

Forschungsbericht 2005

Institut für Chemie



Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik

Institut für Chemie

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg
Tel. +49 (0)391 67 18416, Fax +49 (0)391 67 11387
ich@uni-magdeburg.de

1. Leitung

Prof. Dr. rer.nat.habil. Frank T. Edelmann
Prof. Dr. rer.nat.habil. Dieter Schinzer
Prof. Dr. rer.nat.habil. Helmut Weiß (Institutsleiter)
Dr. rer. nat. Volker Lorenz
Frau Ines Sauer

2. Hochschullehrer

Prof. Dr. rer.nat.habil. Frank T. Edelmann
Prof. Dr. rer.nat.habil. Dieter Schinzer
Prof. Dr. rer.nat.habil. Helmut Weiß
Apl. Prof. Dr. rer. nat. habil. Helmut Rau (i.R.)

3. Forschungsprofil

AG Anorganische Chemie

- Siliciumchemie: Silsesquioxane, Metallasilsesquioxane
- Präparative und Strukturuntersuchungen an Organometallkomplexen der Lanthanoide
- Koordinationschemie der f-Elemente
- Metallorganische Chemie der frühen Übergangsmetalle
- NMR-Untersuchungen an paramagnetischen Lanthanoidkomplexen
- Röntgenstrukturanalysen an Organolanthanoidkomplexen
- Untersuchungen zur Homogenkatalyse mit Lanthanoidmetallocenen
- Entwicklung neuer Metallocenkatalysatoren für die Olefinpolymerisation
- Entwicklung von Modellverbindungen für lanthanoiddotierte Zeolith-Katalysatoren
- Koordinationschemie von Fulvenen und Azulenen
- Synthese von molekularen Vorstufen für MOCVD-Verfahren (III/V und II/VI Halbleiter, Metallnitride, Metallboride, Strontium-Bismut-Tantalat (SBT), Blei-Zirconat-Titanat (PZT))
- Untersuchungen zur bioanorganischen Chemie der Lanthanoide
- Spezielle Aspekte der Hauptgruppenchemie (Stannylene, Plumbylene, nichtklassische Mehrfachbindungen)
- Präparative Fluorchemie
- Ferrocenchemie
- Supramolekulare Strukturchemie von Organozinnverbindungen
- Koordinationschemie von Oxo- und Cyanokohlenstoffanionen

AG Organische Chemie

- Entwicklung moderner Synthesemethoden: Diastereo- und enantioselektive C-

C-Verknüpfungen

- Metallorganische Chemie: Synthese und Reaktionen von Chrom-, Mangan-, Silicium- und Zinn-Verbindungen
- Synthese von Heterocyclen durch Tandemreaktionen
- Wirkstoffsynthese: Stereoselektive Synthese von biologisch aktiven Substanzen
- Struktur-Wirkungs-Beziehungen
- Naturstoffchemie: Synthese von Terpenen, Alkaloiden und Macroliden
- Computeranwendungen in der Chemie: Reaktionsdatenbanken und Molecular Modelling

AG Physikalische Chemie

- "Membranunterstützte Reaktionsführung": Adsorption, Reaktion und Desorption an anorganischen, katalytisch aktivierten Membranmaterialien
- Charakterisierung vanadium- und eisenhaltiger Katalysatoren mit Photoelektronenspektroskopie und Infrarotspektroskopie
- Ceroxid-basierte Abgaskatalysatoren: Einfluß von Dotierung, Temperatur, Reduktionsgrad und Leerstellenkonzentration auf katalytische Aktivität, Oberflächenstruktur und dynamik
- Dreiweg-Katalysatoren mit justierbaren Eigenschaften: Beeinflussung der katalytischen CO-Oxidation auf Platin durch Erdalkali-Additive
- Katalytische Reaktionen auf atomarer Skala
- Struktur, Thermodynamik und Dynamik reiner und adsorbatbedeckter Isolator-Einkristallflächen
- Elementare Prozesse in der Gas-Fest-Photokatalyse an Halbleitern

4. Forschungsprojekte

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelman

Projektbearbeiter: Prof. Frank T. Edelman, Dr. Stephan Gießmann, Prof. Mikhail N. Bochkarev

Förderer: DFG; 01.04.2004 - 31.03.2006

Lanthanoidspezifische Funktionalitäten in Molekül und Material (SPP 1166): Anorganische Lanthanoid-Metalloce - Ein Weg zu robusteren Organolanthanoid-Katalysatoren?

Im Rahmen des geplanten Forschungsvorhabens soll mit Hilfe von anionischen Lithiumdisiloxandiolat-Liganden und Silsesqui-oxanderivaten eine Klasse neuartiger Organolanthanoidkatalysatoren etabliert werden, die als "anorganische Lanthanoidmetalloce" bezeichnet werden können. Hauptziel dieser Untersuchungen ist die Synthese und strukturelle Charakterisierung hochreaktiver Metallalkyle und -hydride auf der Basis von Lithiumdisiloxandiolat- und Silsesqui-oxanliganden. Ein weiterer Schwerpunkt ist die Testung der Reaktivität (Katalyse) und des Synthesepotentials der dargestellten Disil-oxandiolat- und Silsesquioxan Komplexe. Weitere Teilziele umfassen die Synthese neuartiger bimetallischer Lanthanoidkomplexe mit Si-O-Liganden sowie Reaktionen von Disiloxandiolen und Silsesqui-oxanderivaten mit Lanthanoid-diiodiden.

Projektleiter: Prof. Dr. Dieter Schinzer

Förderer: Bund; 01.11.2002 - 31.07.2005

InnoRegio Rephyna- Verbund- "Neue hochwertige pflanzliche Inhaltsstoffe" Teilprojekt

Untersuchungen zur Charakterisierung pflanzlicher Inhaltsstoffe aus Pflanzen der Gattung Allium
Für dieses Projekt ist noch keine Kurzbeschreibung eingegeben worden.

Projektleiter: PD Dr. Yuri Suchorski
Projektbearbeiter: Dr. Yuri Suchorski
Förderer: EU; 01.05.2005 - 01.05.2007

A Field Ionization Position Sensitive Detector for Neutral Molecular Beams

Ziel des Projektes ist, einen positionsempfindlichen feld-ionisation basierten Detektor für neutrale atomare Strahlen zu entwickeln. Der Detektor sollte in einem Raster-Heliumatom-Mikroskop eingesetzt werden. Als empfindliche Elemente sollten nanogroßen Kohlenstoffröhrchen dienen.

Projektleiter: Prof. Dr. Helmut Weiß
Projektbearbeiter: M. Piorkowska
Kooperationen: Inst. f. Analysis u. Numerik, Inst. f. Apparate- u. Umwelttechnik, Inst. f. Strömungstechnik u. Thermodynamik, Inst. f. Verfahrenstechnik, Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg
Förderer: DFG; 01.07.2005 - 30.06.2009

Herstellung, Charakterisierung und reaktionstechnische Untersuchung von Katalysatoren und katalytisch aktiven Membranen

In der Weiterführung des Teilprojektes TP 1 der Forschergruppe "Membranunterstützte Reaktionsführung" sollen Katalysatoren und katalytisch aktive Membranen für die Kohlenwasserstoffoxidation präpariert und charakterisiert, kinetische Modelle und katalysatorspezifische Parameter gewonnen sowie systematische Oberflächenuntersuchungen zum Verständnis der am Katalysator ablaufenden Vorgänge durchgeführt werden. Katalysatoren und Modelle werden den anderen Teilprojekten zur Verfügung gestellt. Das Hauptaugenmerk gilt der C2-Kohlenwasserstoffoxidation, zusätzlich sind orientierende Untersuchungen zum C3-Netzwerk mit dem Ziel geplant, Gemeinsamkeiten, aber auch Unterschiede zwischen den beiden herauszuarbeiten. Für die kinetische Modellierung der Systeme sollen Techniken zur Parameterschätzung und -optimierung weiterentwickelt werden; dies schließt Untersuchungen zur statistischen Datenanalyse und Fehlerabschätzung ein. Die Erkenntnisse der umfangreichen Oberflächenuntersuchungen sollen dabei direkt in die kinetischen Modelle integriert werden. Angestrebt wird der Übergang von der formalen zur wissensbasierten Kinetik, um durch die Verbindung von Katalysatorevaluierung, in situ- und ex situ-Oberflächenuntersuchungen und mathematischer Modellierung Beiträge zum vertieften Verständnis des Reaktionsmechanismus bei der Kohlenwasserstoffoxidation leisten zu können.

Projektleiter: Prof. Dr. Helmut Weiß
Projektbearbeiter: Dr. M. Alandjiyska
Kooperationen: Inst. f. Analysis u. Numerik, Inst. f. Apparate- u. Umwelttechnik, Inst. f. Strömungstechnik u. Thermodynamik, Inst. f. Verfahrenstechnik, Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg
Förderer: DFG; 01.01.2001 - 30.06.2005

Herstellung und Charakterisierung von Katalysatoren und katalytisch aktiven Membranen

Im Rahmen dieses Teilprojektes (TP 1) der Forschergruppe "Membranunterstützte Reaktionsführung" werden Katalysatoren für die C2-Kohlenwasserstoffoxidation präpariert und charakterisiert sowie Beiträge zum Verständnis der dabei am Katalysator ablaufenden Vorgänge und ihrer Beeinflussbarkeit über die Katalysatoreigenschaften und Reaktionsbedingungen geleistet. Dazu werden, ausgehend von kommerziell erhältlichen Trägermaterialien, geeignete Katalysatorsysteme ausgewählt und präpariert, zunächst anhand von Versuchen mit Festbettschüttungen, um Katalysatoreigenschaften, wie die Zusammensetzung, Porosität und Basizität zu optimieren. Auf Basis dieser Ergebnisse und unter Einbeziehung von Ergebnissen anderer Teilprojekte werden zielgerichtet geeignete, katalytisch aktive Membranen hergestellt. Dazu werden verschiedene Imprägierungstechniken auf ihre Wirksamkeit und Eignung geprüft. Partikuläre Katalysatoren und katalytisch aktive Membranen sollen in ihrem Aktivitäts- und Selektivitätsverhalten sowie ihren Struktureigenschaften charakterisiert und miteinander verglichen werden. Anhand vor allem infrarotspektroskopischer Untersuchungen und mikroskopischer Betrachtungen sollen dabei makroskopisch beobachtete Unterschiede aufgeklärt und auf Basis mechanistischer Konzepte gedeutet werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Helmut Weiß

Projektbearbeiter: Dr. Jochen Vogt

Förderer: Haushalt; 01.01.2003 - 31.12.2007

Strukturen und Phasenumwandlungen molekularer Adsorbate an Isolatoren mittels höchstempfindlicher Beugung langsamer Elektronen

Ziel des Projektes sind Beiträge zum Verständnis der Adsorption kleiner Moleküle an definierten, gespaltenen Isolator-Einkristallflächen mit Hauptgewichten auf einer allgemeinen Untersuchung der Ausbildung geordneter zweidimensionaler Strukturen in diesen Adsorbaten, der Charakterisierung von Phasenumwandlungen und der Bestimmung lokaler Absolutgeometrien der untersuchten Oberflächen. Von Bedeutung ist in diesem Zusammenhang natürlich auch die umfängliche Charakterisierung der unbedeckten Isolator-Einkristallsubstrate selbst. Als Untersuchungsmethode kommt in erster Linie die Beugung langsamer Elektronen (LEED) mit einem LEED-System mit bildverstärkenden Vielkanalplatten zum Einsatz. Die Messungen werden teilweise durch die Fourier-Transform-infrarotspektroskopische (FTIRS) Charakterisierung der Adsorbate, teilweise auch durch die Kombination von LEED mit Helium-Atomstrahlstreuung (HAS) ergänzt.

Projektleiter: Prof. Dr. Helmut Weiß

Projektbearbeiter: Dr. Rafal Wrobel

Kooperationen: Queen Mary, University of London (Großbritannien), University College Cork (Irland), University of Cardiff (Großbritannien), University of Linköping (Schweden), University of Liverpool (Großbritannien), Uppsala University (Schweden)

Förderer: EU; 01.11.2002 - 30.10.2006

Surface Active Sites and Emission Control Analysis

Ziel dieses "Research & Training"-Netzwerks ist die Identifikation der Rolle der Oberflächendynamik und aktiver Zentren in oxidischen Katalysatormaterialien auf atomarer und molekularer Ebene; die untersuchten Materialien, wie Cerdioxid oder Bariumoxid, sind insbesondere von Bedeutung im Bereich der Luftreinhaltung. Im einzelnen werden folgende

Punkte adressiert: (i) Größe und Art der Oberflächendynamik der untersuchten Materialien; (ii) Die Rolle der Oberflächendynamik im katalytischen Prozess. (iii) Die Dynamik der Molekül-Oberflächen-Reaktion. (iv) Vorkommen, Art und Rolle weiterer aktiver Zentren. (v) Einfluss der Temperatur auf Vorkommen und Art aktiver Zentren

Projektleiter: Prof. Dr. Helmut Weiß

Projektbearbeiter: Milind Joshi

Kooperationen: Inst. f. Analysis u. Numerik, Inst. f. Apparate- u. Umwelttechnik, Inst. f. Strömungstechnik u. Thermodynamik, Inst. f. Verfahrenstechnik, Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg

Förderer: DFG; 01.01.2001 - 30.06.2005

Untersuchung der Kinetik des Reaktionsnetzwerkes der C2-Kohlenwasserstoffoxiden für ausgewählte partikuläre Katalysatoren und katalytisch aktive Membranen

Im zweiten Teilprojekt der DFG-Forschergruppe Membranunterstützte Reaktionsführung an der OvGU Magdeburg sollen auf der Grundlage von systematischen experimentellen Untersuchungen quantitative Aussagen zur Reaktionskinetik der katalytischen C2-Kohlenwasserstoffoxidation erarbeitet werden. Zum Einsatz kommen werden dabei ausgewählte partikuläre Katalysatoren und katalytisch aktive Membranen. Die Messungen sollen in differentiellen Strömungsreaktoren durchgeführt werden und einen weiten Parameterbereich hinsichtlich Temperaturen, Konzentrationen und Verweilzeiten abdecken. Das primäre Ziel dieses Teilprojektes ist die Entwicklung von Sätzen formalkinetischer Gleichungen für die verschiedenen Katalysatoren unter Verwendung von Standardkonzepten der heterogenen Katalyse, um diese dann den anderen Teilprojekten zur Verfügung zu stellen. Darüber hinaus sollen die für die verschiedenen Katalysatorsysteme ermittelten Reaktionsgeschwindigkeiten zusammen mit den Ergebnissen von Aktivitätstests systematisiert werden, um Struktur-Wirkungs-Beziehungen zu erkennen. Ergänzend dazu soll versucht werden, für einige katalytisch aktive Membranen reaktive Übergangsspezies durch Einsatz IR-spektroskopischer in situ-Untersuchungen zu charakterisieren.

5. Eigene Kongresse und wissenschaftliche Tagungen

- COST D28 Training School and Workshop, "Natural Products as a Source for Discovery, Synthesis, and Application of New Pharmaceuticals"; 19.-22. Oktober 2005; Ischia, Italien

6. Veröffentlichungen

Originalartikel in internationalen Zeitschriften

Amberger, Hanns-Dieter (ext.) ; Reddmann, Hauke (ext.) ; Edelmann, Frank T.

Zur Elektronenstruktur metallorganischer Komplexe der f-Elemente LxI : welche Oxidationszahl hat Cer im tiefvioletten 1,1',4,4'-Tetrakis(trimethylsilyl)cerocen?.

In: Journal of organometallic chemistry [Lausanne] 690(2005), S. 2238 - 2242

[Imp.fact.: 1.905]

Amenta, Donna S. (ext.) ; Sparks, S.Nikki (ext.) ; Gilje, John W. (ext.) ; Edelmann, Frank T. ; Fischer, Axel ; Blaurock, Steffen

Lanthanide nitrate complexes of the unsymmetrical bidentate ligand Ph₂PCH₂CH₂P(O)PPh₂.
In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie : ZAAC = Journal of inorganic and general chemistry [Weinheim] 631(2005), S. 1 - 4
[Imp.fact.: 1.086]

Girma, Kibatu Berchie ; Lorenz, Volker ; Blaurock, Steffen ; Edelmann, Frank T.

Coordination chemistry of acrylamide.
In: Coordination chemistry reviews [Amsterdam] 249(2005), Nr. 1, S. 1283 - 1293
[Imp.fact.: 6.446]

Girma, Kibatu Berchie ; Lorenz, Volker ; Blaurock, Steffen ; Edelmann, Frank T.

Coordination chemistry of acrylamide 1. cobalt (II) chloride complexes with Acrylamide : synthesis and crystal structures.
In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie : ZAAC = Journal of inorganic and general chemistry [Weinheim] 631(2005), S. 1419 - 1422
[Imp.fact.: 1.086]

Girma, Kibatu Berchie ; Lorenz, Volker ; Blaurock, Steffen ; Edelmann, Frank T.

Coordination chemistry of acrylamide 3 : synthesis, crystal structure and IR spectroscopic properties of dichloro-tetrakis(O-acrylamide)copper(II), [Cu(o-OC(NH₂)CH=CH₂)₄Cl₂].
In: Inorganica chimica acta [New York, NY] 358(2005), Nr. 7, S.
[Imp.fact.: 1.554]

Girma, Kibatu Berchie ; Lorenz, Volker ; Blaurock, Steffen ; Edelmann, Frank T.

Coordination chemistry of acrylamide 4. crystal structures and IR spectroscopic properties of acrylamide complexes with CoII, NiII, and ZnII nitrates.
In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie : ZAAC = Journal of inorganic and general chemistry [Weinheim] 631(2005), S. 1843 - 1848
[Imp.fact.: 1.086]

Girma, Kibatu Berchie ; Lorenz, Volker ; Girma, Kibatu Berchie ; Edelmann, Frank T.

Coordination chemistry of acrylamide 2. classical complexes of acrylamide manganese(II), iron(II) and nickel(II) chlorides : syntheses and crystal structures.
In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie : ZAAC = Journal of inorganic and general chemistry [Weinheim] 631(2005), S. 2763 - 2769
[Imp.fact.: 1.086]

Hyeon, Ji-Young ; Gottfriedsen, Jochen ; Edelmann, Frank T.

Lanthanides and actinides : annual survey of their organometallic chemistry covering the year 2000.
In: Coordination chemistry reviews [Amsterdam] 249(2005), Nr. 3,
[Imp.fact.: 6.446]

Hyeon, Ji-Young ; Lisker, Marco (ext.) ; Silinskas, Mindaugas (ext.) ; Burte, Edmund ; Edelmann, Frank T.

Liquid-Delivery MOCVD of strontium bismuth tantalate thin films using

Sr[Ta(OC₂H₅)₅(OCH₂CH₂OCH₃)₂] and liquid Bi(CH₂CH=CH₂)₃ as precursors.
In: Chemical vapor deposition : CVD [Weinheim] 11(2005), Nr. 4, S. 213 - 218

Lorenz, Volker ; Edelmann, Frank T.

Metallasilsesquioxanes.

In: Advances in organometallic chemistry [New York, NY] 53(2005), S. 101 - 153
[Imp.fact.: 5.500]

Suchorski, Yuri ; Rihko-Struckmann, L. (ext.) ; Klose, F. (ext.) ; Ye, Y. (ext.) ; Alandjiyska, Maia ; Sundmacher, Kai ; Weiß, Helmut

Evolution of oxidation states in vanadium-based catalysts under conventional XPS conditions.

In: Applied surface science [Amsterdam] 249(2005), S. 231 - 237
[Imp.fact.: 1.497]

Vogt, Jochen ; Henning, Jan ; Weiß, Helmut

The structure of CaF₂(111) and BaF₂(111) single crystal surfaces : a tensor low energy electron diffraction study.

In: Surface science [Amsterdam] 578(2005), S. 57 - 70
[Imp.fact.: 2.063]

Zarraga-Colina, Jeanette (ext.) ; Nix, Roger M. (ext.) ; Weiß, Helmut

Growth, structure, and stability of ceria films on Si(111) and the application of CaF₂ buffer layers.

In: Journal of physical chemistry, B = Condensed matter, materials, surfaces, interfaces & biophysical chemistry [Washington, DC] 109(2005), S. 10978 - 10985
[Imp.fact.: 3.834]

Hochschulschriften

Cordes, Martin

Intramolekulare Cyclisierungen chiraler "C-zentrierter" Propargylsilane und enantioselektive Synthesen anellierter Azepine zum Aufbau des BD-Grundgerüsts von Cephalotaxin. 2005, getr. Zählg. Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Habil., 2005