Institut für Technische Chemie und Polymerchemie

Institutsvorstellung

Institut für Technische Chemie und Polymerchemie (ITCP)

Professoren des Instituts

(Leitende Mitarbeiter)

Prof. Christopher Barner-Kowollik
Dr. Guillaume Delaittre,
Dr. Anja Goldmann

Prof. Olaf Deutschmann

Prof. Rainer Suntz

Dr. Claudia Antinori, Dr. Matthias Hettel, Dr. Luba Maier, Dr. Steffen Tischer, Dr. Martin Wörner

Prof. Manfred Wilhelm
Dr. Nico Dingenouts,
Dr. Christopher Klein,
Dr. Jennifer Kübel

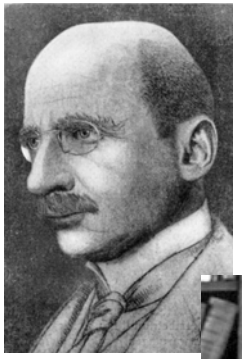
Prof. Jan-Dierk Grunwaldt
Dr. Maria Casapu,
PD Wolfgang Kleist,
Dr. Henning Lichtenberg

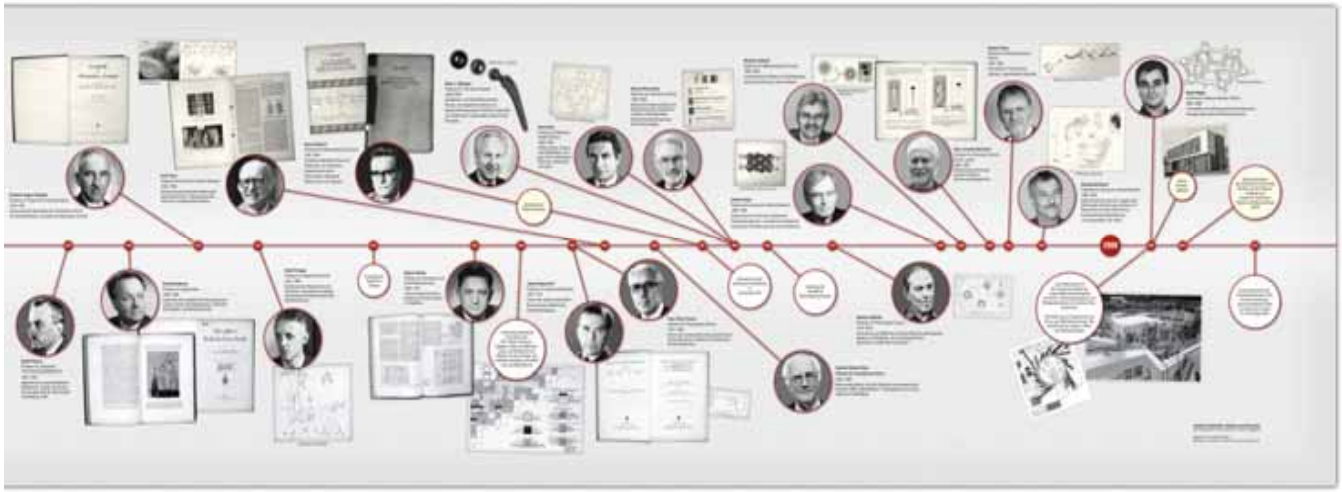
Prof. Clemens Heske
Hauptamt am IPS
Campus Nord
Dr. Lothar Weinhardt

Prof. Felix Studt
Hauptamt am IKFT,
Campus Nord
ab 3/2016

Historie ITCP

Geschichtstafel (auf Flur)





ITCP-Veranstaltungen
Symposium 100 Jahre Ammoniak-Synthese (2005)
150 Jahre Weltkongress Chemie (2010)
100 Jahre Haber-Bosch-Verfahren (2013)

Fritz Haber

* 9. Dez. 1868 in Breslau,
† 29. Januar 1934
Prof. in Karlsruhe, 1896-1911, danach Berlin.
Entwickelt die Ammoniaksynthese.

1918 Nobelpreis

Hermann Staudinger

* 23. März 1881 in Worms,
† 8. Sept. 1965
Prof. in Karlsruhe 1907-1912 , danach Freiburg.

1953 Nobelpreis
Polymerwissenschaftler
Dr. Ing. hc in Karlsruhe

(2010, mit 3 Nobelpreisträgern)

(2013)

Institut für Technische Chemie und Polymerchemie

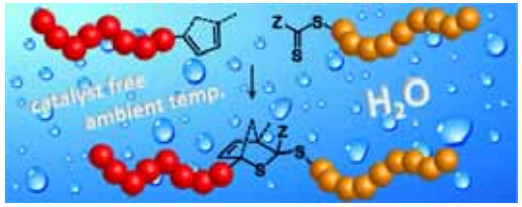
Das Institut für Technische Chemie und Polymerchemie verbindet Lehre und Forschung zwischen synthetischer Chemie und physikalischer Chemie/Physik mit den Anwendungsfeldern:

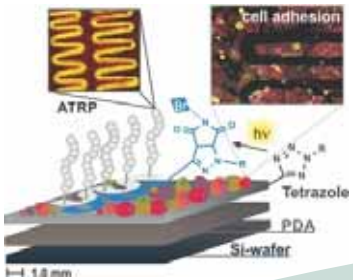
- Polymerchemie
- Chemische Technik und katalytische Prozesse
- Angewandte Spektroskopie

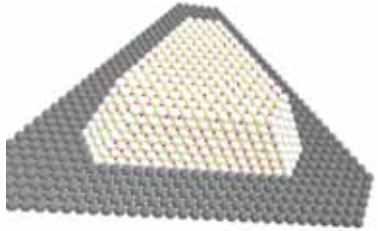
Damit stellt es auch eine Brücke zwischen Chemie / Physik und Ingenieurswissenschaften / Materialwissenschaften her.

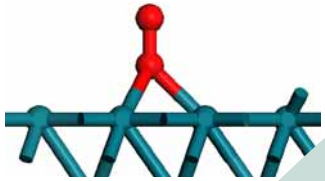
Das Institut hat eine kollegiale Institutsleitung.

Von Synthese und Verständnis zur Anwendung









Anwendung

Funktion

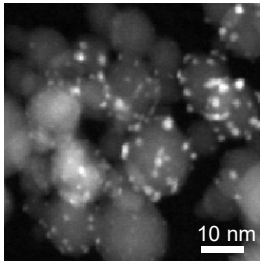
Physikalische Messmethoden

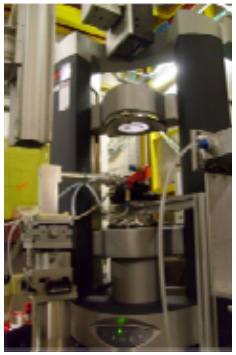
Synthese

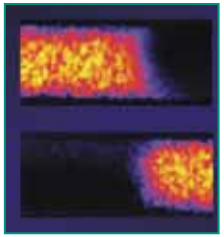
Molekül

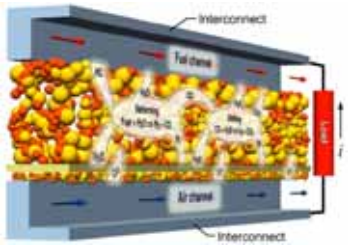
Oberfläche

Modellierung









Über 170 engagierte Mitarbeiter

Promovierte: 45

Doktoranden: 80

VT-Personal: 26

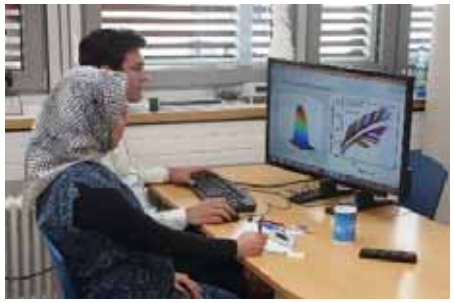
Studenten und Hiwis: ca. 25

Azubis: 6

Gastwissenschaftler: 8

ca. 70% drittmittelfinanziert

Promotionen



Forschungsalltag

Mitarbeiter

- Zur Zeit 23 Länder!

Lehre in den chemisch-orientierten Studien-gängen

Ziel: Moderne Ausbildung einer Technischen Hochschule

Kernfach: Angewandte Chemie mit 3 Aspekten

Chemische und katalytische Prozesse

Polymerchemie

Technische Realisierung

Studiengang C: Angewandte Chemie

Grundlagen: Angewandte Chemie
Vorlesung, Übung, Exkursion

Chemische Technik I
Chem. Reaktionstechnik

Polymerchemie I
Polymersynthese

Chemische Technik II
Katalyse & chem. Prozesse

Polymerchemie II
Charakterisierung, Physikal.-chem. Eigenschaften

Praktikum „Angewandte Chemie“

Charakterisierung von Katalysatoren

Industrielle katalyt. Prozesse

Charakterisierung am Synchrotron

Laserspektros-kopie

+ Seminare

Modellierung von Reaktoren

Bachelor-Arbeit

Vertiefung

Master-Arbeit

Synthese von Polymeren

Moderne Synthese und Charakteri-sierungsmethoden

Rheologie

Charakterisierung mit Elektronen bzw. weicher Röntgenstrahlung

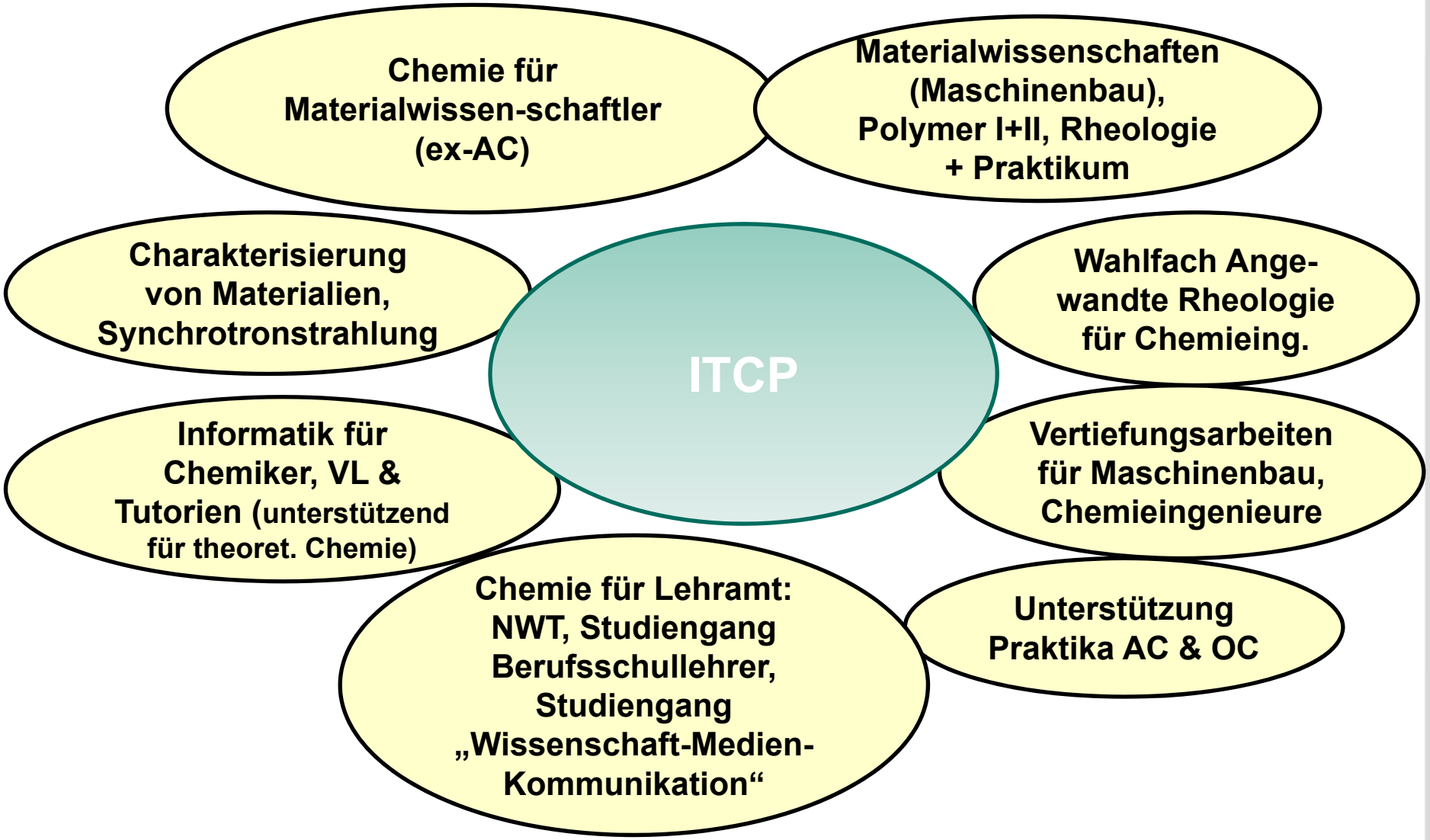
Charakterisierung von Poylymeren

+ Praktika

Vorlesungen im Master-Studiengang/Vertiefung

- Chemische Reaktionstechnik, Katalyse und chem. Prozesse, Grundoperationen
- Chemie und Physik der Makromoleküle, Synthetische Polymerchemie
- Charakterisierungsmethoden von Polymeren
- Einführung in die Rheologie
- Moderne Methoden zur Synthese und Charakterisierung von Makromolekülen
- Aktuelle Konzepte in heterogenkatalytischen industriellen Prozessen
- Katalyse für nachhaltige chemische Produkte und Energieträger
- Moderne Charakterisierungsmethoden für Materialien und Katalysatoren
- Spektroskopie und Beugungsmethoden am Synchrotron: Physikalisch-chemische Grundlagen und Anwendungen in der Katalyse
- Einführung in die Optimierung in der Chemischen Technik
- Modellierung und Simulation chemischer Reaktoren
- Laserspektroskopie in reaktiven Strömungen
- Spektroskopie mit Elektronen und weichen Röntgenstrahlen
- … sowie Seminare, Übungen sowie mehrere Exkursionen im Jahr.

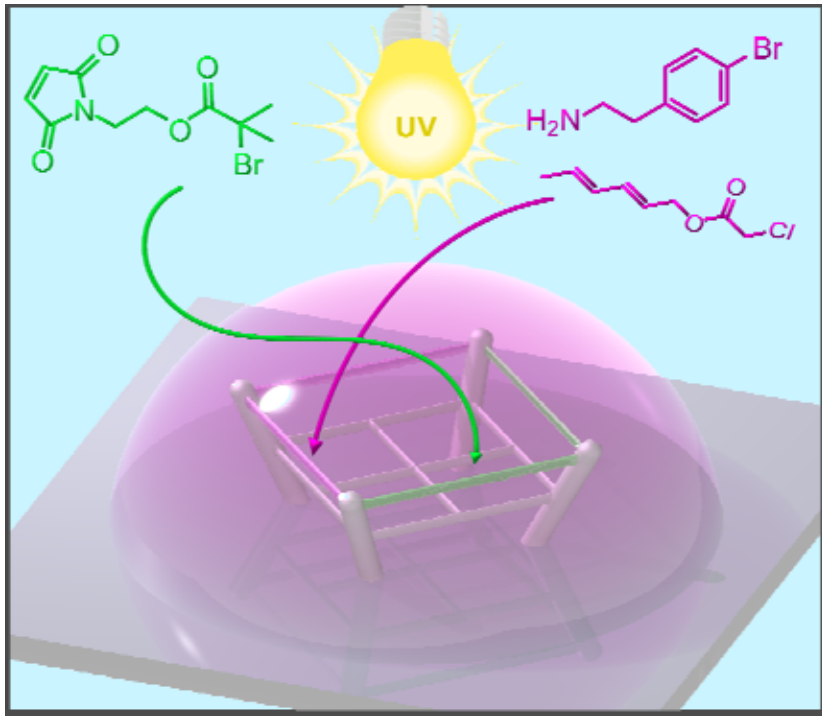
Lehreexport



Forschung

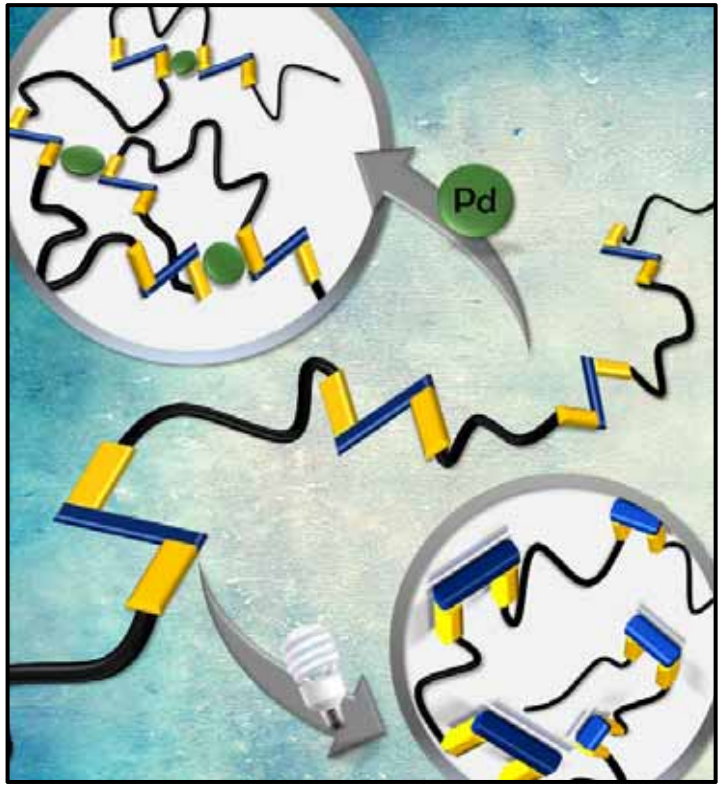
- **Ziel**: Von den chemischen Grundlagen bis zur Anwendung
  - Internationale Spitzenforschung
  - Exzellent ausgebildeter Nachwuchs für Forschung & Entwicklung in chemischer Industrie & Forschungsinstitutionen
  - Engagierter akademischer Nachwuchs
  - Brücke zwischen Universität und Industrie
- **Forschungsfelder**
  - Polymersynthese, nano- und mikrostrukturierte neue Materialien
  - Charakterisierung von Polymeren und Rheologie
  - Heterogene Katalyse, Modellierung, Reaktionstechnik, Materialsynthese
  - Abgasreinigung und Verbrennung, Hochtemperaturkatalyse
  - Insitu Spektroskopie, Struktur-Funktions-Relationen
  - Nachhaltige Herstellung von Chemikalien, Energieträgern und Polymeren
- **Standorte**: Campus Süd (ITCP), West, Nord: IKFT, ANKA, IPS, IKET, andere europäische und internationale Unis/Forschungseinrichtungen

Forschung - Highlight (Prof. Barner-Kowollik)



Molecules find their place on a three dimensional micron sized structure by simple irradiation

Claus, T. K.; Richter, B.; Hahn, V.; Welle, A.; Kayser, S.; Wegener, M.; Bastmeyer, M.; Delaittre, G.; Barner-Kowollik, C. Angew. Chem. Int. Ed. **2016**, *55*, 3817-3822.

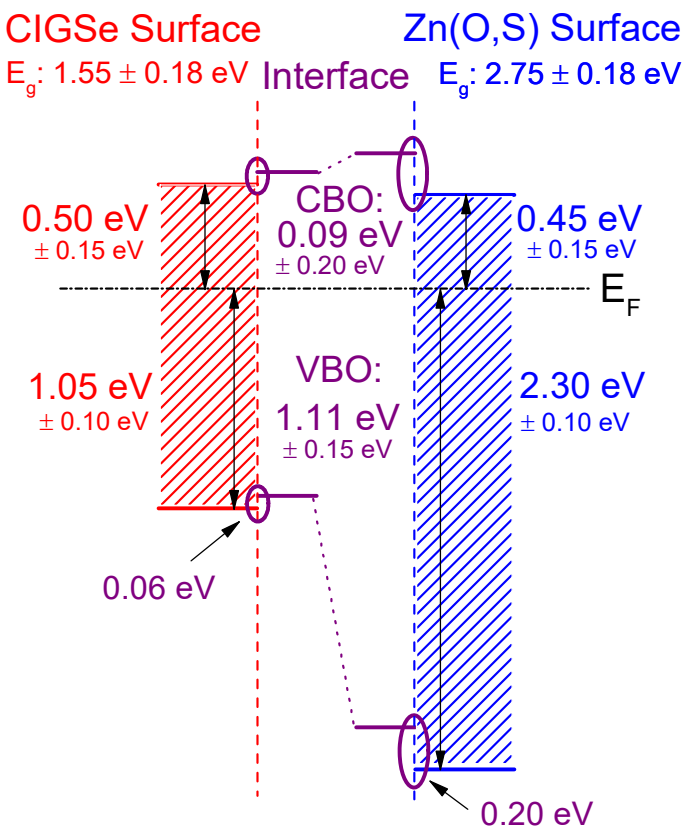


Dual gated macromolecules that respond to light and metal ions with a shape change

Greb, L.; Mutlu, H.; Barner-Kowollik, C.; Lehn, J. M. J. Am. Chem. Soc. **2016**, *138*, 1142−1145

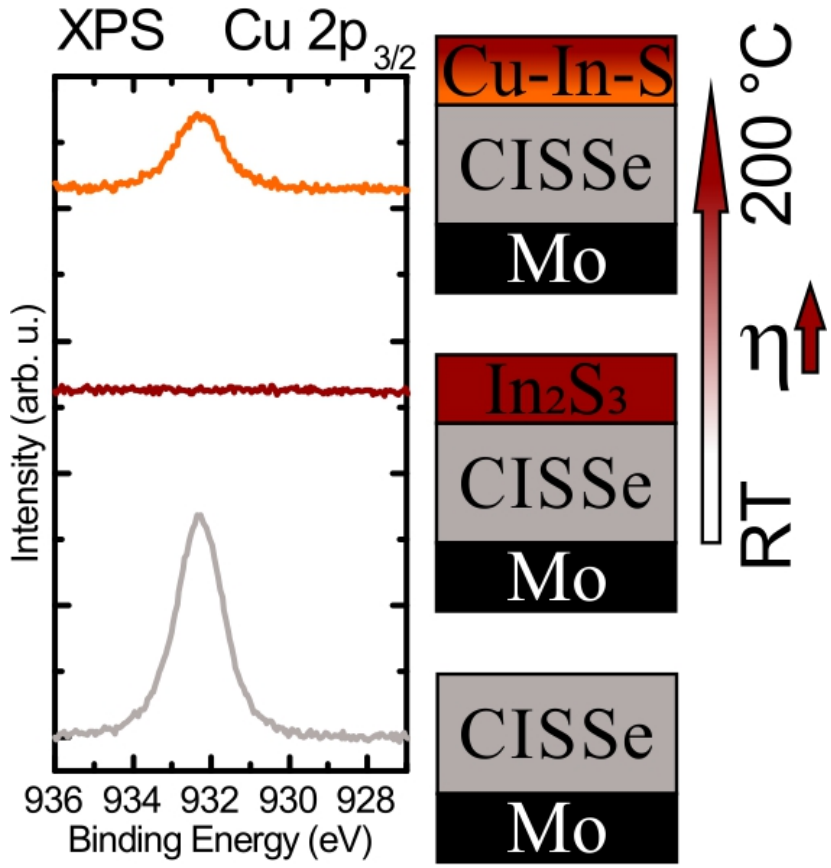
Forschung – Highlight (Prof. Heske): Optimierung von Dünnschichtsolarzellen (mit Avancis, ZSW, HZB, NREL, ...)

Electronic Structure of the $Zn(O,S)/Cu(In,Ga)Se_2$ Interface



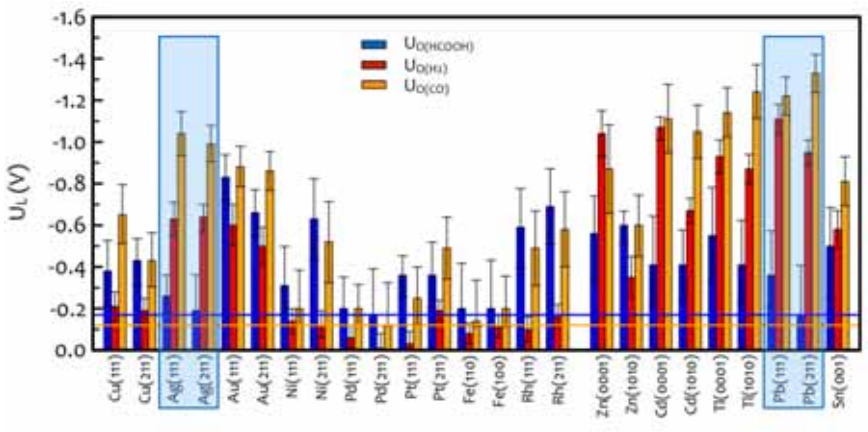
M. Mezher et al., PIP **24**, 1142 (2016)

Annealing-Induced Effects on the Chemical Structure of the $In_2S_3/CuIn(S,Se)_2$ Interface



D. Hauschild et al., JPC C **119**, 10412 (2015)

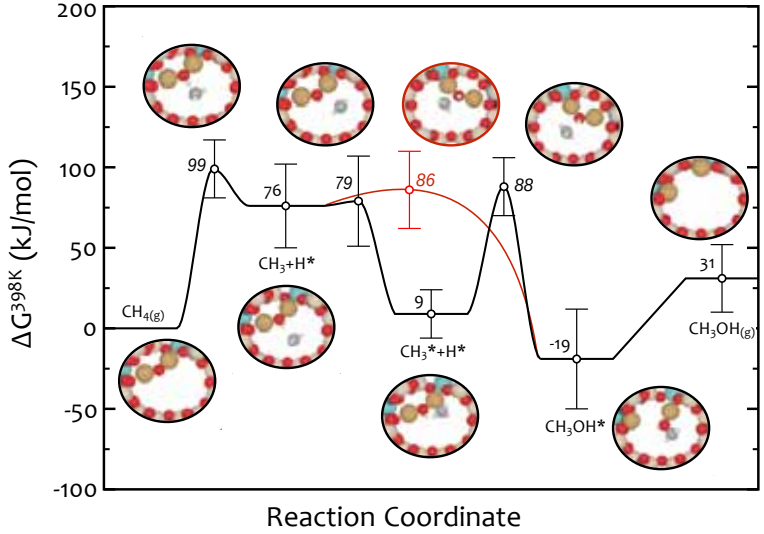
Forschung - Highlight (Prof. Studt)
Theoretical insight into energy-related catalytic processes



Theoretical insight into the trends that guide the electrochemical reduction of carbon dioxide to formic acid

Yoo, J. S; Christensen, R.; Vegge, T.; Nørskov, J. K.; Studt, F. ChemSusChem 2016, 9, 358.

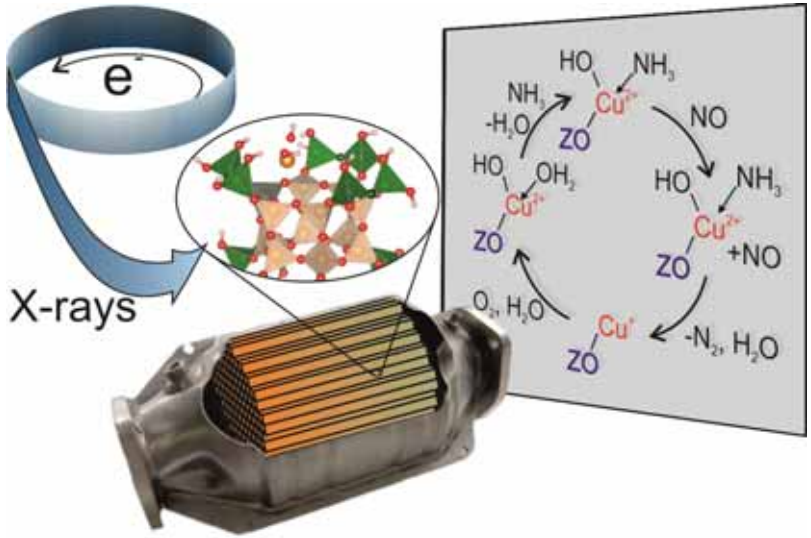
Theoretical insights into the selective oxidation of methane to methanol in copper-exchanged mordenite



Zhao, Z.-J.; Kulkarni, A.; Vilella, L.; Nørskov, J. K.; Studt, F. ACS Catal. 2016, 6, 3760.

Forschung - Highlight (Prof. Grunwaldt)
NO_x-Entfernung aus Abgasen/Spektroskopie

$$4\ NO + 4\ NH_3 + O_2 \rightarrow 4\ N_2 + 6\ H_2O$$



SAUBERMÄNNER: Katalysatoren tragen erheblich dazu bei, den Schadstoffausstoß von Autos zu reduzieren. Die Abgasnachbehandlung könnte jedoch weiter verbessert werden. Deshalb schauen die Forscher mit Röntgenstrahlen tief ins Innere der Katalysatoren. Foto: dpa

Röntgenblicke in den Katalysator

Studie könnte die Nachbehandlung von Abgasen weiter verbessern

Karlsruhe (BNN). Wie funktionieren Abgaskatalysatoren? Wissenschaftler des KIT haben mithilfe von Röntgenstrahlen die Reaktionen in Katalysatoren unter wirklichkeitsnahen Bedingungen untersucht. Ihre Ergebnisse können dazu beitragen, die Abgasnachbehandlung weiter zu verbessern.

Moderne Katalysatoren zur Abgasnachbehandlung in Fahrzeugen mit Verbrennungsmotor haben erheblich dazu beigetragen, Schadstoffemissionen zu reduzieren. Durch Oxidation beziehungsweise Reduktion – Abgabe oder Aufnahme von Elektronen – wandeln Abgaskatalysatoren Verbrennungsschadstoffe wie Kohlenwasserstoffe, Kohlenstoffmonoxid und Stickoxide in die Stoffe Kohlenstoffdioxid, Wasser und Stickstoff um. Immer strikktere Vorgaben des Gesetzgebers verlangen, den Kraftstoffverbrauch zu verringern und den Ausstoß von Stickoxiden weiter zu senken. Durch Zugabe des Reduktionsmittels Ammoniak, das zum Beispiel durch Zersetzung der hochreinen Harnstofflösung „AdBlue" im Fahrzeug gebildet wird, lassen sich die Stickoxide am Katalysator zu unschädlichem Stickstoff und Wasserdampf umsetzen.

Die Harnstofflösung wird dazu vor dem Katalysator in den Abgasstrang eingespritzt.

Um Katalysatoren zu verbessern, ist es erforderlich, ihre Funktion und die einzelnen Reaktionsschritte genau zu verstehen. „Verlässliche Erkenntnisse über die ablaufenden Reaktionen lassen sich nur unter realitätsnahen Reaktionsbedingungen gewinnen"[1] erklärt Jan-

Strahlen ermöglichen realitätsnahes Beobachten

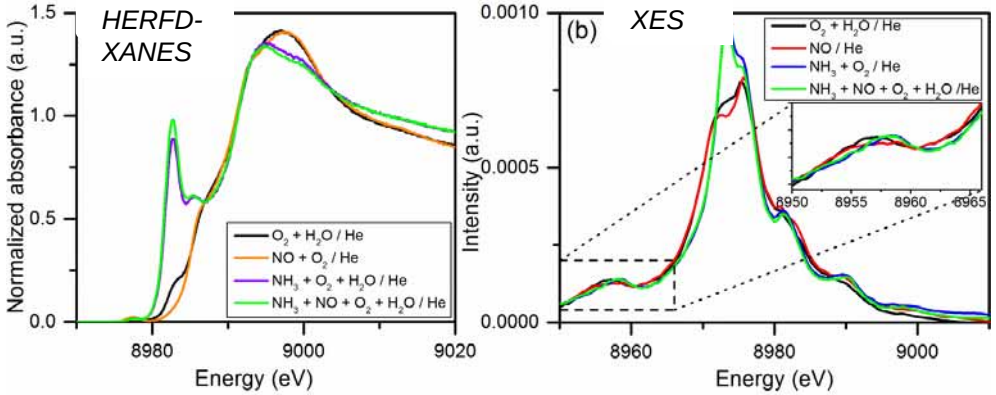
Dierk Grunwaldt, Inhaber des Lehrstuhls Chemische Technik und Katalyse am KIT, „Das heißt, wir müssen den Katalysatoren bei der Arbeit zuschauen. Dazu bieten Synchrotronstrahlungsquellen hervorragende Möglichkeiten." Synchrotronstrahlung ist Röntgenstrahlung mit einer Energie von einigen bis zu Hunderten oder sogar einer Million Elektronenvolt. Mit ihr lassen sich die Eigenschaften der aktiven Metallzentren im Katalysator und deren Wechselwirkungen mit den Gasmolekülen beobachten. Dabei bieten sich zwei Meth-

den an, die ein Forscherverbund unter KIT-Beteiligung erstmals kombiniert hat, um die Reaktionen an zwei bereits in Fahrzeugen eingesetzten katalytisch aktiven Materialien (Fe-ZSM-5 und Cu-SSZ-13) unter die Lupe zu nehmen. Mithilfe der Röntgentechniken untersuchten und verglichen die Forscher die Wechselwirkung des Schadstoffmoleküls Stickstoffmonoxid und des Reduktionsmittels Ammoniak mit den Eisen- und Kupferzentren. „Obwohl in Summe die gleiche Reaktion abläuft, haben wir für die zwei Katalysatoren unterschiedliche Reaktionswege beobachtet", berichtet Tobias Günter vom KIT.

Die Erkenntnisse der Forscher um Jan-Dierk Grunwaldt liefern wertvolle Informationen für Modelle, um das Verhalten der Katalysatoren im Betrieb besser vorhersagen zu können. „Unser Ansatz mit den zwei röntgenbasierten Methoden eignet sich nicht nur für die genannten Materialien, sondern lässt sich auf viele weitere Materialien und Reaktionen übertragen", sagt Grunwaldt. In Zukunft kann dieser Ansatz die weitere Entwicklung und Verbesse-

BNN, August 2015

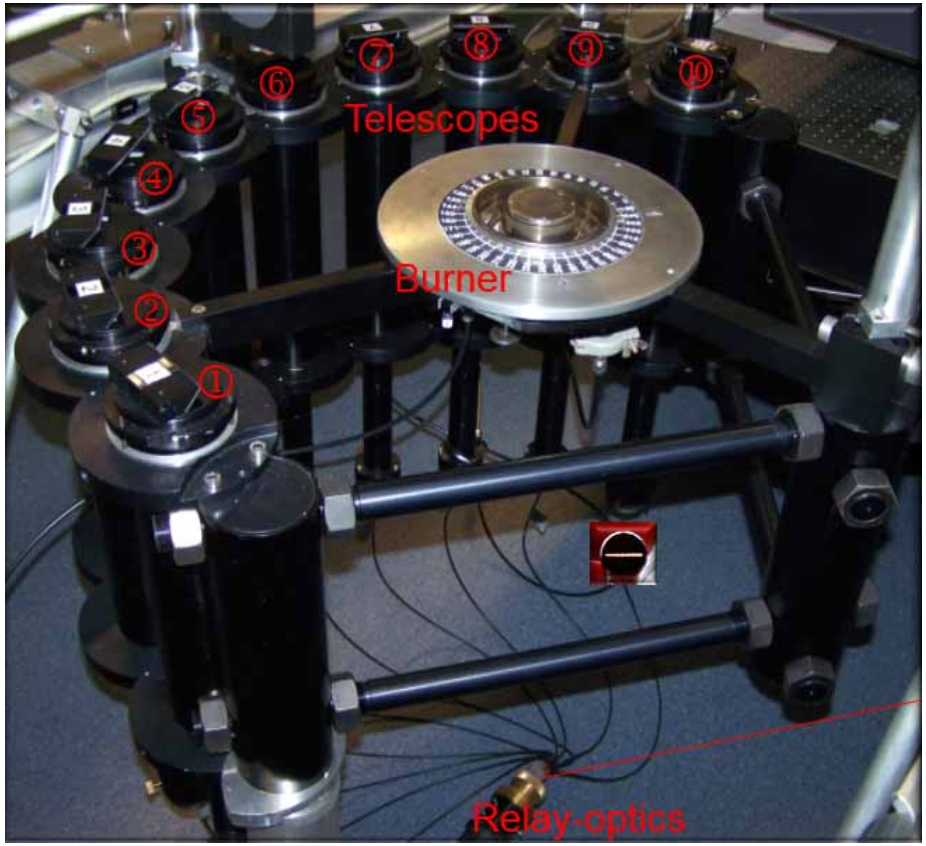
Oxidationszustand von Cu und dessen Wechselwirkung mit NH_3 und NO_x gemessen mit neuer Röntgenspektroskopiemethode



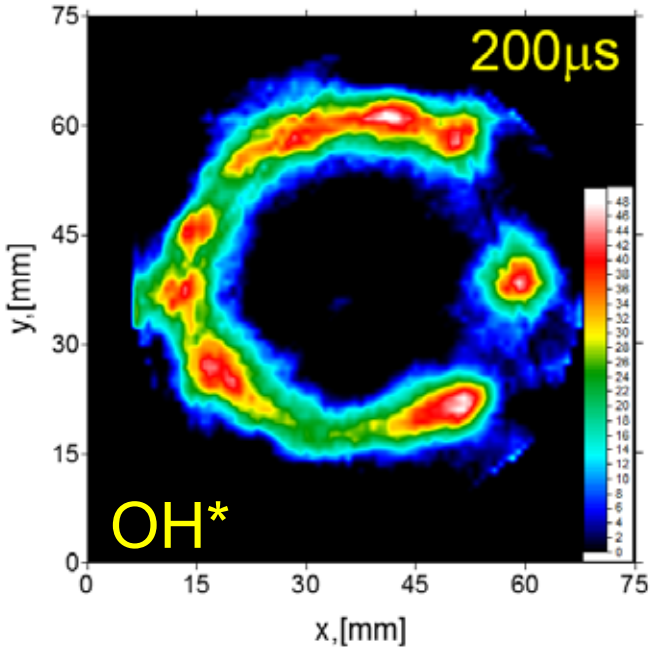
T. Günter, H.W.P. Carvalho, D.E. Doronkin, M. Casapu, J.-D. Grunwaldt, et al., Chem. Commun. 51 (2015) 9227-9230, ESRF Highlights 2015.

Forschung - Highlight (Prof. Suntz)
Planarer optischer Emissionstomograph POET

OH*, CH*,… < 10 ppb @ < 100 µm



Tomographieverfahren zum spezies-selektiven Nachweis einzelner chemi-lumineszierender Moleküle in der Reaktionszone von Flamme



Patent: 10 2009 044 303
N.B. Anikin, R. Suntz and H. Bockhorn, Appl. Phys. B, 107, 591 (2012)

Innovation - Highlight (Prof. Wilhelm)
Überführung in kommerzielle Geräte

- Neue Methoden: FT-Rheologie

- Kapillarrheometer: Neue Düse für Polymere

- Dehnrheometer: Kraftmessung

- Chemische Sensitiver Detektor für GPC

- Diplexor: Elektrische und mechanische Eigenschaften kombiniert

Innovation – Highlight (Prof. Deutschmann)
Inbetriebnahme eines Pilotreformers mit CO_2 als Rohstoff

- Klimaschonende Herstellung von Synthesegas mit neuen Katalysator

  $CH_4 + CO_2 \rightarrow 2\ H_2 + 2\ CO$

Cortesey of hte AG

Cortesey of Linde AG

T. Roussière, L. Schulz, K. M. Schelkle, G. Wasserschaff, A. Milanov, E. Schwab, O. Deutschmann, A. Jentys, J.A. Lercher, S. A. Schunk. ChemCatChem 6 (2014) 1447

K. Herrera Delgado, H. Stotz, L. Maier, S. Tischer, A. Zellner, O. Deutschmann. Catalysts 5 (2015) 871.
L.C.S. Kahle, T. Roussière, L. Maier, K. Herrera Delgado, G. Wasserschaff, S.A. Schunk, O. Deutschmann. Industrial & Engineering Chemistry Research 52 (2013) 11920.

Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie

Forschungsförderung und Forschungsverbünde

- Sonderforschungsbereiche
  - SFB 1176 „Molekulare Strukturierung weicher Materie“ ab 2016
    Sprecher: C. Barner-Kowollik
  - SFB/TRR150 – „Turbulente chemisch reagierende Mehrphasenströmungen in Wandnähe“ mit TU Darmstadt, ab 2015, Koordinator am KIT: O. Deutschmann
- Graduiertenkollegs
  - Graduiertenkolleg des SFB 1176, ab 2016, Sprecher: M. Wilhelm
  - Teilprojekte in GRK 2039 (Nanopartikel), GRK 2165 (Nachhaltige Katalyse; begutachtet)
- DFG-Initiativen
  - Über 20 lfd. Einzelprojekte, Großgeräteanträge, Teilprojekte in FG 1993
  - SPP „Katalysatoren und Reaktoren unter dynamischen Betriebsbedingungen für die Energiespeicherung und -wandlung“, eingereicht, Sprecher: J.-D. Grunwaldt
- Weitere Initiativen zur Förderung durch öffentliche Hand und Stiftungen
  - Bund (BMBF, BMWi), EU, Land BW, AiF, FVV, Landesstiftung BW, VW-Stiftung, …

Kooperationen mit Hochschulen und Forschungsinstituten

- 25 Universitäten in Deutschland
- 18 Universitäten in Europa
- 22 Universitäten international

Kooperationen mit der Industrie

Öffentlichkeitsarbeit

- **Präsent in öffentlichen Medien**
  Von TV über Printmedien bis zur …

- **TV & Radio**

- **Printmedien**

Das Institut – ein Dank an die Akteure!