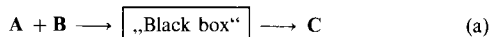


Festkörperchemie: Rückkehr zum Gleichgewicht**

Robert Schöllhorn*

Die Chemie, ein Teilgebiet der Naturwissenschaften, stellt sich als Januskopf mit zwei wohldefinierten Gesichtern dar: einem *statischen*, dem die Bestimmung und Beschreibung der Grundzustandseigenschaften der Materie in bezug auf die geometrische und die elektronische Struktur, die chemische Bindung und die physikalischen Eigenschaften zugeordnet sind, und einem *dynamischen*, das jede Art von zeitabhängigen, strukturellen, elektronischen und zusammensetzungsmäßigen Umwandlungen sowie insbesondere die Reaktivität als eine zentrale funktionelle Eigenschaft chemischer Systeme beschreibt. In der Festkörperchemie wurde ein beachtlicher Fortschritt im Hinblick auf das Verständnis der Zusammenhänge zwischen Struktur, Bindung und physikalischen Eigenschaften erreicht. Das Verständnis der besonders wichtigen Beziehungen dieser statischen Parameter zu den dynamischen Aspekten, d. h. der Reaktivität von Festkörpern, ist wesentlich weniger weit entwickelt.

Dieser Sachverhalt läßt sich unschwer anhand eines schematisch vereinfachten Modells der konventionellen Synthesekunst in der Festkörperchemie verdeutlichen. Obwohl die „Synthese“ eindeutig zum dynamischen Aspekt der Chemie zählen sollte, wird sie tatsächlich im wesentlichen als statisches Spiel betrieben. Bei der üblichen Vorgehensweise [Gl. (a)] werden die



Ausgangsverbindungen **A** und **B**, deren statische Eigenschaften wohldefiniert sind, bestimmten experimentellen Bedingungen unterworfen, die auf einer Kombination aus wertvoller praktischer Erfahrung, qualitativen Leitlinien, Intuition und „Glück“ beruhen. Diesem Prozeß schließt sich gewöhnlich die sorgfältige Untersuchung und Charakterisierung der statischen Eigenschaften des neuen Produkts **C** hinsichtlich der gemittelten geometrischen Struktur, der chemischen Bindung, der physikalischen Eigenschaften und der Einordnung in ein Beziehungssystem verwandter Stoffe an. Die nachfolgenden Synthesoperationen berücksichtigen dann jeweils die bei vorangehen-

den Experimenten gewonnenen Erfahrungen. Entscheidend ist hierbei die Tatsache, daß in der Regel die „Black box“, die sich zwischen **A/B** und **C** befindet und die die *dynamischen* Aspekte des ablaufenden chemischen Vorgangs (d. h. den Reaktionsmechanismus) verbirgt, aus guten Gründen nicht „geöffnet“ wird.

Die intelligente Synthese neuer Stoffe ist zweifellos ein notwendiges und höchst wertvolles Arbeitsziel sowie eine permanente Quelle der Innovation im Bereich der Festkörperchemie und der Materialforschung. Rationale Synthesepaltung und Modellentwicklung auf theoretischer Basis – beides wesentliche Komponenten der heutigen Molekülchemie – sind jedoch auf diesem Gebiet (von wenigen Ausnahmen abgesehen) kaum ausgebildet^[1–6]. In den letzten Jahren ist das „Schneidern von Materialien“ zu einem Modebegriff in der Festkörperchemie und der Materialforschung geworden. Diese vielversprechende Bezeichnung suggeriert die Existenz eines rationalen Ansatzes für Synthesestrategien; dies entspricht jedoch keineswegs der aktuellen Situation und erweckt unrealistische Erwartungen hinsichtlich der uns gegenwärtig zur Verfügung stehenden Möglichkeiten. Es ist notwendig, hier auf die schlichte Tatsache hinzuweisen, daß ohne eine angemessene Kenntnis des Inhalts der Black box – d. h. ohne die systematische Untersuchung von Reaktionsmechanismen – dieses anspruchsvolle Ziel nicht erreicht werden kann.

An dieser Stelle kommen wir zurück zu der oben getroffenen Feststellung, daß eine Öffnung der Black box in der Regel vermieden wird. Dieser Sachverhalt ist auf mehrere Ursachen zurückzuführen:

1. Die meisten Festkörper-Reaktionsmechanismen sind außerordentlich komplex und beinhalten Eigenschaften, die in molekularen Systemen gewöhnlich keine Rolle spielen, z. B. das kollektive/kooperative Verhalten fester Stoffe, die Existenz von strukturspezifischen Nichtgleichgewichtsdefekten und der Einfluß von Grenzflächenphänomenen.
2. Die eingehende Aufklärung einzelner Reaktionsmechanismen bei Festkörpersystemen ist sehr aufwendig hinsichtlich Arbeitskapazität und Zeithorizont (häufig in der Größenordnung einer Dekade), und in der Regel wird eine Vielfalt spezifischer analytischer Verfahren benötigt, um – meist indirekte – Beweise für die Bestätigung von Modellen zu gewinnen.
3. Das Arbeitsgebiet ist deshalb kaum attraktiv für jüngere Wissenschaftler, die unter dem Zeitdruck einer Qualifikation in akademischen Institutionen stehen und sich gleichzeitig mit den Schwierigkeiten konfrontiert sehen, Langzeitprojekte im Rahmen der gegenwärtigen Forschungsförderpolitik

[*] Prof. Dr. R. Schöllhorn
Institut für Anorganische und Analytische Chemie
der Technischen Universität
Straße des 17. Juni 135, D-10623 Berlin
Telefax: Int. + 30/314-21106
E-mail: schoe@wap0209.chem.tu-berlin.de

[**] Über das Thema „Synthesepaltung in der Festkörperchemie“ wurde kürzlich umfassend berichtet: J. C. Schön, M. Jansen, *Angew. Chem.* **1996**, *108*, 1358; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1996**, *35*, 1286.

durchzuführen. Unter den gegebenen Bedingungen sind somit naturgemäß syntheseorientierte Kurzzeitprojekte begünstigt.

4. Die zwangsläufige Konsequenz ist, daß es nur wenige Forschungsgruppen gibt, die aktiv und systematisch in diesem Bereich tätig sind, und damit auch eine eng begrenzte Kapazität an akademischem Lehrpersonal für die Ausbildung und Motivierung jüngerer Wissenschaftler^[6, 7].

Es ergibt sich demnach die paradoxe Situation, daß ein Forschungsgebiet, das grundlegend für die Festkörperchemie und die Materialforschung und eine unerläßliche Voraussetzung für Fortschritte im Bereich der Entwicklung rationaler und ökonomischer Synthesestrategien ist, zwangsläufig und zum Teil aus

taktischen Gründen vernachlässigt wurde. Wir sollten erkennen, daß die Zeit gekommen ist, nach Wegen zu suchen, die eine Rückkehr zu einem angemessenen Gleichgewicht der beiden Gesichter der Festkörperchemie ermöglichen.

Stichworte: Festkörperchemie · Materialforschung

- [1] H. Schäfer, *Angew. Chem.* **1971**, 83, 35; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1971**, 10, 43.
- [2] F. J. DiSalvo, *Science* **1990**, 247, 649.
- [3] G. D. Stucky, *Prog. Inorg. Chem.* **1992**, 40, 99.
- [4] A. K. Cheetham, *Science* **1994**, 264, 794.
- [5] R. Schlögl, *Angew. Chem.* **1994**, 106, 319; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1994**, 33, 311.
- [6] A. W. Sleight, *MRS Bull.* **1989**, 14(9), 5.
- [7] V. Boldyrev, *Adv. Mater.* **1992**, 4, 70.

Die Stellung von Literaturverweisen

Mancher Autor hat schon sich oder uns gefragt, warum wir in der deutschen Ausgabe der *Angewandten Chemie* Hinweise auf Literaturzitate **vor** und in der englischen Ausgabe **hinter** Satzzeichen platzieren. Eine deshalb eingeleitete „Nachforschung“ hat nun ergeben, daß auch in deutschsprachigen Empfehlungen zur Gestaltung wissenschaftlicher Texte der Platzierung hinter dem Satzzeichen der Vorzug gegeben wird.^[1] Aus diesem Grund und um uns und den Autoren das Leben zu erleichtern, werden wir daher **ab Januar 1997** auch in der deutschen Ausgabe die Literaturverweise **hinter** die Satzzeichen stellen. Unsere Autoren bitten wir, ab sofort bei eingereichten Manuskripten diese neue Gestaltung bereits zu berücksichtigen.

Vielen Dank

Die Redaktion

[1] *Rechtschreibung der deutschen Sprache und der Fremdwörter* (Duden Band 1), 19. Aufl., Bibliographisches Institut, Mannheim, **1986**, S. 73; H. F. Ebel, C. Bliefert, *Schreiben und Publizieren in den Naturwissenschaften*, 3. Aufl., VCH, Weinheim, **1994**, S. 227, 369.

