



OTTO VON GUERICKE
UNIVERSITÄT
MAGDEBURG

VST

FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS-
UND SYSTEMTECHNIK

Forschungsbericht 2016

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

Prof. Dr. rer. nat. habil. Frank T. Edelmann

PD Dr. Edgar Haak

Dr. Volker Lorenz

Frau Uta Jeutes

2. HochschullehrerInnen

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 CO₂, 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

Projektleitung: 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 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. 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.

Projektleitung: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeitung: 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.

Projektleitung: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeitung: Nicole Harmgarth, Philipp Hillebrand, Peter Dröse

Förderer: Land (Sachsen-Anhalt); 01.07.2013 - 30.06.2018

Carboranylaminidate

Die in unserem Arbeitskreis entwickelten Carboranylaminidat-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.

Projektleitung: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeitung: 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 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.

Projektleitung: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeitung: 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.

Projektleitung: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeitung: Dr. Volker Lorenz

Kooperationen: Lapua GmbH, Schönebeck

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.01.2013 - 31.12.2017

Metallsilsesquioxane

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 (C₆H₁₁)₇Si₈O₁₂(OH)₃ (3) und (C₆H₁₁)₇Si₈O₁₂(OLi)₄ (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 Metallsilsesquioxane in neuartige poröse Materialien mit interessanten Adsorptions- und Katalysatoreigenschaften umgewandelt werden. Silsesquioxane und Metallsilsesquioxane 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. Metallsilsesquioxane sind interessante Homogenkatalysatoren, z.B. für Oxidationsreaktionen. Durch Pyrolyse, aber auch durch Plasmabehandlung, lassen sie sich in neuartige Heterogenkatalysatoren umwandeln.

Projektleitung: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeitung: 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.

Projektleitung: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeitung: 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_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, 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 3CeCl konnten unter Verwendung von 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 ZnMe_2 oder 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.

Projektleitung: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeitung: 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.

Projektleitung: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Förderer: Haushalt; 01.11.2016 - 30.09.2019

Supramolekulare Komplexverbindungen mit Azolypropanamid-Liganden

Supramolekulare Kristallstrukturen sind von großem aktuellem Interesse, insbesondere solche mit dreidimensionalen Netzwerken aus Wasserstoffbrücken. In den vergangenen Jahren wurden in unserem Arbeitskreis neue multifunktionelle Liganden entwickelt, die sich zum Aufbau solcher Strukturen eignen. Typische Vertreter dieser neuen Liganden sind das *N*-Pyrazolypropanamid und das *N*-Triazolypropanamid. Ziel des Forschungsvorhabens ist es, weitere Pyrazolypropanamid-Liganden und davon ausgehend neue supramolekulare Komplexverbindungen mit ausgewählten Übergangsmetallen zu synthetisieren und durch Einkristall-Röntgenstrukturanalysen aufzuklären.

Projektleitung: 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 Katalysatorforschung 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.

Projektleitung: Dr. Alexandra Lieb

Projektbearbeitung: 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 ($\gg 20-500$ °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.

Projektleitung: 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 molekulardynamischen 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.

Projektleitung: Dr. habil. Jochen Vogt

Kooperationen: Universität Osnabrück, Oberflächenphysik

Förderer: Haushalt; 01.07.2016 - 28.06.2021

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 molekulardynamischen 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.

Projektleitung: 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

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

Corrigendum to "Alumino-mesostructured Ni catalysts for the direct conversion of ethene to propene" [J. Catal. 305 (2013) 154168]

In: Journal of catalysis. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 336.2016, S. 134;
[Imp.fact.: 6,921]

Betke, Ulf; Lieb, Alexandra; Scheffler, Franziska; Scheffler, Michael

Manufacturing of reticulated open-cellular aluminum nitride ceramic foams from aqueous AlN suspensions

In: Advanced engineering materials. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, insges. 8 S., 2016;
[Imp.fact.: 1,817]

Betke, Ulf; Proemmel, Steven; Eggebrecht, Jakob G.; Rannabauer, Stefan; Lieb, Alexandra; Scheffler, Michael; Scheffler, Franziska

Micro-macroporous composite materials - SiC ceramic foams functionalized with the metal organic framework HKUST-1

In: Chemie - Ingenieur - Technik: CIT. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, 2016; <http://dx.doi.org/10.1002/cite.201500141>;
[Imp.fact.: 0,661]

Betke, Ulf; Proemmel, Steven; Rannabauer, Stefan; Lieb, Alexandra; Scheffler, Michael; Scheffler, Franziska

Silane functionalized open-celled ceramic foams as support structure in metal organic framework composite materials

In: Microporous and mesoporous materials: the official journal of the International Zeolite Association. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 239.2016, S. 209-220;
[Imp.fact.: 3,349]

Betke, Ulf; Reschke, Kirsten; Scheffler, Michael

A novel processing route for alumina/mullite-based refractory materials

In: Refractories worldforum: manufacturing & performance of high-temperature materials. - Baden-Baden: Göller, Bd.

8.2016, 2, S. 81-85;

Betke, Ulf; Sharma, Kashyapa S. K.; Rodak, Andreas; Rannabauer, Stefan; Lieb, Alexandra; Scheffler, Franziska; Scheffler, Michael

Manufacturing of an electrically conducting cellular Cu-SiC material by metal salt infiltration and chemical reduction (MESCAL)

In: Materials letters: an interdisciplinary journal affiliated with the Materials Research Society and the Materials Society Japan, devoted to the rapid publication of short communications on the science, applications and processing of materials. - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 185.2016, S. 201-203;

[Imp.fact.: 2,437]

Brüser, Wolfgang; Hilfert, Liane; Lorenz, Volker; Hrib, Cristian G.; Bode, Karin; Adam, Arnold; Vogt, Jochen; Edelmann, Frank T.

A comparative IR/Raman, X-ray and computational study of diethylzinc pyridine complexes

In: Journal of organometallic chemistry. - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 806.2016, S. 77-82;

[Imp.fact.: 2,173]

Edelmann, Frank T.

Lanthanides and actinides - annual survey of their organometallic chemistry covering the year 2014

In: Coordination chemistry reviews. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 306.2016, S. 346-419;

[Part 1];

[Imp.fact.: 12,239]

Edelmann, Frank T.

Lanthanides and actinides - annual survey of their organometallic chemistry covering the year 2015

In: Coordination chemistry reviews. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 318.2016, S. 329-130;

[Imp.fact.: 12,239]

Ehle, Sophie; Lorenz, Volker; Liebing, Phil; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.

Synthesis and structural characterization of two complex tantalum(V) siloxides

In: Inorganic chemistry communications: an international journal dedicated to rapid publications in inorganic and organometallic chemistry. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 74.2016, S. 82-85;

[Imp.fact.: 1,762]

Haak, Edgar

Transition-metal-catalyzed transformations of 1-alkenylpropargyl alcohols and esters - valuable cascade reactions for increasing structural complexity

In: European journal of organic chemistry. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, 2016; <http://dx.doi.org/10.1002/ejoc.201601076>;

[Imp.fact.: 3,068]

Kühling, Marcel; McDonald, Robert; Liebing, Phil; Hilfert, Liane; Ferguson, Michael J.; Takats, Josef; Edelmann, Frank T.

Stabilization of molecular lanthanide polysulfides by bulky scorpionate ligands

In: Dalton transactions: a journal of inorganic chemistry, including bioinorganic, organometallic, and solid-state chemistry. - London: Soc, Bd. 45.2016, 25, S. 10118-10121;

[Imp.fact.: 4,177]

Leutritz, Tobias; Hilfert, Liane; Busse, Ulrich; Smalla, K.-H.; Speck, Oliver; Zhong, K.

Contribution of iron and protein contents from rat brain subcellular fractions to MR phase imaging

In: Magnetic resonance in medicine: MRM; an official journal of the International Society for Magnetic Resonance in Medicine. - New York, NY [u.a.]: Wiley-Liss, 2016; <http://dx.doi.org/10.1002/mrm.26288>;

[Imp.fact.: 3,782]

Liebing, Phil; Hilfert, Liane; Lorenz, Volker; Edelmann, Frank T.

Crystal structures and hydrogen bonding of two complexes containing the [Ammine-chlorido-ethylenediamine-bis(pyridine)cobalt(III)]²⁺ cation

In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie: ZAAC. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 642.2016, 20, S. 1178-1183;

[Imp.fact.: 1,261]

Reschke, Verena; Bordia, Rajendra K.; Scheffler, Franziska; Scheffler, Michael

Rheology and crosslinking of a low-viscosity SiOC preceramic polymer

In: Ceramics international. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, 2016; <http://dx.doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.01.171>;

[Imp.fact.: 2,605]

Sroor, F. M.; Liebing, Phil; Hrib, C. G.; Gräsing, D.; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.

Formation and structure of the first metal complexes comprising amidinoguanidinate ligands

In: Acta crystallographica / E. - Chester: International Union of Crystallography; Vol. E72.2016, S. 1526-1531;

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

Five different types of [eta] 8-cyclooctatetraenyl-lanthanide half-sandwich complexes from one ligand set, including a giant neodymium wheel

In: Dalton transactions: a journal of inorganic chemistry, including bioinorganic, organometallic, and solid-state chemistry. - London: Soc, Bd. 34.2016, S. 13332-13346;

[Imp.fact.: 4,177]

Wang, Sida; Sroor, Farid M.; Liebing, Phil; Lorenz, Volker; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.

Crystal structures of two ytterbium(III) complexes comprising alkynylamidinate ligands

In: Acta crystallographica / E. - Chester: International Union of Crystallography; Vol. E72.2016, 9, S. 1229-1233;

Woche, Martin; Scheibe, Norbert; Tümpling, Wolf von; Schwidder, Michael

Degradation of the antiviral drug zanamivir in wastewater - the potential of a photocatalytic treatment process

In: The chemical engineering journal. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 287.2016, S. 674-679;

[Imp.fact.: 4,321]

Begutachtete Buchbeiträge

Sherepenko, Oleksii; Jüttner, Sven; Betke, Ulf; Mathiszik, Christian; Zschetzsche, Jörg; Füssel, Uwe

Partikelverstärkte Kupferlegierungen - physikalischen Eigenschaften und Einsatzpotential als Elektrodenkappenwerkstoffe zum Widerstandsschweißen

In: Widerstandsschweißen: Vorträge der gleichnamigen 23. Sondertagung in Duisburg am 29. und 30. Juni 2016.

- Düsseldorf: DVS Media, S. 151-158 - (DVS Berichte; 1682)

[Kongress: 23. Sondertagung Widerstandsschweißen, Duisburg, 29. - 30. Juni 2016];

Dissertationen

Amusan, Akinwumi Abimbola; Burte, Edmund P. [GutachterIn]; Edelmann, Frank T. [GutachterIn]

Plasma-assisted atomic layer deposition for microelectronics applications. - Magdeburg, 2016; xviii, 170 Blätter: Illustrationen

[Literaturverzeichnis: Blatt 153-170];

Khorkhordin, Oleksandr; Burte, Edmund P. [GutachterIn]; Edelmann, Frank T. [GutachterIn]

Ferroelektrische Stapelschichten für die Verwendung in nichtflüchtigen Speichern. - Magdeburg, 2016; vii, 116 Blätter

[Literaturverzeichnis: Blatt 109-116];

Yazdi, Samira; Naumann, Michael [GutachterIn]; Weiß, Helmut [GutachterIn]

The structural dynamics of soluble and membrane proteins explored through molecular simulations. - Magdeburg, 2016; iv, 131 Seiten: Illustrationen

[Literaturverzeichnis: Seite 107-129];