

2021-070 vom 09.07.2021

Veröffentlichung in Nature Communications

## Arbeitsgruppe um Prof. Sebastian Henke entwickelt neuartige responsive Materialien

Ein Forschungsteam um die Arbeitsgruppe von Prof. Sebastian Henke von der Fakultät für Chemie und Chemische Biologie der TU Dortmund hat in Kooperation mit Partnern der Ruhr-Universität Bochum das außergewöhnliche responsive Verhalten von porösen metallorganischen Gerüstverbindungen untersucht. Diese können sich in Abhängigkeit von ihren Umgebungsbedingungen ähnlich wie ein Stück Papier zusammenknüllen und wieder entfalten. Die Erkenntnisse, die von hoher Relevanz etwa für ihre Anwendung in der Energiespeicherung oder molekularen Separation sind, wurden kürzlich in der renommierten Fachzeitschrift *Nature Communications* veröffentlicht.

Metallorganische Gerüstverbindungen (kurz MOFs für Metal-Organic Frameworks) sind synthetische Materialien. Sie setzen sich modular aus organischen und anorganischen Molekülen zusammen und weisen eine poröse, offene Struktur auf. Einige MOFs zeigen zudem responsive Eigenschaften, das heißt, sie ändern ihre Kristallstruktur in Abhängigkeit von den Umgebungsbedingungen. So verändert sich – etwa wenn man die chemische Zusammensetzung der Umgebungsatmosphäre variiert oder mechanischen Druck ausübt – die Größe und Form der Poren. Durch diese Responsivität sind MOFs unter anderem in der Lage, sehr effizient Gase zu speichern oder Moleküle voneinander zu trennen.

Doktorand Roman Pallach aus der Arbeitsgruppe um Prof. Sebastian Henke hat nun eine neue Form der Responsivität in MOFs entdeckt: Durch gezielte chemische Modifikation der organischen MOF-Bausteine schalten die Netzwerke nicht mehr zwischen zwei kristallinen – also geordneten – Zuständen hin und her, sondern zwischen einem geordneten und einem sehr komplexen, ungeordneten Zustand. Die modifizierten Bausteine erzeugen konkurrierende Wechselwirkungen innerhalb der Netzwerkstrukturen, so dass der ungeordnete Zustand bei Abwesenheit von Gastmolekülen – zum Beispiel von gespeicherten Gasen – in den Poren bevorzugt ist. „Wenn wir die Gastmoleküle aus den Poren entfernen, ist das Netzwerk gewissermaßen frustriert und kann sich nur ungeordnet zusammenfallen,“ sagt Prof. Sebastian Henke. „Ein Zusammenfallen unter Erhalt der Ordnung ist bei diesen MOFs nicht möglich.“

In Kooperation mit Dr. Julian Keupp von der Arbeitsgruppe um Prof. Rochus Schmid von der Ruhr-Universität Bochum und Mitarbeitern der Arbeitsgruppe um Prof. Rasmus Linser vom Bereich Physikalische Chemie der TU Dortmund haben die Wissenschaftler das responsive Verhalten der MOFs theoretisch und experimentell untersucht und konnten dabei tiefe Einblicke in die Struktur und temperaturabhängige Dynamik des ungeordneten Zustands erlangen. Neben Computersimulationen und spektroskopischen Techniken setzten sie dazu aufwendige Röntgenstreuungsmethoden an der Synchrotronstrahlungsquelle

DELTA der TU Dortmund, dem Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) in Hamburg und der Diamond Light Source (bei Oxford, UK) ein.

Die Ergebnisse des interdisziplinären Forschungsteams wurden kürzlich in der renommierten Fachzeitschrift *Nature Communications* veröffentlicht. Gefördert wurde das Projekt u.a. im Rahmen des gemeinsamen Exzellenzclusters RESOLV der Ruhr-Universität Bochum und der TU Dortmund.

**Zur Veröffentlichung:**

R. Pallach, J. Keupp, K. Terlinden, L. Frentzel-Beyme, M. Kloß, A. Machalica, J. Kotschy, S. K. Vasa, P. A. Chater, C. Sternemann, M. T. Wharmby, R. Linser, R. Schmid, S. Henke, *Nat. Commun.* 2021, 12, 4097: Frustrated Flexibility in Metal-Organic Frameworks. DOI: [10.1038/s41467-021-24188-4](https://doi.org/10.1038/s41467-021-24188-4)

**Bildhinweis:** Prof. Sebastian Henke lehrt und forscht an der Fakultät für Chemie und Chemische Biologie der TU Dortmund. Foto: Nikolas Golsch/TU Dortmund.

**Ansprechpartner für Rückfragen:**

Prof. Sebastian Henke  
Fakultät für Chemie und Chemische Biologie  
Tel.: (0231) 755-3976  
E-Mail: [sebastian.henke@tu-dortmund.de](mailto:sebastian.henke@tu-dortmund.de)

Die Technische Universität Dortmund hat seit ihrer Gründung vor 52 Jahren ein besonderes Profil gewonnen, mit 17 Fakultäten in Natur- und Ingenieurwissenschaften, Gesellschafts- und Kulturwissenschaften. Die Universität zählt rund 33.440 Studierende und 6.500 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, darunter etwa 300 Professorinnen und Professoren. Das Lehrangebot umfasst rund 80 Studiengänge. In der Forschung ist die TU Dortmund in vier Profildbereichen besonders stark aufgestellt: (1) Material, Produktionstechnologie und Logistik, (2) Chemische Biologie, Wirkstoffe und Verfahrenstechnik, (3) Datenanalyse, Modellbildung und Simulation sowie (4) Bildung, Schule und Inklusion. Aufgrund ihrer vorbildlichen Transferstrategie wird die TU Dortmund im „Gründungsradar 2020“ in der Spitzengruppe der großen Hochschulen gelistet. Bis zu ihrem 50. Geburtstag belegte die TU Dortmund beim QS-Ranking „Top 50 under 50“ Rang drei der bundesdeutschen Neugründungen.