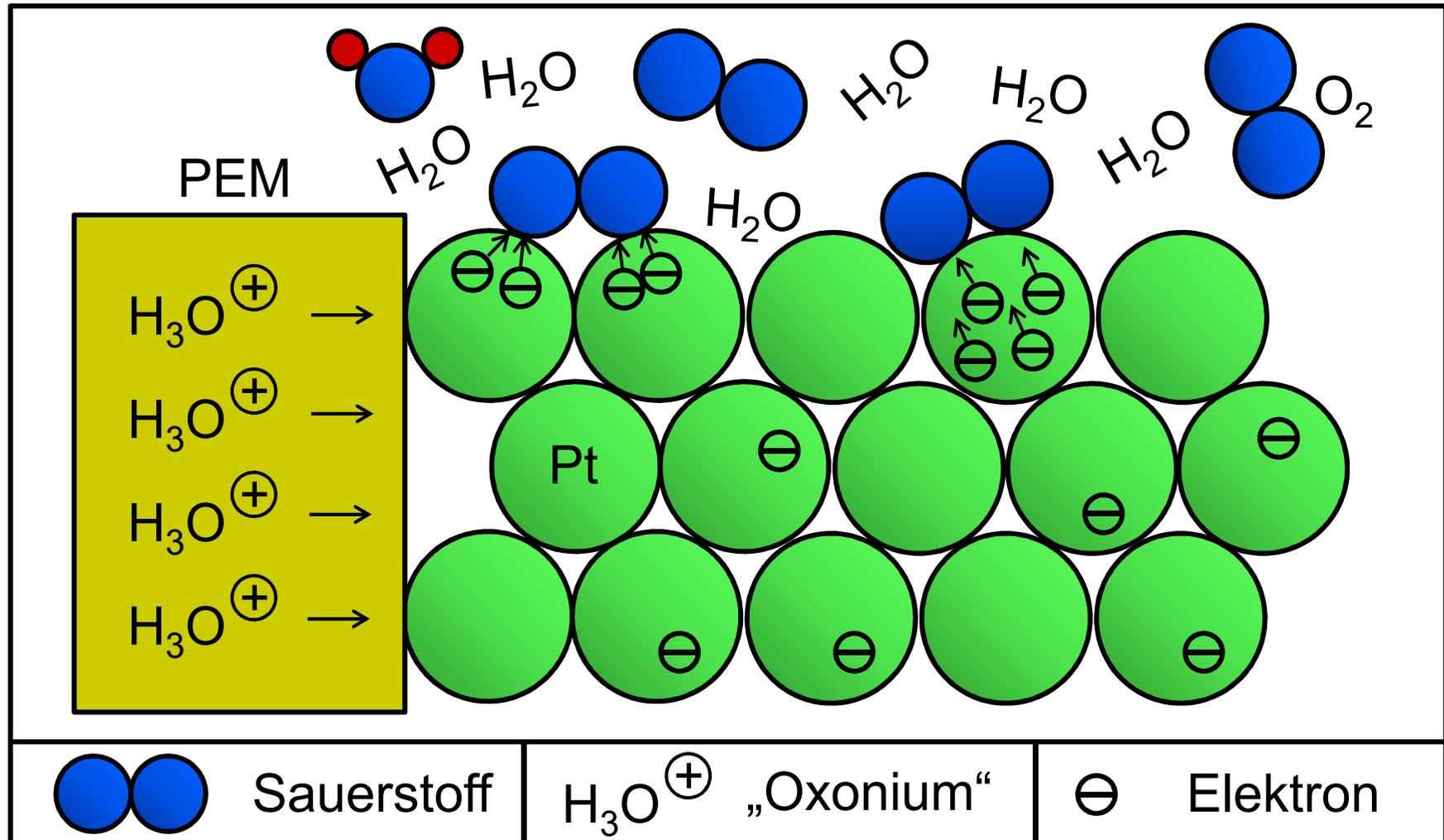
Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), PEM.

Protonenleitung in einer Wasserdomäne von Nafion[®] (idealisiert):



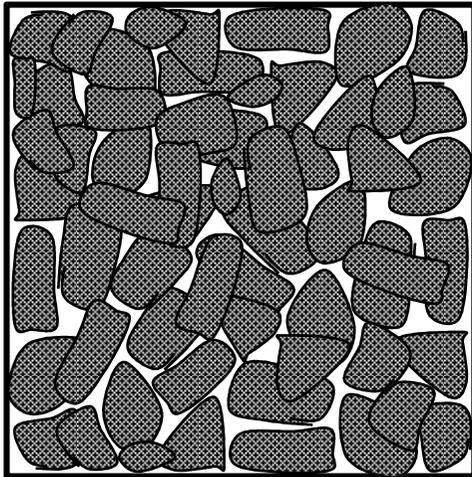
PEM-Brennstoffzelle, Kathode: Reduktion von Sauerstoff.

Platin-Nanopartikel, Elektronen-/Protonentransfer (Schema):

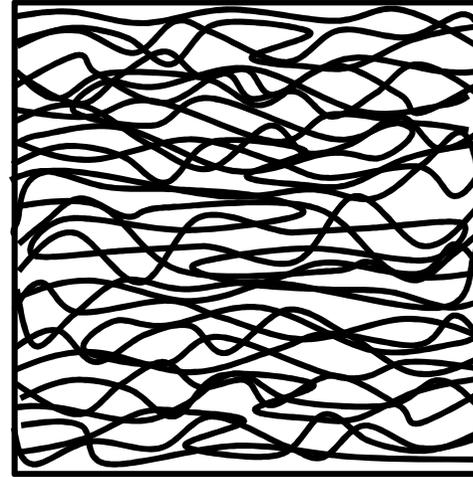


Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), PEM.

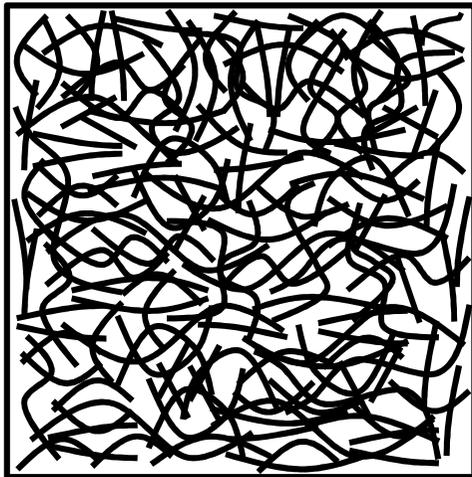
Gasdurchlässige Trägermaterialien für die Platin-Nanopartikel:



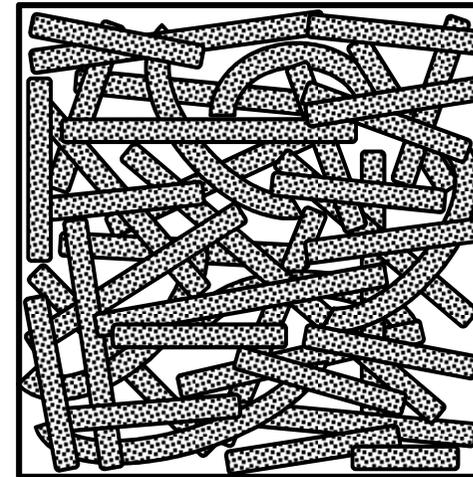
Gepresste
Aktivkohle



C-Fasern,
gepresst



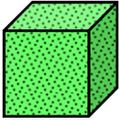
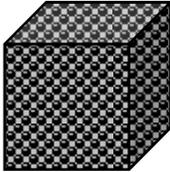
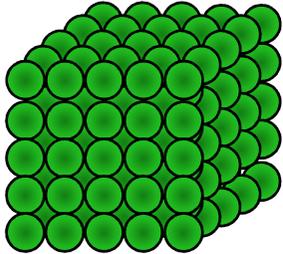
C-Faser
Vliesstoff



C-Nano
Tubes

Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC), PEM.

Funktionierende Alternativen zum Katalysatormetall Platin:

Ni	Ru	Pd	Pt
			

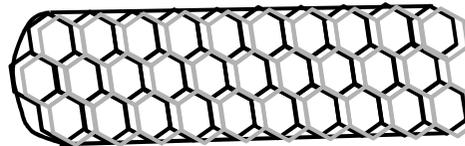
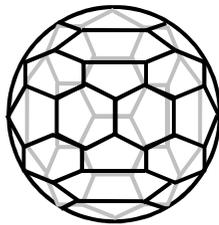
Diese Partikel haben Kantenlängen zwischen $\approx 1,0$ nm und $5,0$ nm.
Ein Platinpartikel von 1nm Kantenlänge enthält ca. 40 Platinatome.

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

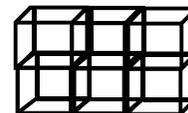
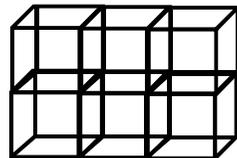
Reversible Gasspeicherung von Wasserstoff, H₂ .

→ **Reversible Wasserstoffspeicher per Adsorption:**

- Kohlenstoffmodifikationen:
z.B. Fullerene, Graphen-Nanotubes



- Metal-Organic Frameworks: z.B. Cu-BTC-MOFs



Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

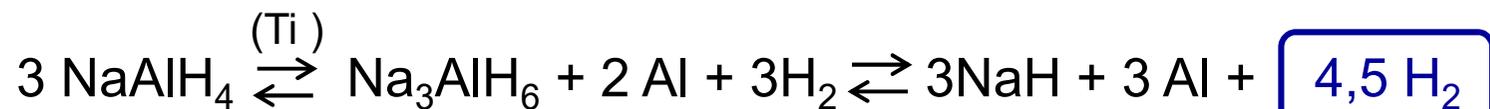
Hinweise und Ergänzungen zum Gesamtkonzept:

Chemische Alternative für die Wasserstoffwirtschaft:
„Teilreversible“, chemische Speicherung von Wasserstoff, H₂,
mittels „Hydrid-Speicherstoffen“. Freisetzung des H₂ aus
fein gemahlenem Metallhydrid (Kugelmühle, Übergangsmetall-
Katalyse, Temperaturen zwischen 35°C und 150°C).

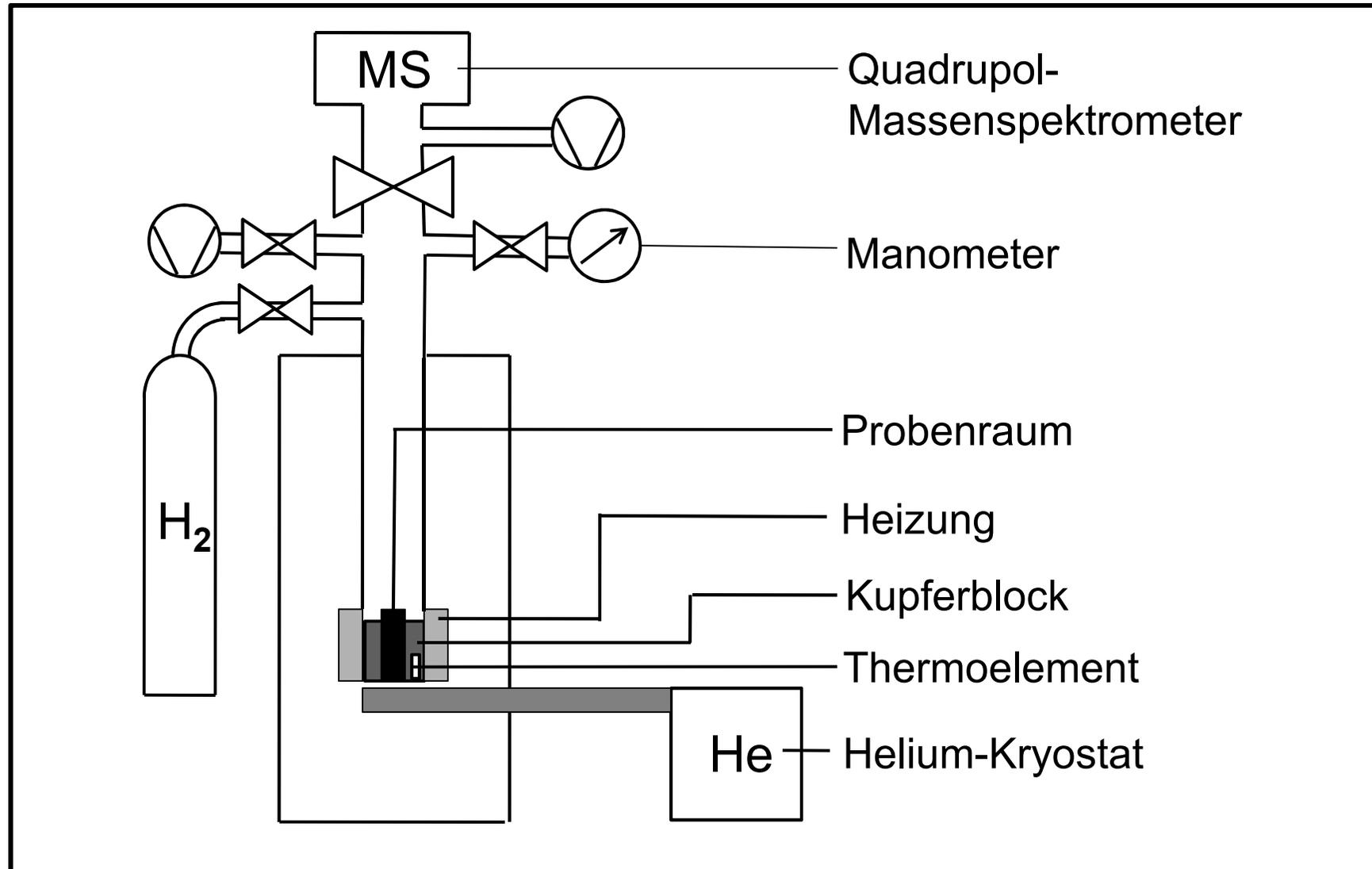
→ Hydride als „teilreversible“ Wasserstoffspeicher

- Metallhydride: z.B. Mg₂NiH₄, NaAlH₄, Mg[AlH₄]₂
- Komplexe Hydride: z.B. , NaBH₄, LiBH₄

→ Wasserstoff-Freisetzung



MOFs, Messung der Wasserstoff-Adsorption durch Thermische Desorptionsspektroskopie, TDS-Apparatur:



Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

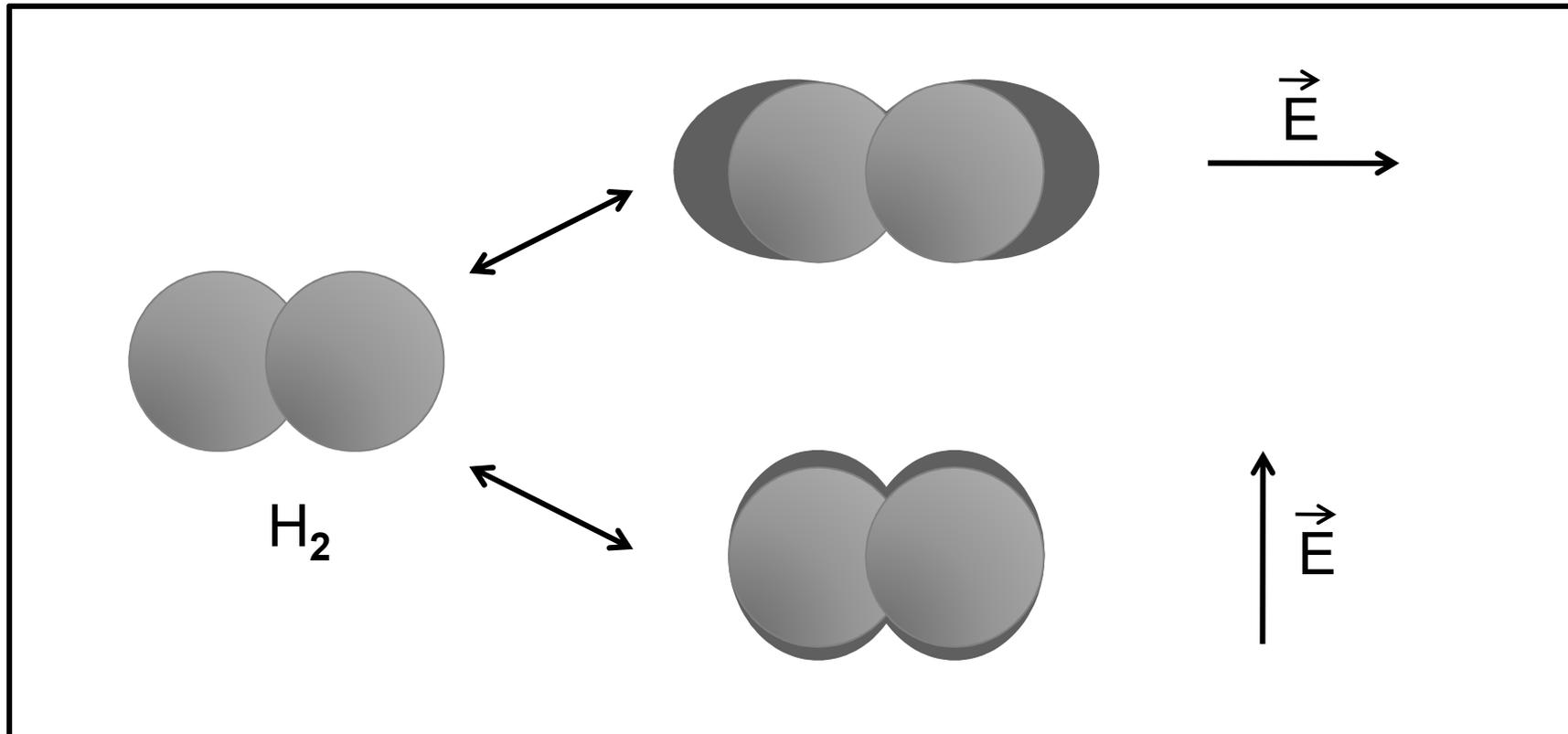
MOFs, Messung der Wasserstoff-Adsorption durch Thermische Desorptionsspektroskopie (TDS), Vorgehen:

1. Bei 20°C einen H₂-Druck von 25 mbar im Probenraum einstellen.
2. Abkühlen auf 20K.
3. 30 Minuten diese p- und T-Bedingungen halten.
4. Evakuierung zur Entfernung von überschüssigem, nicht adsorbiertem H₂.
5. Start des Aufheizprogramms mit 0,1K/s.
6. Messung des Ionisationsstroms im MS (~ H₂-Desorptionsrate).

(Quelle: B. Panella, K. Hönes, U. Müller, N. Trukhan, M. Schubert, H. Pütter, M. Hirscher, "Desorption Studies of Hydrogen in Metal-Organic Frameworks", *Angewandte Chemie International Edition*, **47**, 2138-2142, 2008.

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

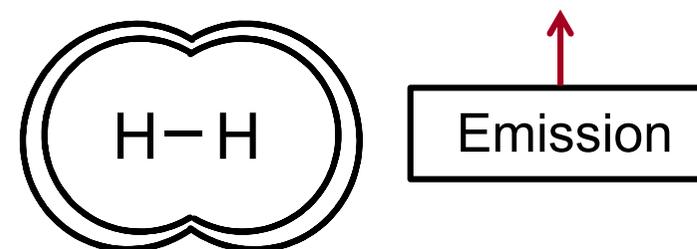
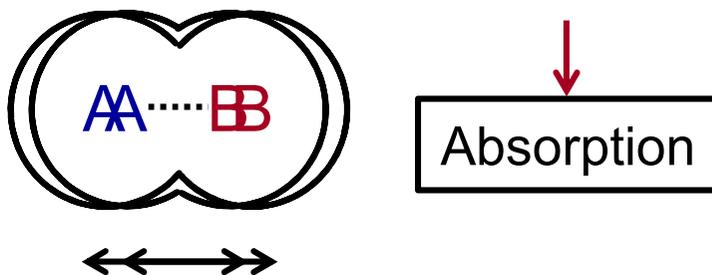
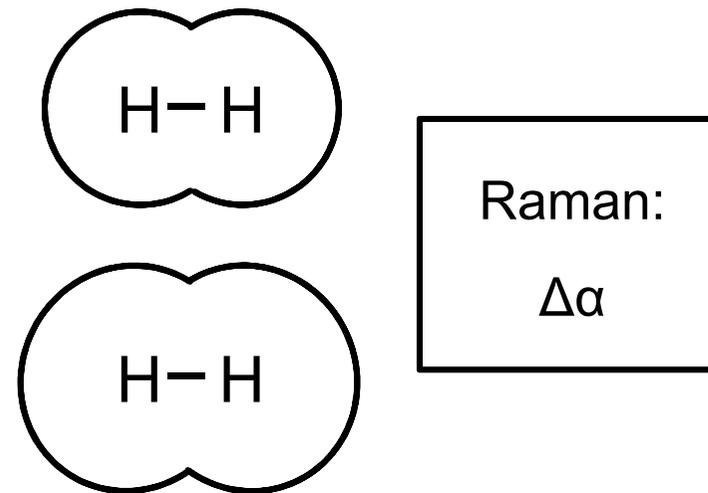
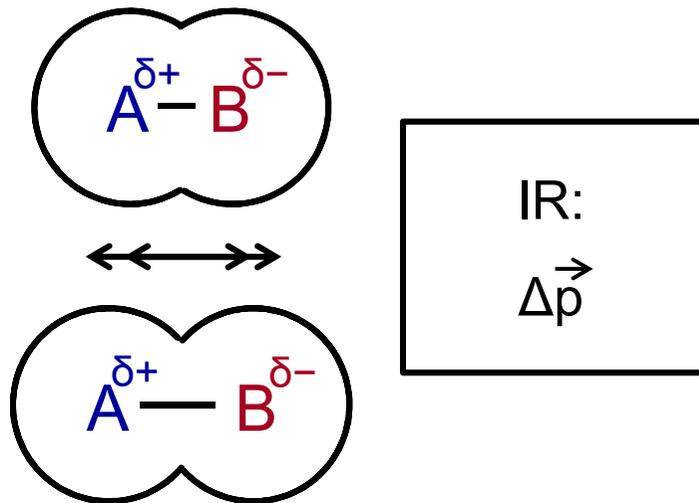
MOFs, Messung der Wasserstoff-Adsorption mittels Raman-Spektroskopie (Anisotrope der Polarisierbarkeit von H₂):



$$\vec{p} = \alpha \cdot \vec{E} ; \text{Dipolmoment} = \text{Polarisierbarkeit} \cdot \text{Feldstärke}$$

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

Messung der Wasserstoff-Adsorption mittels Raman-Spektroskopie, Raman-Effekt, Physikalische Grundlagen:

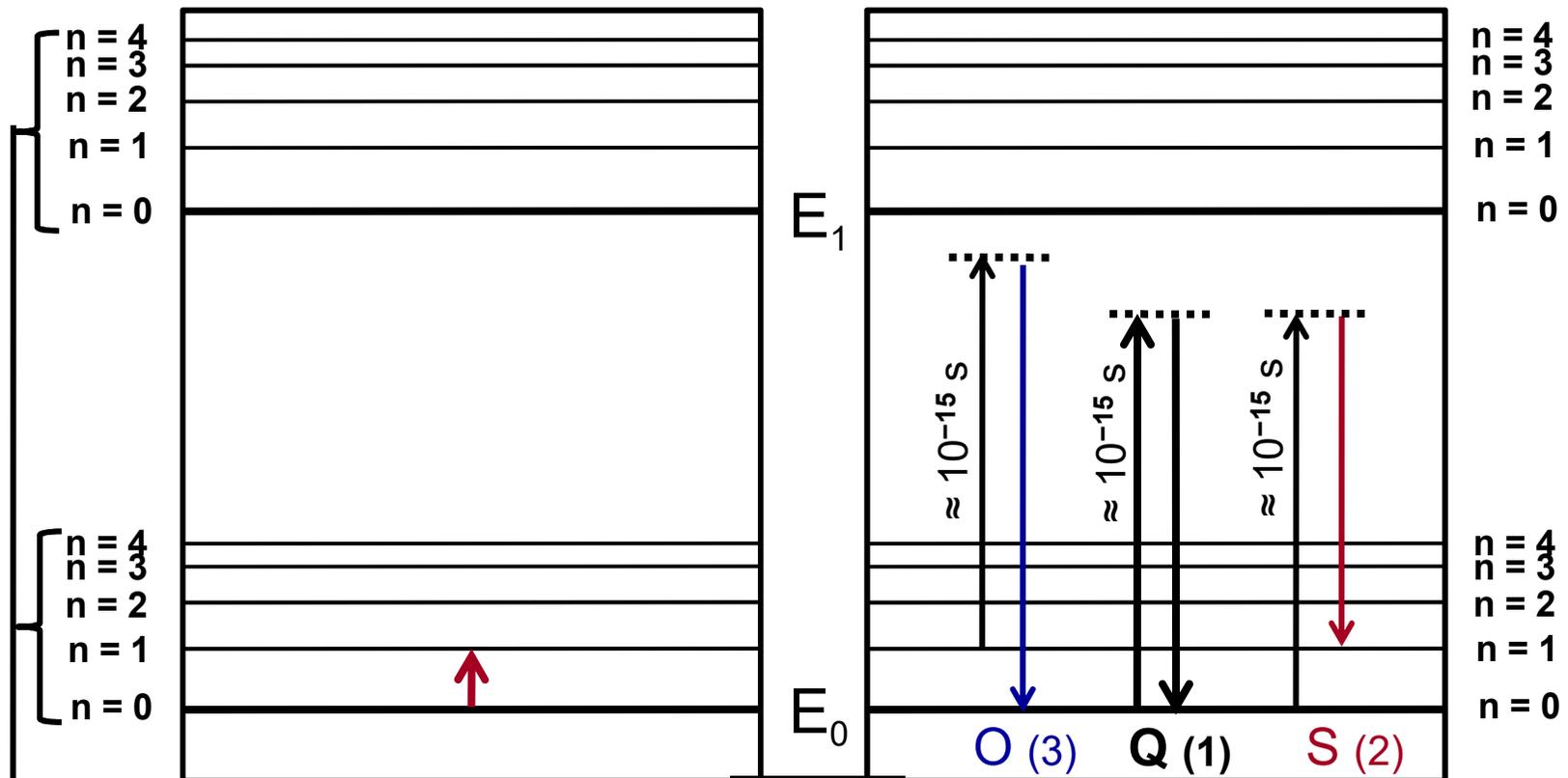


IR-Absorption, Δ Dipolmoment:
 $\Delta \vec{p}$, Abstandsänderungen d A-B

Raman-Emission, Δ Polarisation:
 $\Delta \alpha$, keine Änderungen von d H-H

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

Messung der Wasserstoff-Adsorption mittels Raman-Spektroskopie, Raman-Effekt, Physikalische Grundlagen:



Elektronische
Anregungszustände n

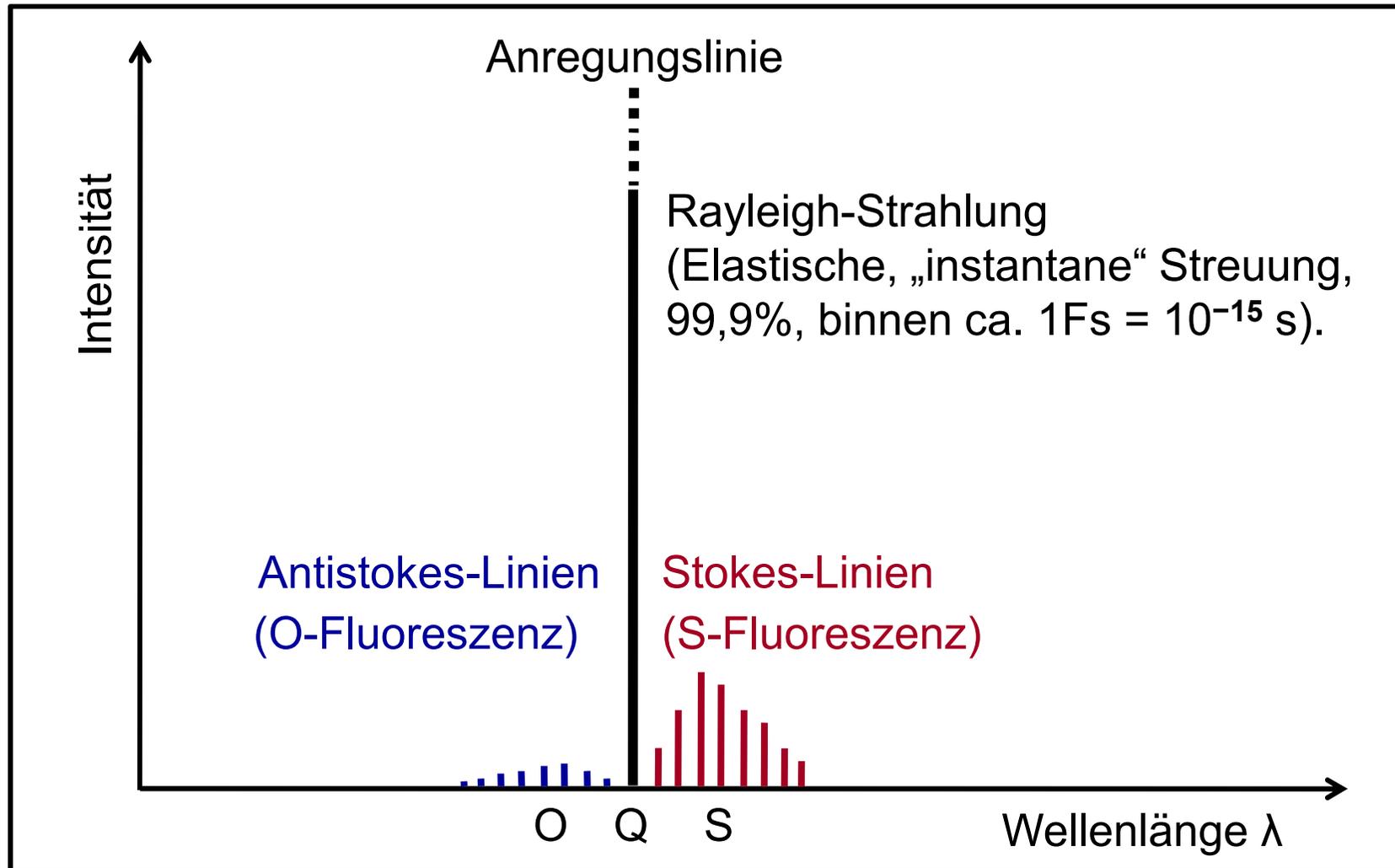
..... Virtuelle
Anregungszustände

Infrarot-Absorption

Rayleigh-Streuung (1)
Raman-Streuung (2, 3)

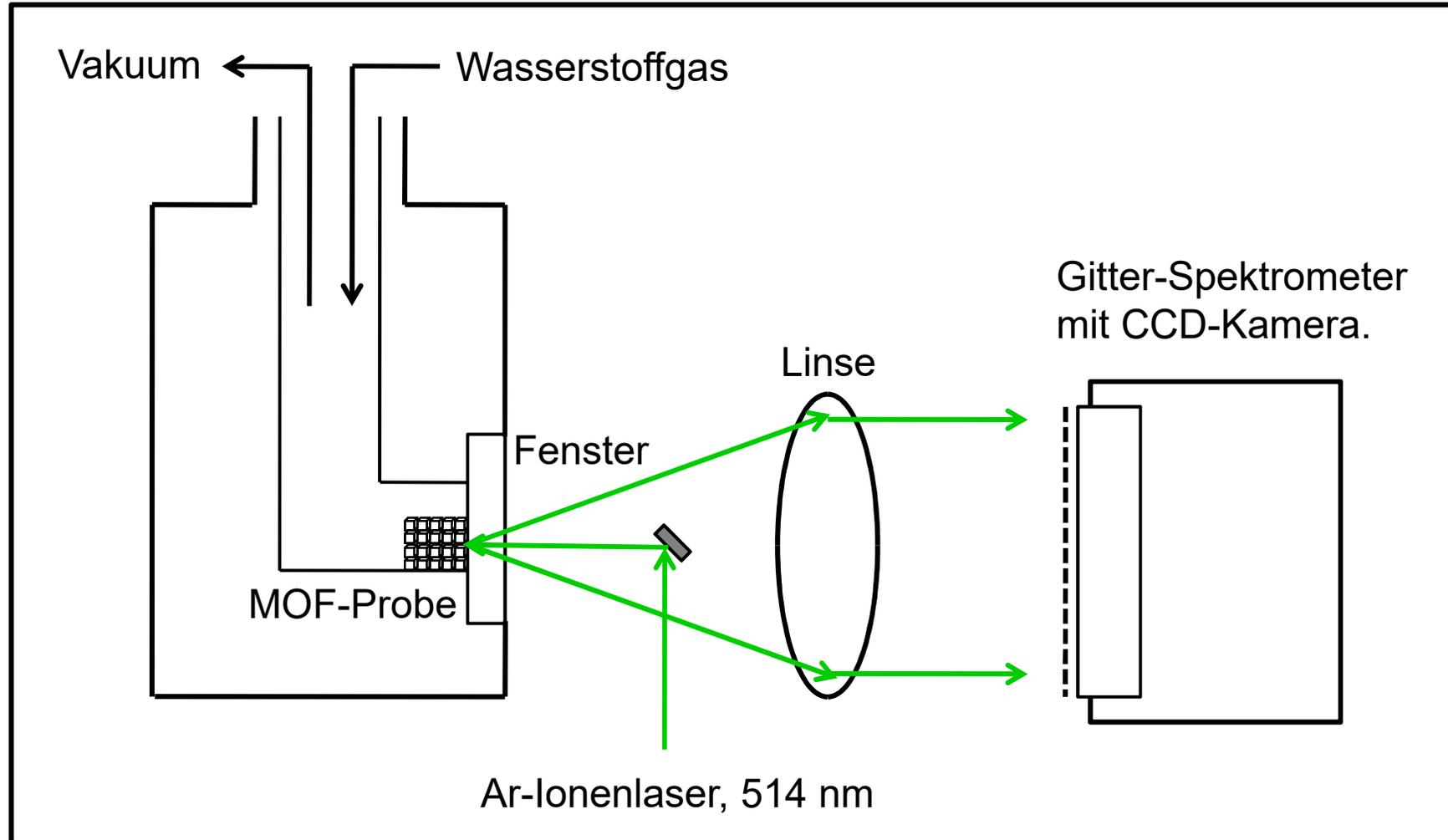
Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

Messung der Wasserstoff-Adsorption mittels Raman-Spektroskopie, Raman-Effekt:



Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

MOFs, Messung der Wasserstoff-Adsorption mittels Raman-Spektroskopie, Apparatur:



Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

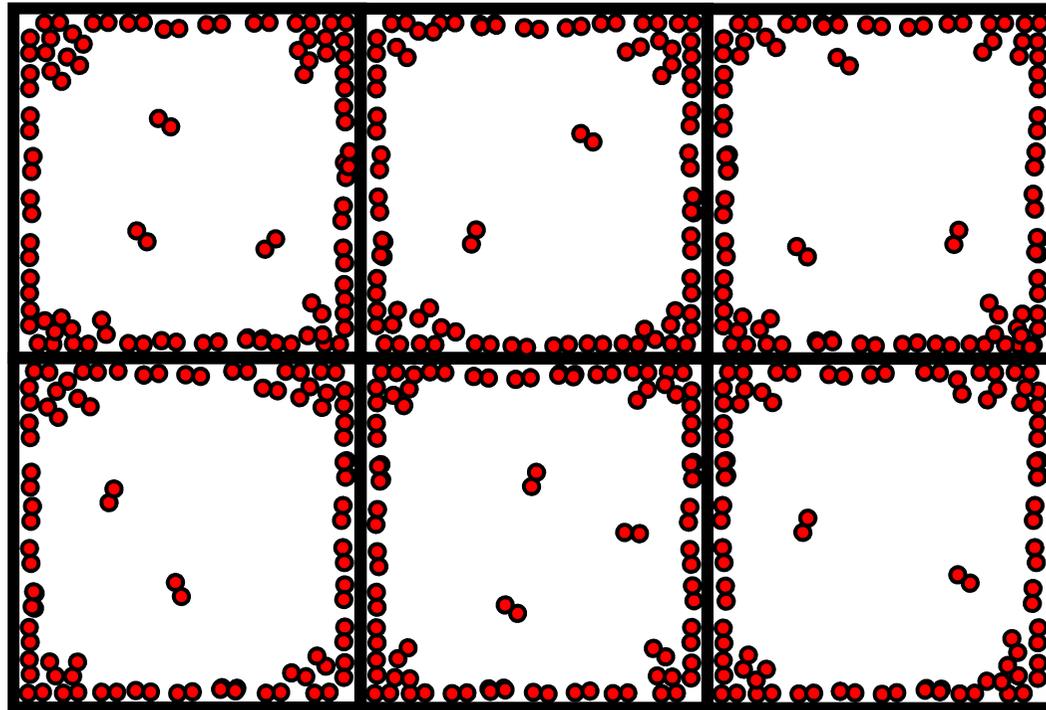
MOFs, Messung der Wasserstoff-Adsorption mittels Raman-Spektroskopie, Resultat mit Cu-BTC:

- Die Q-Linie von molekularem Wasserstoff, der auf Cu-BTC adsorbiert ist, wird (nur) um $1,5 \text{ cm}^{-1}$ in Richtung höherer Wellenzahlen verschoben.
- Diese kleine Verschiebung zeigt, dass in MOFs die Wasserstoff-Speicherung durch schwache van der Waals Kräfte erfolgt und ein Ladungstransfer zwischen H_2 -Molekülen und den MOF-Bausteinen vernachlässigt werden kann.

(Quelle: Dissertation Barbara Panella, Universität Stuttgart, 2006).

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

Gasspeicherung, Wasserstoff, H_2 ($\bullet\bullet$). Vereinfachtes Schema:



MOF 5: $H_{ads} = 3,8 \text{ kJ/Mol } H_2$

Mg-Formiat: $H_{ads} = 7,0 \text{ kJ/Mol } H_2$

Metal-Organic Frameworks → Technische Anwendungen

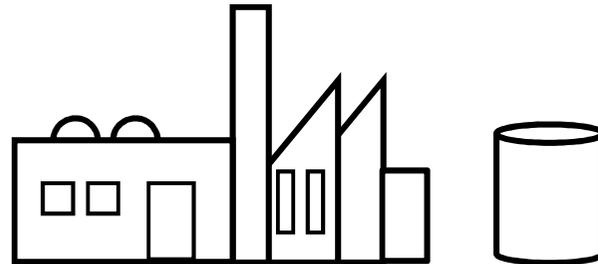
Gasspeicherung per Adsorption.

Weitere Gase, die sich mittels MOFs speichern lassen →

- Methan, CH_4 , (Cu-MOFs, MIL 101).
- Kohlendioxid, CO_2 , (ZIFs: Zeolitic Imidazolate Frameworks).
- Kohlenmonoxid, CO .
- Ammoniak, NH_3 .
- Chlor, Cl_2 .
- Schwefeldioxid, SO_2 .

Die Firma, in der neue MOFs zur Gasspeicherung entstehen sollen.

FuE-Projekt „Neue metallorganische Gerüstmaterialien...“



Das Chemieunternehmen [...GmbH 3]

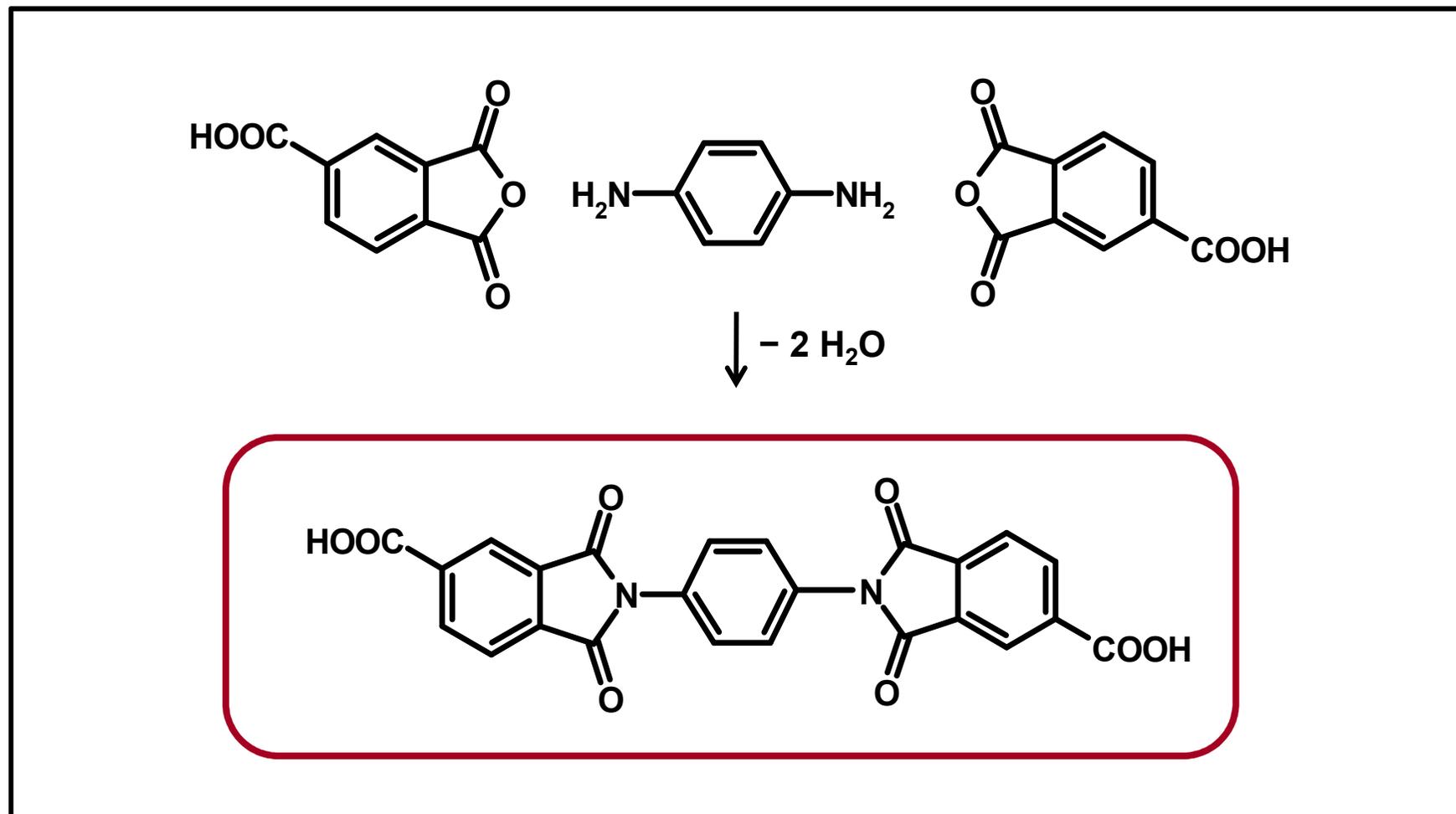
Kleinerer mittelständischer Betrieb: europaweit 127 Mitarbeiter, davon 11 Chemiker, 17 Ingenieure (FH), 5 Ingenieure (TU). Hersteller und Vertreiber spezieller Metall-Organica.

Eigene Forschung und Entwicklung, eigene Produktion. Seit 12 Jahren in FuE, Scale-up und in der Lohnfertigung von Metall-Organica aktiv.

Organische Spezialitäten: Herstellung und Vertrieb von TMA (Trimellithsäureanhydrid) und PMA, (Pyromellithsäureanhydrid).

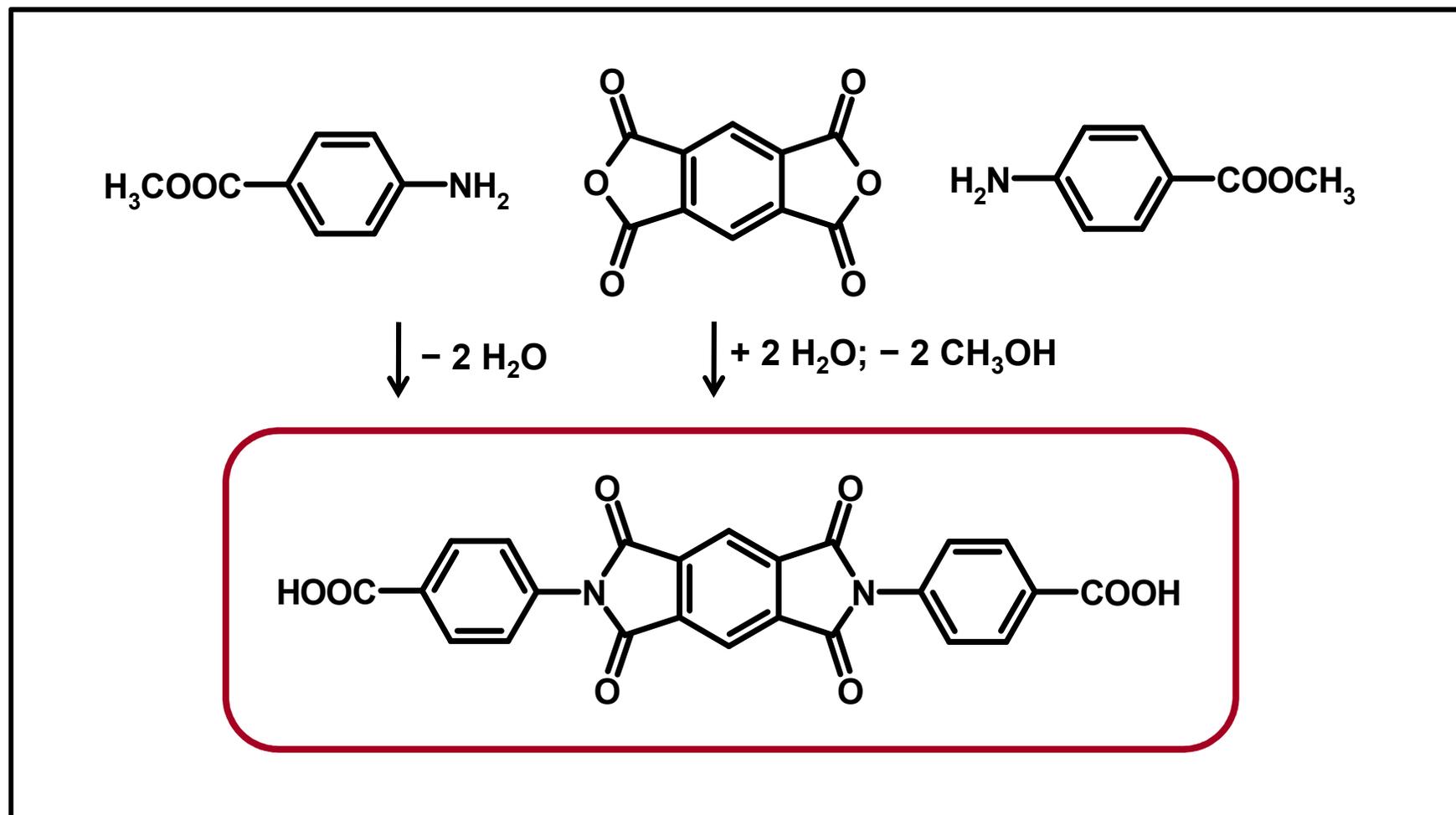
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur H₂-Speicherung

**Thermostabile Dicarbonsäure als Linker für Metall-Ion²⁺-MOF's .
Potenzielle Speichermaterialien für komprimierten Wasserstoff.**



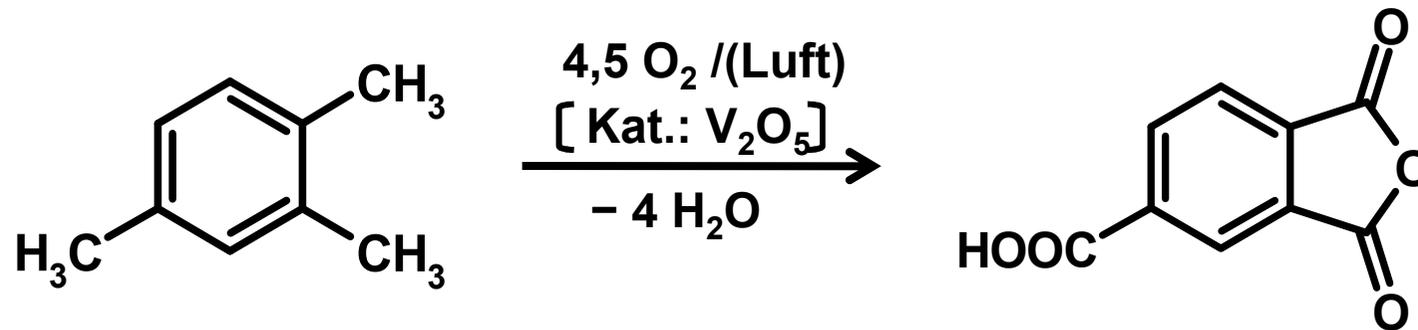
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur H₂-Speicherung

**Thermostabile Dicarbonsäure als Linker für Metall-Ion²⁺-MOF's .
Potenzielle Speichermaterialien für komprimierten Wasserstoff.**



Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur H₂-Speicherung

Synthese von Trimellithsäureanhydrid, TMA:



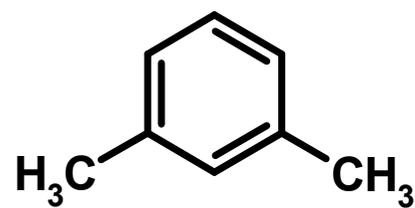
1,2,4-Trimethylbenzol
(Pseudocumol)



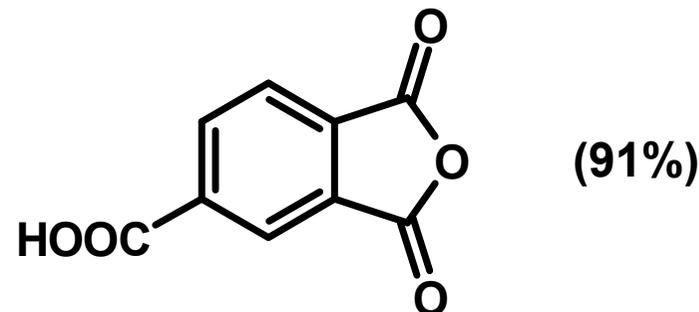
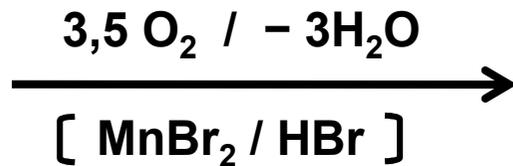
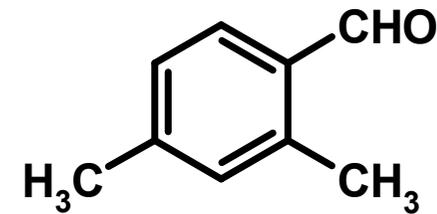
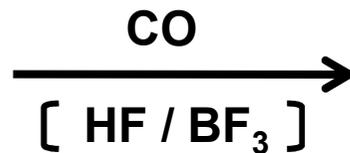
Weltproduktion:
ca. 100.000 t/a

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur H₂-Speicherung

**Synthese von Trimellithsäureanhydrid, TMA .
Verfahrenscheme: Mitsubishi Gas Chemical.**

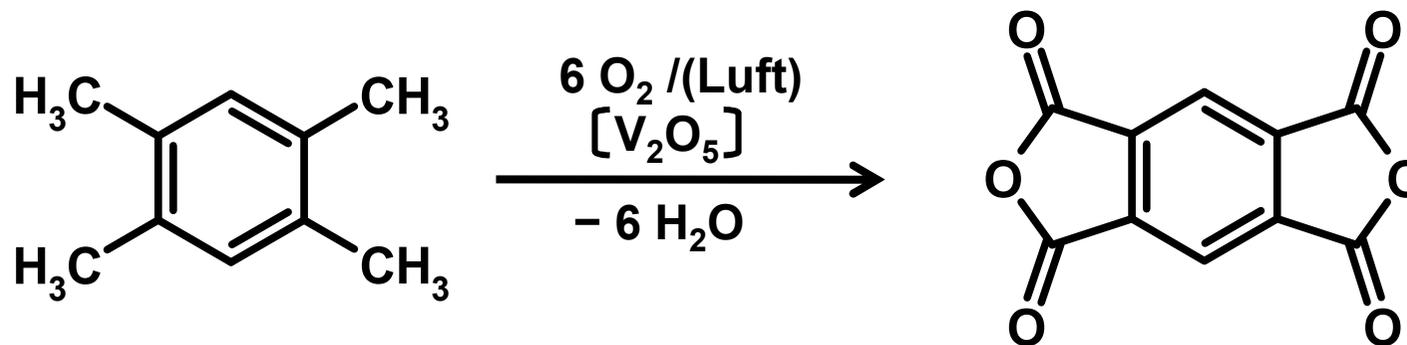


m-Xylole



Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur H₂-Speicherung

Synthese von Pyromellithsäureanhydrid, PMA:

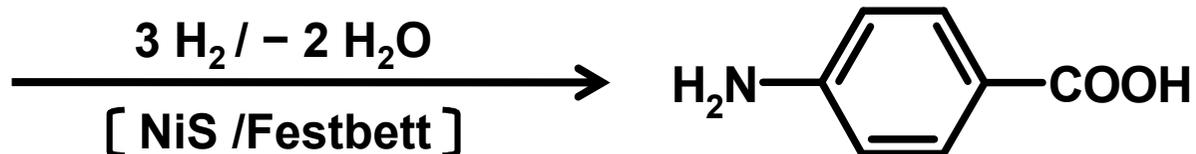
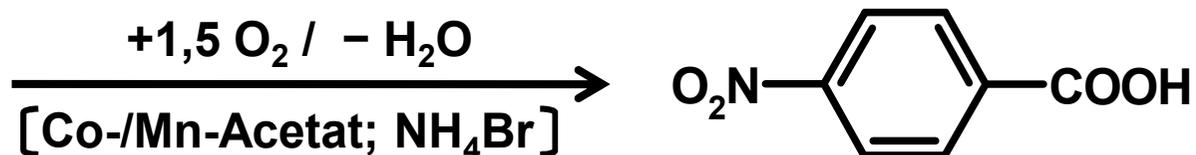
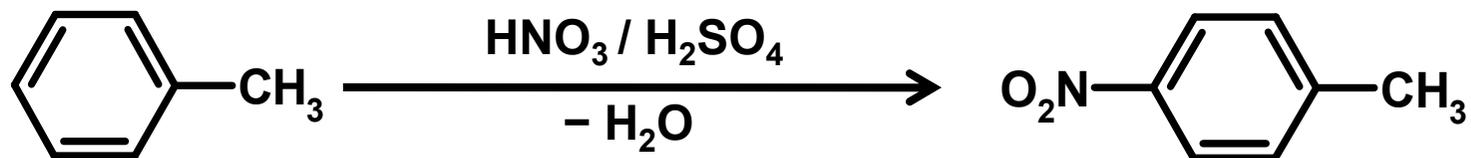


**1,2,4,5-Tetramethylbenzol
(Durol)**

**Weltproduktion:
ca. 8.000 jato**

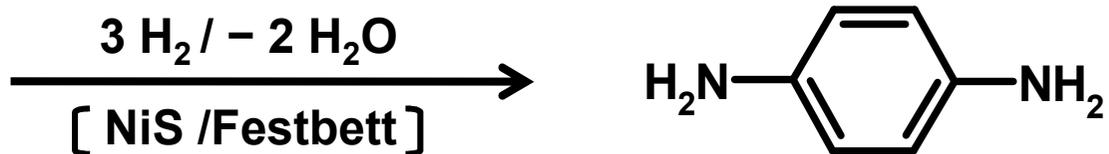
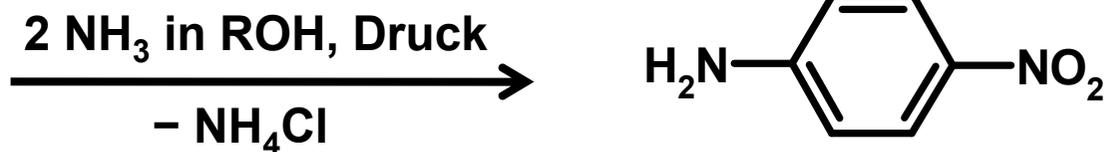
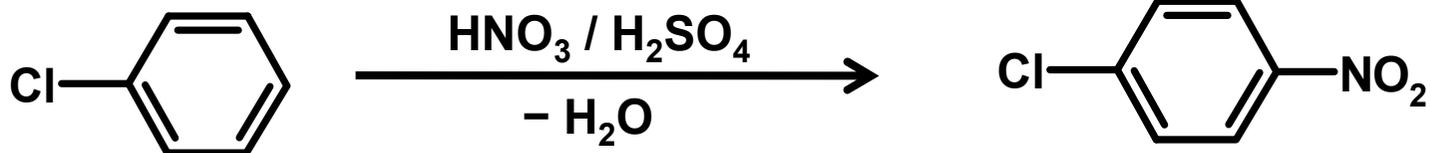
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur H₂-Speicherung

Technische Synthese von 4-Aminobenzoesäure (PABA):



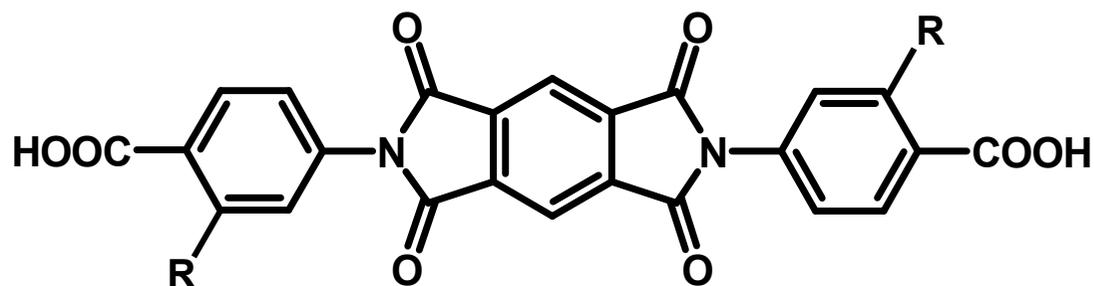
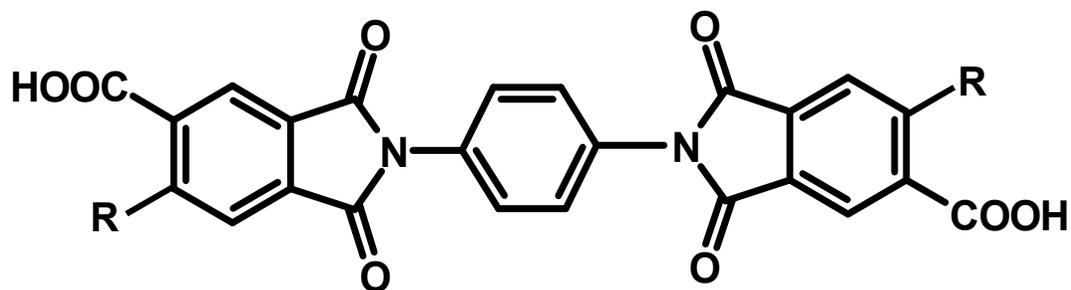
Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur H₂-Speicherung

Industrielle Synthese von p-Phenylendiamin:



Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur H₂-Speicherung

Linker und Konnektoren für MOFs, deren Speicherkapazitäten für Wasserstoff (198K–373K/10–50 bar) zu untersuchen sind:



Dicarbonsäuren als Linker: R = H, OH (Typ: CPO-27)

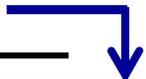
Zn ²⁺	
Co ²⁺	
Ni ²⁺	Mg ²⁺
Mn ²⁺	Ca ²⁺
Fe ²⁺	Sr ²⁺
Cu ²⁺	Ba ²⁺
Cd ²⁺	

Konnektoren M²⁺

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur H₂-Speicherung

Technische Kristallisationsverfahren zur Testung des Scale-ups von wasserstoffspeichernden Metal-Organic Frameworks:

Verdampfungskristallisation



- Mit Innenheizkörper
- Mit außenliegendem Verdampfer

Kühlungskristallisation



- Kaltrührer, Vertikalrührer
- Kühlzylinderkristallisator
- Drehrohrkristallisator
- Kristallisierwiege
- Säulenkristallisator

Vakuumbkristallisation



- Vakuum-Umlaufkristallisator
- Vakuum-Rührwerkskristallisator
- Mehrstufen-Vakuumkristallisator

Neue metallorganische Gerüstmaterialien zur H₂-Speicherung

Technische Trocknungsverfahren zur Testung des Scale-ups von wasserstoffspeichernden Metal-Organic Frameworks:

Konvektionstrocknung, Kontakttrocknung, Strahlungstrocknung



- Kammertrockner
- Tunneltrockner
- Bandtrockner
- Etagentrockner
- Drehrohtrockner

- Tellertrockner
- Schaufeltrockner
- Wirbelschichttrockner
- Zerstäubungstrockner
- Walzentrockner

Vakuumtrocknung

Vakuumgefriertrocknung

**Weiterführende Literatur zum Thema „FuE-Projektmanagement in der Chemieindustrie“.
Auswahl von Monografien und von Publikationen in Fachjournalen oder im Internet.**

- 1 -

- Leker, Gelhard, von Delft, Business Chemistry, Wiley & Sons Ltd., Oxford U. K., 2018.
- Hauschildt, Salomo, Schultz, Kock, Innovationsmanagement, Verlag Franz Vahlen, München, 2021.
- Vahs, Brem, Innovationsmanagement, Schäffer-Poeschel Verlag, Stuttgart, 2015.
- Gausemeier, Dumitrescu, et al., Innovationen für die Märkte von morgen, Carl Hanser Verlag, München, 2019.
- Cooper, Top oder Flop in der Produktentwicklung, WILEY-VCH Verlag, Weinheim, 2002.
- Russo, Gleich, Strascheg, Von der Idee zum Markt, Verlag Franz Vahlen, München, 2008.
- Loch, Kavadias, Handbook of New Product Development, Elsevier, Oxford, 2008.
- Bullinger, Fokus Innovation, Carl Hanser Verlag, München, 2006.
- Offermanns, „Steinheimer Gespräche“ des FCI, persönliche Mitteilungen, Steinheim, 2002.

- Münch, Patente, Marken, Design von A bis Z, WILEY-VCH Verlag, Weinheim, 2012.

- Gassmann, Praxiswissen Projektmanagement, Carl Hanser Verlag, München, 2006.
- Kerzner, Projekt Management, Ein systemorientierter Ansatz, mitp, Redline Verlag, Heidelberg, 2008.
- Gessler, Kompetenzbasiertes Projektmanagement, GPM-Publikation, Nürnberg, 2016.
- Patzak, Rattay, Projektmanagement, Linde-Verlag, Wien, 2014.
- Jenny, Projektmanagement - Das Wissen für den Profi, vdf Hochschulverlag an der ETH, Zürich, 2020.
- Jenny, Projektmanagement - Das Wissen für eine erfolgreiche Karriere, vdf Hochschulverlag an der ETH, Zürich, 2020.
- Drees, Lang, Schöps, Praxisleitfaden Projektmanagement, Carl Hanser Verlag, München, 2014.
- Burghardt, Projektmanagement, Publicis MCD Verlag, Erlangen, 2018.

**Weiterführende Literatur zum Thema „FuE-Projektmanagement in der Chemieindustrie“.
Auswahl von Monografien und von Publikationen in Fachjournalen oder im Internet.**

- 2 -

- Hesseler, Projektmanagement, Verlag Franz Vahlen, München, 2015.
- Stöger, Wirksames Projektmanagement, Schäffer- Poeschel, Stuttgart, 2019.
- Litke, Projektmanagement, Carl Hanser Verlag, München, 2007, Neuauflage für 2023 angekündigt.
- Litke, Kunow, Schulz-Wimmer, Projektmanagement, Haufe-Lexware, Freiburg, 2018.
- Madauss, Projektmanagement, Theorie und Praxis aus einer Hand, Springer Gabler, Berlin, 2020.
- Bea, Scheurer, Hesselmann, Projektmanagement, UVK-Verlag, München, 2020.
- Braehmer, Projektmanagement für kleine und mittlere Unternehmen, Carl Hanser Verlag, München, 2009.
- Klein, Projektmanagement in der Praxis, Ebook, Verlag Interna, Bonn, 2012.
- Weichselbaumer, Bley, MS-Project 2013 in 13 Stunden, epubli GmbH, Stuttgart, Berlin, 2014.
- Dittmann, Dirbanis, Projektmanagement (IPMA®), Haufe, Freiburg, 2020.
- Schels, Seidel, Projektmanagement mit Excel, Carl Hanser Verlag, München, 2016.
- Tumuscheit, Überleben im Projekt, Redline Wirtschaft, Heidelberg, 2014.
- Tumuscheit, 55 Mythen des Projektmanagements, Orell Füssli Verlag, Zürich, 2013.
- Meyer, Reher, Projektmanagement, Springer Fachmedien, München, 2020.
- Drews, Hillebrand, Kärner, Praxishandbuch Projektmanagement, Haufe, Freiburg, 2015.
- Pautsch, Steininger, Lean Project Management – Projekte exzellent umsetzen, Carl Hanser Verlag, München, 2014.
- Cole, Barker, Brilliant Project Management, Pearson Education Ltd., London, 2015.
- Andler, Tools für Projektmanagement, Workshops und Consulting, Publicis Publishing, Erlangen, 2015.
- Hüsselmann, Lean Project Management, Schäffer-Poeschel Verlag, Stuttgart, 2021

**Weiterführende Literatur zum Thema „FuE-Projektmanagement in der Chemieindustrie“.
Auswahl von Monografien und von Publikationen in Fachjournalen oder im Internet.**

- 3 -

- Schröder, Agile Produktentwicklung, Carl Hanser Verlag, München, 2018.
- Kuster et al., Handbuch Projektmanagement, Agil – Klassisch – Hybrid, Springer Gabler, Wiesbaden, 2019.
- Ziegler, Agiles Projektmanagement mit Scrum für Einsteiger, Independ. Published, ISBN 9781729408353, 2021.
- Cooper, Edgett, Kleinschmidt, Optimizing the Stage Gate Process, Res. Technol. Management, 45, 2002.
- Cooper, What's Next After Stage-Gate? Res. Technol. Management, 157, 2014.
- Hirzel, Alter, Niklas, Projektportfolio-Management, Springer Gabler, Wiesbaden, 2019.
- Timinger, Modernes Projektmanagement, WILEY-VCH Verlag, Weinheim, 2017.
- www.projektmanagementhandbuch.de, PMH, 2021.
- www.projektmanagement-definitionen.de, 2021.
- www.projektmagazin.de, 2021.
- GPM Deutsche Gesellschaft für Projektmanagement e.V., Kompetenzbasiertes Projektmanagement (PM4), Handbuch für Praxis und Weiterbildung im Projektmanagement, Band 1, Band 2, Nürnberg, 2019.
- Lang, Wagner, Der Weg zum projektorientierten Unternehmen, Carl Hanser Verlag, München, 2019.

- Helm, Pfeifer, Ohser, Mathematik für Wirtschaftswissenschaftler, Carl Hanser Verlag, München, 2015.
- Grieser, Mathematisches Problemlösen und Beweisen, Springer Fachmedien, Wiesbaden, 2017.
- Krischke, Röpcke, Graphen- und Netzwerktheorie, Carl Hanser Verlag, München, 2015.
- Tittmann, Graphentheorie, eine anwendungsbezogene Einführung, Fachbuchverlag, Leipzig, 2003.
- Nietzsche, Graphen für Einsteiger, Vieweg + Teubner Verlag, Wiesbaden, 2009.
- Stegbauer, Häußling, Handbuch Netzwerkforschung, Springer Fachmedien, Wiesbaden, 2010.

**Weiterführende Literatur zum Thema „FuE-Projektmanagement in der Chemieindustrie“.
Auswahl von Monografien und von Publikationen in Fachjournalen oder im Internet.**

- 4 -

- Festel, Hassan, Leker, Bamelis, Betriebswirtschaftslehre für Chemiker, Springer, Berlin, 2001.
- Festel, Söllner, Bamelis, Volkswirtschaftslehre für Chemiker, Springer, Berlin, 2000.
- Mühlbradt, Wirtschaftslexikon, Scriptor Reihe, Cornelsen Verlag, Berlin, 2008.
- Malik, Unternehmenspolitik und Corporate Governance, Campus-Verlag, Frankfurt/Main, 2013.
- Schierenbeck, Wöhle, Grundzüge der Betriebswirtschaftslehre, Oldenbourg Verlag, München, 2016.
- Wöhe, Einführung in die Allgemeine Betriebswirtschaftslehre, Verlag Franz Vahlen, München, 2020.

- Drucker, Die Kunst des Managements, Econ Verlag, München, 2000.
- Drucker, Alles über Management, Redline Wirtschaft, Heidelberg, 2007.
- Drucker, The Effective Executive, Verlag Franz Vahlen, München, 2014.
- Malik, Management, Das A und O des Handwerks, Campus-Verlag, Frankfurt/Main, 2013.
- Malik, Führen, Leisten, Leben, Campus-Verlag, Frankfurt/Main, 2019.
- Roth, Fühlen, Denken, Handeln, Suhrkamp Verlag, Frankfurt/Main, 2007.
- Sprenger, Mythos Motivation, Campus-Verlag, Frankfurt/Main, 2014.
- Sprenger, Vertrauen führt, Campus-Verlag, Frankfurt/Main, 2007.
- Freitag, Kommunikation im Projektmanagement, Springer-Gabler, Wiesbaden, 2016.
- Schulz von Thun, Miteinander Reden, Rowohlt Verlag, Reinbeck, 2019.
- Riemann, Grundformen der Angst, Reinhardt Verlag, München, 2019.
- Csikszentmihalyi, Flow im Beruf, Klett-Cotta Verlag, Stuttgart, 2012.

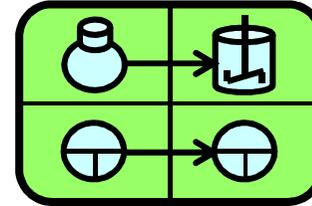
**Weiterführende Literatur zum Thema „FuE-Projektmanagement in der Chemieindustrie“.
Auswahl von Monografien und von Publikationen in Fachjournalen oder im Internet.**

- 5 -

- Horx, Das Zukunftsmanifest, Ullstein Taschenbuch Verlag, Berlin, 2002.
- Bürkle, Aktive Karrierestrategie, Springer Gabler, Wiesbaden, 2013.
- Hesse, Schrader, Das große Bewerbungshandbuch, Stark Verlag, München, 2015.
- Hesse, Schrader, 1X1 - Das erfolgreiche Vorstellungsgespräch, Stark Verlag, München, 2014.
- Püttjer, Schnierda, Trainingsmappe Vorstellungsgespräch, Campus-Verlag, Frankfurt/Main, 2019.
- Püttjer, Schnierda, Das überzeugende Bewerbungsgespräch für Führungskräfte, Campus-Verlag, Frankfurt/M, 2019.
- Püttjer, Schnierda, Das große Bewerbungshandbuch, Campus-Verlag, Frankfurt/Main, 2019.
- Stärk, Erfolgreich im Vorstellungsgespräch und Jobinterview, GABAL, Offenbach, 2018.
- Hesse, Schrader, Die hundert häufigsten Fragen im Vorstellungsgespräch, Stark Verlag, München, 2013.
- Lüdemann, Lüdemann, Die 111 wichtigsten Fragen im Vorstellungsgespräch, Redline Wirtschaft, München, 2018.
- Rohrschneider, Lorenz, Müller-Thurau, Vorstellungsgespräche, Haufe, Freiburg und Planegg, 2018.
- Engst, Willmann, Professionelles Bewerben, Bibliografisches Institut, Berlin, 2019.

- Drewermann, Glauben in Freiheit oder Tiefenpsychologie und Dogmatik, Band 1, Walter-Verlag, Olten, 1994.
- Schuler, Psychologische Personalauswahl, Hogrefe Verlag, Göttingen, 2014.
- Kanning, Personalauswahl zwischen Anspruch und Wirklichkeit, Springer-Verlag, Berlin, 2015.
- Herrmann, Die Auswahl, Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 2016.
- Riedel, Agile Personalauswahl, Haufe Fachbuch, Freiburg, 2017.
- Autorenkollektiv „Diagnostik- und Testkuratorium“, Personalauswahl kompetent gestalten, Springer, Berlin, 2018.

FuE-Projektmanagement in der Chemieindustrie



Ende Vorlesungsmodul 03

Rainer Bürstinghaus