



OTTO VON GUERICKE
UNIVERSITÄT
MAGDEBURG

VST

FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS-
UND SYSTEMTECHNIK

Forschungsbericht 2019

Institut für Chemie

INSTITUT FÜR CHEMIE

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg
Tel. 49 (0)391 67 58672, Fax 49 (0)391 67 42223
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

2. HOCHSCHULLEHRER/INNEN

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 bioorganischen 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
- Zellulare 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 geträgerter Katalysatoren auf Titanoxidbasis

4. SERVICEANGEBOT

NMR-Messungen verschiedener Kerne an Feststoffen und Flüssigkeiten
Röntgenpulverdiffraktometrie (XRD) in Reflexion, Transmission und Kapillare, auch temperaturabhängig
Stickstoff-Tieftemperaturadsorption
Sorptionmessungen mit CO₂, Wasser etc.
Quecksilberporosimetrie
Rheologische Messungen
Katalysatortestung

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. Franziska Scheffler
Förderer: EU - ESF Sachsen-Anhalt - 01.01.2018 - 31.12.2021

MEMoRIAL-M2.9 — Preparation and testing of phase change materials for thermal storage

Latent heat storage can be achieved by the phase transition of a large number of different materials (PCMs). Depending on the desired temperature range organic substances, salt hydrates, salts, or even metals can be utilised within this context. For the purpose of technical application, the PCM has to be embedded in a higher melting containment. The objective of this sub-project is to develop new processing routes in order to produce mechanically stable PCM beads covered with a polymer-derived ceramic layer. The project will encompass the coating of different types of PCMs, a detailed characterisation and testing, as well as the investigation of the "structure-properties" correlation. A special focus will be directed towards the mechanical stability of the composite material during temperature cycling.

Projektleitung: Prof. Dr. Franziska Scheffler
Projektbearbeitung: Christian Künzel
Förderer: EU - ESF Sachsen-Anhalt - 01.02.2017 - 31.01.2021

MEMoRIAL-M2.10 —Preparation and testing of thermoelectric materials

Thermoelectric materials generate a thermovoltage when exposed to a temperature gradient. They are central components in thermoelectric generators, which allow for recovering electric energy from waste heat leading to higher energy efficiency and lower emissions. To reduce processing costs as well as to open up novel fields of application, coating- and film technologies are in the focus of this research project. Apart from the compounds' thermoelectric properties, also the mechanical properties of these layers and films crucially affect technical applications.

The objective of this PhD project is to develop new processing routes in order to produce mechanically stable layers of different thermoelectric compounds. The project will encompass the preparation of layered samples, a detailed characterisation and testing, as well as the investigation of the structure-properties-correlation.

Projektleitung: Prof. Dr. Dieter Schinzer
Förderer: Bund - 01.06.2018 - 31.05.2021

Sorangicine und Neosorangicine als neue Strukturtypen für Breitbandantibiotika

Das wissenschaftliche Ziel ist die Weiterentwicklung der Sorangicine und Neosorangicine zu einem Antibiotikum, mit dem insbesondere *Acinetobacter baumannii* und Mycobakterien bekämpft werden können. *Acinetobacter* wird von der WHO als "critical" eingestuft, da sich insbesondere in Krankenhäusern immermehr multi-resistente Stämme entwickeln. *Mycobacterium tuberculosis* ist jährlich für mehrere Millionen Tote verantwortlich und bisher nicht optimal therapierbar.

Die Neuartigkeit des Ansatzes liegt einerseits in der Verfügbarkeit von neuen, proprietären Derivaten mitverbesserter Aktivität, die biotechnologisch herstellbar sind. Andererseits steht auch ein Syntheseverfahren zur Verfügung, das es erstmals erlaubt, die Substanzklasse in größeren Mengen bereit zu stellen und zur Herstellung weiterer synthetischer Derivate nutzbar ist. Speziell die kürzliche Entdeckung der Neosorangicine eröffnet vielversprechende Möglichkeiten, um über SAR-Studien Derivate mit verbesserter Aktivität zu konzipieren.

Projektleitung: PD Dr. Edgar Haak
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 15.09.2019 - 30.09.2022

Kaskadentransformationen ungesättigter Alkohole mit bifunktionellen Rutheniumkatalysatoren, 2. Förderperiode (DFG-Nr. 265182801)

Kaskadenreaktionen sind im Kontext der Wirkstoffforschung von besonderem Interesse. Die Ausbildung mehrerer Bindungen in einem Eintopfprozess erhöht die Syntheseeffizienz signifikant und erleichtert die Erzeugung verschiedener Derivate strukturell komplizierter Moleküle. Die Transformationen erzeugen molekulare Komplexität und eignen sich besonders zur Herstellung von Naturstoffen und ihren Analoga als wichtige Leitstrukturen für die Entwicklung bioaktiver Verbindungen. Übergangsmetallkatalysierte Kaskaden-transformationen einfacher acyclischer Untereinheiten, die Alken- und Alkin-Fragmente enthalten, bieten einen atomökonomischen Ansatz für die Eintopfsynthese komplexer Gerüste aus leicht zugänglichen Ausgangsmaterialien. Hinsichtlich der Zugänglichkeit sind Propargylalkohole besonders bemerkenswert. Sie sind direkt aus Aldehyden oder Ketonen durch Acetylid-Addition erhältlich. Das 1-Alkenylpropargylalkohol-Motiv stellt eine besonders vielseitige C5-Untereinheit dar, da alle fünf Kohlenstoffatome selektiv adressiert werden können und ein breites Spektrum unterschiedlich substituierter Alkine und α,β -ungesättigter Aldehyde oder Ketone zugänglich ist. Aufgrund verschiedener funktioneller Gruppen (Alken, Alkin, -OR) können unterschiedliche Aktivierungsmodi angewendet werden, die zu diversen Kaskadentransformationen führen. Wir entdeckten, dass bifunktionelle Cyclopentadienon-Ruthenium(0)-Komplexe und ihre Iminoderivate verschiedene Additions-/Cyclisierungs-kaskaden von Propargylalkoholen mit unterschiedlichen Nucleophilen katalysieren. Die basische Koordinationsstelle des donorstabisierten Cyclopentadienon-Liganden und die Redoxkopplung zwischen Ligand und Metall sind entscheidend für diese hochselektiven Transformationen. In Fortführung unserer bisherigen Arbeiten planen wir die Entwicklung weiterer metallkatalysierter Kaskadenreaktionen für die effiziente Synthese polycyclischer naturstoffähnlicher Verbindungen. Die Prozesse basieren auf rutheniumkatalysierten Allylierungs-/Cycloisomerisierungsreaktionen und Redoxisomerisierungs-/Michaeladditions-kaskaden und sollen auch im Rahmen der Totalsynthese von bioaktiven Naturstoffen angewendet werden. Die asymmetrisch-katalysierte Reaktionsführung unter Verwendung chiraler Vertreter der Komplexserien bildet im Hinblick auf zukünftige Anwendungen auf dem Gebiet der Wirkstoffsynthese einen besonderen Schwerpunkt. Darüber hinaus sollen Optionen für photokatalytische Anwendungen der entwickelten Katalysatoren ausgelotet werden.

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.

7. VERÖFFENTLICHUNGEN

BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

Duraisamy, Ramesh; Liebing, Phil; Harmgarth, Nicole; Lorenz, Volker; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Engelhardt, Felix; Edelmann, Frank T.

The manifold structural chemistry of alkali metal enediamide complexes

European journal of inorganic chemistry - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 2019.2019, 28, S. 3343-3351;

[Imp.fact.: 2.578]

Edelmann, Frank T.; Engelhardt, Felix; Haiduc, Ionel

Molecular and crystal structures of three tetraphenyldichalcogenoimido-diphosphinates, $M[Ph_2P(O)NP(O)Ph_2](M = Rb, Cs)$ and $[NMe_4][Ph_2P(S)NP(S)Ph_2]$

Revue roumaine de chimie - Bucuresti: Ed. Acad. Române, Bd. 64.2019, 1, S. 65-71;

[Imp.fact.: 0.395]

Edelmann, Frank T.; Farnaby, Joy H.; Jaroschik, Florian; Wilson, Bradley

Lanthanides and actinides - annual survey of their organometallic chemistry covering the year 2018

Coordination chemistry reviews - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Volume 398 (2019), article 113005;

[Imp.fact.: 13.476]

Harmgarth, Nicole; Liebing, Phil; Hilfert, Liane; Lorenz, Volker; Engelhardt, Felix; Busse, Sabine; Edelmann, Frank T.

New homoleptic rareearth metal complexes comprising the unsymmetrically substituted amidinate ligand $[MeC(NEt)(NtBu)]-$

Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 645.2019, 17, S. 110-1109;

[Imp.fact.: 1.337]

Kaufmann, Julia; Jäckel, Elisabeth; Haak, Edgar

Ruthenium-catalyzed formation of pyrazoles or 3-hydroxynitriles from propargyl alcohols and hydrazines

Arkivoc - Zurich: ARKAT, Bd. 2019.2019, 4, insges. 11 S.;

[Imp.fact.: 1.048]

Kühling, Marcel; Liebing, Phil; Takats, Josef; Engelhardt, Felix; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Edelmann, Frank T.

Deliberate synthesis and structural characterization of a scorpionate-supported cerium(III) pentasulfide complex

Inorganic chemistry communications - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 106.2019, S. 34-37;

[Imp.fact.: 1.795]

Lehmann, Tony; Schallert, Kay; Vilchez-Vargas, Ramiro; Benndorf, Dirk; Püttker, Sebastian; Sydor, Svenja; Schulz, Christian; Bechmann, Lars Peter; Canbay, Ali E.; Heidrich, Benjamin; Reichl, Udo; Link, Alexander; Heyer, Robert Steven

Metaproteomics of fecal samples of Crohn's disease and Ulcerative Colitis

Journal of proteomics - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 201.2019, S. 93-103;

[Imp.fact.: 3.537]

Liebing, Phil; Harmgarth, Nicole; Lorenz, Volker; Zörner, Florian; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Edelmann, Frank T.

Structural Investigation of New Lithium Amidinates and Guanidinates

Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 645.2019, 4, S. 440-446;

[Imp.fact.: 1.337]

Liebing, Phil; Harmgarth, Nicole; Zörner, Florian; Engelhardt, Felix; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Edelmann, Frank

Synthesis and structural characterization of two new main group element carboranylamidinates

Inorganics - Basel: MDPI, Bd. 7.2019, 3, S. 41;

Liebing, Phil; Kühling, Marcel; Swanson, Claudia; Feneberg, Martin; Hilfert, Liane; Goldhahn, Rüdiger; Chivers, Tristram; Edelmann, Frank T.

Catenated and spirocyclic polychalcogenides from potassium carbonate and elemental chalcogens
Chemical communications - Cambridge: Soc., Bd. 55.2019, 99, S. 14965-14967;
[Imp.fact.: 6.164]

Liebing, Phil; Stein, Franziska; Hilfert, Liane; Lorenz, Volker; Oliynyk, Karyna; Edelmann, Frank T.

Synthesis and structural investigation of brightly colored organoammonium violurates
Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 645.2019, 1, S. 36-43;
[Imp.fact.: 1.337]

Lorenz, Volker; Liebing, Phil; Engelhardt, Felix; Stein, Franziska; Kühling, Marcel; Schröder, Lea; Edelmann, Frank T.

Review: the multicolored coordination chemistry of violurate anions
Journal of coordination chemistry - London [u.a.]: Taylor & Francis, Bd. 72.2019, 1, S. 1-34;
[Imp.fact.: 1.685]

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

An unsymmetrical dinuclear scandium complex comprising salophen ligands [H 2salophen = N,N -bis(salicylidene)-1,2-phenylenediamine]
Acta crystallographica / E - Chester: International Union of Crystallography, Bd. 75.2019, 2, S. 175-178;

Lorenz, Volker; Liebing, Phil; Suta, Markus; Engelhardt, Felix; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Wang, Sida; Wickleder, Claudia; Edelmann, Frank T.

Synthesis, structure, complexation, and luminescence properties of the first metal-organic curcumin compound Bis(4-triphenylsiloxy)curcumin
Journal of luminescence - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 211.2019, S. 243-250;
[Imp.fact.: 2.961]

Palombo, Tyler M.; Liebing, Phil; Hildebrand, Sara J.; Patrikus, Quentin R.; Assarsson, Anders P.; Wang, Ling; Amenta, Donna S.; Engelhardt, Felix; Edelmann, Frank T.; Gilje, John W.

Complexes of palladium(II) chloride with 3-(pyrazol-1-yl)propanamide (PPA) and related ligands
Polyhedron - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 171.2019, S. 493-501;
[Imp.fact.: 2.284]

Yuan, Lina; Horosanskaia, Elena; Engelhardt, Felix; Edelmann, Frank T.; Couvrat, Nicolas; Sanselme, Morgane; Cartigny, Yohann; Coquerel, Gérard; Seidel-Morgenstern, Andreas; Lorenz, Heike

Solvate formation of Bis(demethoxy)curcumin - crystal structure analyses and stability investigations
Crystal growth & design - Washington, DC: ACS Publ., Bd. 19.2019, 2, S. 854-867;
[Imp.fact.: 4.153]

DISSERTATIONEN

Duraisamy, Ramesh; Edelmann, Frank T. [AkademischeR BetreuerIn]

Synthesis and structural characterization of new alkali metal, alkalineearth metal, and lanthanide complexes with 1,4-diazabutadiene ligands
Magdeburg, 2019, 193 Seiten, Diagramme, 30 cm;
[Literaturverzeichnis: Seite 184-191]

Jäckel, Elisabeth; Haak, Edgar [AkademischeR BetreuerIn]

Atomökonomische Transformationen von Propargylalkoholen durch Ruthenium-katalysierte Kaskadenreaktionen und Eintopfprozesse
Magdeburg, 2019, 265 Seiten, Illustrationen, 22 cm;
[Literaturverzeichnis: Seite 254-259]

Münzberg, Eileen; Seidel-Morgenstern, Andreas [AkademischeR BetreuerIn]; Schinzer, Dieter [AkademischeR BetreuerIn]

Of proteins and lipids - a molecular dynamics study of membrane-bound Rab5

Magdeburg, 2019, XIX, 158 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 30 cm;

[Literaturverzeichnis: Seite 111-122]

Rausch, Janek; Edlmann, Frank T. [AkademischeR BetreuerIn]

Vom Sandwich-Komplex zum Tripeldecker - 1,4-Bis(trimethylsilyl)cyclooctatetraenyl-Komplexe der Seltenen Erden

Magdeburg, 2019, 168 Seiten, 30 cm;

[Literaturverzeichnis: Seite 120-125]