

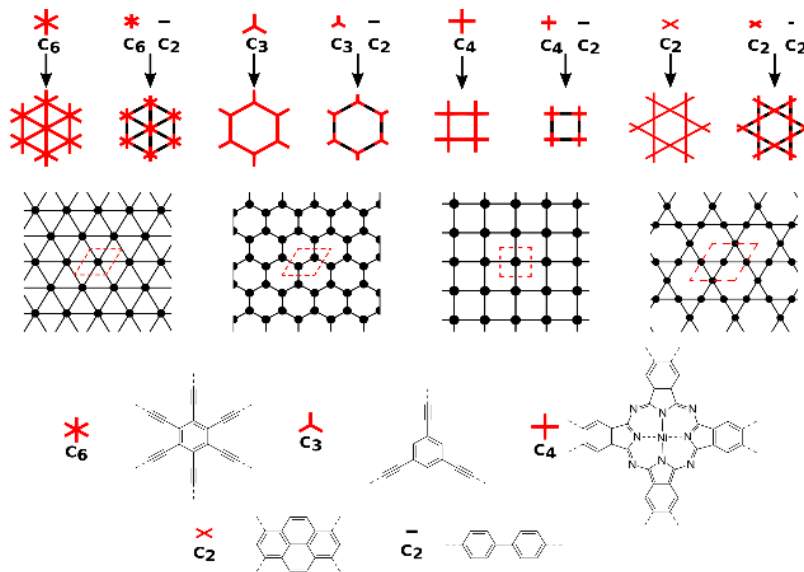
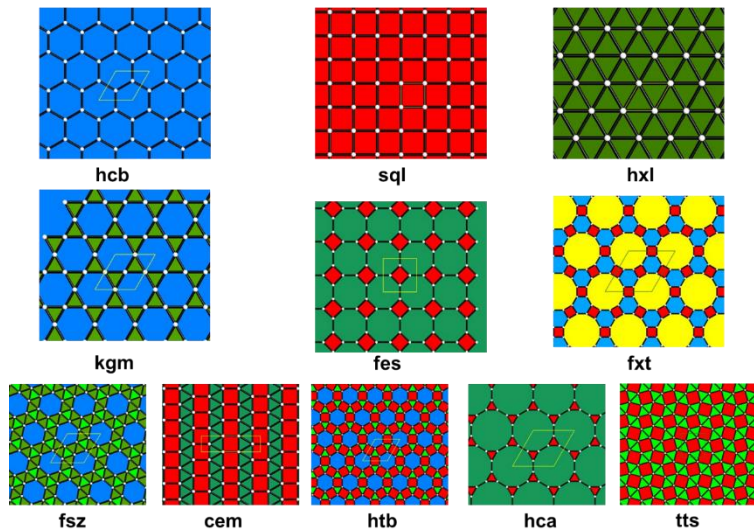


Lehrstuhl
Theoretische
Chemie

Themen für
Bachelorarbeiten

BSc-Themen 2021: Topologische Polymere

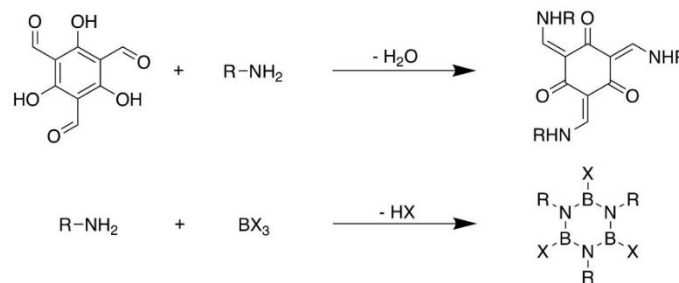
11 vertex-transitive plane nets (Kepler nets)



Mögliche Themen:

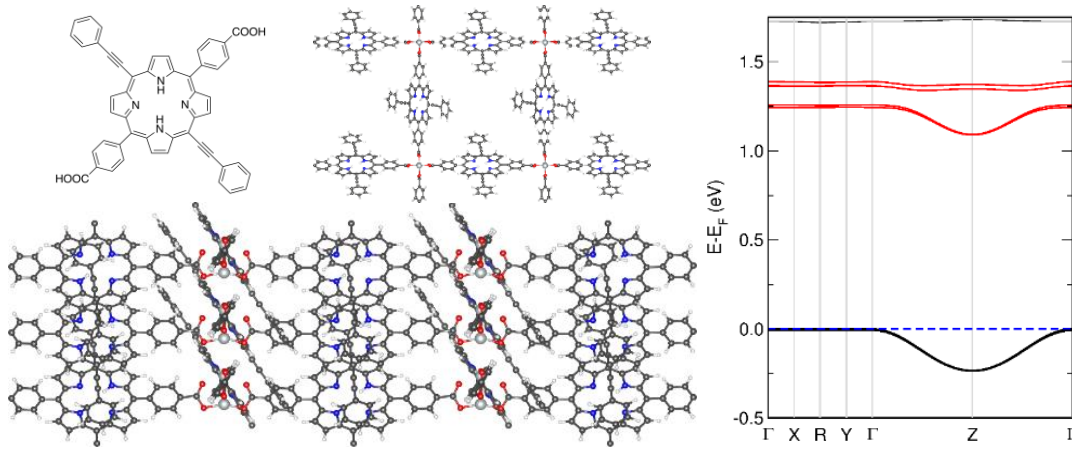
- Konstruktion von konjugierten 2D-Polymeren und/oder 2D MOFs
- Untersuchung von Kopplungsreaktionen

Rationales Design (pre-synthesis)



Konjugierte Netze: AK Jiang (NUS Singapore) und Heine, Science 2017
Topologische Polymere: AK Heine, Chem. Soc. Rev. 2020

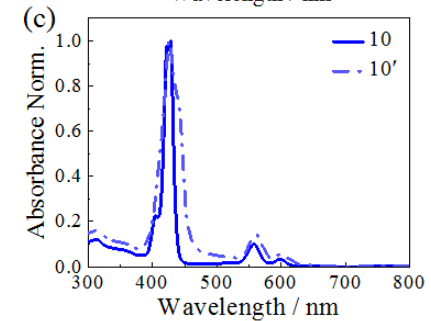
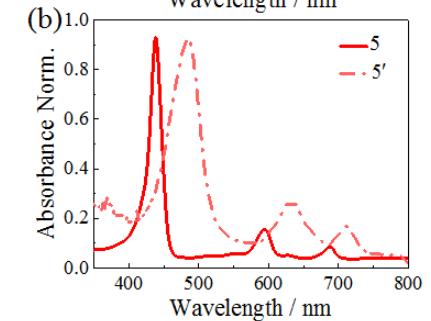
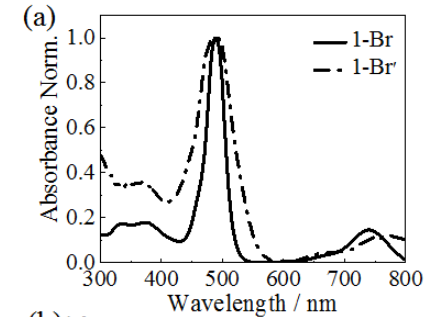
BSc-Themen 2021: Funktionalität durch Stapelung (MOFs)



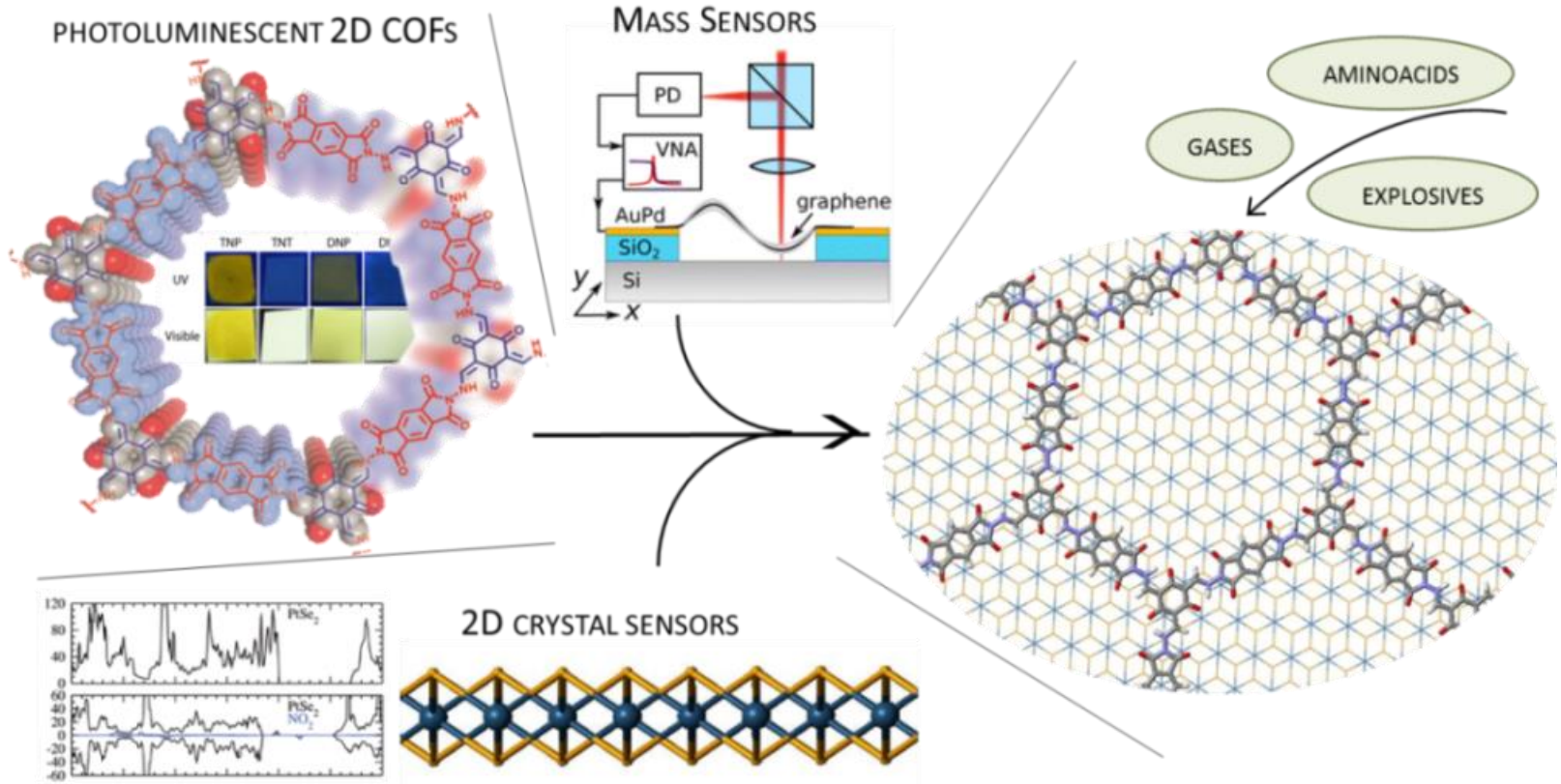
Bsp: Porphyrin-SURMOFs
AK Heine/Wöll, *Chem. Eur. J.* 2019, *Adv. Func. Mater.* 2020

Mögliche Themen:

- Computational Screening von photoaktiven Linkern
- Sterische Kontrolle des Stapelwinkels



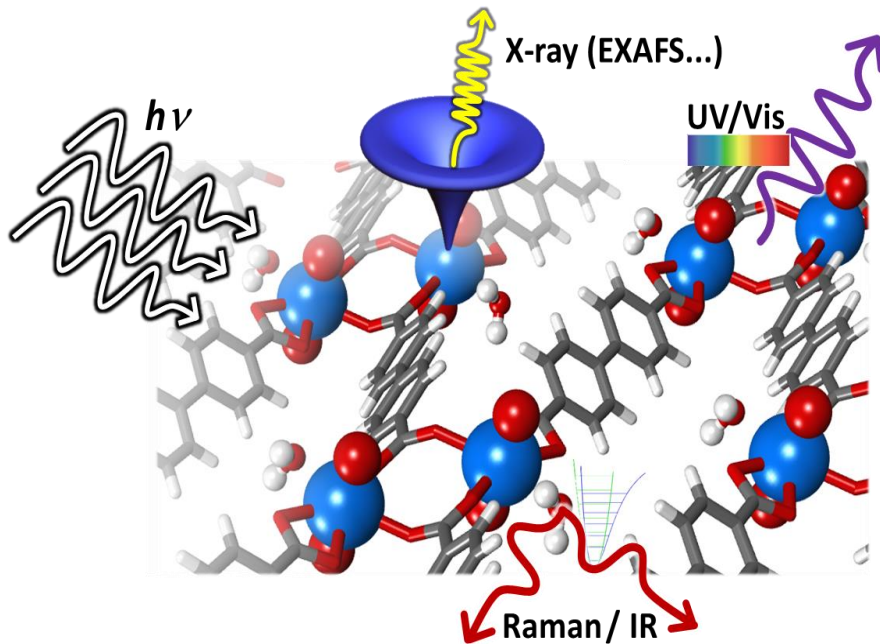
BSc-Themen 2021: Van-der-Waals Heterostrukturen



Themen:

- Design und Eigenschaften von vdW-Heterostrukturen
- Sensorik (Masse, molekulare Erkennung)

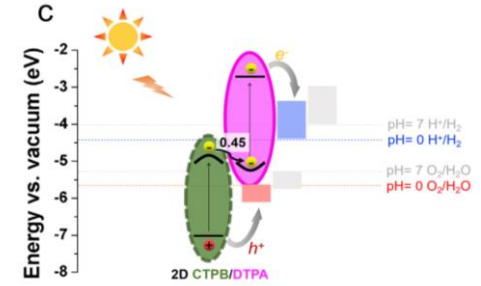
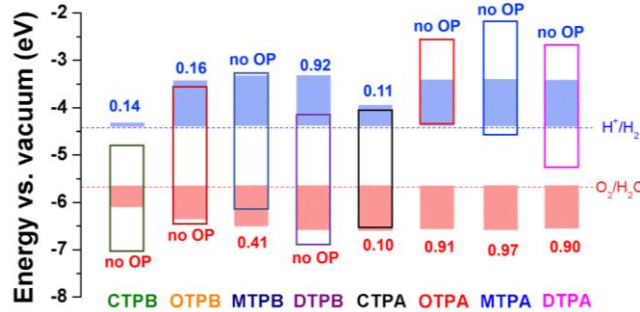
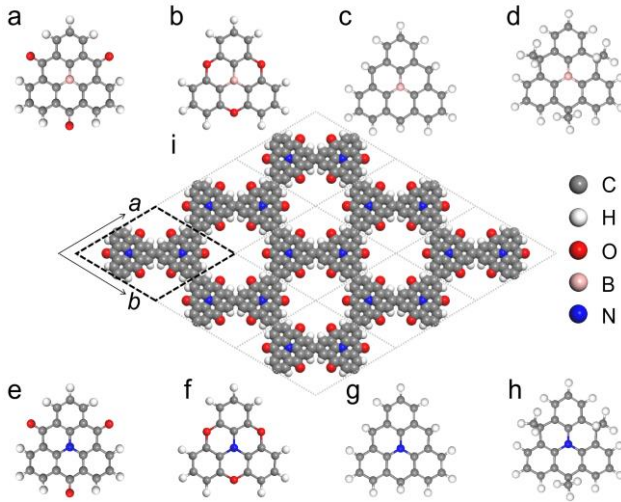
Actinid-basierte Metallorganische Gerüstverbindungen (An-MOFs)



Mögliche Themen

- Konstruktion von unterkoordinierten An-MOFs
- Entwicklung einer 3D-MOF-Design-Entwicklungsumgebung
- Spektroskopie an An-MOFs
- Entwicklung eines neuen Dichtefunktionals mit Fokus auf f-Elemente

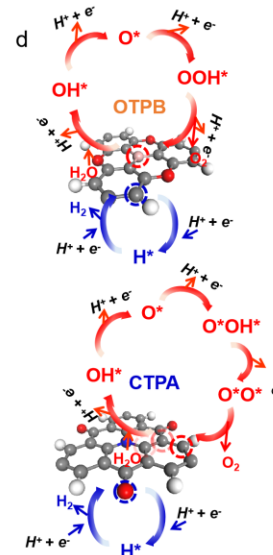
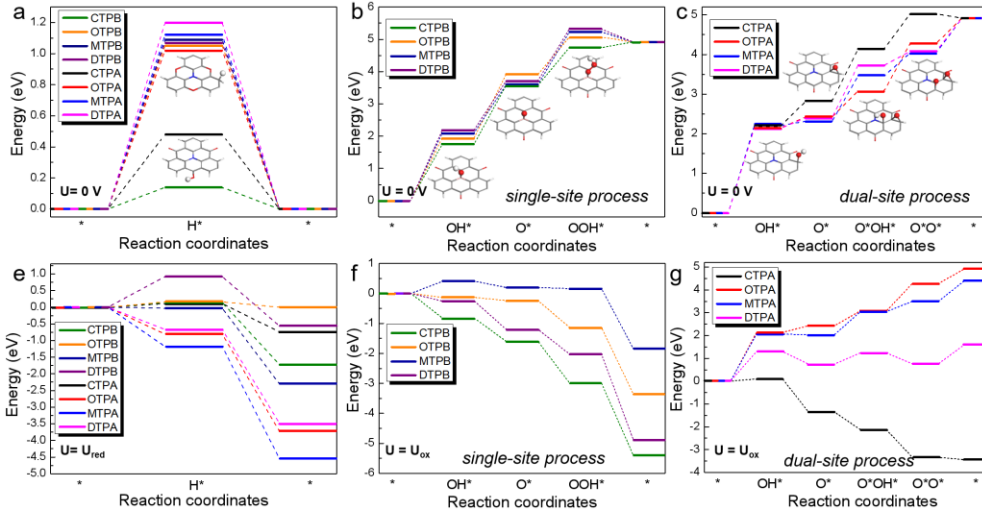
BSc-Themen 2021: Photokatalyse an 2D-Polymeren



Mögliche Themen:

- Berechnung der Oberflächenreaktionen
- Untersuchung des Zusammenhangs topologische Struktur – katalytische Aktivität

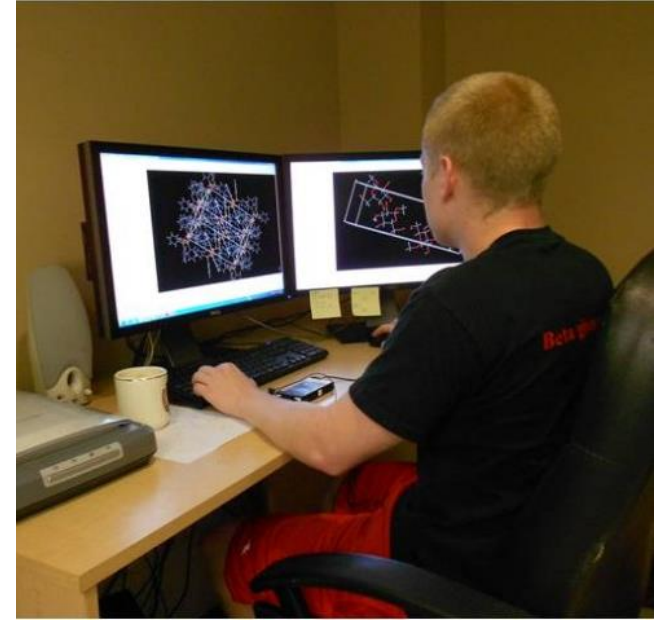
AK Heine, JACS 2020



Ressourcen und Betreuung



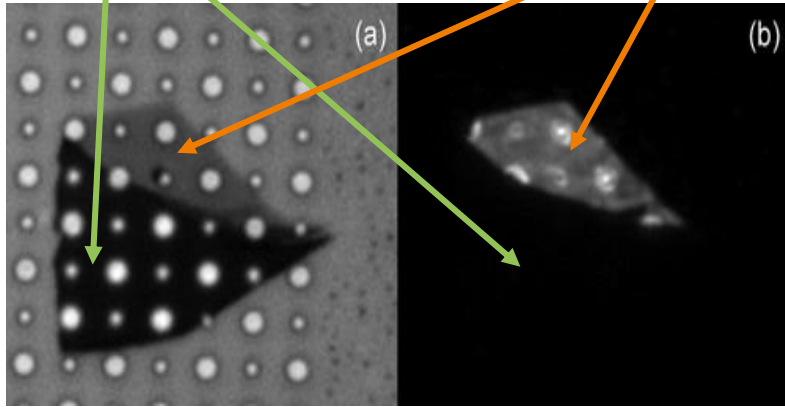
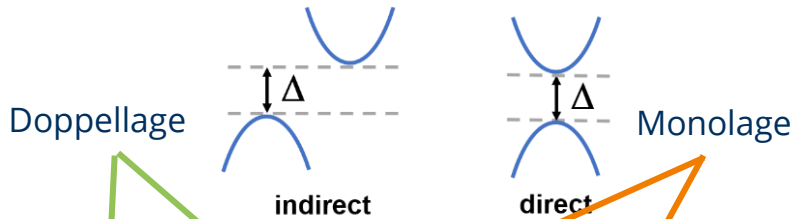
Taurus-Cluster, erste Ausbaustufe



- Taurus-Cluster ZIH Dresden
- Rechencluster AK Heine
- Diverse Softwarepakete
- Moderner Arbeitsplatz im AK Heine
- Kooperation mit führenden Softwareentwicklern

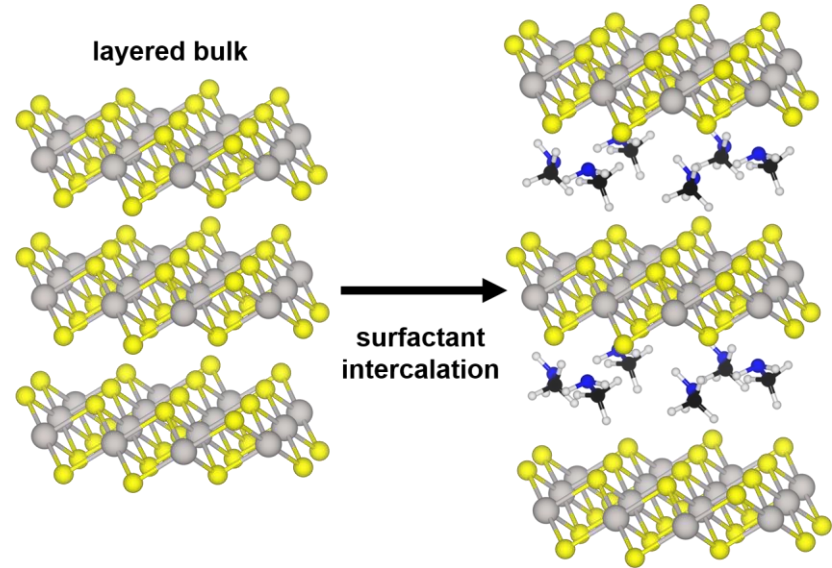
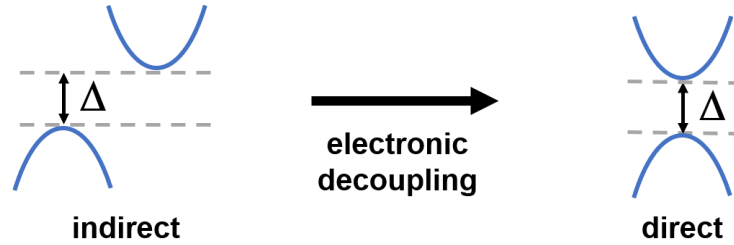
- **Individuelle Betreuung** durch erfahrene wissenschaftliche Mitarbeiter, Doktoranden und technisches Personal.
- **Teamarbeit** (interne und externe Kooperationen)
- **Einbindung in alle Aktivitäten des AK Heine** (Gruppenseminare, Retreats, Workshops...)

Beispiel einer Bachelorarbeit: Roman Kempf (2018)



Optische Aufnahme

Photolumineszenz



Wie können die MoS₂-Lagen elektronisch entkoppelt werden?

2D Crystals in Three Dimensions: Electronic Decoupling of Single-Layered Platelets in Colloidal Nanoparticles. **R. Kempf**, A. Kuc, J. H. Han, J. Cheon, T. Heine, *Small* 2018, 14, 1803910