



OTTO VON GUERICKE  
UNIVERSITÄT  
MAGDEBURG

VST

FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS-  
UND SYSTEMTECHNIK

# Forschungsbericht 2021

Institut für Chemie

# INSTITUT FÜR CHEMIE

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg  
Tel. 49 (0)391 67 58673, 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. Nora Kulak  
Prof. Dr. rer. biol. hum. Heike Walles

## 2. HOCHSCHULLEHRER/INNEN

Hon.-Prof. Dr. Ernst R.F. Gesing  
apl. 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  
Prof. Dr. rer. nat. Nora Kulak  
Prof. Dr. rer. biol. hum. Heike Walles

## 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 geträgerter Katalysatoren auf Titanoxidbasis

### **AG Core Facility Tissue Engineering**

- Tissue Engineering: Herstellung von menschlichen gesunden oder kranken Gewebemodellen zur Medikamentenentwicklung
- Studien von Infektionsmechanismen an humanen Gewebemodellen – DFG Projekt AGAVE
- Zellkulturtechnik: Verfahrensentwicklung für die Stammzellbiologie
- Medizintechnik: Entwicklung von Biophantomen (BMBF Projekt Stimulate 2) zur Prüfung und Zertifizierung von Implantaten, Biomaterialien, Medizinprodukten (BMBF Projekt TIRAMISU)
- Regenerative Medizin: Translation neuer Arzneimittel, Biomedical Engineering

## 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>, Wasseretc.  
Quecksilberporosimetrie  
Rheologische Messungen  
Katalysatorrestung

## 5. KOOPERATIONEN

- Bayerisches Zentrum für Angewandte Energieforschung e.V. Würzburg
- CeramTec GmbH, Plochingen
- Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR)
- Dr. Wolf von 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. Nora Kulak  
**Förderer:** EU - ERASMUS+ - 28.09.2020 - 27.06.2021

### **Synthese von Curcumin-Metallkomplexen für biomedizinische Anwendungen**

Es werden neue Metallkomplexe von Curcumin-Derivaten synthetisiert, die je nach eingesetztem Metallion verschiedene biomedizinische Anwendungen haben können (z.B. cytotoxische und antimikrobielle Eigenschaften).

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Nora Kulak  
**Förderer:** Haushalt - 01.05.2020 - 30.04.2023

### **Entwicklung von Assays für Enzyminhibierung und reaktive Sauerstoffspezies**

Es werden fluorimetrische Assays entwickelt, mit denen eine Enzyminhibierung durch Metallkomplexe verfolgt werden kann. Darüberhinaus sollen für die Detektion von reaktiven Sauerstoffspezies fluorimetrische Methoden im Hochdurchsatz angewandt werden.

---

**Projektleitung:** apl. Prof. Dr. habil. Ulrich Vorwerk, Dr. med. Laura Gartmann, Prof. Dr. med. D. Jechorek, Prof. Dr. Franziska Scheffler  
**Förderer:** Haushalt - 01.10.2021 - 31.10.2024

### **Expression von Zinktransporterproteinen und Bedeutung der Zink-Konzentration bei Patienten mit Kopf- und Hals-Karzinomen**

Ziel der Studie ist es, die Expression von Zinktransporterproteinen und die Bedeutung der Zink-Konzentration bei Patienten mit Kopf- und Hals-Karzinomen zu bestimmen. Dabei soll zunächst die methodische Machbarkeit der Bestimmung von Zink-Konzentrationen im Gewebe geklärt werden. Des Weiteren wird die Expression des Zinktransporterproteins untersucht. Dabei ist die Rolle des Zinks, insbesondere bei der Karzinogenese von Kopf- und Hals-Karzinomen, unzureichend untersucht. Im Rahmen dieser Studie sollen nun hinsichtlich der Zinktransporterexpression tumorales und extratumorales Gewebe von Patienten mit Kopf- und Hals-Tumoren sowie aus der Mundschleimhaut von gesunden Patienten immunhistochemisch untersucht werden und wenn möglich, soll der Zinkgehalt in dem Gewebe und im Serum verglichen werden. Es wird sich ein Hinweis auf vermeintliche tumorsuppressive Effekte des Zinks erhofft. Diese könnten für zukünftige Therapien, die in die Zink-Homöostase eingreifen, genutzt werden.

---

**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 - 30.04.2021

### **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 mit verbesserter 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:** Prof. Dr. Heike Walles  
**Kooperationen:** Omicron-Laserage<sup>®</sup> Laserprodukte GmbH (Omicron); MedFact Engineering GmbH (MedFact); Photonscore GmbH (Photonscore); Leibniz Institute for Neurobiology Combinatorial Neuroimaging Core Facility (LIN CNI); Medical Faculty of the University Hospital Magdeburg - University Clinic for Otolaryngology, Head and Neck Surgery (UKM ENT)  
**Förderer:** Bund - 01.08.2021 - 31.07.2024

### **Zeitaufgelöste Raman- und metabolische Spektroskopie-Untersuchungen zur Detektion, Identifikation und Behandlungskontrolle mikrobieller Aktivität bei chronischer Inflammation und Kanzerogenese (TIRAMISU) - Teilvorhaben: 3D Gewebemodelle des Rachenraums FKZ: 13N15789**

Das übergeordnete Ziel, dieses mit insgesamt 4,8 Millionen Euro geförderten FuE-Verbundvorhabens, ist die Erforschung eines nicht-invasiven endoskopischen Verfahrens zur Früherkennung von mikrobiellen Infektionsherden im Menschen anhand von Stoffwechselveränderungen und molekülspezifischer ‚Fingerabdrücke‘ der Mund-Rachenmucosa und seines Mikrobioms. Das zusammengestellte Konsortium besteht mit den KMU Omicron-Laserage<sup>®</sup> Laserprodukte GmbH (Omicron), MedFact Engineering GmbH (MedFact), Photonscore GmbH (Photonscore) sowie den wissenschaftlichen Partnern Leibniz Institut für Neurobiologie Combinatorial Neuroimaging Core Facility (LIN CNI), Otto-von-Guericke Universität (OvGU) Magdeburg, Core Facility Tissue Engineering (CF TE) und der Medizinischen Fakultät des Universitätsklinikum Magdeburg - Universitätsklinik für Hals-, Nasen-, Ohrenheilkunde, Kopf- und Halschirurgie (UKM HNO). Das Konsortium besteht aus hochspezialisierten Partnern mit höchster Expertise in ihren jeweiligen Fachbereichen und stellt somit die bestmögliche Voraussetzung für das hier beschriebene hoch anspruchsvolle FuE-Projekt dar. Im Kontext des Verbundprojektes ist die Core Facility TE verantwortlich für die Unterstützung des Partners LIN bei der Festlegung der Wellenlängen, Messzeiten und Definition der Spektren für die Detektion von Biofilmen und entstehenden Tumoren im Rachenraum. Nach der Entwicklung der Flächendetektoren, können diese an den Gewebemodellen sehr präzise für die Evaluation der Belastung gesunder Zellen durch die eingesetzten Laser und Messzeiten verwandt werden. Abschließend kann mit den Gewebemodellen in "Doppelt-Blind-Studien" die Sensitivität und Spezifität des neuen TIRA-Verfahrens (Endoskops) zur Detektion von Biofilmen und Tumorentstehungen im Rachenraum eingesetzt werden. Die beiden letzten Aspekte sind wichtige Zulassungsvoraussetzungen für den zukünftigen klinischen Einsatz des neuen Endoskops.

**Projektleitung:** Prof. Dr. Heike Walles  
**Kooperationen:** Jun.-Prof. Dr. Fabian Denner (FVST - Lehrstuhl Mechanische Verfahrenstechnik);  
Prof. Dr. rer. nat. Claus-Dieter Ohl (FNW - Institut für Physik – Abt. Physik der  
Weichen Materie)  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.05.2021 - 30.04.2024

### **Aerosolentstehung in der Lunge und Einkapselung von Viren WA2915/12-1**

Ziel des von der Deutschen Forschungsgemeinschaft DFG mit fast 900.000 Euro geförderten interdisziplinären Projektes ist es, herauszufinden, warum es das Phänomen so genannter "Superspreader" gibt. Die drei geförderten Forscherteams gehen den Fragen nach, wie die Viruspartikel im menschlichen Körper in die winzigen Aerosole verpackt werden und welche Mechanismen dann dazu führen, dass diese Aerosolpartikel anschließend in den Atemwegen anderer Menschen anhaften, dort platzen und zu weiteren Infektionen führen. Verfahrenstechniker entwickeln anschließend Simulationsmodelle, um belastbare Vorhersagen über die Verteilung und Verbreitung der Aerosole zu treffen.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Heike Walles  
**Förderer:** Bund - 01.10.2020 - 30.09.2025

### **Stimulate 2 - Teilprojekt Immunoprofilung**

Stimulate 2 - Teilprojekt Immunoprofilung - Bestimmung der für den Patienten individualisierten interventionell-onkologischen Therapieform zur kurativen minimalinvasiven bildgeführten Behandlung von Tumoren im iCT Setup

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Helmut Weiß  
**Förderer:** Haushalt - 01.10.2018 - 30.09.2024

### **Untersuchungen zur Adsorption von Wasser auf wohldefinierten 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 Elektroneneinfluss (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.

---

**Projektleitung:** apl. Prof. 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  $\alpha,\beta$ -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 donorstablierten 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. rer. nat. Phil Liebing  
**Förderer:** Haushalt - 01.10.2018 - 30.09.2024

### **Heterobimetallische Koordinationspolymere mit O,S-ditopen Liganden auf Basis von Aminosäuren**

Koordinationspolymere sind potentiell in der Lage sind, poröse dreidimensionale Strukturen (MOFs; metal-organic frameworks) auszubilden. Koordinationspolymere, die mindestens zwei verschiedene Metalle enthalten, können neue, interessante Eigenschaften aufweisen und so neuartige Anwendungen eröffnen. Ziele des Projekts sind die Synthese, Strukturaufklärung und Untersuchung der Eigenschaften neuer heterobimetallischer Koordinationspolymeren mit dithiocarbamat-funktionalisierten Carboxylat-Liganden (DTCCs). Diese Liganden sind leicht und preisgünstig zugänglich und können selektiv an ein hartes und ein weiches Metall koordinieren.

---

**Projektleitung:** Dr. habil. Jochen Vogt  
**Förderer:** Haushalt - 28.06.2021 - 28.06.2024

### **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.

## 7. VERÖFFENTLICHUNGEN

### BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

**Haak, Edgar; Hatzfeld, Jana; Skowaisa, Steffen; Jäckel, Elisabeth; Kaufmann, Julia**

Triaminocyclopentadienyl ruthenium complexes - new catalysts for cascade conversions of propargyl alcohols  
Chemistry - a European journal - Weinheim: Wiley-VCH . - 2021, insges. 12 S.;  
[Imp.fact.: 5.236]

**Hasemann, Georg; Betke, Ulf; Krüger, Manja; Walles, Heike; Scheffler, Michael**

Refractory metal coated alumina foams as support material for stem cell and fibroblasts cultivation  
Materials - Basel: MDPI, Bd. 14 (2021), 11; <http://dx.doi.org/10.3390/ma14112813> 10.25673/36901  
[Imp.fact.: 3.057]

**Liebing, Phil; Harmgarth, Nicole; Yang, Yi; McDonald, Robert; Engelhardt, Felix; Kühling, Marcel; Edelmann, Frank T.; Takats, Josef**

Synthesis and structure of alkaline earth Bis{hydrido-tris(3,5-diisopropyl-pyrazol-1-yl)borate} complexes:  
Ae(TpiPr<sub>2</sub>)<sub>2</sub> (Ae = Mg, Ca, Sr, Ba)  
Inorganic chemistry - Washington, DC: American Chemical Society, Bd. 60 (2021), 3, S. 1877-1884;  
[Imp.fact.: 4.825]

**Wacker, Max; Riedel, Jan; Walles, Heike; Scherner, Maximilian Philipp; Awad, George; Varghese, Sam; Schürlein, Sebastian; Garke, Bernd; Veluswamy, Priya; Wippermann, Jens; Hülsmann, Jörn**

Comparative evaluation on impacts of fibronectin, heparin chitosan, and albumin coating of bacterial nanocellulose  
small-diameter vascular grafts on endothelialization in vitro  
Nanomaterials - Basel: MDPI, 2011, Bd. 11 (2021), 8, insges. 24 S.;  
[Imp.fact.: 5.076]

### LEHRBÜCHER

**Vogt, Jochen**

Exam Survival Guide: Physikalische Chemie  
[Heidelberg]: Springer Spektrum, 2021, XIX, 389 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 24 cm - (Lehrbuch)

### ABSTRACTS

**Schmelzer, Janett; Hasemann, Georg; Regenber, Maximilian; Betke, Ulf; Krüger, Manja; Walles, Heike; Scheffler, Michael**

Biocompatibility of pure refractory metals and their combination as high entropy alloys  
Intermetallics 2021 - International Conference, 4th till 8th October 2021 : Educational Center Kloster Banz,  
Germany : programme and abstracts - Jena, Germany: Conventus Congressmanagement & Marketing GmbH,  
2021; Krüger, Manja . - 2021, S. 172-173;

### DISSERTATIONEN

**Dammler, Kathleen; Scheffler, Michael [AkademischeR BetreuerIn]; Scheffler, Franziska [AkademischeR BetreuerIn]**

Keramikschaüme mit hoher Stegporosität  
Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für  
Maschinenbau 2021, 1 Online-Ressource (XVIII, 257 Seiten, 111,81 MB), Illustrationen ;  
[Literaturverzeichnis: Seite 181-202]