

P. WEINBERGER



8. Workshop Anorganische Chemie in Österreich 14. – 15. April 2014 Salzburg



Paris-Lodron-Universität Salzburg
FB Materialforschung & Physik
Abteilung Materialchemie
Hellbrunnerstrasse 34
A-5020 Salzburg

Fremdioneninduzierte Anomalien in der f-Element Koordinationschemie

Christian Knoll^a, Danny Müller^a, Georg Steinhauser^b, Peter Weinberger^a

a) Institut für angewandte Synthesechemie, Technische Universität Wien,
Getreidemarkt 9, 1060 Wien

b) Department of Environmental and Radiological Health Sciences, Colorado State
University, Fort Collins, Colorado 80523, USA

Die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle ist eines der größten ungelösten Probleme bei der Erzeugung von Energie durch Kernspaltung. Den Großteil dieser Abfälle machen Spaltprodukte und Actinide aus.

Da die Durchführung von Experimenten mit Actiniden nicht ohne entsprechende Schutzausrüstung und Infrastruktur (Hot Cell) möglich ist, arbeiten wir mit den entsprechenden Lanthaniden, die sich chemisch sehr ähnlich verhalten.

Es wurden neue Verbindungen der Tetrazolderivate synthetisiert und diese mit Fremdionen (CO_3^{2-} , ...) komplexiert, um dadurch ein tieferes Verständnis der Koordinationschemie der Lanthanide und Actinide zu erhalten. Die Einführung fremder Ionen erfolgt einerseits im makroskopischen Maßstab (Synthese von Doppelsalzen) und andererseits auf mikroskopischer Ebene (Spiking mit Radiotracer). Begleitet wird die Synthese sowohl durch spektroskopische Methoden in diversen Energiebereichen (NMR, ..., FIR, ..., γ -Spektroskopie), als auch durch Röntgendiffraktionsexperimente.

Ein weiterer Bestandteil sind quantenchemische Rechnungen auf unterschiedlichen Theorieniveaus zur Analyse der experimentellen Ergebnisse.

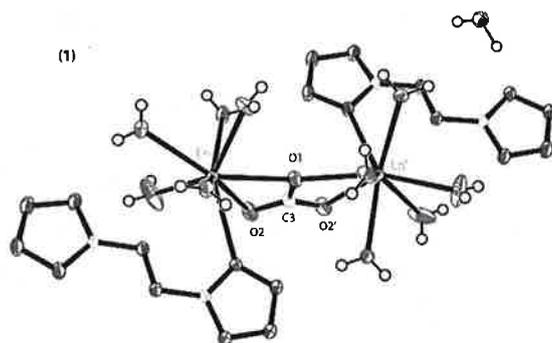


Abbildung 19: Molekülstruktur von $[\text{Ln}_2(\text{CO}_3)(\text{ZT})_2(\text{H}_2\text{O})_{10}] \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ mit $\text{Ln} = \text{La}, \text{Pr}, \text{Dy}, \text{und Y}$.

Knoll, C.; Müller, D.; Giester, G.; Ofner, J.; Lendl, B.; Weinberger, P.; Steinhauser, G., An unusually water-poor 5,5'-azobistetrazolate of dysprosium: stabilization of a nitrogen-rich heterocycle by a minimum of hydrogen bonds. *New J. Chem.* 2013, 37, (12), 3840-3844.

Steinhauser, G.; Giester, G.; Wagner, C.; Weinberger, P.; Zachhuber, B.; Ramer, G.; Villa, M.; Lendl, B., Nitrogen-rich Compounds of the Actinoids: Dioxouranium(VI) 5,5'-Azobis[tetrazolide] Pentahydrate and Its Unusually Small Uranyl Angle. *Inorg. Chem.* 2012, 51, (12), 6739-6745.

Panak, P. J.; Geist, A., Complexation and Extraction of Trivalent Actinides and Lanthanides by Triazinylpyridine N-Donor Ligands. *Chem. Rev.* 2013, 113, (2), 1199-1236.