

VORTRAGSEINLADUNG

im Rahmen des gemeinsamen Berufungsverfahrens
der Freien Universität Berlin und des Helmholtz-Zentrums Berlin
W1-Professur „Theoretical Physics for Matter under Non-Equilibrium Conditions (BerNEM)“

am Mittwoch, 13. November 2013, 9.00Uhr
FU Berlin, Fachbereich Physik, Arnimallee 14, Hörsaal B

Carbone, Mangan-Oxo-Komplexe und Reduktionspotentiale

Dr. Susanne Klein

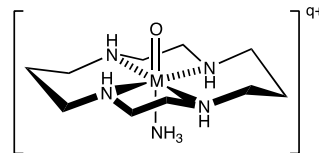
Max-Planck-Institut für chemische Energiekonversion, Mühlheim a.d.R., Deutschland

Carbone: Carbodiphosphorane sind ein prominentes Beispiel dafür, wie die Verwendung unterschiedlicher Lewis-Strukturen von den jeweils beobachteten Reaktivitäten abhängt. Quantenchemische Rechnungen belegen, dass die Carbodiphosphorane zur neuen Stoffklasse der Carbone zählen, bei denen es sich um Komplexe des Kohlenstoff-Atoms mit 2 σ -Donor-Liganden handelt. Die beiden am Kohlenstoff-Atom verbleibenden freien Elektronenpaare führen zu interessanten Eigenschaften dieser Moleküle.



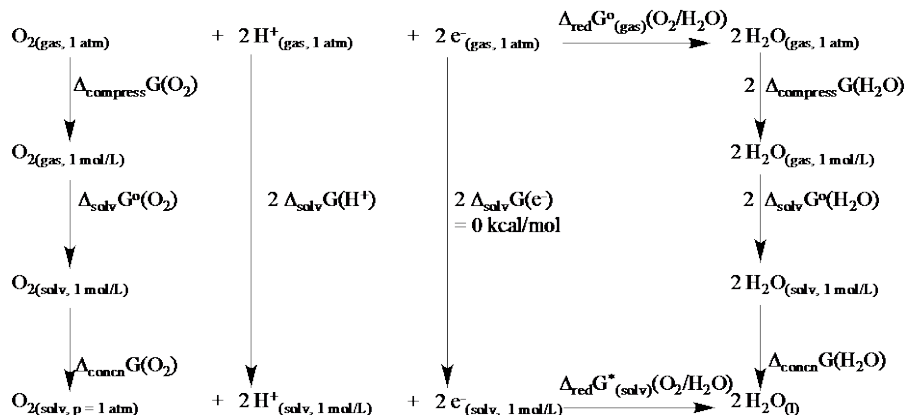
Schema 1: Allgemeine Formel eines Carbons; L ist ein nicht näher bestimmter Donor-Ligand (links) oder Triphenylphosphan (rechts)

Mangan-Oxo-Komplexe: Der wasserspaltende Komplex im Photosystem II besteht aus einem CaMn_3O_4 -Cluster. Daher ist das grundlegende Verständnis der Mn-O-Bindungen eine Voraussetzung den Prozess der Wasserspaltung zu entschlüsseln. Dazu wurden einkernige Mangan-, Eisen- und Cobalt-Komplexe als Modellsysteme ausgewählt. Abhängig von Oxidationsstufe und Spinzustand liegt der Sauerstoff-Ligand entweder als Oxo- (O^{2-}) oder als Oxy-Ligand (O^-) vor.



Schema 2: allgemeine Formel der untersuchten Komplexe (M = Mn, Fe, Co)

Reduktionspotentiale: Das Verständnis von Elektronentransferreaktionen erfordert die Kenntnis von Standard-Reduktionspotentialen. Genügt in der Gasphase die Berechnung von Ionisationspotentialen und Elektronenaffinitäten, so spielen in Lösung Solvenseffekte eine beträchtliche Rolle. Meist wenig Beachtung bei der Berechnung von Reduktionspotentialen findet die Beachtung der jeweiligen Standardzustände innerhalb der verwendeten Born-Haber-Kreisprozesse, obwohl diese von signifikanter Bedeutung sind.



Schema 3: Born-Haber-Kreisprozess zur Berechnung von Reduktionspotentialen