

Schwerpunktprogramm

„Materialsynthese nahe Raumtemperatur“



Projektbeschreibung

Synthese anorganischer Materialien in ionischen Flüssigkeiten: Aufklärung der Reaktionsmechanismen vom Komplex zum Kristall

Antragsteller	Prof. Dr. Barbara Kirchner
Institution	Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn Institut für Physikalische und Theoretische Chemie Mulliken Center for Theoretical Chemistry Beringstraße 4+6 53115 Bonn Tel.: 0228/73-60442 E-Mail: kirchner@thch.uni-bonn.de
Antragsteller	Prof. Dr. Bernd Smarsly
Institution	Justus-Liebig-Universität Gießen Fachbereich Biologie und Chemie Physikalisch-Chemisches Institut Ludwigstraße 23 35390 Gießen Tel.: 0641/99-34599 E-Mail: bernd.smarsly@phys.chemie.uni-giessen.de

Kurzfassung des Projektantrags

Unter Verwendung von ionischen Flüssigkeiten wurde in den vergangenen Jahren eine Vielfalt an neuartigen Synthesen von kristallinen und anorganischen Materialien entwickelt. Trotz vorteilhafter Eigenschaften und Synthese-Bedingungen gegenüber konventionellen Methoden mangelt es stark am mechanistischen Verständnis, besonders was die dirigierende Rolle der ionischen Flüssigkeiten angeht. Wir setzen uns hier zum Ziel, die Synthese von mehreren ungewöhnlichen Modifikationen des TiO₂, nämlich der Bronze-Phase TiO₂(B) und einem jüngst synthetisiertem Titanoxyhydroxy-Fluorid, aufzuklären. Beide werden unter erstaunlich milden Bedingungen aus einer Mischung von einfachen ionischen Flüssigkeiten mit Wasser und TiCl₄ erhalten. Unsere bisherigen Experimente zeigten bereits den prägenden Einfluss von ionischen Flüssigkeiten, welche Fluor-Atome im Anion enthalten, und von Mischungen zweier Kationen mit jeweils Seitenketten von unterschiedlicher Länge.

Die wesentliche Aufgabenstellung unseres Projektes besteht nun darin, mechanistische Zusammenhänge zu klären, und zwar sowohl zwischen der molekularen Struktur der Reaktionslösung und der Bildung von Fluorhydroxotitan-Komplexen als auch der Bildung von Clustern. Darüber hinaus möchten wir die Entstehung von Primär- und Nanopartikeln verstehen. Unser Ansatz liegt in der Variation von ionischen Flüssigkeiten (z. B. Ersatz von $[\text{BF}_4]^-$ durch $[\text{F}]^-$) und in der Verwendung alternativer Ti-Verbindungen wie $[\text{NH}_4][\text{TiF}_6]$. Einerseits sollen in-situ-Methoden (Raman-Spektroskopie, Röntgenweit- und Kleinwinkelstreuung) dabei helfen, die relevanten Zwischenstufen auf molekularer Ebene und Nanometer-Skala zu identifizieren, andererseits stärkt die Berechnung der molekularen Bildungsmechanismen und des Wachstums von Clustern aus Komplexen das mechanistische Verständnis. Zu diesem Zweck werden neue Wechselwirkungspotentiale parametrisiert, aber auch solche Simulationen durchgeführt, die mit expliziter elektronischer Struktur-Berechnung arbeiten. Es werden dabei Computer-Experimente aufgesetzt, die dem Experiment nicht zugängliche Einsichten erlauben, zum Beispiel zum Einfluss von lokaler Polarität, spezifischen Wechselwirkungen oder gewissen Zwischenstufen.