

## AK Kersting

Unser Arbeitskreis bietet aus unseren Forschungsgebieten (Supramolekulare Koordinationschemie, Bioanorganische Chemie, Molekularer Magnetismus) die folgenden Themen für Bachelor-Arbeiten an:

- a) Bioanorganische Chemie: Modellverbindungen für das aktive Zentrum der Urease
- b) Supramolekulare Chemie: Calixaren-artige Rezeptoren für die Anionenerkennung
- c) Supramolekulare Katalyse: Katalyse mit metallierten Container-Molekülen
- d) Materialwissenschaften: Zweikernkomplexe als Bausteine für molekulare Magnete

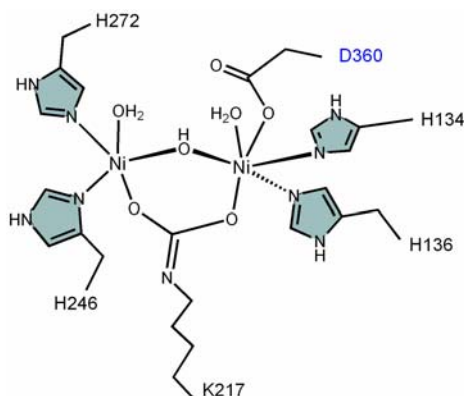
Kurze Beschreibungen dieser Projekte sind weiter unten bzw. auch im Internet ([www.uni-leipzig.de/~bkerst](http://www.uni-leipzig.de/~bkerst)) aufgeführt. Für weitere Informationen wenden Sie sich bitte an Herrn Prof. Kersting (Büro Nr. 150, Tel. 9736143) oder an seine Mitarbeiter (Labor Nr. 210, Tel. 9736142).

**Interessenbekundung sollte zwecks Organisation und Planung möglichst frühzeitig vor Beginn des Sommersemesters 2005 erfolgen !**

### AK KERSTING, Thema 1

#### Bioanorganische Chemie. Modellverbindungen für das aktive Zentrum der Urease.

Dieses Projekt soll Ihnen einen Eindruck von der spannenden und hochaktuellen Bioanorganischen Chemie vermitteln. In der "Bioanorganischen Chemie" wird die Funktionsweise der natürlichen Metalloenzyme anhand von biomimetischen Modellverbindungen untersucht. Die hierbei erkannten Prinzipien der enzymatischen Katalyse nutzen wir dann für die Entwicklung neuer Katalysatoren für organische Transformationen. In diesem Projekt geht es um Modellverbindungen für die Urease.



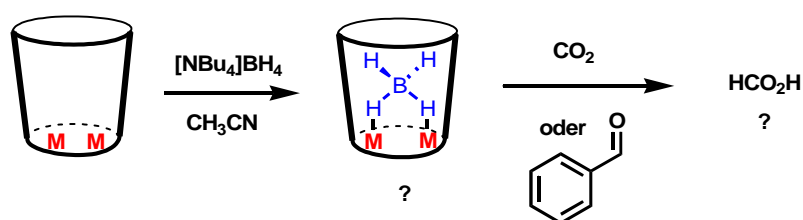
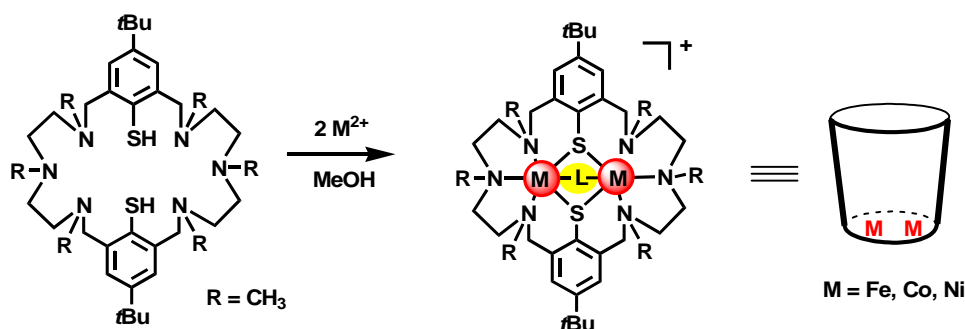
**Aktives Zentrum der Urease aus *Klebsiella Aerogenes***

Sie werden sich in diesem Projekt zunächst mit der Struktur des nativen Enzyms aus *Klebsiella Aerogenes* (vgl. dazu R.P. Hausinger *Science* **1995**, 268, 998) und seiner Funktion vertraut machen. Anschließend nutzen Sie diese Informationen für die Konstruktion einer Modellverbindung. Sie sollen die Eigenschaften (z.B. Farbe, UV/Vis-Spektrum, Infrarotspektrum, Struktur, Reaktionsverhalten) ihrer Modellverbindung mit den Eigenschaften des natürlichen Metalloenzym vergleichen, um so Hinweise auf die Funktionsweise der Urease zu erhalten. Mit diesen Informationen sollen dann Verbesserungsvorschläge für eine Modellverbindung der "zweiten Generation" gegeben werden. Für die Darstellung des Modellkomplexes sollen möglichst die in unserem Arbeitskreis vorhandenen Ressourcen (d.h. Liganden) verwendet werden.

## AK KERSTING, Thema 2

### b) Supramolekulare Chemie: Calixaren-artige Rezeptoren für die Anionenerkennung

Container-Moleküle zeichnen sich dadurch aus, dass sie einen inneren Hohlraum zur Aufnahme von Gastmolekülen (Anionen, Kationen, Neutralmoleküle) aufweisen. Durch eine mehr oder weniger ausgeprägte "molekulare Verkapselung" resultieren oftmals neue Eigenschaften der Gastverbindungen, die man im freien bzw. solvatisierten Zustand nicht beobachtet. So kann durch Verkapselung das Reaktionsverhalten eines einzelnen Moleküls genau gesteuert werden. Die Verbindungen könnten in naher Zukunft als "maßgeschneiderte Reaktionsbehälter" eingesetzt werden und gegenüber herkömmlichen Reagentien eine viel höhere Substratselektivität besitzen.

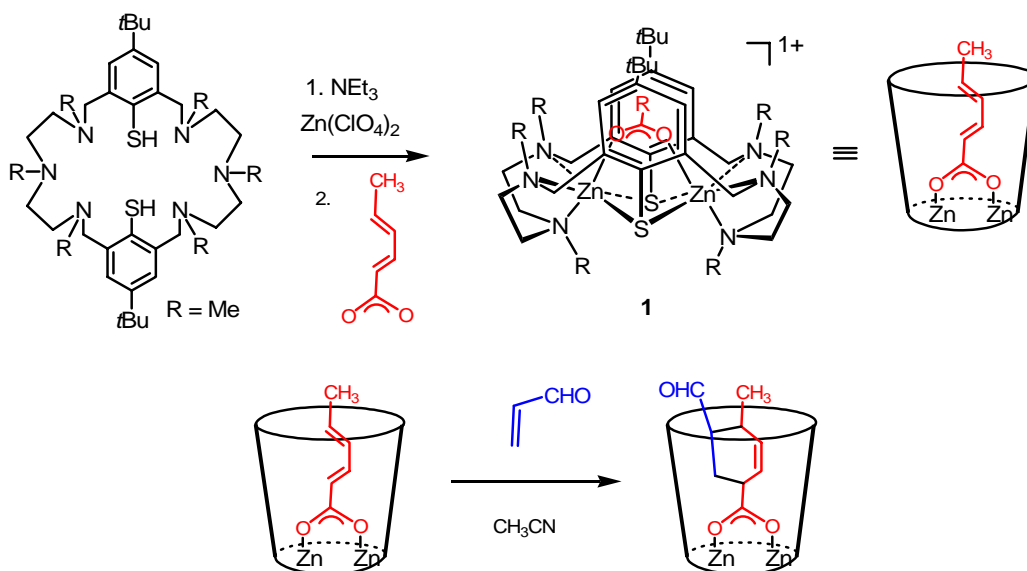


Hier soll der Frage nachgegangen werden, ob Container-Moleküle des oben abgebildeten Typs das Boranat-Anion "erkennen" und binden. Die resultierenden Verbindungen sollen auch auf ihre Reduktionskraft hin untersucht werden. Als Metalle sollen  $M = \text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ , und  $\text{Ni}^{2+}$  zum Einsatz kommen. Die Wirt-Gast-Komplexe werden mit folgenden Methoden charakterisiert: Infrarotspektroskopie, CHN-Analyse und - falls möglich - Kristallstrukturanalyse. In den Reduktionsreaktionen dienen Kohlendioxid oder aromatische Aldehyde als Testsubstrate.

### AK KERSTING, Thema 3

#### c) Supramolekulare Katalyse: Katalyse mit metallierten Containermolekülen.

In diesem Projekt sollen Container-Moleküle dargestellt werden, die eine reaktive Dieneinheit in ihrer Bindungstasche tragen. Diese Verbindungen sollen auf ihre Diels-Alder-Reaktivität hin getestet werden. Es kann davon ausgegangen werden, dass die Bindungstasche einen Einfluß auf den Verlauf und die Geschwindigkeit der Diels-Alder-Reaktion ausüben wird. Solche Untersuchungen zwischen eingelagerten Gästen und exogenen Substraten gewären auch Einblicke in den Einfluss der Umgebung auf den Übergangszustand einer Reaktion, was nützlich für das Design ganz neuartiger Katalysatoren sein könnte.

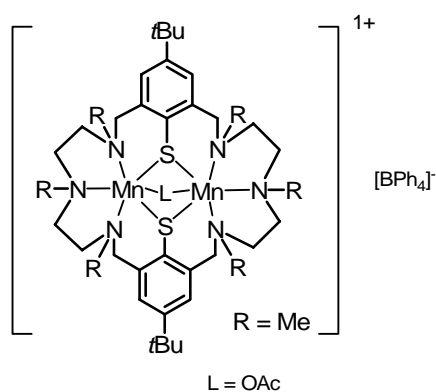


**Aufgabenstellung.** Die Arbeiten beinhalten die Synthese des Sorbinatverbrückten Dizinkkomplexes **1** und dessen anschließende Umsetzung mit elektronenarmen Dienen wie z.B. Acrylonitril oder Acrolein. Als Untersuchungsmethoden sollen die  $^1\text{H}$ - und die  $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektroskopie herangezogen werden.

## AK KERSTING, Thema 4

### d) Materialwissenschaften: Zweikernkomplexe als Bausteine für molekulare Magnete

In dem Forschungsschwerpunkt "Molekularer Magnetismus" geht es um den gezielten Aufbau magnetischer Materialien. Es geht bei diesen Arbeiten darum, magnetisches Verhalten auf molekularer Ebene zu verstehen bzw. zu steuern und somit bestimmte magnetische Eigenschaften mit weiteren interessanten Materialeigenschaften kombinieren zu können. Die hierbei gewonnenen Erkenntnisse sollen letztlich für den Aufbau von Koordinationsverbindungen genutzt werden, die als funktionelle Bausteine in der Nanotechnologie verwendet werden können.



**Aufgabenstellung:** Es sollen zweikernige Metallkomplexe hergestellt werden, die magnetische Eigenschaften aufweisen. Die magnetische Suszeptibilität der Komplexe soll als Funktion der Temperatur bestimmt werden. Mittels quantenmechanischer Rechenverfahren soll dann die Austauschwechselwirkung zwischen den Elektronenspins bestimmt werden. Ein konkretes Syntheseziel ist der oben gezeigte dinukleare Mangan-Komplex, der als Tetraphenylboratsalz isoliert werden soll. Als weitere Charakterisierungsmethoden sollen die IR- und die UV/Vis-Spektroskopie herangezogen werden.