

„ITSC-IC“ – das „Seminar“ im Rahmen des ACF-Praktikums

Introduction to the Scientific Community –
Inorganic Chemistry

Präsentation wissenschaftlicher Ergebnisse in den Formaten:

- Aufgaben
- Struktur
- zeitlicher Ablauf
- Organisation

„Communication“

„Abstract“

„Poster“

Ammonia Synthesis Hot Paper

The Formation of Surface Lithium–Iron Ternary Hydride and its Function on Catalytic Ammonia Synthesis at Low Temperatures

Peikun Wang*, Hua Xie*, Jianping Guo, Zhi Zhao, Xiangtao Kong, Wenbo Gao, Fei Chang, Teng He, Guotao Wu, Mingshu Chen, Ling Jiang,* and Ping Chen*

Abstract: Lithium hydride (LiH) has a strong effect on iron leading to an approximately 3 orders of magnitude increase in catalytic ammonia synthesis. The existence of lithium-iron ternary hydride species at the surface/interface of the catalyst were identified and characterized for the first time by gas-phase optical spectroscopy coupled with mass spectrometry and quantum chemical calculations. The ternary hydride species may serve as centers that readily activate and hydrogenate dinitrogen, forming Fe-(NH)₂-Li and LiNH₂ molecules—possibly through a redox reaction of dinitrogen and hydride: hydrogen (LiH) that is mediated by iron—showing distinct differences from ammonia formation mediated by conventional iron or ruthenium-based catalysts. Hydrogen-associated activation and conversion of dinitrogen are discussed.

Ammonia is one of the most important synthetic chemicals for the sustainable growth of human society because it is the nitrogen (N) source of manmade fertilizer and a promising energy carrier in the upcoming renewable energy era.^[1] The activation and transformation of dinitrogen (N₂) under mild conditions is thus one of the grand challenges in chemistry and has been pursued actively for a century.^[2–5] Advanced surface-science investigations and theoretical calculations have demonstrated that the dissociative activation of N₂ on

Recently, ammonia synthesis at low temperatures (such as, 150 °C) was recorded upon employing TM-LiH (transition metal (TM) = Cr, Mn, Fe, Co) composites as catalyst.^[6] Kinetic analyses show that these catalysts have smaller apparent activation energies (45–65 kJ mol⁻¹) and lower reaction orders of N₂ (ca. 0.5), implying that the rate-determining step is unlikely to be the dissociation of N₂. To determine the mechanistic foundation of this new TM-LiH catalytic system for the multielectron and multihydrogen process, a number of imperative questions should be addressed: 1) the nature of the active site; 2) the manner in which N₂ is activated; 3) the site of NH₃ formation, and so forth. These issues are crucial for a molecular-level understanding of ammonia synthesis over the TM-LiH composite catalyst and directive for the design and optimization of catalytic material, but difficult to completely elucidate solely with conventional condensed-phase characterization techniques. Gas-phase clusters, bombarded from the surface of a catalyst and efficiently cooled by supersonic expansion of pulsed carrier gas, contains compositional and structural information of the surface and may represent the most active or least coordinated site on the surface.^[7] The reaction between those clusters and gaseous reactants can thus provide structural and energetic information for mechanistic understanding of a catalytic process.^[7a] Combined with the condensed-phase approaches, herein, the gas-phase optical spectroscopy coupled with mass spectrometry (GOS-MS) supplemented with density functional theory (DFT) calculations was employed to characterize the active site, reactive surface species, and intermediates of the Fe-LiH catalyst, and to provide detailed insights into the microscopic mechanism of the activation and transformation of N₂ on that catalyst surface.

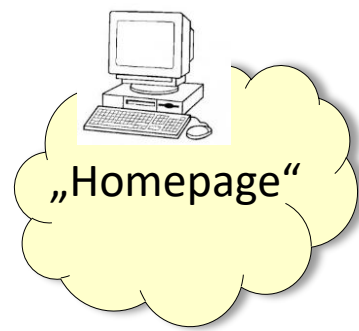
We first tested the effect of LiH content on the catalytic performance of the Fe-LiH composite (Figure 1). The activity of neat polycrystalline Fe is negligible, which is about 2 to 3 orders of magnitude lower than that of the Fe-dLiH (x = 1–0.93) catalysts. The Fe-LiH, Fe-3LiH, Fe-5LiH, and Fe-10LiH catalysts show similar ammonia synthesis rates in terms of the

© 2017 Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim



Aufgaben

Struktur



WS
X/Y

Abstract Bachelor-Arbeit

WS 2018/2019

Mitte - Ende Dez. 2018

„Feedbackphase“

Präsentation wissenschaftlicher Ergebnisse

- Wie schreibe ich einen „Abstract“
- Wie schreibe ich eine „Communication“
- Wie „begutachte“ ich („Peer Review“)
- Wie erstelle ich ein „Poster“

ACFP-1
(Nov. 2018 – Apr. 2019)

(Abstract)
Communication ACFP-1

April - September 2019

„Einreichungs- und Begutachtungsphase-1“

- „Abstract“ BSc-Arbeit



ACFP-2
(bis Dez. 2019)

(Abstract)
Communication ACFP-2

Okt. – Dez. 2019

„Einreichungs- und Begutachtungsphase-2“

- „Abstract“ und „Communication“ ACFP-1



- „Abstract“ und „Communication“ ACFP-2
- „Posterauswahl“ (ACFP-1 *oder* ACFP-2)

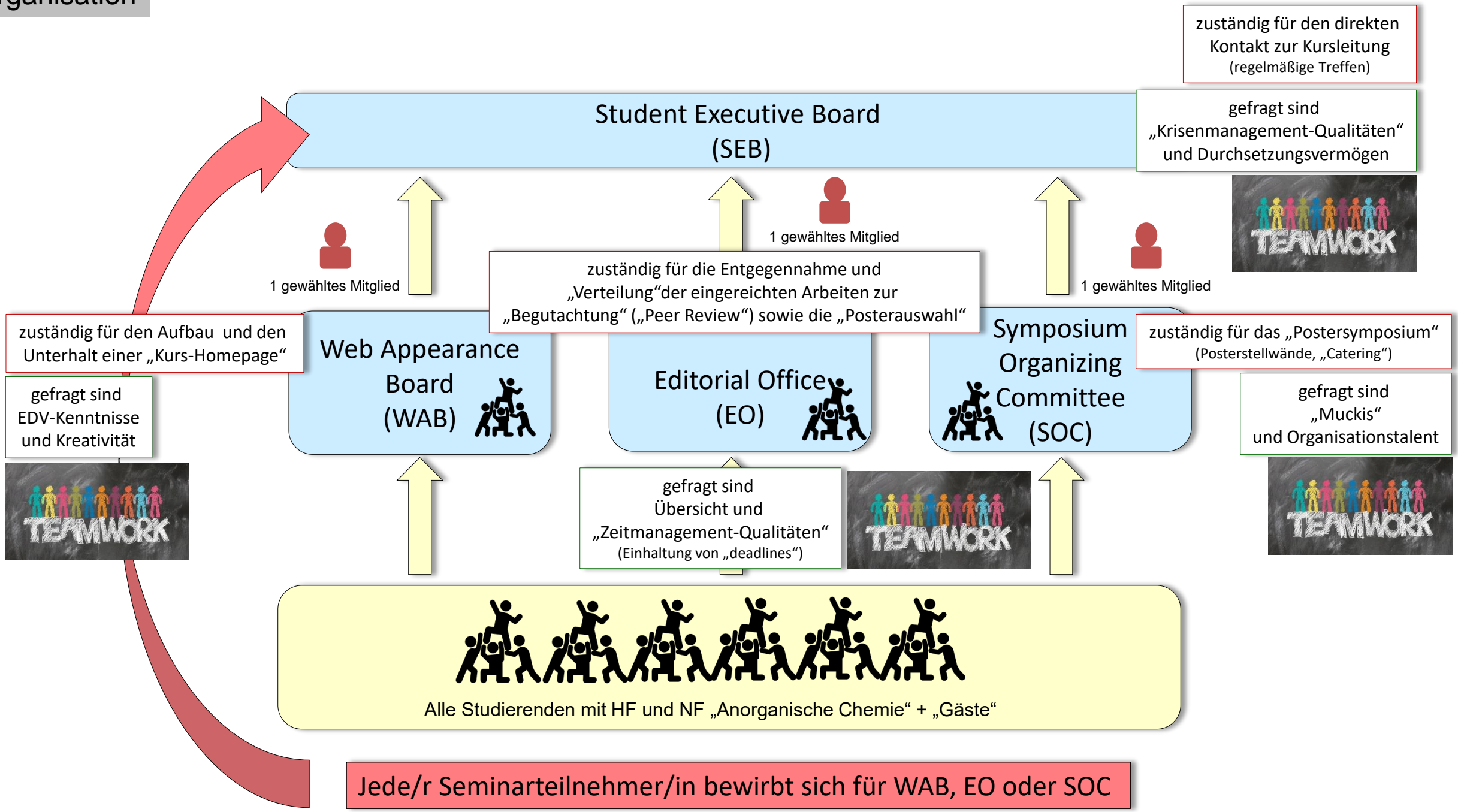
Poster
ACFP-1 *oder* ACFP-2

Januar – Juli 2020

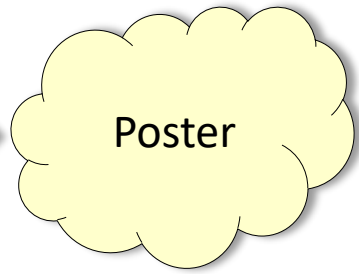
„Postersymposium“

Ende
SS
Y+1



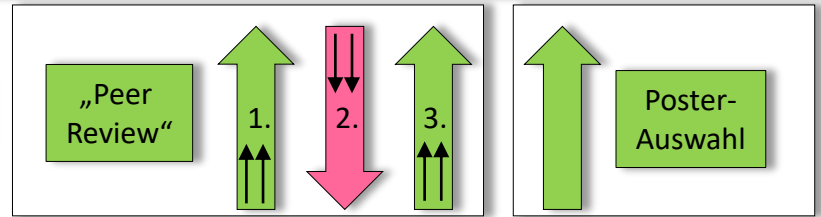


„Workflow“

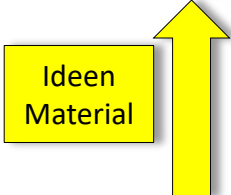
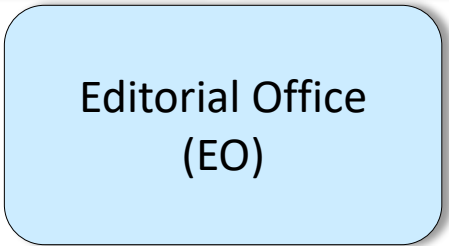
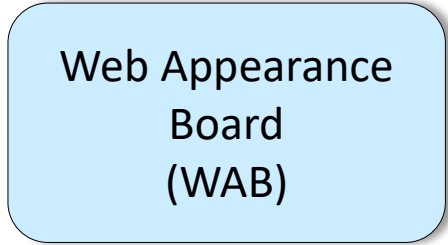
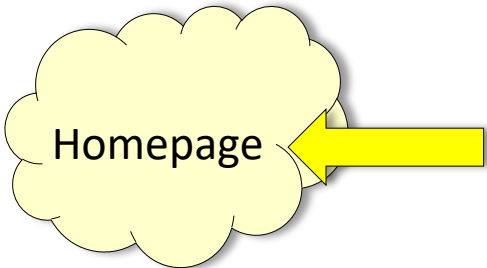


„double-blind“

„blind“



Poster-Anmeldung



Communications „blind“

Deadlines!



„Veranstaltungsphase“ (≡ „Hörsaal“)



Workshop
„Peer Review“
April 2019

- Präsentation wissenschaftlicher Ergebnisse
- Wie schreibe ich einen „Abstract“
Wie schreibe ich eine „Communication“
 - Wie „begutachte“ ich („Peer Review“)
 - Wie erstelle ich ein „Poster“

Workshop
„Schreiben und Lesen“
Januar 2019

„Gastredner“ z.B. aus dem Bereich einer wissenschaftlichen Zeitschrift (Redaktion, Editorial) und/oder z.B. der DFG werden „das richtige Leben“ präsentieren

Workshop
„Poster“
Februar 2020

Termine werden jeweils bekannt gegeben

Peer-Review (*Peer* = „Gleichrangiger“, Fachkollege und *Review* = Gutachten) ist ein Verfahren zur Qualitätssicherung einer (wissenschaftlichen) Arbeit durch unabhängige Gutachter aus dem gleichen Fachgebiet (Publikationswesen, Projektbewilligungs-/förderungsverfahren etc.). **Begutachtet** wird die „**Qualität der Wissenschaft**“ (= „**Inhalt**“)

... = „conditio sine qua non“



Peer Review im Rahmen von **ITSC-IC**: Erlernt und **begutachtet** werden die **Form** und der **Aufbau** der Niederschrift wissenschaftlicher Ergebnisse, **nicht** jedoch deren Qualität („**Inhalt**“)...!

Mitte – Ende Dezember 2018: „Feedbackphase“ = „Abstract Bachelor-Arbeit“

Voraussetzung: Bachelor-Arbeit

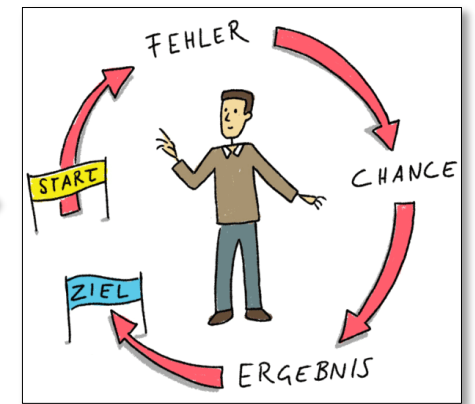
vorgeschaltete



Ergebnis: „Abstract Bachelor-Arbeit“

Workshop
„Schreiben und Lesen“
Januar 2019

- Verbessern des Abstracts
- Schreiben der 1. Communication



April – September 2019: 1. Einreichungs- und „Peer Review“ Phase

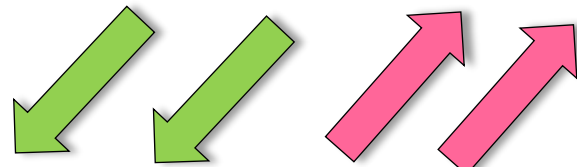
Voraussetzungen: 1. Praktikum (WS 2018/2019)
workshop „Lesen und Schreiben“ (Januar 2019)
workshop „Peer Review“ (April 2019)

Deadlines!

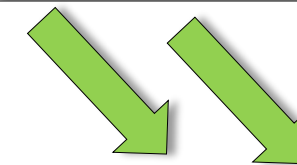
Editorial Office
(EO)

Ergebnis: „1. Communication“

„Peer
Review“



Einreichen der
1. Communication



„Return to Sender“



Alle Studierenden mit HF und NF „Anorganische Chemie“ + „Gäste“

Oktober – Dezember 2019: 2. Einreichungs- und „Peer Review“ Phase

Voraussetzung: 2. Praktikum

„Posterauswahl“

alle Arbeitsgruppen
sollen Berücksichtigung finden

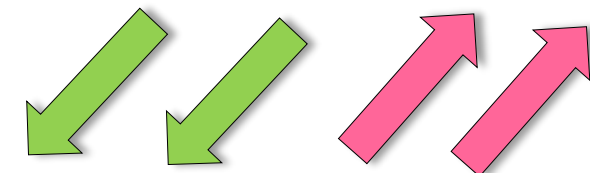


Ergebnis: „2. Communication“
 „Posterinhalt“

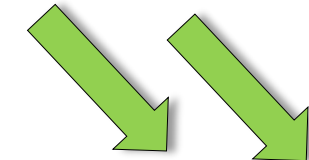

Deadlines!

Editorial Office
(EO)


„Peer Review“



Einreichen der
2. Communication



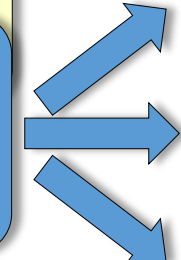
„Return to Sender“



Alle Studierenden mit HF und NF „Anorganische Chemie“ der „nächsten Generation“



„Zuwachs“ für
WAB, EO, SOC
und SEB



Juli 2020: „Postersymposium“

Voraussetzungen: „Posterinhalt“
workshop „Poster“ (Februar 2020)

Deadlines!

alle AC-Arbeitsgruppen
sollen Berücksichtigung finden

„Posterauswahl“

Editorial Office
(EO)


Symposium
Organizing
Committee
(SOC)

„Teilnahme“



Ergebnis: „Poster“
und Postersymposium

Posterstellwand



Alle Studierenden mit HF und NF „Anorganische Chemie“ der „nächsten Generation“

