



OTTO VON GUERICKE  
UNIVERSITÄT  
MAGDEBURG

VST

FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS-  
UND SYSTEMTECHNIK

# Forschungsbericht 2015

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. habil. Dieter Schinzer (Institutsleiter)

Prof. Dr. rer. nat. Franziska Scheffler

Prof. Dr. rer. nat. habil. Helmut Weiß

PD 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

PD 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. Helmut Weiß

**Förderer:** Haushalt; 01.10.2014 - 30.09.2018

### **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. Mittlerweile konnten erste Messungen mittels Photoelektronenspektroskopie an diesem Adsorptionssystem durchgeführt werden. Sie werden jetzt weitergeführt mit dem Ziel der Absolutbestimmung der Belegung der ersten Wasserlage auf NaCl(100)-Einkristallflächen. und der Aufdeckung des Mechanismus der elektroneninduzierten Strukturumwandlung.

---

**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); 01.07.2013 - 30.06.2018

### **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 Metallasilsesquioxane 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 neuartiger 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, 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. Aktuell werden auch ring-substituierte Derivate wie das t-Butylpyrazolylpropanamid verwendet.

---

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

**Projektbearbeiter:** Dr. Volker Lorenz

**Kooperationen:** Lapua GmbH, Schönebeck

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.01.2013 - 31.12.2017

**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<sub>6</sub>H<sub>11</sub>)<sub>7</sub>Si<sub>8</sub>O<sub>12</sub>(OH)<sub>3</sub> (3) und (C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>)<sub>7</sub>Si<sub>8</sub>O<sub>12</sub>(OLi)<sub>4</sub> (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 Flammschutzeigenschaften. 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); 01.06.2013 - 31.05.2018

**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, 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,  $\text{PhICl}_2$ , 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,  $\text{PhICl}_2$ , 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  $[(\text{Me}_3\text{Si})_2\text{N}]_3\text{CeCl}$  sowie das neuartige Cer(IV)amidinat  $3\text{CeCl}$  konnten unter Verwendung von  $\text{PhICl}_2$  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  $\text{ZnMe}_2$  oder  $\text{SnMe}_4$  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; 01.01.2013 - 31.12.2017

**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:** PD 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 Dominoprozesse 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:** 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 ( $\approx 20-500$  °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 Werkstoffverbünde 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.

---

**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.

## 7. Eigene Kongresse, wissenschaftliche Tagungen und Exponate auf Messen

## 8. Veröffentlichungen

### **Begutachtete Zeitschriftenaufsätze**

Ali, Asim; Langer, Mirko; Lorenz, Volker; Hrib, Cristian G.; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.

Synthesis and structure of hexaphenyltrisiloxanediolates of sodium, titanium, and iron

In: Journal of organometallic chemistry. - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 776.2014, S. 163-169, 2015;

[Imp.fact.: 2,302]

**Bauer, Carolin; Scheffler, Franziska; Schwidder, Michael**

Direct crystallization of silicoaluminophosphates onto the surface of open-celled SiC foam

In: Advanced engineering materials. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 17.2015, 5, S. 656-662;

[Imp.fact.: 1,508]

**DAmico, David J.; McDougal, Michael A.; Amenta, Donna S.; Gilje, John W.; Wang, Sida; Hrib, Cristian G.; Edelmann, Frank T.**

Synthesis and supramolecular structures of manganese complexes with N-pyrazolylpropanamide-derived ligands

In: Polyhedron. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 88.2015, S. 19-28;

[Imp.fact.: 2,047]

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

Structures and energetic properties of two new salts comprising the 5,5 -azotetrazolate dianion

In: Crystals: open access journal. - Basel: MDPI, Bd. 5.2015, 3, S. 405-417;

**Edelmann, Frank T.**

Lanthanides and actinides - annual survey of their organometallic chemistry covering the year 2013

In: Coordination chemistry reviews. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 261.2015, S. 124-205;

[Imp.fact.: 12,098]

**Edelmann, Frank T.; Junk, Peter**

Frontiers of organo-f-element chemistry

In: New journal of chemistry. - London: RSC, Bd. 39.2015, 10, S. 7539;

[Imp.fact.: 3,086]

**Kühling, Marcel; Wickleder, Claudia; Ferguson, Michael J.; Hrib, Cristian G.; McDonald, Robert; Suta, Markus; Hilfert, Liane; Takats, Josef; Edelmann, Frank T.**

Investigation of the bent sandwich-like divalent lanthanide hydro-tris(pyrazolyl)borates Ln(Tp iPr<sub>2</sub>)<sub>2</sub> (Ln

In: New journal of chemistry. - London: RSC, 2015; <http://dx.doi.org/10.1039/C5NJ00568J>;

[Imp.fact.: 3,159]

**Lammert, Martin; Wharmby, Michael T.; Smolders, Simon; Bueken, Bart; Lieb, Alexandra; Lomachenko, Kirill A.; De Vos, Dirk; Stock, Norbert**

Cerium-based metal organic frameworks with UiO-66 architecture - synthesis, properties and redox catalytic activity

In: Chemical communications: ChemComm. - Cambridge: Soc, Bd. 51.2015, 63, S. 12578-12581;

[Imp.fact.: 6,834]

**Mainka, Hendrik; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Edelmann, Frank; Haak, Edgar; Herrmann, Axel S.**

Characterization of the major reactions during conversion of lignin to carbon fiber

In: Journal of materials research and technology: jmr official publication of the Brazilian Metallurgical, Materials and Mining Association. - Rio de Janeiro: Elsevier, 2015; <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmrt.2015.04.005>;

**Mainka, Hendrik; Täger, Olaf; Körner, Enrico; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Edelmann, Frank T.; Herrmann, Axel S.**

Lignin - an alternative precursor for sustainable and cost-effective automotive carbon fiber

In: Journal of materials research and technology: jmr official publication of the Brazilian Metallurgical, Materials and Mining Association. - Rio de Janeiro: Elsevier, 2015; <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmrt.2015.03.004>;

**Rausch, Janek; Apostolidis, Christos; Walter, Olaf; Lorenz, Volker; Hrib, Cristian G.; Hilfert, Liane; Kühling, Marcel; Busse, Sabine; Edelmann, Frank T.**

One ligand fits all: lanthanide and actinide sandwich complexes comprising the 1,4-bis(trimethylsilyl)cyclooctatetraenyl



(=COT) ligand

In: New journal of chemistry. - London: RSC, 2015; <http://dx.doi.org/10.1039/C5NJ00991J>;  
[Imp.fact.: 3,159]

**Reinsch, Helge; Stassen, Ivo; Bueken, Bart; Lieb, Alexandra; Ameloot, Rob; Vos, Dirk de**

First examples of aliphatic zirconium MOFs and the influence of inorganic anions on their crystal structures  
In: CrystEngComm. - London: RSC, Bd. 17.2015, 2, S. 331-337;  
[Imp.fact.: 3,858]

**Schmielau, Andrea; Hrib, Cristian G.; Lorenz, Volker; Hilfert, Liane; Zörner, Florian; Busse, Sabine; Edelmann, Frank T.**

Surprising reactivity of the unsymmetrically substituted amidinate anion [MeC(NEt)(N tBu)]  
In: Journal of organometallic chemistry. - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 791.2015, S. 252-257;  
[Imp.fact.: 2,173]

**Sroor, Farid M.; Hrib, Cristian G.; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Edelmann, Frank T.**

Synthesis and catalytic activity of homoleptic lanthanide-tris(cyclopropylethynyl)amidinates  
In: New journal of chemistry. - London: RSC, 2015; <http://dx.doi.org/10.1039/C5NJ00555H>;  
[Imp.fact.: 3,159]

**Sroor, Farid M.; Hrib, Cristian G.; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.**

Synthesis and structural characterization of an unusual heterometallic europium(III) amidinate complex  
In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie: ZAAC. - Weinheim: Wiley-VCH, 2015; <http://dx.doi.org/10.1002/zaac.201500200>;  
[Imp.fact.: 1,160]

**Sroor, Farid M.; Hrib, Cristian G.; Hilfert, Liane; Jones, Peter G.; Edelmann, Frank T.**

Lanthanide(III)-bis(cyclopropylethynylamidinates) - synthesis, structure, and catalytic activity  
In: Journal of organometallic chemistry. - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 785.2015, S. 1-10;  
[Imp.fact.: 2,302]

**Sroor, F.M.; Hrib, Cristian G.; Hilfert, Liane; Hartenstein, Larissa; Roesky, Peter W.; Edelmann, Frank T.**

Synthesis and structural characterization of new bis(alkynylamidinato)lanthanide(III)-amides  
In: Journal of organometallic chemistry. - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 799/800.2015, S. 160-165;  
[Imp.fact.: 2,173]

**Thies, Nora; Haak, Edgar**

Ruthenium-catalyzed synthesis of 2,3-cyclo[3]dendralenes and complex polycycles from propargyl alcohols  
In: Angewandte Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH Angewandte Chemie / International edition, 2015; <http://dx.doi.org/10.1002/anie.201412207>;  
[Imp.fact.: 11,336]

**Thies, Nora; Haak, Edgar**

Rutheniumkatalysierte Synthese von 2,3-cyclo[3]dendralenen und komplexer Polycyclen aus Propargylalkoholen  
In: Angewandte Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH, 2015; <http://dx.doi.org/10.1002/ange.201412207>;

**Wanninger, Simon; Lorenz, Volker; Subhan, Abdus; Edelmann, Frank T.**

Metal complexes of curcumin - synthetic strategies, structures and medicinal applications  
In: Chemical Society reviews: CSR. - London: Soc, 2015; <http://dx.doi.org/10.1039/C5CS00088B>;  
[Imp.fact.: 30,452]

**Wrobel, Rafal J.; Becker, Stefan; Weiss, Helmut**

Influence of subsurface oxygen in the catalytic CO oxidation on Pd(111)  
In: The journal of physical chemistry <Washington, DC> / C. - Washington, DC: Soc, Bd. 119.2015, 10, S. 5386-5394;  
[Imp.fact.: 4,835]

## **Dissertationen**

**Sroor, Farid Mohamed Ahmed; Edelmann, Frank T. [Gutachter]; Haak, Edgar**

Synthesis, structure and catalytic activity of new lanthanide alkynylamidinates. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; IV, 148 S.: graph. Darst.;