

# INSTITUT FÜR CHEMIE

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg  
Tel. +49 (0)391 67 58672, Fax +49 (0)391 67 52223  
ich@uni-magdeburg.de

## 1. Leitung

Prof. Dr. rer. nat. habil. Frank T. Edelmann  
Jun.-Prof. Dr. Edgar Haak  
Prof. Dr. rer. nat. Franziska Scheffler (Institutsleiterin)  
Prof. Dr. rer. nat. habil. Dieter Schinzer  
Prof. Dr. rer. nat. habil. Helmut Weiß  
Dr. Volker Lorenz  
Frau Ines Sauer

## 2. Hochschullehrer

Prof. Dr. rer. nat. habil. Frank T. Edelmann  
Hon.-Prof. Dr. Ernst R.F. Gesing  
Jun.-Prof. Dr. Edgar Haak  
Prof. Dr. rer. nat. Franziska Scheffler  
Prof. Dr. rer. nat. habil. Dieter Schinzer  
Prof. Dr. rer. nat. habil. Helmut Weiß  
PD Dr. rer. nat. habil. Jochen Vogt

## 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
- "Inverse Katalysatoren": Beeinflussung der katalytischen CO-Oxidation auf Edelmetallen durch Ceroxid
- Katalytische Reaktionen auf atomarer Skala
- Struktur, Thermodynamik und Dynamik reiner und adsorbatbedeckter Isolator-Einkristallflächen

#### AG Technische Chemie

- Katalysatorentwicklung: Zeolithe und zeolithartige Materialien, Optimierung der Struktur, Oberflächenchemie, Morphologie
- Beschichtungen: Trägergestützte (Reaktiv-)Kristallisation von katalytisch aktiven Systemen
- Zelluläre Kompositmaterialien: katalytisch aktive Keramik- und Glasformkörper durch neue Prozessierungsverfahren
- Thermische Energiespeicherung: Support für Wärmespeichermaterialien, neuartige (keramische und hybride) Wärmespeichermaterialien
- Thermoelektrika: Prozessierung von thermoelektrischen Pulvern mittels Techniken aus der keramischen Fertigung
- Photokatalyse: Entwicklung und Testung monolithisch getragener Katalysatoren auf Titanoxidbasis

#### 4. Serviceangebot

NMR-Messungen verschiedener Kerne an Feststoffen und Flüssigkeiten

Röntgenpulverdiffraktometrie (XRD) in Reflexion, Transmission und Kapillare, auch temperaturabhängig

Stickstoff-Tieftemperaturadsorption

Katalysatorrestung

## 5. Forschungsprojekte

**Projektleiter:** Prof. Dr. Franziska Scheffler

**Projektbearbeiter:** Dr. Alexandra Lieb

**Förderer:** Haushalt; 01.07.2009 - 31.12.2012

### **Darstellung und Charakterisierung neuer Boroarsenate**

Boroarsenate ähneln strukturell den Silicaten, da beide Verbindungsklassen als Grundbaueinheiten TO<sub>4</sub>-Einheiten (T = B, As, Si) aufweisen. Durch die nahezu unbegrenzten Möglichkeiten durch Eckenverknüpfung aus diesen Tetraederbausteinen verschiedene strukturelle Baueinheiten zu erhalten ist eine unendlich große Variabilität dieser Verbindungsklassen denkbar. Solche Gerüstverbindungen unterschiedlicher chemischer Natur werden in vielerlei Hinsicht zur Anwendung gebracht. Man unterscheidet dabei nicht-poröse und poröse Systeme, wobei die porösen Systeme z. B. zur Gasreinigung- und -speicherung oder zur heterogenen Katalyse eingesetzt werden. Nicht-poröse Systeme können z. B. als Grundstrukturen für Lumineszenzkonversionsfarbstoffe dienen. Der Einbau von unterschiedlichen Tetraederzentren in Tetraedernetzwerkstrukturen bedingt oft die Ausbildung von Gerüsten mit modifizierten Eigenschaften, die somit besser an potentielle Anwendungen angepasst sein können. Auf dem Gebiet der Boroarsenate (T = B, As) sind erst relativ wenige Verbindungen ausreichend charakterisiert. Durch die Untersuchung der Boroarsenate soll das strukturelle Potential der Verbindungsklasse ausgelotet werden. Hierbei werden die neuen Strukturen sowohl mit Röntgen- als auch mit Neutronenbeugung untersucht, wobei gekoppelte Verfeinerungen zur genaueren Lokalisierung von Wasserstoffatomen angewendet werden. Wasserstoffatome liegen als Gerüst-OH-Gruppen oder in eingelagerten Wassermolekülen vor und können die Eigenschaften der Verbindungen einschneidend beeinflussen.

---

**Projektleiter:** Prof. Dr. Franziska Scheffler

**Projektbearbeiter:** Susan Muschalle

**Förderer:** BMWi/AIF; 01.04.2010 - 28.02.2013

### **Energieeffiziente Thermoelektrische Generatoren durch Material- und Fertigungsoptimierung**

Basierend auf dem prinzipiellen Funktionsnachweis der Herstellung thermoelektrisch aktiver Schichten aus Suspensionen, werden thermoelektrische Tapes mittels Tape casting und weiteren Druck- und Beschichtungsverfahren erzeugt. Ziel ist es eine kostengünstige Technologie für die großflächige Verarbeitung von TE-Materialien zu entwickeln.

---

**Projektleiter:** Prof. Dr. Franziska Scheffler

**Projektbearbeiter:** Dr. Alexandra Lieb

**Förderer:** Haushalt; 01.07.2010 - 30.06.2013

### **Silangestützte MOF-Schichten**

Die Substanzklasse der metall-organischen Koordinationspolymere steht momentan im Fokus vieler weltweiter Forschungsaktivitäten, hauptsächlich im Hinblick auf die Anwendbarkeit solcher Systeme bei Gasspeicherung und -separation, der Katalyse oder der Wirkstofffreisetzung (drug delivery). MOFs bestehen aus einem organischen Teil (Linker/Ligand) und Metall-Ionen oder Metalloxid-Clustern (Knoten), welche sich zu dreidimensionalen Netzwerken verbinden. Sie können sehr große (innere) Oberflächen aufweisen, die genutzt werden können. Hierbei ist besonders interessant, dass durch den modularen, hybriden Aufbau der MOFs eine einfache post-synthetische Modifizierung ermöglicht wird. Da MOFs bei der Synthese stets als feine Pulver anfallen, sind sie zumeist in ihrer as-synthesised-Form für eine industrielle Anwendung nicht geeignet. Es ist deshalb nötig die Materialien durch Trägerung oder Formgebung in eine besser verwendbare Form zu bringen. Eine Möglichkeit der Trägerung stellt die silangestützte Beschichtung von Gläsern dar, bei der das MOF-Material durch geeignete Zwischenschichten chemisch auf dem Untergrund verankert wird. Hierbei können speziell geformte Substrate zum Einsatz kommen, die nach der Beschichtung den Einsatz der MOF-Materialien in verschiedenen Reaktortypen ermöglichen.

---

**Projektleiter:** Prof. Dr. Franziska Scheffler

**Projektbearbeiter:** Susann Holze

**Förderer:** Haushalt; 01.10.2008 - 31.12.2012

### **TiO<sub>2</sub>-beschichtete Glasschäume für die Abwasserreinigung**

TiO<sub>2</sub>-Nanopartikel stellen effiziente photoaktive Katalysatoren für die Zersetzung von organischen Schadstoffen dar. Die Fixierung der Partikel auf einem zellularen (porösen), lichtdurchlässigen Festkörper könnte den technischen Einsatz dieser Materialien wesentlich vereinfachen und die Effizienz erheblich steigern. Hierzu werden polymerabgeleitete

keramische Schäume entwickelt, denen Glas als Füllstoff zugesetzt wird. Über die Variation der Ausgangsstoffe und der Prozessbedingungen können Struktur und Eigenschaften der Schaumkomposite in weiten Bereichen beeinflusst werden.

---

**Projektleiter:** Prof. Dr. Frank T. Edelmann

**Projektbearbeiter:** Ronny Syre

**Förderer:** DFG; 01.11.2011 - 31.10.2015

#### **Atomlagenabscheidung von Germanium-Antimon-Tellurid**

Germanium-Antimon-Tellurid-Schichten zeigen eine hohe, mehrere Größenordnungen betragende Änderung des Schichtwiderstands bei Übergang von der kristallinen in die amorphe Phase und umgekehrt. Diese Eigenschaft lässt sich zur nicht-flüchtigen Speicherung von Informationen benutzen. Eine mögliche bedeutende Anwendung dieser Schichten ist in den sogenannten PCRAMs (Phase Change Random Access Memory) gegeben. Im Rahmen des beantragten Vorhabens sollen dünne Schichten aus Germanium- Antimon-Tellurid ( $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ , abgekürzt: GST) mittels Atomlagenabscheidung unter Verwendung von neu für diesen Prozess zu entwickelnder Germanium-, Antimon- und Tellur- Precursoren auf Amidinat- und Guanidinatbasis niedergeschlagen und charakterisiert werden. Die Charakterisierung der hergestellten Materialien erfolgt hinsichtlich ihrer Zusammensetzung, ihrer Struktur, ihrer Morphologie und ihrer elektrischen Eigenschaften. Zur Charakterisierung des Übergangs von der amorphen zur kristallinen bzw. von der kristallinen zur amorphen Phase und des Speichereffekts sollen fein strukturierte Testbauelemente bestehend aus Metall/GST-Schicht/Metall-Widerstandsstrukturen untersucht werden.

---

**Projektleiter:** Prof. Dr. Frank T. Edelmann

**Projektbearbeiter:** Peter Dröse, Nicole Harmgarth

**Förderer:** Land (Sachsen-Anhalt); 01.07.2010 - 30.06.2015

#### **Carboranylamidinate**

Die in unserem Arbeitskreis entwickelten Carboranylamidinat-Anionen stellen ein völlig neuartiges multifunktionelles Ligandensystem dar. Im Rahmen des Projekts sollen die Ligandeneigenschaften dieser Anionen untersucht und Komplexverbindungen mit Hauptgruppenelementen, Übergangsmetallen und f-Elementen hergestellt und charakterisiert werden.

---

**Projektleiter:** Prof. Dr. Frank T. Edelmann

**Projektbearbeiter:** Girma Kibatu Berihie, Thomas Wagner, John W. Gilje (James Madison University)

**Förderer:** Haushalt; 01.04.2010 - 31.03.2014

#### **Koordinationschemie des Acrylamids und N-Pyrazolylpropanamids**

Acrylamid ist aufgrund seines Vorkommens in frittierten Lebensmitteln unter Umweltgesichtspunkten in das öffentliche Blickfeld gerückt. Dieses Projekt, angesiedelt im Bereich der bioanorganischen Chemie, soll mithelfen, die Wechselwirkung zwischen Acrylamid und biologisch relevanten Übergangsmetall-Ionen besser zu verstehen. Eine aktuelle Weiterentwicklung beinhaltet die Untersuchung der Koordinationschemie von neuartigen Liganden, die sich vom Acrylamid ableiten. Dazu gehören insbesondere das N-Pyrazolylpropanamid und das N-Triazolylpropanamid.

---

**Projektleiter:** Prof. Dr. Frank T. Edelmann

**Projektbearbeiter:** Dr. Volker Lorenz

**Kooperationen:** Astrium GmbH; Dow Olefinverbund GmbH; Dracosa AG Bitterfeld-Wolfen; Lapua GmbH, Schönebeck

**Förderer:** DFG; 01.01.2012 - 31.12.2015

#### **Metallasilsesquioxane**

Funktionalisierte Disiloxane und Silsesquioxane als Bausteine für neuartige komplexe Moleküle, Katalysatoren und Polymermaterialien auf Si-O-Basis. Im Rahmen des geplanten Forschungsvorhabens sollen monofunktionalisierte bzw. monoanionische Disiloxane und Silsesquioxane zum Aufbau komplexer Moleküle, Katalysatoren und Polymermaterialien auf Si-O-Basis verwendet werden. In einem ersten Schwerpunkt des Vorhabens soll mit Hilfe von anionischen Lithiumdisiloxandiolat-Liganden eine Klasse neuartiger f-Elementkomplexe etabliert werden, die als "anorganische Lanthanoidmetallocene" bezeichnet werden kann. Ziel dieser Untersuchungen ist die Synthese hochreaktiver Metallalkyle und -hydride auf der Basis von Siloxandiolat-Liganden. Im Zweiten Schwerpunkt spielen die monofunktionalisierten Silsesquioxanderivate ( $\text{C-C } 6 \text{ H } 11 ) 7 \text{ Si } 8 \text{ O } 12 \text{ (OH) } (3)$  und  $(\text{C}_6\text{H}_{11})_7\text{Si}_8\text{O}_{12}(\text{OLi}) (4)$  eine zentrale

Rolle- Mit ihrer Hilfe sollen neuartige, zwei- und dreidimensionale komplexe Moleküle wie z.B. Silsesquioxan-substituierte anorganische Ringe, Käfige und Dendrimere sowie Polymermaterialien aufgebaut werden. Durch Plasmabehandlung sollen Metallasilsesquioxane in neuartige poröse Materialien mit interessanten Adsorptions- und Katalysatoreigenschaften umgewandelt werden. Silsesquioxane und Metallasilsesquioxane sind technisch in vielerlei Hinsicht bedeutsam. Silsesquioxane (auch als POSS bezeichnet) dienen als Additive für neuartige Hochleistungspolymere ("nanostructured polymers"), die u.a. als hitzebeständige Polymere in der Raumfahrttechnik eingesetzt werden können. Weiterhin haben Silsesquioxane interessante Flammgeschutzeigenschaften. Metallasilsesquioxane sind interessante Homogenkatalysatoren, z.B. für Oxidationsreaktionen. Durch Pyrolyse, aber auch durch Plasmabehandlung, lassen sie sich in neuartige Heterogenkatalysatoren umwandeln.

---

**Projektleiter:** Prof. Dr. Frank T. Edelmann  
**Projektbearbeiter:** Peter Dröse, Farid Sroor  
**Förderer:** Land (Sachsen-Anhalt); 01.07.2010 - 30.06.2014

#### **Organometall- und Koordinationsverbindungen Cers und Europiums**

Das Projekt beinhaltet die Synthese und Strukturaufklärung neuartiger Organometall- und Koordinationsverbindungen des Cers. Ein weiteres wichtiges Ziel des Projekts ist die Weiterentwicklung der Koordinationschemie von Cer(IV) im Hinblick auf mögliche katalytische Anwendungen. Weiterhin sollen neuartige Komplexverbindungen des Europiums synthetisiert und auf ihre Lumineszenzeigenschaften hin untersucht werden.

---

**Projektleiter:** Prof. Dr. Frank T. Edelmann  
**Projektbearbeiter:** Raik Deblitz, Gesine Stock  
**Förderer:** Haushalt; 01.01.2010 - 31.12.2014

#### **Stickstoffreiche energetische Verbindungen**

Das Projekt beinhaltet die Entwicklung und Erprobung stickstoffreicher energetischer Verbindungen für die Pyrotechnik sowie für Zündsätze in Kleinkalibermunition. Von besonderem Interesse sind dabei neuartige umweltfreundliche (weil schwermetallfreie) stickstoffreiche Verbindungen.

---

**Projektleiter:** Prof. Dr. Frank T. Edelmann  
**Projektbearbeiter:** Farid Sroor  
**Förderer:** DAAD; 01.04.2011 - 31.10.2014

#### **Synthese von Cerdioxid-Nanopartikeln in Ionischen Flüssigkeiten**

Ziele des Projekts ist die Synthese und Charakterisierung von Cerdioxid-Nanopartikeln in ionischen Flüssigkeiten als Reaktionsmedium. Als Ausgangsmaterialien sollen neuartige Cer(IV)-Komplexes mit Amidinat- und Disiloxandiolat-Liganden verwendet werden.

---

**Projektleiter:** Prof. Dr. Helmut Weiß  
**Förderer:** DFG; 01.07.2009 - 31.12.2013

#### **Aufklärung der Struktur und Absolutbedeckung des Adsorbates Wasser auf definierten NaCl(100)-Einkristallflächen**

Das Adsorptionssystem Wasser auf definierten NaCl(100)-Einkristallflächen ist aufgrund seiner Relevanz für verschiedenste Bereiche experimentell wie auch theoretisch wiederholt untersucht worden. Für die gesättigte erste Lage wurden zwei verschiedene Strukturen beobachtet eine (1x1)- und eine c(4x2)-Struktur. Es konnte gezeigt werden, dass erstgenannte erst durch Elektro-neneinfluss (z.B. bei Beugung langsamer Elektronen, LEED) irreversibel in die c(4x2)-Struktur umgewandelt wird. Der Mechanismus ist nicht verstanden, kann aber von großer Bedeutung auch für andere Systeme sein, da LEED eine elementare Untersuchungsmethode zur Strukturaufklärung ist. Unklarheit herrscht auch über den Bedeckungsgrad; hier wurden für die erste Lage Wasser zwischen 0,5 und 3 Moleküle je NaCl(100)-Elementarzelle vorgeschlagen. Theoretische Untersuchungen trugen bislang wenig zur Klärung bei. Das vorliegende Projekt soll jetzt, durch Bündelung von LEED (mit I(V)-Analyse) u.a. mit Helium-Atomstrahlstreuung, Infrarot-spektroskopie und Röntgen-Photoelektronenspektroskopie, einen unter vergleichbaren Bedingungen gewonnenen, konsistenten Datensatz für die erste Wasserlage auf NaCl(100)-Einkristallflächen liefern, die Absolutbedeckung und Struktur klären, sowie den Mechanismus der elektroneninduzierten Strukturumwandlung aufdecken.

---

**Projektleiter:** Prof. Dr. Helmut Weiß

**Projektbearbeiter:** Dr. Jochen Vogt, Dipl.-Phys. Stephan Härtel

**Förderer:** Haushalt; 01.03.2008 - 28.02.2012

**Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie an Physisorbaten auf wohldefinierten Isolator-Einkristalloberflächen**

Im Rahmen des Projektes wird auch weiterhin die Adsorption verschiedener kleiner Moleküle wie CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O und anderen an definierten, gespaltenen Isolator-Einkristallflächen untersucht. Diese Systeme sind einerseits für das grundlegende Verständnis der Physisorption, darüber hinaus aber auch für Bereiche wie Atmosphärenchemie oder Geochemie bis hin zur Astrophysik interessant. Infrarotspektren werden hierbei mit polarisiertem Licht als Funktion von Belegung, Druck und Temperatur gemessen; hieraus ergeben sich Informationen z.B. über die "Störung" der Moleküle durch die Wechselwirkung mit dem Substrat, die Zahl der Moleküle pro Elementarzelle in geordneten Systemen, die Homogenität der Adsorbate, Adsorptionsgeometrien, die Ausbildung zweidimensionaler Strukturen, Adsorptionsisothermen und Adsorptionswärmen, und anderes mehr. Die Messungen werden teilweise komplementiert durch LEED-Untersuchungen.

---

**Projektleiter:** Prof. Dr. Helmut Weiß

**Projektbearbeiter:** Dr. Jochen Vogt, Dipl.-Phys. Stephan Härtel

**Förderer:** Haushalt; 01.01.2010 - 31.12.2014

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

Ziel des Projektes, das jetzt bereits seit mehreren Jahren (weiter)geführt wird, 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:** Dipl.-Phys. Birgit Vogt

**Förderer:** Haushalt; 01.03.2010 - 28.02.2013

**Raster-Tunnel- und Raster-Kraftmikroskopie an wohldefinierten Oberflächen**

Im Rahmen des haushaltsfinanzierten Projektes werden Untersuchungen an wohldefinierten Einkristalloberflächen mittels eines VT STM/AFM durchgeführt. Zunächst ist hierfür die Inbetriebnahme des Gerätes und die routinemäßige Erlangung atomarer Auflösung erforderlich. Abhängig vom Fortschritt sind dann Untersuchungen an anderen für den Haupt-Forschungsgebiet des Arbeitskreises (Adsorption insbesondere an definierten Isolaturoberflächen) geplant.

---

**Projektleiter:** Jun. Prof. Dr. Edgar Haak

**Förderer:** Sonstige; 01.04.2011 - 31.03.2014

**Organometallkatalyse mit redox-gekoppelten Ligandensystemen**

Flexible Methoden zur Darstellung komplexer Strukturen aus einfachen und leicht zugänglichen Edukten sind von großem Interesse. Unser Forschungsschwerpunkt liegt auf der Entwicklung neuer Übergangsmetall-katalysierter Transformationen, die atomökonomische Zugänge zu komplexen biologisch relevanten Substanzklassen eröffnen. Ein auf mechanistischen Untersuchungen basierendes rationales Katalysator- und Verfahrens-Design sowie sequentiell katalysierte Domino-Prozesse sind dabei von wesentlicher Bedeutung. Die Demonstration des Potentials der entwickelten katalytischen Verfahren erfolgt im Rahmen der Naturstoffsynthese und der flexiblen Darstellung diverser Naturstoffanaloga. Als Katalysatoren dienen Übergangsmetall-Komplexe redox-gekoppelter Ligandensysteme, vorrangig funktionalisierte Ruthenium-Cyclopentadienon-Derivate. Aufgrund der elektronischen Kopplung des Dienon-Liganden und seiner basischen Koordinationsstelle bieten solche Komplexe außergewöhnliche Optionen hinsichtlich katalytischer Transformationen bifunktioneller Substrate wie den einfach sowie in großer Breite zugänglichen Propargyl- und Allylalkoholen. Zudem können elektronische, sterische und stereochemische Aspekte über die Substituenten des Dienon-Ligandensystems gesteuert werden.

**Projektleiter:** Dr. habil. Jochen Vogt

**Förderer:** Haushalt; 03.03.2009 - 03.03.2013

### **Numerische Analyse molekularer Strukturen auf Isolatoreinkristalloberflächen**

Die Kenntnis der Wechselwirkungsmechanismen molekularer Strukturen auf Isolatoroberflächen ist im Zusammenhang mit Fragestellungen z. B. in der Geologie oder in der Klimaforschung von erheblichem Interesse. Als Beispiel sei hier das System Wasser/NaCl genannt. Die technologische Bedeutung von Isolatoroberflächen als Trägermaterialien für Schichten funktionaler Moleküle wird darüberhinaus zunehmend erkannt.

Ziel des Projekts ist einerseits die Simulation solcher Strukturen mit Hilfe von quantenchemischen und molekuldynamischen Methoden. Darüberhinaus erfordert die experimentelle Untersuchung von Filmstrukturen mit Hilfe der Beugung langsamer Elektronen (LEED, DLEED) eine nachgeschaltete numerische Auswertung, deren Aufwand z. B. im Falle von Defektstrukturen erheblich ist. Vorhandene Computerprogramme der sogenannten I(V)-Analyse sollen hierzu für den Einsatz auf Großrechnern parallelisiert werden.

## **6. Eigene Kongresse, wissenschaftliche Tagungen und Exponate auf Messen**

Die 24. Deutsche Zeolith-Tagung fand gemeinsam mit dem Jahrestreffen der Fachgruppe Adsorption in der Zeit vom 7. bis 9. März 2012 an der Otto-von-Guericke-Universität in Magdeburg statt. Sie wurde vom Chemischen Institut unter Mitwirkung der beiden ProcessNet-Fachgruppen Zeolithe und Adsorption ausgerichtet. An der Tagung nahmen mehr 300 Wissenschaftler aus dem In- und Ausland teil.

Organisation: Prof. Dr. Franziska Scheffler, Lehrstuhl für Technische Chemie, Otto-von-Guericke-Universität, Magdeburg und Prof. Dr. Dieter Bathen, Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik, Universität Duisburg-Essen

## **7. Veröffentlichungen**

### **Begutachtete Zeitschriftenaufsätze**

**Deblitz, Raik; Hrib, Cristian G.; Plenikowski, Georg; Edelmann, Frank T.**

Synthesis and supramolecular structure of  $[\text{Me}_3\text{Sn}(\text{my})\text{-C}_2\text{N}_{10}\text{SnMe}_3(\text{H}_2\text{O})]_n$ , the first metal-organic azotetrazolate  
In: Inorganic chemistry communications. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 18.2012, S. 57-60; ... [weitere Infos](#); 2012  
[Imp.fact.: 1,972]

**Deblitz, Raik; Hrib, Cristian; Plenikowski, Georg; Edelmann, Frank T.**

Molecular and crystal structure of a new high energy density material - Aminoguanidinium-styphnate,  $[\text{H}_2\text{NNHC}(\text{NH}_2)_2]_2[\text{C}_6\text{HO}_2(\text{NO}_2)_3]$   
In: Crystals. - Basel: MDPI, Bd. 2.2012, 1, insges. 8 S.; ... [weitere Infos](#); 2012

**Edelmann, Frank T.**

Lanthanide amidinates and guanidates in catalysis and materials science - a continuing success story  
In: Chemical Society reviews. - London: Soc, Bd. 41.2012, 23, S. 7657-7672; ... [weitere Infos](#); 2012  
[Imp.fact.: 28,760]

**Edelmann, Frank T.**

Lanthanides and actinides - annual survey of their organometallic chemistry covering the year 2009  
In: Coordination chemistry reviews. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 256.2012, 11/12, S. 1151-1228;  
... [weitere Infos](#); 2012  
[Imp.fact.: 12,744]

**Edelmann, Frank T.**

Lanthanides and actinides - annual survey of their organometallic chemistry covering the year 2010  
In: Coordination chemistry reviews. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 256.2012, 23/24, S. 2641-2740;  
... [weitere Infos](#); 2012  
[Imp.fact.: 12,110]

**Jonek, Anita; Berger, Stefanie; Haak, Edgar**

Ruthenium-catalyzed allylation-cyclization reactions of cyclic 1,3-dicarbonyl compounds with 1-vinyl propargyl alcohols  
In: Chemistry. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 18.2012, 42, insges. 44 S.; ... [weitere Infos](#); 2012  
[Imp.fact.: 5,925]

**Kostenko, Nataliya; Goodfriedsen, Jochen; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.**

A synthetic route to quaternary pyridinium salt-functionalized silsesquioxanes  
In: International journal of polymer science. - New York, NY: Hindawi, Bd. 2012.2012, insges. 9 S.; ... [weitere Infos](#); 2012

**Leutritz, Tobias; Hilfert, Liane; Smalla, Karl-Heinz; Speck, Oliver; Zhong, Kai**

Accurate quantification of watermacromolecule exchange induced frequency shift - effects of reference substance  
In: Magnetic resonance in medicine. - New York, NY [u.a.]: Wiley-Liss, 2012; ... [weitere Infos](#); 2012  
[Imp.fact.: 2,964]

**Prinz, Jan; Gaspari, Roberto; Pignedoli, Carlo A.; Vogt, Jochen; Gille, Peter; Armbrüster, Marc; Brune, Harald; Gröning, Oliver; Passerone, Daniele; Widmer, Roland**

Isolated Pd sites on the intermetallic PdGa(111) and PdGa(-1-1-1) model catalyst surfaces  
In: Angewandte Chemie. - Weinheim: Wiley-VCHAngewandte Chemie / International edition, Bd. 51.2012, 37, S. 9339-9343; ... [weitere Infos](#); 2012  
[Imp.fact.: 13,455]

**Thies, Nora; Hrib, Cristian G.; Haak, Edgar**

Ruthenium-catalyzed functionalization of pyrroles and indoles with propargyl alcohols  
In: Chemistry. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 18.2012, 20, S. 6302-6308; ... [weitere Infos](#); 2012  
[Imp.fact.: 5,476]

**Vogt, Jochen**

The structure of N<sub>2</sub> adsorbed on the rumpled NaCl(100) surface: a combined LEED and DFT-D study  
In: The journal of chemical physics. - Melville, NY: American Institute of Physics, Bd. 137.2012, 17, insges. 8 S.; ... [weitere Infos](#); 2012  
[Imp.fact.: 3,333]

**Wagner, Thomas; Hrib, Cristian G.; Lorenz, Volker; Edelmann, Frank T.; Amenta, Donna S.; Burnside, Christopher J.; Gilje, John W.**

N-Pyrazolylpropanamide - a versatile ligand for the construction of supramolecular hydrogen-bonded frameworks  
In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 638.2012, 12/13, S. 2129-2137; ... [weitere Infos](#); 2012  
[Imp.fact.: 1,249]

**Wagner, Thomas; Hrib, Cristian G.; Lorenz, Volker; Edelmann, Frank T.; Gilje, John W.**

Bromidobis[3-(1H-pyrazol-1-yl-[kappa]N<sub>2</sub>)propionamide-[kappa]O]copper(II) bromide methanol monosolvate  
In: Acta crystallographica. - Copenhagen: MunksgaardActa crystallographica / E, Bd. 68.2012, 10, S. 1253-1254; ... [weitere Infos](#); 2012  
[Imp.fact.: 0,347]

**Wagner, Thomas; Hrib, Cristian G.; Lorenz, Volker; Edelmann, Frank T.; Zhang, Jianfeng; Yi, Qiaohua**

N-triazolylpropanamide - an acrylamide-derived multifunctional ligand for the construction of supramolecular hydrogen-bonded networks  
In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 638.2012, 14, S. 2185-2188; ... [weitere Infos](#); 2012  
[Imp.fact.: 1,249]

## **Dissertationen**

**Belayneh, Kumeneger Debalike; Schinzer, Dieter [Gutachter]; Haak, Edgar [Gutachter]**

Progress towards the total synthesis of sorangicin. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss.,



2012; IX, 144 S.: graph. Darst.; 2012

**Ivanov, Ivan; Schinzer, Dieter [Gutachter]; Sundmacher, Kai [Gutachter]**

Development of a glucose-oxygen enzymatic fuel cell. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; IX, 118 S.: graph. Darst.; 2012

**Seebach, Axel; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]; Scheffler, Franziska [Gutachter]**

Enantiomerentrennung mit molekular geprägten, monolithischen Polymerphasen. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2011; Barleben: docupoint Verl., 2012; XII, 183 S.: graph. Darst.; 21 cm, ISBN 978-3-86912-069-0; 2012