



FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS-  
UND SYSTEMTECHNIK

# Forschungsbericht 2014

Institut für Chemie

# 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
- Metallorganische Gerüstverbindungen (MOFs)
- 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-Tiefemperaturadsorption

Sorptionsmessungen mit CO<sub>2</sub>, Wasser etc.

Quecksilberporosimetrie

Rheologische Messungen

Katalysortestung

### **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 Tümpling, 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 Knauft, Michael Seeger

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

**Förderer:** Fördergeber; 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:** Susann Holze

**Förderer:** Haushalt; 01.10.2011 - 31.12.2014

### **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. Helmut Weiß

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.07.2009 - 30.06.2014

### **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; 01.01.2010 - 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 umfangliche 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. Frank T. Edelmann

**Projektbearbeiter:** Ronny Syre

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.11.2012 - 31.10.2016

**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:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (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 anionischen 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 Berihe, Thomas Wagner, Sida Wang, John W. Gilje (James Madison University)

**Förderer:** Haushalt; 01.04.2012 - 31.03.2016

#### **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:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (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 ( $C_6H_{11}Si_8O_{12}(OH)_3$ ) (3) und  $(C_6H_{11})_7Si_8O_{12}(OLi)$  (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 Flammenschutzigenschaften. 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:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.06.2012 - 31.05.2016

#### **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:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (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, PhICl<sub>2</sub>, 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, PhICl<sub>2</sub>, 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 [(Me<sub>3</sub>Si)<sub>2</sub>N]<sub>3</sub>CeCl sowie das neuartige Cer(IV)amidinat 3CeCl konnten unter Verwendung von PhICl<sub>2</sub> 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 Phenyljodchlorids 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<sub>2</sub> oder SnMe<sub>4</sub> erreicht werden. Im weiteren Verlauf des geplanten Forschungsvorhabens soll versucht werden, mit Hilfe des Phenyljodchlorids neuartige Organocer(IV)-Komplexe mit Cyclopentadienyl- oder Cyclooctatetraenyl-Liganden zu erschließen.

---

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

**Projektbearbeiter:** Raik Deblitz, Gesine Stock

**Förderer:** Haushalt; 01.01.2012 - 31.12.2016

**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:** Deutscher Akademischer Austauschdienst e.V. (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:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.12.2014 - 30.11.2017

**Kaskadentransformationen ungesättigter Alkohole mit bifunktionellen Rutheniumkatalysatoren**

Der Entwicklung neuer katalytischer Methoden zur atomökonomischen Darstellung komplexer Verbindungsklassen aus strukturell einfachen, ungesättigten Alkoholen ist das wesentliche Projektziel. Die Schwerpunkte liegen auf dem rationalen Katalysatordesign unter gezielter Nutzung kooperativer Effekte sowie auf sequentiell katalysierten Reaktionskaskaden. Die hinsichtlich ihrer katalytischen Eigenschaften besonders vielseitigen Übergangsmetallkomplexe redoxaktiver Cyclopentadienon-Liganden stehen im Zentrum der Untersuchungen. Sie katalysieren unterschiedlichste chemo- und regioselektive Transformationen bifunktioneller Substrate und bieten vielfältige

Manipulationsmöglichkeiten. Die Basis der zu entwickelnden Kaskadentransformationen bilden rutheniumkatalysierte Allylierungs-Cycloisomerisierungs-Reaktionen tertiärer 1-Vinylpropargylalkohole. Die Anwendung der Verfahren erfolgt im Rahmen der Synthese diverser polycyclischer Grundkörper und Alkaloide. Im Hinblick auf zukünftige Anwendungen im Bereich der Natur- und Wirkstoffsynthese werden Optionen zur asymmetrisch-katalytischen Reaktionsführung unter Verwendung axial-chiraler Vertreter der Komplexserien und sequentiell katalysierte Domino-Prozesse überprüft. Neben der produktorientierten Katalyseforschung erfolgen metallorganische Studien zur Aufklärung der Reaktionsmechanismen. Dabei liegt der Schwerpunkt auf der Isolierung und Charakterisierung zentraler metallorganischer Intermediate der Katalysezyklen sowie auf Markierungsexperimenten. Letztendlich sollen die Verfahren maximale Diversität, Flexibilität, Selektivität, Atom- und Stufenökonomie ermöglichen und mechanistisch zweifelsfrei verstanden werden um einen nachhaltigen Beitrag zur weiteren Entwicklung der präparativen Organischen Chemie leisten zu können.

---

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

**Förderer:** Fördergeber; 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; 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. habil. Jochen Vogt

**Förderer:** Haushalt; 01.07.2014 - 28.06.2016

#### **LEED it! Image tool zur quantitativen Auswertung von Beugungsbildern**

Beugung langsamer Elektronen (LEED) gehört zu den Schlüsselexperimenten der *Surface Science*. LEED ermöglicht die Bestimmung der Struktur von Oberflächen auf der atomaren Größenskala. Der erste Schritt hierzu ist die quantitative Auswertung von Beugungsbildern. Vorhandene Programme sind nur kommerziell erhältlich und/oder die genauen Analysealgorithmen sind nicht hinreichend genau beschrieben. Im Rahmen des Projekts wird basierend auf der Programmiersprache C/C++ ein Software-Werkzeug entwickelt, mit dessen Hilfe Beugungsbilder in vielen gängigen Bildformaten analysiert werden können. Weitere spezielle Eigenschaften sind die Verfügbarkeit auf mehreren verbreiteten Betriebssystemen, verschiedene Methoden zur Reflexintegration inklusive Untergrundkorrektur, sowie die automatisierte Erstellung von I(V)-Kurven.

---



**Projektleiter:** Dr. Alexandra Lieb

**Projektbearbeiter:** Dr. Ulf Betke

**Förderer:** Bund; 01.06.2013 - 31.05.2016

**Neuartige Kompositwerkstoffe für die thermochemische Energiespeicherung, BMBF-Nachwuchsforschergruppe NEOTHERM**

In der interdisziplinären Nachwuchsforschergruppe Neuartige Kompositwerkstoffe für die thermochemische Energiespeicherung (NEOTHERM) mikro-makro-poröse Kompositmaterialien für die thermochemische Energiespeicherung entwickelt, charakterisiert und bewertet. Ziel ist es, Sorptionsmaterialien für das Sorbat Wasser mit hoher Speicherdichte, effektivem Wärmeübergang und applikationsangepasster Sorptionstemperatur ( $\approx 20-500\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) 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**

**Deblitz, Raik; Hrib, Cristian G.; Blaurock, Steffen; Jones, Peter G.; Plenikowski, Georg; Edlmann, Frank T.**

Explosive Werner-type cobalt(III) complexes

In: Inorganic chemistry frontiers. - Cambridge: RSC, Bd. 1.2014, 8, S. 621-640;

**Deblitz, Raik; Hrib, Cristian G.; Hilfert, Liane; Edlmann, Frank T.**

Crystal structure of the high-energy-density material guanylurea dipcrylamide

In: Acta crystallographica. - Copenhagen: MunksgaardActa crystallographica / E, Bd. 70.2014, 8, S. 111-114;

**Edlmann, Frank T.**

Lanthanides and actinides - annual survey of their organometallic chemistry covering the year 2012

In: Coordination chemistry reviews. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 261.2014, S. 73-155;

[Imp.fact.: 11,016]

**Gesine Stock,; Hrib, Cristian G.; Deblitz, Raik; Kühling, Marcel; Plenikowski, Georg; Edlmann, Frank T.**

Synthesis, Supramolecular Structure, and Energetic Properties of the First Metal-Organic Nitrotetrazolate,  $[\text{Me}_3\text{Sn}(-\text{OH})\text{SnMe}_3(-\text{OH})\text{SnMe}_3(\text{H}_2\text{O})][\text{NT}]$  (NT=5-nitrotetrazolate)

In: Inorganic chemistry communications. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 43.2014, S. 90-93;

[Imp.fact.: 2,016]

**Harmgarth, Nicole; Gräsing, Daniel; Dröse, Peter; Hrib, Cristian G.; Jones, Peter G.; Lorenz, Volker; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Edlmann, Frank T.**

Novel inorganic heterocycles from dimetalated carboranylaminidates

In: Dalton transactions. - London: Soc, Bd. 43.2014, 13, S. 5001-5013;

[Imp.fact.: 3,806]

**Harmgarth, Nicole; Hrib, Cristian G.; Lorenz, Volker; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.**

Unprecedented formation of polycyclic diazadiborepine derivatives through cage deboronation of m-carborane  
In: Chemical communications. - Cambridge: Soc, 2014; <http://dx.doi.org/10.1039/C4CC06261B>;  
[Imp.fact.: 6,718]

**Hrib, Cristian; Blaurock, Steffen; Edelmann, Frank**

Crystallization and structure determination of fac-triammin-aquo-oxalato-cobalt (III)-nitrate monohydrate  
In: Crystals. - Basel: MDPI, Bd. 4.2014, 4, S. 490-497;

**Hrib, Cristian G.; Harmgarth, Nicole; Jones, Peter G.; Lorenz, Volker; Kühling, Marcel; Edelmann, Frank T.**

Carboranylamidinates of di- and trivalent iron  
In: Inorganic chemistry communications. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 46.2014, S. 127-129;  
[Imp.fact.: 1,838]

**Lorenz, Volker; Hrib, Cristian G.; Jones, Peter G.; Edelmann, Frank T.**

Synthesis and structure of a heterotrimetallic (Li/Er/In), heptacyclic metallasiloxane cage compound  
In: Inorganic chemistry communications. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 49.2014, S. 37-40;  
[Imp.fact.: 1,838]

**Rausch, Janek; Lorenz, Volker; Hrib, Cristian G.; Frettlöh, Vanessa; Adlung, Matthias; Wickleder, Claudia; Hilfert, Liane; Jones, Peter G.; Edelmann, Frank T.**

Heterometallic europium disiloxanediolates: synthesis, structural diversity, and photoluminescence properties  
In: Inorganic chemistry. - Washington, DC: American Chemical Society, Bd. 53.2014, 21, S. 11662-11674;  
[Imp.fact.: 4,794]

**Tutacz, P.; Syre, R.; Hrib, Cristian G.; Hilfert, Liane; Frenzel, N.; Burte, Edmund P.; Kühling, M.; Edelmann, Frank T.**

The first aziridinylguanidinates - new precursors for potentially volatile metal guanidinates  
In: Australian journal of chemistry. - Melbourne: CSIRO, Bd. 67.2014, 7, S. 1110-1114;  
[Imp.fact.: 1,644]

**Vogt, Jochen; Vogt, Birgit**

The structure of carbon monoxide adsorbed on the NaCl(100) surface - a combined LEED and DFT-D/vdW-DF study  
In: The journal of chemical physics. - Melville, NY: American Institute of Physics; Vol. 141.2014, 21, Art. 214708,  
insgesamt 9 S.;  
[Imp.fact.: 3,122]

**Wagner, Thomas; Christiansen, Nena; Hrib, Cristian G.; Kaufmann, Dieter E.; Edelmann, Frank T.**

Unexpected formation and crystal structure of tetrakis(1H-pyrazole- $[\kappa]$ N 2)palladium(II) dichloride  
In: Acta crystallographica. - Copenhagen: MunksgaardActa crystallographica / E, Bd. 70.2014, 12, S. 486-488;

### **Buchbeiträge**

**Pucci, Annemarie; Vogt, Jochen; Weiß, Helmut; Reichling, Michael**

Surfaces of simple ionic crystals  
In: Surface and interface science; Vol. 3: Properties of composite surfaces. - Weinheim: Wiley-VCH-Verl., S. 279, 2014;

### **Dissertationen**

**Alvarado Perea, Leo; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]; Scheffler, Franziska [Gutachter]**

Direct conversion of ethene to propene on Ni-alumino-mesostructured catalysts - synthesis, characterization and catalytic testing. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2014; 161 S.: graph. Darst.;

**Thies, Nora; Haak, Edgar [Gutachter]; Gesing, Ernst R. F. [Gutachter]; Schinzer, Dieter [Gutachter]**

Die Entwicklung nachhaltiger Synthesemethoden zur atomökonomischen Transformation von 1-Vinylpropargylalkoholen

mit Übergangsmetallkomplexen redoxaktiver Liganden als Katalysatoren. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2014; III, 173 S.: graph. Darst.;