

■ **Forschungsgruppe**  
**Priv.-Doz. Dr. Burkhard Kirste**

Institut für Organische Chemie  
Takustr. 3  
1000 Berlin 33  
Tel.: 030/838 5357

**Wissenschaftlicher Werdegang**

Diplom: 1974, FU Berlin  
Promotion: 1977, FU Berlin  
Habilitation: 1985, FU Berlin  
Auslandsaufenthalte: 1981-1982 Postdoktorand bei Prof. Dr. H. van Willigen, Univ. of Massachusetts, Boston, Massachusetts, USA

**Kooperationspartner**

Prof. Dr. H. Kurreck, FU Berlin

**Förderung**

Deutsche Forschungsgemeinschaft, Fonds der Chemischen Industrie

**Zugehörigkeit zur Forschungsstruktur**

DFG-Schwerpunktprogramm „Thermotrope Flüssigkristalle“

**Ausgewählte Publikationen**

Kirste, B.: „ $^{13}\text{C}$  ENDOR Studies of Organic Radicals in Natural Isotopic Abundance“. J. Magn. Reson. 62, 242-259 (1985)  
Kirste, B., West, R., Kurreck, H.: „Natural Abundance  $^{13}\text{C}$  and  $^{29}\text{Si}$  ENDOR Studies of Cyclopolysilane Radical Anions“. J. Am. Chem. Soc. 107, 3013-3016 (1985)  
Kirste, B., Kurreck, H., Sordo, M.: „Synthesis and ENDOR Studies of Selectively Deuterated Galvinoxyl Radicals. Complete Determination of the C-13 Hyperfine Coupling Constants of Coppinger's Radical“. Chem. Ber. 118, 1782-1797 (1985)  
Kirste, B., Broser, W., Grein, K., Kurreck, H., Schlömp, G.: „Untersuchung des Spindichtetransfers in Cyclopropyl- und Cyclohexylgruppen mit ENDOR und TRIPLE-Resonanz, INDO- und MINDO/3-Rechnungen“. Chem. Ber. 118, 3464-3480 (1985)  
Kurreck, H., Kirste, B., Lubitz, W.: „ENDOR-Spektroskopie – eine fortschrittliche Methode zur Strukturuntersuchung organischer Radikale“. Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 23, 173-194 (1984)

**Abstract**

*Investigations of organic radicals in isotropic and in liquid-crystalline solutions by means of EPR and ENDOR spectroscopy provide a detailed insight into the electronic and geometric structure as well as the dynamic behavior of these paramagnetic molecules. The experimental data i.e. hyperfine and quadrupole coupling constants, allow a sensitive test of quantum calculations. Precise information about the ordering in liquid crystals, the dynamic behavior of mesophases, and about host-guest interactions is obtained.*

**Forschungsprojekte**

■ **1: Flüssigkristall-Untersuchung mit paramagnetischen Spinsonden**

**Schwerpunkte**

Lösungen von organischen Radikalen in Flüssigkristallen mit verschiedenartigen Mesophasen (nematisch, smek-tisch und cholesterisch) werden mit EPR- und ENDOR-spektroskopischen Methoden untersucht.

**Ziele**

Erkenntnisse über die Phasenstruktur, den Ordnungsgrad und das dynamische Verhalten von flüssigkristallinen Phasen sowie über Wirt-Gast-Wechselwirkungen sollen gewonnen werden.

■ **2: Untersuchung von Struktur und Dynamik organischer Radikale mit EPR- und ENDOR-Spektroskopie.**

**Schwerpunkte**

Messungen der Hyperfeinwechselwirkungen (Elektron/Kern) in paramagnetischen organischen Verbindungen mit Hilfe der EPR-Spektroskopie und der ENDOR-Spektroskopie an Protonen und anderen Kernen (z.B. H-2, C-13, N-14, F-19, Si-29).

**Ziele**

Die Ziele dieser Untersuchungen bestehen in der Aufklärung der Elektronenverteilung (Spindichte), der Struktur und des dynamischen Verhaltens von organischen Radikalen.

■ **Methoden (1 und 2)**

EPR- und ENDOR-Spektroskopie.

■ **Anwendungsmöglichkeiten (1 und 2)**

Die durchgeführten Projekte vermitteln detaillierte Aussagen über die Eigenschaften von Flüssigkristallen bzw. von organischen Radikalen. Die experimentellen Daten erlauben einen empfindlichen Test von quantenmechanischen Modellrechnungen.