

**Pressemitteilung****Universität Wien****Alexandra Frey**

22.06.2023

<http://idw-online.de/de/news816505>Forschungs- / Wissenstransfer, Forschungsergebnisse  
Biologie, Chemie  
überregional**Mikromandalas ihre volle Wirkung entfalten lassen****Ein neuer Speziationsatlas hilft Forscher\*innen dabei, genauere Ergebnisse und neue Entdeckungen zu erzielen.**

Um das bisher schwierig fassbare Verhalten und die Stabilität komplexer Metallverbindungen in wässrigen Lösungen, sogenannter "POMs", aufzudecken, haben Forscher\*innen an der Universität Wien einen Speziationsatlas entwickelt, der aktuell in Science Advances veröffentlicht wurde. Dieser Durchbruch hat das Potenzial, neue Entdeckungen und Fortschritte in Bereichen wie Katalyse, Medizin und weiteren Disziplinen voranzutreiben.

Metallatome können mit Sauerstoff winzige 3D-Strukturen bilden, komplizierte Gerüste, die wie Drahtmandalas aussehen und als "Polyoxometallate" oder kurz "POMs" bezeichnet werden. Diese POMs sind nützlich zur Kontrolle chemischer Reaktionen in Chemie, Biologie oder Materialwissenschaften. Ihre Struktur ist jedoch äußerst variabel und hängt von winzigen Veränderungen in ihrer Umgebung ab, was es für Forscher\*innen sehr schwierig macht, ihre Struktur und damit ihre Funktion für verschiedene Anwendungen, von der Medizin bis zur Umweltsanierung, vorherzusagen.

Nadiia Gumerova und Annette Rempel von der Fakultät für Chemie an der Universität Wien haben nun einen sogenannten "Speziationsatlas" entwickelt, eine Art Spickzettel, der es Forscher\*innen ermöglicht, die erwartete Struktur und das Verhalten von zehn gängigen POMs für beliebige chemische Bedingungen genau zu bestimmen. Konkret handelt es sich bei diesem Atlas um eine Datenbank, die ein vorhersagendes Modell enthält, das auch auf andere als die zehn ausgewählten POMs erweitert werden kann. Dadurch werden POM-Artenverteilungen, Stabilität und katalytische Aktivität unter Berücksichtigung von Faktoren wie pH-Wert, Temperatur, Inkubationszeit, Pufferlösungen, reduzierenden oder chelatbildenden Substanzen und ionischer Stärke ermittelt.

Um zukünftige Forschung weiter zu unterstützen, haben Gumerova und Rempel auch eine "Roadmap" für andere Wissenschaftler\*innen entwickelt, die Experimente mit eigenen POMs durchführen: Durch Auswahl stabiler POM-Varianten, Auflistung der Anwendungssystemparameter und Durchführung sogenannter "POM-Speziationsstudien" – Experimente, die die Veränderung der POM-Struktur unter veränderten Bedingungen aufzeigen – können Forscher\*innen sicherstellen, dass sie die genauesten Ergebnisse erhalten und POMs optimal für ihre Arbeit nutzen.

"Der Speziationsatlas für POMs stellt einen bedeutenden Fortschritt in unserem Verständnis dieser komplexen Metallverbindungen dar. Daraus gewonnene Erkenntnisse haben das Potenzial, neue Entdeckungen und Fortschritte in Katalyse, Biologie, Medizin und darüber hinaus voranzutreiben", so Annette Rempel.

wissenschaftliche Ansprechpartner:

Univ. Prof. Dr. Annette Rempel  
Institut für Biophysikalische Chemie, Universität Wien

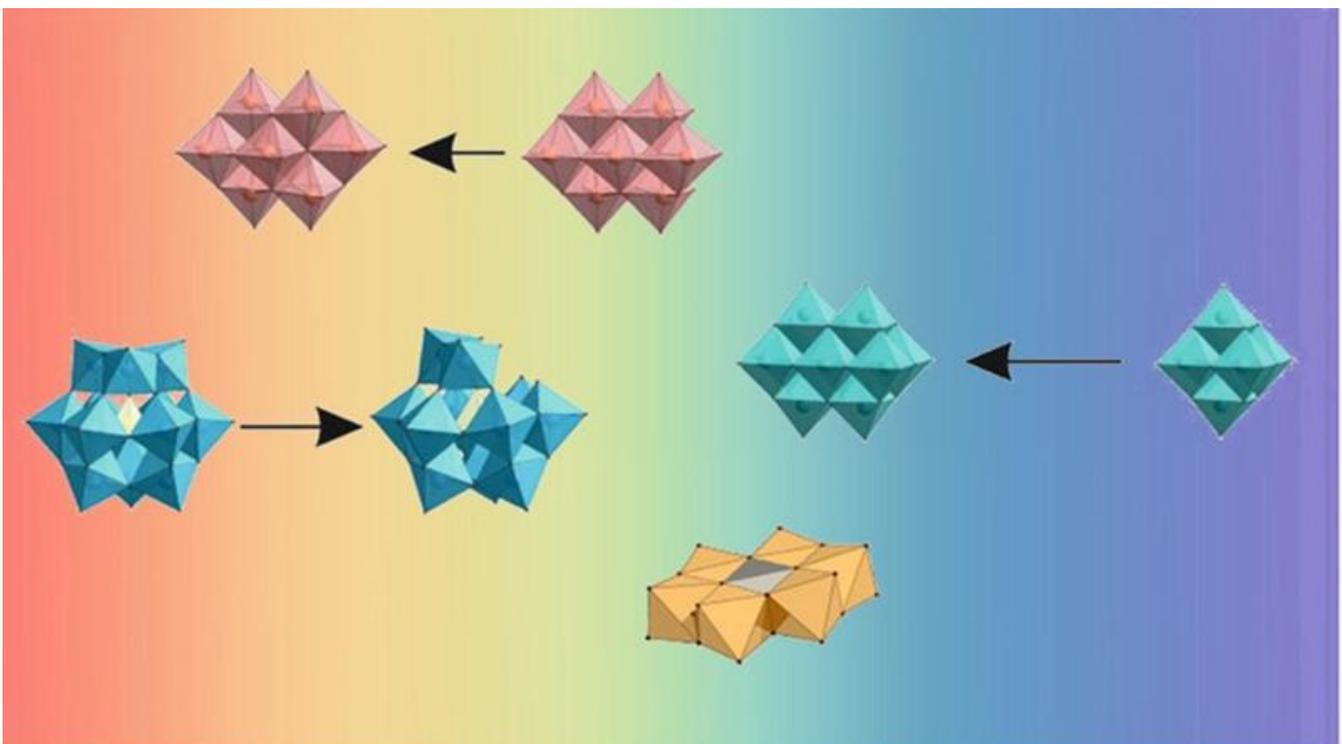
1090 Wien, Josef-Holaubek-Platz 2  
T +43-1-4277-52502  
annette.rompel@univie.ac.at

Originalpublikation:

Nadiia Gumerova and Annette Rompel. Speciation atlas of polyoxometalates in aqueous solutions, Science Advances (2023)

DOI: 10.1126/sciadv.adio814 (<https://doi.org/10.1126/sciadv.adio814>)

URL zur Pressemitteilung: [https://medienportal.univie.ac.at/media/aktuelle-pressemeldungen/detailansicht/artikel/mikromandalas-ihre-volle-wirkung-entfalten-lassen/?mtm\\_campaign=presse&mtm\\_kwd=idw](https://medienportal.univie.ac.at/media/aktuelle-pressemeldungen/detailansicht/artikel/mikromandalas-ihre-volle-wirkung-entfalten-lassen/?mtm_campaign=presse&mtm_kwd=idw)



Der "Speziationsatlas" ermöglicht es Forscher\*innen, die erwartete Struktur und das Verhalten von gängigen POMs für beliebige chemische Bedingungen genau zu bestimmen.

Annette Rompel  
Annette Rompel