

## Schwerpunktprogramm

### „Materialsynthese nahe Raumtemperatur“



#### Projektbeschreibung

### Von der Geburt bis zum Wachstum von metastabilen Metalloxiden in Ionischen Flüssigkeiten

Antragsteller **Prof. Dr. Sebastian Polarz**

Institution Universität Konstanz  
Fachbereich Chemie  
Arbeitsgruppe Anorganische Funktionsmaterialien  
Universitätsstraße 10  
78464 Konstanz  
Telefon +49 7531 88-4415  
Fax +49 7531 88-4406  
E-Mail [sebastian.polarz@uni-konstanz.de](mailto:sebastian.polarz@uni-konstanz.de)

Antragsteller **Prof. Dr. Bernd Smarsly**

Institution Justus-Liebig-Universität Gießen  
Fachbereich Biologie und Chemie  
Physikalisch-Chemisches Institut  
Heinrich-Buff-Ring 58  
35392 Gießen  
Telefon +49 641 99-34590  
Fax +49 641 99-34509  
E-Mail [bernd.smarsly@phys.chemie.uni-giessen.de](mailto:bernd.smarsly@phys.chemie.uni-giessen.de)

#### Kurzfassung des Projektantrags

Es ist in der Chemie allgemein bekannt, dass die Energie von Übergangszuständen durch das umgebende Lösungsmittel beeinflusst werden kann und man so auch auf den Reaktionsverlauf einwirken kann. In den Materialwissenschaften können nanodimensionierte Keime als solche Übergangszustände angesehen werden, die für die Steuerung der Partikelform oder von alternativen Kristallstrukturen eingesetzt werden. In beiden Fällen ist man sehr oft an thermodynamisch weniger begünstigten, d. h. metastabilen Produkten interessiert, im vorliegenden Fall also ungewöhnlichen Formen oder Polymorphen. Neben der Kristallstruktur bedingt auch die Form eines Partikels seine Eigenschaften, da diese mit der Art und Häufigkeiten bestimmter, zu Netzebenen korrespondierender Oberflächen korreliert. Um die genannten, metastabilen Produkte erhalten zu können, ist es notwendig die festen Phasen durch kinetisch kontrollierte Reaktionswege generieren zu können. Die Hauptaufgabe des Projektes besteht in der Untersuchung der Effekte von hochpolaren, aber nicht-wässrigen Lösungsumgebungen (Ionische Flüssigkeiten) auf die Bildung von metastabilen Partikelzuständen: Formen, welche von der thermodynamisch stabilsten Form (Wulff-Form) abweichen, und die Ausbildung von polymorphen Kristallstrukturen. Wir werden die genannten, kinetisch-kontrollierten Bedingungen durch die Kombination von

Molekülchemie mit Materialsynthese und verfeinerten in situ-Untersuchungen realisieren. Es werden von uns hochreaktive Organometallprecursoren eingesetzt werden, um wichtige Metalloxide mit Halbleitercharakter z. B. Zinkoxid (ZnO) oder Manganoxide ( $Mn_xO_y$ ) herzustellen. Eine besondere Herausforderung stellt die Synthese von neuartigen Precursoren dar, die in einem Molekül widerstrebende Gruppen enthalten (z. B. oxidierend und reduzierend). Dadurch soll die Bildung von Partikeln bereits bei sehr niedrigen Temperaturen, nahe Raumtemperatur oder darunter, oder sogar durch nicht-konventionelle Trigger wie Licht initiiert werden. Wir werden eine fundierte Wissensbasis nicht nur dadurch erarbeiten, dass die erhaltenen Produkte genauestens untersucht werden, sondern auch dadurch, dass umfangreiche Röntgen-Streuuntersuchungen (Klein- und Weitwinkel) in einem in situ-Modus durchgeführt werden. Hier kommt der Vorteil der genannten Übergangsmetalloxide zum Tragen, da diese eine höhere Elektronendichte im Vergleich zu den organischen, ionischen Flüssigkeiten aufweisen und somit Streuuntersuchungen mit hoher tempospatialer Auflösung ermöglicht werden. Wir werden somit die sehr frühen Abschnitte der Bildung der Partikel beobachten, um der Frage nachzugehen, an welchem Punkt die Festlegung von Partikelform und Kristallstruktur geschieht.