

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

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. Kooperationen

- Bayerisches Zentrum für Angewandte Energieforschung e.V. Würzburg
- CeramTec GmbH, Plochingen
- Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR)
- Dr. Wolf von Tümping, Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ), Magdeburg
- Evonik GmbH & Co KG, Stuttgart
- Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
- Leoni Bordnetze-Systeme GmbH, Kitzingen
- Prof. Dr. Norbert Stock, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Prof. Dr. Wolfgang Grünert, Ruhr-Universität Bochum
- Stiebel Eltron GmbH & Co KG, Holzminden

6. Forschungsprojekte

Projektleiter: Prof. Dr. Franziska Scheffler

Projektbearbeiter: Susan Muschalle

Förderer: BMWi/AIF; 01.04.2010 - 30.09.2014

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: Benjamin Knauff, Michael Seeger

Kooperationen: Verein zur Förderung erneuerbarer Energien im Jerichower Land (VEE)

Förderer: Sonstige; 01.03.2013 - 30.06.2014

Masterplan zur autarken Energieversorgung der Gemeinde Biederitz

Die Gemeinde Biederitz hat sich zum Ziel gesetzt, bis zum 31.12.2022, den gesamten Energiebedarf durch regional erzeugte Energie aus erneuerbaren Energiequellen zu decken. Um die entsprechenden Voraussetzungen zu schaffen, arbeiten die Gemeinde, der Verein zur Förderung erneuerbarer Energien im Jerichower Land (VEE) und die Otto-von-Guericke-Universität in einem gemeinsamen Projekt zusammen. Inhalt des Projektes ist die Entwicklung eines Masterplans für die Umsetzung des Ziels der Gemeinde Biederitz, bis zum 31.12.2022 die autarke Versorgung mit erneuerbaren Energien umzusetzen.

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; 01.10.2011 - 31.12.2014

TiO₂-beschichtete Glasschäume für die Abwasserreinigung

TiO₂-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. 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 Strukturauflösung 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; 01.01.2010 - 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 Isolatoroberflächen) geplant.

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: Nicole Harmgarth, Philipp Hillebrand, Peter Dröse

Förderer: Land (Sachsen-Anhalt); 01.07.2011 - 30.06.2016

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: Dr. Volker Lorenz, Janek Rausch

Förderer: DFG; 01.05.2011 - 30.04.2016

Heterobimetallische Disiloxandiolate und Metallsilsesquioxane der Lanthanoide - Neuartige Metallakronen und Clustermoleküle

Für den zweiten Antragszeitraum des laufenden Forschungsvorhabens ist geplant, die mit Hilfe von anioni-schen Lithiumdisiloxandiolat-Liganden und Silsesquioxanderivaten erschlossene Klasse neu-artiger Organolanthanoidkatalysatoren auszuweiten. Hauptziel dieser Untersuchungen ist, diese Verbindungen, die als "anorganische Lanthanoidmetallocene" bezeichnet werden können, als Ausgangspunkt für die Synthese und strukturelle Charakterisierung hochreaktiver Metallalkyle und -hydride auf der Basis von Lithiumdisiloxandiolat- und Silsesquioxanliganden zu nutzen. Ein weiterer Schwerpunkt ist die Untersuchung der Reaktivität (Katalyse) und des Synthesepotentials der dargestellten Disiloxandiolat- und Silsesquioxan-komplexe. Weitere Teilziele umfassen die Synthese neuartiger heterobimetallischer Lanthanoidkomplexe mit Si-O-Liganden sowie die Darstellung von Disiloxandiolat- und Silsesquioxan-Komplexen zweiwertiger Lanthanoide.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Girma Kibatu Berihie, Thomas Wagner, Sida Wang, Xi Yang, John W. Gilje (James Madison University)

Förderer: Haushalt; 01.04.2011 - 31.03.2015

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, sowie das Benzotriazolylpropanamid.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Dr. Volker Lorenz
Kooperationen: Lapua GmbH, Schönebeck
Förderer: DFG; 01.01.2012 - 31.12.2016

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 (c-C 6 H 11) 7 Si 8 O 12 (OH) (3) und (C6H11)7Si8O12(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 Flammseigenschaften. 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: Dr. Volker Lorenz, Janek Rausch
Förderer: DFG; 01.06.2011 - 31.05.2015

Multidecker-Sandwich-Komplexe der Lanthanoide

Im Rahmen des geplanten Forschungsvorhabens soll die bislang kaum bekannte Chemie des Cerocens und seiner Derivate erforscht werden. Hauptziel dieser Untersuchungen ist die Synthese und strukturelle Charakterisierung neuartiger Organolanthanoidverbindungen, wie beispielsweise Tetradecker-Sandwichkomplexe. Weitere Aspekte des Forschungsvorhabens beinhalten Versuche zur Synthese von Cerocenanalogen anderer Lanthanoidelemente sowie der ersten Halbsandwich-Komplexe mit formal vierwertigem Cer.

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: Peter Dröse, Nicole Harmgath, Janek Rausch
Förderer: DFG; 01.10.2011 - 30.09.2016

Phenyljodchlorid - Ein innovatives Reagens zur Synthese von Cer(IV)-Verbindungen

Im Rahmen eigener Vorarbeiten konnte kürzlich gezeigt werden, dass das leicht zugängliche Phenyljodchlorid, PhICl₂, ein innovatives Reagens in der Lanthanoidchemie darstellt und insbesondere für die Synthese von funktionalisierbaren Komplexverbindungen der vierwertigen Cers geeignet ist. Das bekannte Cer(IV)amid Im Rahmen eigener Vorarbeiten konnte kürzlich gezeigt werden, dass das leicht zugängliche Phenyljodchlorid, PhICl₂, ein innovatives Reagens in der Lanthanoidchemie darstellt und insbesondere für die Synthese von funktionalisierbaren Komplexverbindungen der vierwertigen Cers geeignet ist. Das bekannte Cer(IV)amid [(Me₃Si)₂N]₃CeCl sowie das neuartige Cer(IV)amidinat 3CeCl konnten unter Verwendung von PhICl₂ leicht und mit guten Ausbeuten synthetisiert werden. Im Rahmen des geplanten Forschungsvorhabens soll zunächst die neuartige Substanzklasse der Cer(IV)amidinate eingehend erforscht und

strukturell charakterisiert werden. Gegebenenfalls sollen auch ringsubstituierte Derivate des Phenylioddichlorids zum Einsatz kommen. Ausgehend von den Cl-funktionalisierten Cer(IV)amidinen soll versucht werden, erstmals Organocer(IV)-Verbindungen mit -Alkyl-Liganden zu synthetisieren. Dieses Ziel könnte durch Verwendung nicht-reduzierender Alkylierungsmittel wie $ZnMe_2$ oder $SnMe_4$ erreicht werden. Im weiteren Verlauf des geplanten Forschungsvorhabens soll versucht werden, mit Hilfe des Phenylioddichlorids neuartige Organocer(IV)-Komplexe mit Cyclopentadienyl- oder Cyclooctatetraenyl-Liganden zu erschließen.

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

Stickstofffreie 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: 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 bifunktionaler 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 Isolatoreinkristallobereflächen

Die Kenntnis der Wechselwirkungsmechanismen molekularer Strukturen auf Isolatoreoberflächen 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 Isolatoreoberflächen 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.

Projektleiter: Dr. habil. Jochen Vogt

Förderer: Haushalt; 04.03.2013 - 03.03.2016

Numerische Analyse molekularer Strukturen auf Oberflächen

Die Kenntnis der Wechselwirkungsmechanismen molekularer Strukturen auf Oberflächen ist im Zusammenhang mit einer Vielzahl von Fragestellungen von fundamentalem Interesse.

Ziel des Projekts ist die Fortführung der 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. Ziel des Projekts ist einerseits die Durchführung von Oberflächenstrukturanalysen mit existierenden Computercodes. Darüberhinaus wird die begonnene Erforschung und der Test neuer numerischer Methoden zur Strukturanalyse auf Grundlage von LEED-Experimenten fortgeführt.

Projektleiter: Dr. Alexandra Lieb

Projektbearbeiter: Dr. Ulf Betke

Förderer: Bund; 01.06.2013 - 31.05.2016

Neuartige Kompositwerkstoffe für die thermochemische Energiespeicherung, NEOTHERM

In der interdisziplinären Nachwuchsforschergruppe "Neuartige Kompositwerkstoffe für die thermochemische Energiespeicherung" (NEOTHERM) sollen mikro-makro-poröse Kompositmaterialien für die thermochemische Energiespeicherung entwickelt, charakterisiert und bewertet werden. Ziel ist es, Sorptionsmaterialien für das Sorbat Wasser mit hoher Speicherdichte, effektivem Wärmeübergang und applikationsangepasster Sorptionstemperatur ($\gg 20-500\text{ }^{\circ}\text{C}$) und geeignetem Temperaturhub sowohl für die Speicherung solarer Wärme als auch für die Energierückgewinnung aus technischen Prozessen bereitzustellen. Dazu sollen zelluläre Werkstoffe als Trägermaterialien entwickelt und bezüglich ihrer chemischen, morphologischen und thermischen Eigenschaften optimiert werden. Parallel dazu sollen als Aktivkomponente der Wärmespeicherung mikroporöse kristalline Verbindungen (*metal organic frameworks* = MOFs und Zeolithe) entwickelt und/oder modifiziert und auf dem Träger fixiert werden, z.B. mittels *in-situ*-Kristallisation oder Träger-Linker-Reaktion. Innerhalb der Nachwuchsgruppe sollen folgende Aspekte der neuen Werkstoffverbände bearbeitet werden: (1) Synthese neuer bzw. modifizierter mikroporöser Materialien (Aktivkomponente), (2) Entwicklung von Herstellungsverfahren für makroporöse monolithische Materialien mit variierbaren oberflächenchemischen und thermischen Eigenschaften und gezielt eingestellter, offener Porosität (Träger), (3) Beschichtung/Oberflächenmodifizierung von offenzelligen Schäumen zur Einstellung der Sorptionseigenschaften des Verbundmaterials, (4) Steuerung von Ad- und Desorptionsvorgängen in porösen Festkörpern durch Steuerung der Porengröße und -form, (5) Evaluierung des Langzeitverhaltens der Wärmespeichermaterialien. Die Entwicklung der neuartigen Materialien erfolgt von Beginn an mit Blick auf den technischen Einsatz bezüglich der Arbeitstemperatur, des Lade-/Entladeverhaltens, der Langzeitstabilität, der Speicherdichte, und der Kosten und Sicherheit.

7. Eigene Kongresse, wissenschaftliche Tagungen und Exponate auf Messen

8. Veröffentlichungen

Begutachtete Zeitschriftenaufsätze

Alvarado Perea, L.; Wolff, T.; Veit, Peter; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.; Hamel, Christof; Seidel-Morgenstern, Andreas

Alumino-mesostructured Ni catalysts for the direct conversion of ethene to propene

In: Journal of catalysis. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 305.2013, S. 154-168;

Betke, Ulf; Wickleder, Mathias S.

Sulfates of the refractory metals - crystal structure and thermal behavior of Nb₂O₂(SO₄)₃, MoO₂(SO₄), WO(SO₄)₂, and Two Modifications of Re₂O₅(SO₄)

In: Inorganic chemistry. - Washington, DC: American Chemical Society, Bd. 50.2011, 3, S. 858-872, 2013;

Edelmann, Anja; Lorenz, Volker; Hirb, Christian G.; Hilfert, Liane; Blaurock, Steffen; Edelmann, Frank T.

Steric effects in lanthanide sandwich complexes containing bulky cyclooctatetraenyl ligands

In: Organometallics. - Washington, DC: ACS Publ, Bd. 32.2013, 5, S. 1435-1444;

Edelmann, Frank T.

Carboranylamidinates

In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 639.2013, 5, S. 655-667;

Edelmann, Frank T.

Lanthanides and actinides - annual survey of their organometallic chemistry covering the year 2011

In: Coordination chemistry reviews. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 257.2013, 7/8, S. 1122-1231;

Edelmann, Frank T.

Recent progress in the chemistry of metal amidinates and guanidinates - syntheses, catalysis and materials

In: Advances in organometallic chemistry. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 61.2013, S. 55-374;

Ehle, Sophie; Brüser, Volker; Lorenz, Volker; Hrib, Cristian G.; Saulich, Katja; Müller, Siegfried; Quade, Antje; Edelmann, Frank T.

Linear heterometallic Co₃Li₂ and Co₄Li₂ siloxides - precursors for the plasma synthesis of adsorbent materials

In: European journal of inorganic chemistry. - Weinheim: Wiley-VCH, 9, S. 1451-1457, 2013;

Feyand, Mark; Seidler, Christopher F.; Deiter, Carsten; Rothkirch, Andre; Lieb, Alexandra; Wark, Michael; Stock, Norbert

High-throughput microwave-assisted discovery of new metal phosphonates

In: Dalton transactions. - London: Soc, Bd. 24.2013, 42, S. 8761-8770;

Flohé, Leopold

The fairytale of the GSSG/GSH redox potential

In: Biochimica et biophysica acta. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 1830.2013, 5, S. 3139-3142;

Hrib, Christian G.; Edelmann, Frank T.; Smith, Charles W.; McQueen, Kent C.; Cruz, Santana S.; Amenta, Donna S.; Gilje, John W.

RuCl₂(PPh₃)₂(N-ppa) - A Hydrogen-Bridged Ruthenium(II) Complex of N-Pyrazolylpropanamide

In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 639.2013, 14, S. 2561-2564;

Krasnopolski, Michael; Hrib, Cristian G.; Seidel, Rüdiger W.; Winter, Manuela; Becker, Hans-Werner; Rogalla, Detlef; Fischer, Roland A.; Edelmann, Frank T.; Devi, Anjana

Homoleptic gadolinium amidinates as precursors for MOCVD of oriented gadolinium nitride (GdN) thin films

In: Inorganic chemistry. - Washington, DC: American Chemical Society, Bd. 52.2013, 1, S. 286-296;

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

Accurate quantification of water-macromolecule exchange induced frequency shift - effects of reference substance

In: Magnetic resonance in medicine. - New York, NY [u.a.]: Wiley-Liss, Bd. 69.2013, 1, S. 263-268;

Lorenz, Volker; Hrib, Christian G.; Grote, Dirk; Hilfert, Liane; Krasnopolski, Michael; Edelmann, Frank T.

Diazadiene complexes of the heavy alkaline-earth metals strontium and barium - structures and reactivity

In: Organometallics. - Washington, DC: ACS Publ, Bd. 32.2013, 16, S. 4636-4642;

Sroor, Farid M. A.; Hrib, Christian G.; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.

Lithium-cyclopropylethynylamidinates

In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 639.2013, 14, S. 2390-2394;

Syre, Ronny; Frenzel, Nancy; Hrib, Cristian G.; Burte, Edmund P.; Jones, Peter G.; Edelmann, Frank T.

Di- μ -oxido-bis[bis(diisopropylacetamidinato)- κ N; κ]2N,N'-germanium(IV)]

In: Acta crystallographica. - Copenhagen: MunksgaardActa crystallographica / E, Bd. 69.2013, 12, S. 686-687;

Thies, Nora; Gerlach, Martin; Haak, Edgar

Ruthenium-catalyzed synthesis of highly substituted pyrroles from 1-vinylpropargyl alcohols and amines

In: European journal of organic chemistry. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, 2013;

Buchbeiträge

Sroor, Farid; Edelmann, Frank T.

Tetravalent cerium chemistry

In: Cerium. - Hauppauge, N.Y: Nova Science Publisher's, Inc, 2013;

Sroor, Farid; Edelmann, Frank T.

Tetravalent chemistry - organometallic

In: The rare earth elements. - Chichester: Wiley, insges. 19 S., 2013;

Dissertationen

Dimitrova, Nadya Radeva; Schinzer, Dieter [Gutachter]; Haak, Edgar [Gutachter]

Untersuchungen zur Charakterisierung ausgewählter pflanzlicher Inhaltsstoffe aus Pflanzen der Gattung Allium.

- Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2013; 147 S.: graph. Darst.;

Reso, Denis; Burte, Edmund P. [Gutachter]; Edelmann, Frank T. [Gutachter]

Chemische Gasphasenabscheidung von Germanium-Chalkogen-Verbindungen für die Verwendung in nichtflüchtigen Festkörperspeichern. - Magdeburg, Univ., Fak. für Elektrotechnik und Informationstechnik, Diss., 2013; VII, 175 S.: Ill., graph. Darst.;

Stoltenberg, Daniel

Oberflächenmodifikation von porösen Gläsern zur Trennung von Gemischen ähnlicher Gase durch Membranverfahren und Adsorption. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik., Diss., 2013; Köln: Kölner Wiss.-Verl.; XXIV, 155 S.: Ill., graph. Darst.; 21 cm, ISBN 9783942720373;

Walter, Mario; Schinzer, Dieter [Gutachter]

Studien zur Synthese des 2,3,4,6-tetrasubstituierten Tetrahydropyran-Fragments von Sorangicin A. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2013; 138 S.: graph. Darst.;