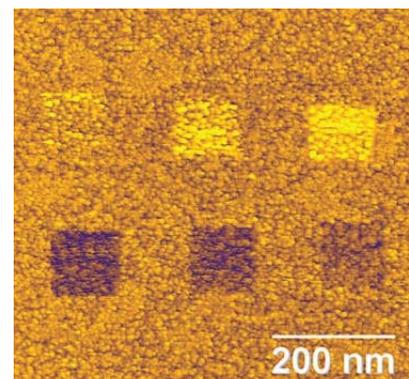
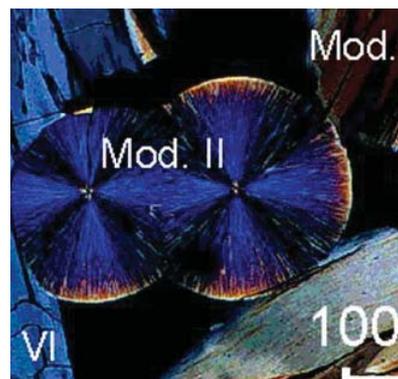
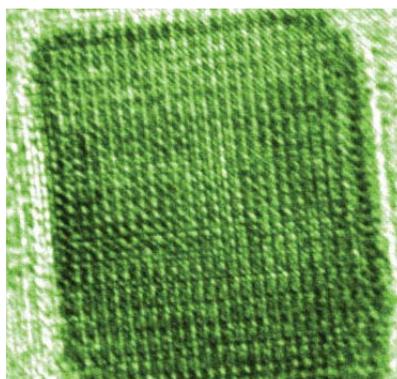
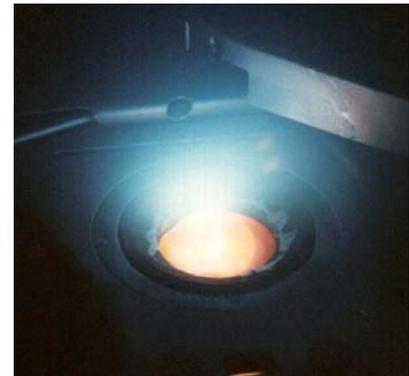
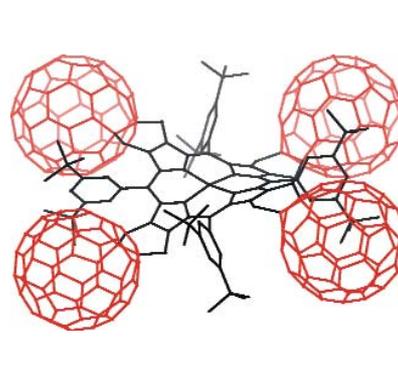
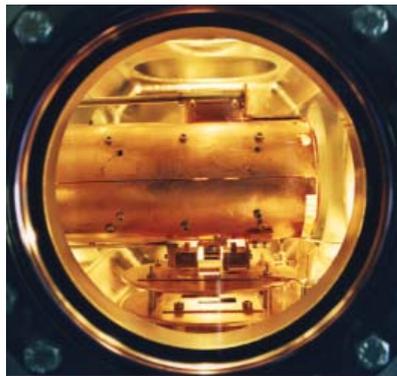
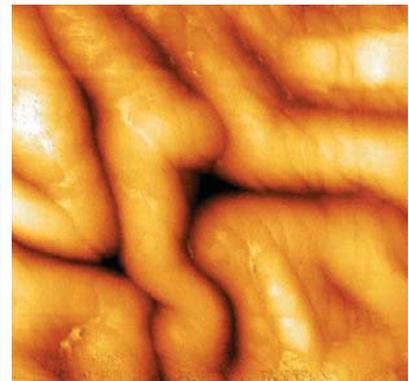
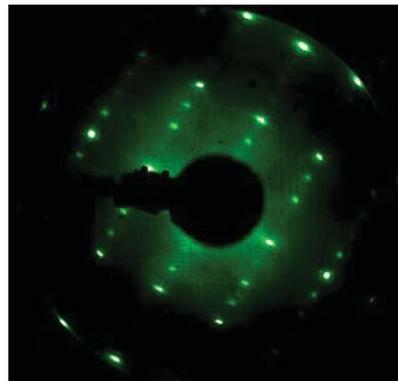
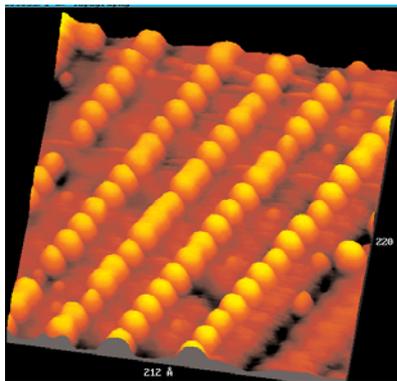


# ADVANCED MATERIALS:

## DESIGN, SYNTHESE UND ANALYSE HOCHENTWICKELTER MATERIALIEN

Eine Forschungsinitiative  
der Universität Innsbruck



## **Impressum:**

Für den Inhalt verantwortlich:

o. Univ.-Prof. Dr. Erminald Bertel

Institut für Physikalische Chemie, Universität Innsbruck, Innrain 52a, A-6020 Innsbruck

Tel. +43 512 507 5050; Fax:+43 512 507 2925; email: [erminald.bertel@uibk.ac.at](mailto:erminald.bertel@uibk.ac.at)

Stand: Frühjahr 2003

Herstellung: Fred Steiner, Rinn

## **Dank**

Der Hypo Tirol Bank und der Industriellenvereinigung Tirol gilt unser herzlicher Dank.  
Durch ihre großzügige Unterstützung wurde die Publikation dieser Broschüre erst möglich.



# Inhaltsverzeichnis

---

Zum Geleit	
DDr. Herwig van Staa, Landeshauptmann von Tirol .....	3
Dr. Hansjörg Jäger, Präsident der Wirtschaftskammer Tirol .....	4
Dr. Oswald Mayr, Präsident der Industriellenvereinigung Tirol .....	5
Dr. Harald Gohm, Geschäftsführer der Tiroler Zukunftsstiftung.....	6
DDr. Haio Harms .....	7
Advanced Materials: Design, Synthese und Analyse hochentwickelter Materialien .....	9
Erminald Bertel, Koordinator Forschungsinitiative "Advanced Materials"	
Makromolekulare Chemie und Polymeranalytik .....	13
A. Univ.-Prof. Mag. Dr. Michael R. Buchmeiser	
Institut für Analytische Chemie und Radiochemie	
Metallorganische Chemie und Katalyse .....	17
A. Univ.-Prof. Dr. Benno Bildstein	
Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie	
Materialwissenschaftliche Synthesechemie .....	19
A. Univ.-Prof. Dr. Herwig Schottenberger	
Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie	
Synthese, Struktur und Selbstorganisation von Fullerenen und funktionalisierten Fulleren-Derivaten .....	24
o. Univ.-Prof. Dr. Bernhard Kräutler	
Institut für Organische Chemie	
Polymorphie und Festkörpereigenschaften von Arznei- und Hilfsstoffen .....	26
A. Univ.-Prof. Dr. Ulrich J. Griesser	
Institut für Pharmazie, Abt. Pharmazeutische Technologie	
Fasern und Textilien .....	30
A. Univ.-Prof. Dr. Thomas Bechtold	
Institut für Textilchemie und Textilphysik	
Modellkatalysatoren .....	34
Univ.-Prof. Dr. Konrad Hayek	
Institut für Physikalische Chemie	
Heterogene Katalyse und Elektrochemie .....	39
A. Univ.-Prof. Dr. Reinhard Kramer	
Institut für Physikalische Chemie	

# Inhaltsverzeichnis

---

Festkörperoberflächen .....	42
o. Univ.-Prof. Dr. Erminald Bertel	
Institut für Physikalische Chemie	
Stress, Struktur und Wachstum Dünner Schichten.....	46
A. Univ.-Prof. Dr. Reinhard Abermann	
Institut für Physikalische Chemie	
Technologie Dünner Schichten .....	50
Prof. Dr. Hans K. Pulker	
Institut für Ionenphysik	
Arbeitskreis Cluster und Nanoteilchen .....	54
A. Univ.-Prof. Mag. Dr. Paul Scheier	
Institut für Ionenphysik	
Praxisorientierte Grundlagenforschung und materialwissenschaftliche Applikationen .....	58
o. Univ.-Prof. Dr. Peter W. Mirwald	
Institut für Mineralogie und Petrographie	
Materialwissenschaftliche Vorträge 2001 – 2002.....	64
Lehrveranstaltungen mit Bezug zur Materialwissenschaft WS 2002/2003 .....	69
Lehrveranstaltungen mit Bezug zur Materialwissenschaft SS 2003 (Planung).....	70

## Zum Geleit

---

### "ADVANCED MATERIALS" – FORSCHUNGSINITIATIVE DER UNIVERSITÄT INNSBRUCK

Die Entwicklung und der Ausbau neuester Techniken ist heute unverzichtbar und dient gemeinsam mit der Forschung dem Wohl der Bevölkerung. Die fortschreitende Globalisierung und Internationalisierung unserer Gesellschaft, der verstärkte Wettbewerb sowie der rasche Fortschritt stellen an die Wissenschaftler des 21. Jahrhunderts immer größere Anforderungen. Dabei spielen vor allem die Naturwissenschaften eine nicht mehr wegzudenkende Rolle.

Auf Grund der stetig wachsenden Anforderungen in der Wissenschaft etablieren sich in den Bereichen der Chemie, Physik, Pharmazie und der Mineralogie, immer mehr Forschungsgruppen und Kooperationen. Nur mehr mit gegenseitiger Hilfestellung bei technisch aufwendigen Untersuchungen ist es möglich, herausragende Ergebnisse zu erzielen.

Darum freut es mich als Landeshauptmann von Tirol ganz besonders, dass Forschungsinitiativen wie „Advanced Materials“ an der Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Innsbruck sich zusammenschließen, denn nur durch regelmäßigen Informationsaustausch und intensive Zusammenarbeit sind Probleme lösbar. Dieses gemeinsame Handeln ist gerade in einer wirtschaftlich unberechenbaren Zeit von größter Bedeutung und hilft, Arbeitsplätze zu sichern und Tirol als Wirtschaftsstandort und Innsbruck als Universitätsstadt zu festigen.

Ich hoffe daher, dass auch in Zukunft das Projekt "Advanced Materials" anderen Forschungsgruppen ein Vorbild ist und den Studenten optimale Rahmenbedingungen während ihrer universitären Ausbildung ermöglicht.

Ihr

DDr. Herwig van Staa  
Landeshauptmann von Tirol



## Zum Geleit

---

### WEITERENTWICKLUNG DES KOMPETENZBEREICHS MATERIALWISSENSCHAFTEN BRINGT NEUE UND VIELFÄLTIGE CHANCEN FÜR WISSENSCHAFT UND WIRTSCHAFT

Dr. Hansjörg Jäger  
Präsident der Wirtschaftskammer Tirol



Im letzten Jahrzehnt hat sich ein kontinuierlicher Wandel von einer rohstoffbasierten zu einer wissensbasierten Wirtschaft vollzogen. In beinahe allen Wirtschaftsbereichen ist dieser Wandel heute deutlich spürbar: "Wissen" und "Know-how" sind zum bedeutendsten Produktionsfaktor geworden. Dieser Wandel stellt Unternehmen und Universitäten gleichermaßen vor neue Herausforderungen: Wissens- und Technologietransfer sind nicht nur Schlagworte einer neuen Zeit, sondern mittlerweile unabdingbare Voraussetzungen für einen wettbewerbsfähigen Standort!

Die Wirtschaftskammer Tirol forciert daher die Zusammenarbeit von Forschung, Ausbildung und Anwendung in allen für unser Land zukunftssträchtigen Kompetenzbereichen. Aus diesem Grunde unterstütze ich die Forschungsinitiative "Advanced Materials" der Universität Innsbruck mit ihrem Anliegen einer möglichst breiten Zusammenarbeit mit gewerblichen und industriellen Partnern. Eine Kooperation bringt beiden Seiten deutliche Vorteile: Für die mitwirkenden Betriebe ergibt sich ein High-Tech-Schub und stärkt deren Wettbewerbsfähigkeit am nationalen und internationalen Markt. Das bedeutet eine kräftige Unterstützung für unsere Produktionswirtschaft, deren Exportvolumen dem des Tourismus in unserem Land keineswegs nachsteht. Für die Universität und deren Institute ergeben sich aus den Kooperationen zahlreiche neue Realisierungs- und Finanzierungsmöglichkeiten für ihre jeweiligen Forschungsgebiete.

Die Weiterentwicklung des Kompetenzbereichs Materialwissenschaften bringt somit neue und vielfältige Chancen für Wissenschaft und Wirtschaft, welche es zu nützen gilt!

## Zum Geleit

---

### WERTVOLLE IMPULSE FÜR ALLE BETEILIGTEN

Dr. Oswald Mayr  
Präsident der Industriellenvereinigung Tirol



Die Forschungs- und Entwicklungsquote zu steigern, muss auch in Tirol für die Betriebe, die Politik und die öffentliche Hand und insbesondere auch die Wissenschaft ein vorrangiges Ziel sein. Dies umso mehr, als gerade in den letzten Jahren eine beeindruckend große Zahl von Tiroler Unternehmen auf ihren ganz speziellen Gebieten weltweite Technologieführerschaft errungen hat. Diese gilt es zu halten und weiter auszubauen.

Dazu bedarf es intensiver und gezielter Forschungsanstrengungen – sowohl in den Betrieben selbst als auch an der Universität Innsbruck. Dann wird die Tiroler Industrie auch ihre Weltmarktführerschaft, die sie in speziellen Nischen erreicht hat, zum eigenen Wohl, zu dem der Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter wie auch des ganzen Landes festigen und erweitern können.

Für die Tiroler Industrie kommt dabei der angewandten Forschung unbestritten Vorrang vor allgemeiner Grundlagenforschung zu!

In der Vergangenheit ist die Universität Innsbruck mit ihren Leistungen und Forschungsfeldern viel zu wenig ins Bewußtsein der Tiroler Betriebe getreten. Ursache dafür war nicht zuletzt eine Haltung, aus der heraus sich Forscher vor allem der „reinen“ Wissenschaft verpflichtet gefühlt haben. Es war damit aber vielleicht auch ein wenig die Scheu davor verbunden, sich mit seinen Forschungsergebnissen außerhalb der wissenschaftlichen Gemeinschaft messen zu lassen und einer konkreten Überprüfung durch die Realität vor allem des wirtschaftlichen Lebens – der betrieblichen Umsetzung ebenso wie des wirtschaftlichen Erfolges – zu stellen.

Umso mehr begrüßen wir die vorliegende Initiative mit "Advanced Materials" einen Leistungskatalog zu erstellen, in dem sich ein wichtiger Teil der Institute der Naturwissenschaftlichen Fakultät präsentiert. Für die Betriebe ist das ein Angebot, eine Einladung, ohne Vorbehalte die Leistungen einzelner Institute oder auch nur einzelner Forscher in Anspruch zu nehmen. Dies wird verstanden werden.

So bin sicher, dass auf diese Weise ein neues auf einander Zugehen zwischen Wissenschaft und betrieblicher Praxis angestoßen wird und daraus viele wertvolle Impulse für alle Beteiligten entstehen werden.

## Zum Geleit

---

ES GILT, INNOVATIVE WEGE DER SYNTHESE EINZUSCHLAGEN

Dr. Harald Gohm  
Geschäftsführer der Tiroler Zukunftsstiftung



Bedingungen, Herausforderungen und Strukturen unserer modernen Wissensgesellschaft haben sich gewandelt. Vernetzung, Interdisziplinarität und Technologietransfer sind nicht nur mehr Schlagworte einer politischen Diskussion, sondern anspruchsvolle Realität all jener, die sich dem wissenschaftlichen und technologischen Fortschritt unserer Gesellschaft verpflichtet haben.

In einem Markt, der zunehmend globaler agiert, gilt es, neue Konzepte zu entwickeln, um international konkurrenzfähig zu bleiben.

In einer Forschungslandschaft, die immer differenziertere Ergebnisse hervorbringt, gilt es, innovative Wege der Synthese einzuschlagen, und diese der interessierten Öffentlichkeit zu kommunizieren. Die Forschungsinitiative "Advanced Materials" der Universität Innsbruck ist einer dieser Schritte in die richtige Richtung.

Es ist dabei nicht nur gelungen, die Forschungskapazitäten mehrerer Institute der naturwissenschaftlichen Fakultät zu bündeln, sondern mit dem Schwerpunkt „Materialwissenschaften“ den Fokus auf ein Thema zu legen, das national, wie international höchste Relevanz besitzt.

Gleichzeitig wurde mit der gemeinsamen Herausgabe dieser Broschüre ein Signal gesetzt – ein Signal für ein verstärktes Auftreten der beteiligten Institute in der Öffentlichkeit, ein Signal für mehr Kooperation zwischen Wissenschaft und Wirtschaft.

Und es ist ein klares Bekenntnis der beteiligten ForscherInnen zu ihrem wissenschaftlichen Auftrag, der ein zweifacher ist:

- Die Grundlagenforschung voranzutreiben, um die Basis der technologischen Entwicklung zu schaffen.
- Die Anwendungsforschung zu forcieren, um die Innovationskraft der heimischen Wirtschaft zu stärken.

## Zum Geleit

---

### INTERDISZIPLINÄRE, NATURWISSENSCHAFTLICHE KOMPETENZBÜNDELUNG

Dr. Dr. Haio Harms  
Leiter Forschung und Entwicklung, Lenzing AG



Mit der Etablierung eines Schwerpunktes auf dem Gebiet der Materialwissenschaften setzt die Universität Innsbruck einen richtigen Schritt, zur richtigen Zeit und am richtigen Ort. Unabhängig von tagespolitisch opportunen Priorisierungsthemen sind Werkstoffe, Anlagen und Verbrauchsgüter aus leistungsfähigen Materialien nämlich eines der wichtigsten Fundamente der österreichischen Volkswirtschaft: die internationale Wettbewerbsfähigkeit einer überraschend großen Zahl von differenzierten und vielfach klein- bis mittelstrukturierten Industriezweigen fußt auf dem bei uns gegebenen speziellen Zugang und der besonderen Expertise bei Werkstoffen. Diese gilt es zu erhalten und auszubauen. Meist realisiert man allerdings erst beim zweiten Blick, wie "advanced" es dabei zugeht.

Ein gutes Beispiel hierfür ist die Cellulose. Seit mehr als hundert Jahren aus heimischem Holz hergestellt, wird auf ihrer Basis ein etwa gleich hoher Devisenüberschuß für Österreich erwirtschaftet, wie durch den gesamten Fremdenverkehr. Nur wenige Menschen wissen allerdings, daß es sich dabei nicht nur um Papier und Pappe dreht, sondern auch um hochmodische Bekleidungsartikel, Hygieneprodukte, Geotextilien, Lebensmittel, Hilfsstoffe für die Bauindustrie und verschiedenste Feinchemikalien. Jedoch erst bei sehr eingehender Beschäftigung wird dann klar, daß es sich bei diesem nachwachsende Naturmaterial um ein extrem komplexes Stoffsystem handelt, von dem noch immer viel zu wenig bekannt ist und bei dem ein riesiges, bisher ungehobenes Potential hervorragender Eigenschaften nur darauf wartet, für völlig neuartige Hightech Produkte genutzt zu werden: auch für dieses anscheinend so altmodische Feld könnten also durch eine Forschungsinitiative "advanced materials" und eine interdisziplinäre, naturwissenschaftliche Kompetenzbündelung die Voraussetzungen für wesentliche Fortschritte stark verbessert werden.

Wir sehen die Forschungsinitiative wie eine Bestätigung unserer schon seit Jahren bestehenden Zusammenarbeit mit der Universität Innsbruck. Ausgehend von Arbeiten auf dem Gebiet analytischer Methoden zum besseren Verstehen der Cellulose-Herstellverfahren wirkte Lenzing in den letzten Jahren gemeinsam mit Vorarlberger Textilunternehmen an der Errichtung eines Christian Doppler Labors für die "Chemie von Cellulosischer Fasern und Textilien" am Institut für Textilchemie und Textilphysik mit. Nach nur kurzer Zeit lassen sich schon erstaunliche Früchte der Bündelung der

## Zum Geleit

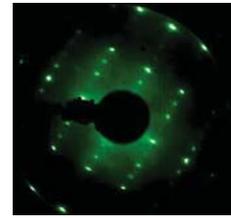
---

Aktivitäten zu diesem "advanced material" erkennen: ausgehend vom Dornbirner Labor, wo eine größere Forschungsgruppe nur an diesem Thema arbeitet, sind intensive akademische Kooperationen mit weiteren Innsbrucker Instituten, mit der Universität für Bodenkultur in Wien, der Montanuniversität in Leoben und den Universitäten Manchester (UMIST) und Maribor in Gang gekommen. Neben der etablierten Zusammenarbeit mit der Lenzinger Forschung haben weitere potente Firmen, wie z.B. die BASF und der Farbstoffhersteller Dystar Interesse an den Arbeiten bekundet und neben einer Reihe hervorragender wissenschaftlicher Publikationen konnten auch schon erste Ergebnisse bei den finanzierenden Industriepartnern umgesetzt werden.

In Zeiten, wo scheints nur so plakative Themen wie Info-, Space-, Life- und Nanotech den erforderlichen Aufmerksamkeitsgrad in der Öffentlichkeit erhalten, drohen die weniger spektakulären Werkstoffe, auf denen aber trotzdem ein Gutteil unseres Wohlstandes ruht, allzuleicht vernachlässigt zu werden. Wir begrüßen deshalb die Forschungsinitiative "Advanced Materials" an der Universität Innsbruck nachdrücklich und wünschen ihr viel Erfolg.

## Advanced Materials:

### Design, Synthese und Analyse hochentwickelter Materialien



Materialwissenschaftliche  
Kompetenz an der  
Universität Innsbruck

Forschungsinitiative  
"Advanced Materials"

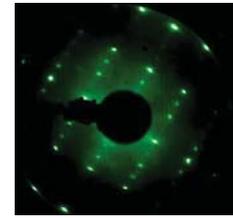
Ansprechpartner für  
industrielle und  
gewerbliche Nutzer

Christian Doppler-Institut  
"Textile and Fibre  
Chemistry in Cellulosics"

An der Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Innsbruck haben sich in den letzten Jahren mehrere Forschungsgruppen etabliert, die über spezielle Kompetenzen auf dem Gebiet der Materialwissenschaften verfügen. Es sind dies Gruppen im Bereich der **Chemie** (vor allem Polymerchemie, Textil-Fasern, Metallorganische Chemie, funktionalisierte Oberflächen, selbststrukturierende Fullerenderivate, Katalyse, Nanostrukturen, Surface Science, Dünne Schichten), **Physik** (Nano-Cluster und Oberflächenphysik, Dünne Schichten, hochkorrelierte Systeme), **Pharmazie** (Polymorphie-Forschung, Steuerung der Materialeigenschaften durch Struktur-Modifikation) und **Mineralogie** (Technische Werkstoffe, Steuerung der Materialeigenschaften durch chemische Modifikation). Aus der wachsenden Kooperation dieser Gruppen untereinander ist vor ca. einem Jahr der Wunsch entstanden, den Informationsaustausch und die Zusammenarbeit zu intensivieren und auf eine institutionalisierte Basis mit gemeinsamen Forschungsprojekten, gemeinsamen Seminaren, gegenseitiger Hilfestellung bei technisch aufwendigen Untersuchungen, etc. zu stellen. Dies hat innerhalb kurzer Zeit zur Entstehung der Forschungsinitiative "Advanced Materials" geführt, die sich mit dieser Broschüre nun der universitären und mehr noch der außeruniversitären Öffentlichkeit vorstellen will. Insbesondere soll damit auch die Wirtschaft angesprochen werden: Industriellen und gewerblichen Nutzern soll es durch die Vorstellung der beteiligten Arbeitsgruppen erleichtert werden, kompetente Ansprechpartner zur Lösung ihrer Probleme aufzufinden. Zahlreiche bereits existierende Kooperationen mit der Industrie belegen die Bereitschaft der beteiligten Forschungsgruppen, sich nicht nur in der Grundlagenforschung zu profilieren, sondern sich auch mit angewandten und technischen Fragestellungen zu befassen. Die Universität wird dabei aber nicht mit den Fachhochschulen konkurrieren, sondern mit diesen zusammen ein möglichst angemessenes Spektrum von Kooperationsmöglichkeiten anbieten. Das neugegründete Christian Doppler-Institut "Textile and Fibre Chemistry in Cellulosics" ist das jüngste Ergebnis dieser verstärkten Zusammenarbeit von universitärer und industrieller Forschung. Davon werden nicht nur die unmittelbar Beteiligten profitieren, von solchen Initiativen gehen auch Impulse aus, die für unsere ganze technisch-industrielle Gesellschaft auf die Dauer lebenswichtig sind.

## Advanced Materials:

### Design, Synthese und Analyse hochentwickelter Materialien



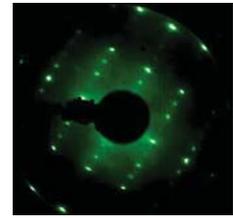
---

Thematische Anbindung an die Rahmenprogramme der EU:	Dies spiegelt sich auch im 5. und 6. Rahmenprogramm der Europäischen Kommission. Unter dem Thema "Competitive and Sustainable Growth" (kurz: GROWTH) werden künftige Herausforderungen an die Materialwissenschaften identifiziert: <i>"Catalysis Materials; Opto-electronic Materials ...</i> , where key developments relate to novel materials systems and to the ability to control materials on the nano-scale; <i>Organic Electronics; Magnetic Materials</i> on the nano-scale; <i>Superconductivity; Composites and "Multimaterials"</i> including polymeric composites that can conduct electricity, molecular electronics and nano-phasic composites; <i>Intelligent Textiles</i> ". Im 6. Rahmenprogramm sind als Brennpunkte der Forschung innerhalb der Information Society Technologies (IST) <i>micro and nano-structures and new materials</i> , und innerhalb der Nanosciences <i>self-assembling materials and structures, cross-cutting technologies including surface science und multifunctional materials</i> genannt. Ein Blick in die folgenden Beiträge zeigt, dass es genau diese Herausforderungen sind, die in der vorliegenden Forschungsinitiative aufgegriffen werden.
"GROWTH"	
"IST"	
Nanosciences and knowledge-based multifunctional materials	
Intensivierung interdisziplinärer Ansätze	Die Forschungsinitiative "Advanced Materials" der Universität Innsbruck erfüllt auch eine interne Funktion: Mit dem vermehrten Informationsaustausch und der verbesserten Vernetzung der Gruppen untereinander wächst die Fähigkeit und die Bereitschaft, Probleme mit interdisziplinären Ansätzen zu bearbeiten. So hat die Gründung der Initiative bereits nach kurzer Zeit zu neuen Kooperationen geführt (z. B. Institut für Physikalische Chemie – Ionenphysik auf dem Gebiet der Leitfähigkeit von Oberflächensystemen; Institut für Textilchemie und Textilphysik – Institut für Pharmazie auf dem Gebiet der Feuchtigkeitsaufnahme von Materialien; Institut für Mineralogie und Petrographie – Institut für Physikalische Chemie auf dem Gebiet der Nano-Morphologie und der mechanischen Stress-Eigenschaften dünner Schichten). Zusätzlich sind österreichweite Forschungsprojekte im Rahmen des FWF und europäischer Netzwerke entstanden.
neue Kooperationen	
österreichweite und europäische Forschungsprojekte	
Ausbildungsinitiative Materialwissenschaften	Die Initiative "Advanced Materials" hat aber noch ein wesentliches Ziel: Sie ist eine Ausbildungsinitiative. Mit dem Wahlfach Materialwissenschaften und mit gemeinsamen Vortragsveranstaltungen, für die internationale Fachleute als Referenten gewonnen

## Advanced Materials:

### Design, Synthese und Analyse hochentwickelter Materialien

---

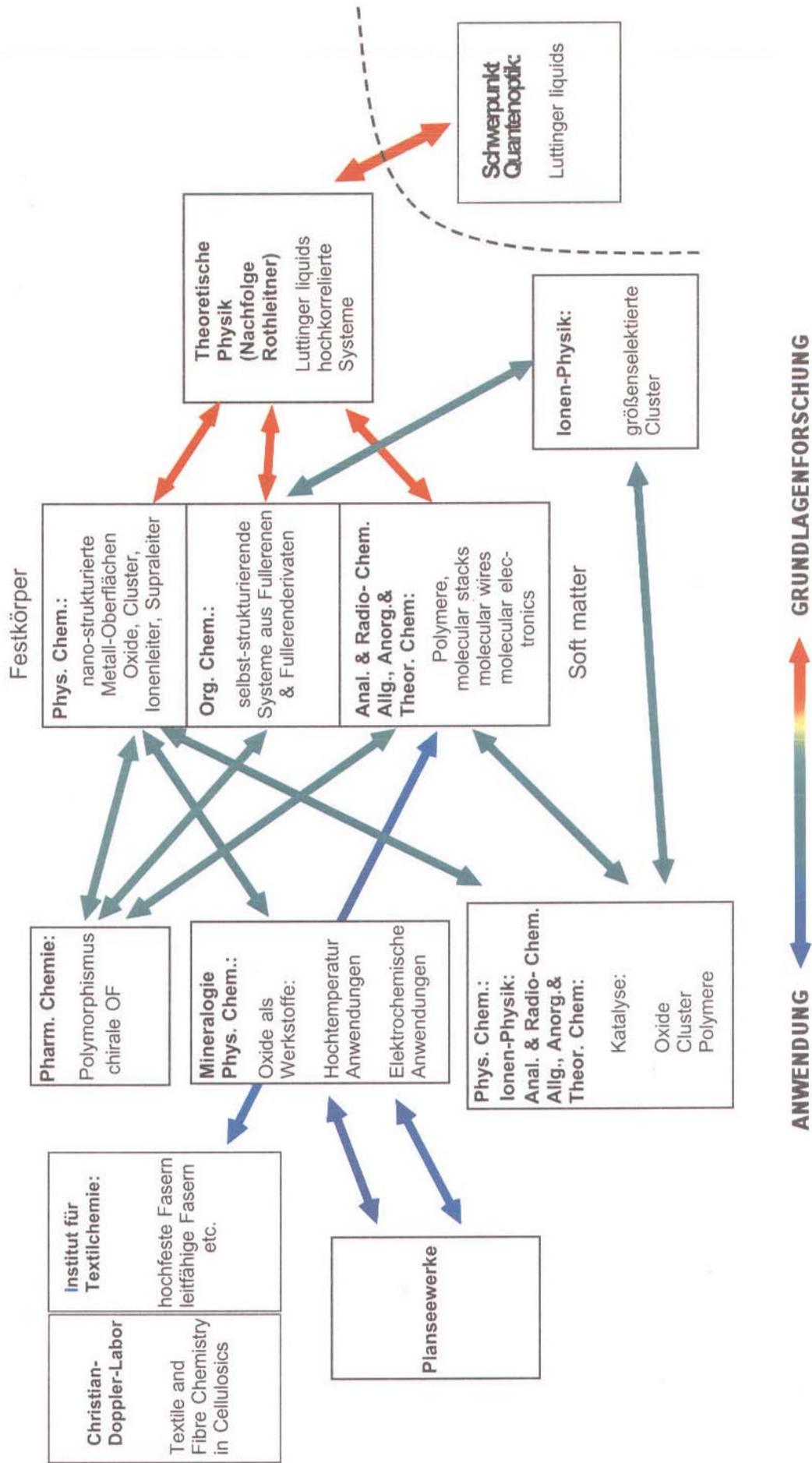


interdisziplinäres Arbeiten	werden, soll Studenten die Möglichkeit geboten werden, sich interdisziplinär über neue Entwicklungen auf dem Gebiet der "Advanced Materials" zu informieren und die notwendigen Grundlagen zu ihrem Verständnis zu erwerben. Gleichzeitig soll das Denken über Fachbereichsgrenzen hinweg gefördert und interdisziplinäres Arbeiten stimuliert werden.
Innovation	Visionen sind oft die Grundlage der Innovation. Die Forschung zum Thema "Advanced Materials" zielt auf Anwendungen in der <b>Elektronik und Sensorik</b> (keramische und organische Supraleiter, Molekulare Schalter, Sensoren), in der <b>Energietechnik</b> (oxidische und polymere Ionenleiter für Brennstoffzellen), in der <b>Katalyse</b> (verbesserte Katalysatoren für homogene und heterogene Katalyse) auf <b>hochtemperaturfeste Werkstoffe</b> (refraktäre Oxide), optimierte <b>(Textil-)Fasern</b> und <b>Pharmazeutika</b> . Manche dieser Ziele sind bereits erreicht, manche stehen vor der Verwirklichung, andere liegen noch weit vor uns: Die Forschungsinitiative "Advanced Materials" stellt das Engagement, die Teamfähigkeit und die Dialogbereitschaft der an der Initiative beteiligten Forscher und Wissenschaftler unter Beweis und dient gleichzeitig dazu, sie zu intensivieren und zu vertiefen. Es wird aber auch an der Unterstützung durch die Universität und an der Initiative seitens der Wirtschaft liegen, inwieweit der gute Beginn sich kraftvoll fortsetzt, das Projekt Dynamik gewinnt und "Advanced Materials" zu einem Markenzeichen der Universität Innsbruck wird.
Anwendungen	
Unterstützung durch die Universität	
Initiative der Wirtschaft	
"Advanced Materials"- künftiges Markenzeichen der Universität Innsbruck?	

Erminald Bertel

Koordinator Forschungsinitiative "Advanced Materials"

**Forschungsinitiative "Advanced Materials":  
Design, Synthese und Analyse hochentwickelter Materialien**



# Makromolekulare Chemie und Polymeranalytik

A. Univ.-Prof. Mag. Dr. Michael R. Buchmeiser

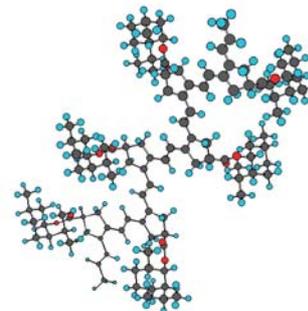
Institut für Analytische Chemie und Radiochemie

Universität Innsbruck, Innrain 52a, A-6020 Innsbruck

Tel: +43 (0) 512 / 507-5184, Fax: +43 (0) 512 / 507-2677

e-mail: [michael.r.buchmeiser@uibk.ac.at](mailto:michael.r.buchmeiser@uibk.ac.at)

<http://www.uibk.ac.at/c/c7/c725/macromol/buchmeiser/mb-d.html>



Der Arbeitskreis **Makromolekulare Chemie und Polymeranalytik** beschäftigt sich mit Themen die der **makromolekularen** aber auch der **anorganischen, metallorganischen** und **analytischen Chemie** zuzuordnen sind, konkret mit aktuellen Fragestellungen der **heterogenen molekularen Katalyse**, mit **elektrisch/optisch aktiven Polymeren** sowie mit den **Trennverfahren**. Allen Bereichen gemeinsam ist dabei der *applikationsorientierte, gezielte, Aufbau polymerer bzw. makromolekularer Systeme aus maßgeschneiderten monomeren Verbindungen und speziell dafür entwickelten Polymerisationskatalysatoren*. Zu diesem Zweck stehen voll ausgestattete Syntheselabors (u. a. mit N<sub>2</sub>-betriebener Inertgasbox) zur Verfügung. Integraler Bestandteil jeglicher Synthese stellt die Analytik der hergestellten Materialien bzw. Vorstufen dar. Dazu existiert ein polymeranalytisches Labor mit FT-IR, UV, HPLC, GC-MS, DSC-TGA-FT-IR, GPC mit kombinierter UV/RI/LS-Detektion). Im Zuge Fachbereichs- und Fakultäts-interner Kooperationen kann weiters auf die Strukturanalytik (NMR, Einkristallröntgenstrukturanalyse, Röntgenbeugung), die Elementanalytik (AAS, FES, ICP, Mikrosonde, RFA) sowie Oberflächen- und Materialanalytik (BET, Hg-Intrusion, Elektronenmikroskopie) zurückgegriffen werden. Die Zielsetzungen in den einzelnen Forschungsbereichen sowie die verwendeten Methoden sind im folgenden angeführt:

## I. Design, Herstellung und Evaluierung neuer heterogener katalytischer Systeme auf molekularer Basis

Diese Thematik wird im Zuge des START Projekts Y-158 bearbeitet. Der Schwerpunkt liegt in der **Synthese, Analytik und Anwendung** von Metathesekatalysatoren, C-C, C-N und C-O-Kupplungssystemen, Oxidationskatalysatoren sowie katalytischen Systemen für die Olefinpolymerisation, die kationische Polymerisation und die Atom-Transfer Radikalpolymerisation (ATRP). Zielsetzung ist die Herstellung aktiver und selektiver katalytischer Systeme mit hoher Lebensdauer, die überdies die Synthese katalysatorfreier Produkte erlauben. Weiters soll der Zugang zur **kombinatorischen Chemie** bzw. zum **high-throughput-screening** ermöglicht werden. In diesem Zusammenhang kommen vor allem monolithische Träger zum Einsatz.

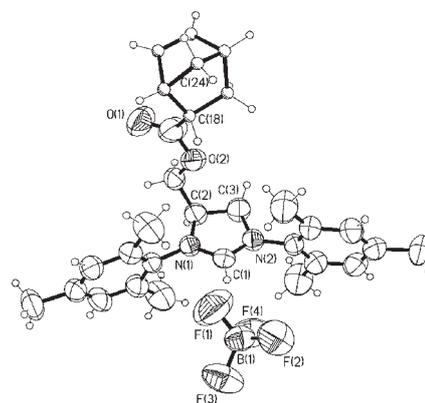
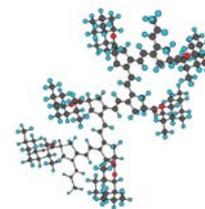


Abb. 1: Katalysatorprecursor für die Heterogenkatalyse (Mayr, Buchmeiser, Adv. Synth. Catal. 2002)



A. Univ.-Prof. Mag. Dr. Michael R. Buchmeiser

Institut für Analytische Chemie und Radiochemie

Die Funktionalisierung mit katalytisch aktiven Gruppen kann aufgrund eines speziellen Polymerisationssystems *in situ* bewerkstelligt werden und erlaubt so die Synthese einer neuen Generation von funktionalisierten Monolithen. Diese Materialien zeichnen sich in der Heterogenkatalyse vor allem durch größere Beständigkeit sowie hohe katalytische Aktivität und geringes Katalysatorbluten aus. Kooperationen existieren mit dem Massachusetts Institute of Technology (MIT, USA), dem Max Planck Institut in Mülheim (D) sowie den Universitäten Ulm (D) und Eindhoven (NL).

## II. Synthese konjugierter Materialien für elektro- und thermo-optische Anwendungen

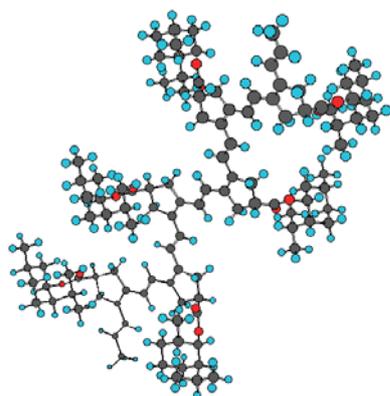
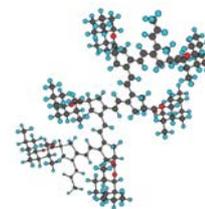


Abb. 2: Kettenausschnitt aus einem thermo-responsiven Polymer (Anders, Nuyken, Wurst, Buchmeiser, Angew. Chem. Int. Ed. 2002.)

Die Synthese erfolgt via Cyclopolymerisation von 1-Alkinen bzw.  $\alpha,\omega$ -Diinen. Die Zielsetzung liegt neben **mechanistischen Untersuchungen** der **Alkinpolymerisation**, welche auf polymertechnischen Verfahren aber auch auf Hoch- und Tieftemperatur NMR Experimenten basieren, vor allem in der Herstellung von (elektro)lumineszenz-aktiven Filmen und selbstorganisierenden Strukturen. Die Anwendungen dieser Systeme liegen in den Bereichen der Informationstechnologie, der Sensorik sowie generell miniaturisierter Systeme. Kooperationen existieren mit der TU München (D) und der Universität Bayreuth (D).

## III. Selektive Extraktion von (radioaktiven) Übergangsmetallionen

Im Zuge des European Commission Projects FIS5-1999-00130 werden hochselektive Trennmateriale zur Nuklidauftrennung synthetisiert und ausgetestet. Ziel ist die Auftrennung radioaktiver Abfallmaterialien nach diversen Nuklidgruppen, um eine nachfolgende detaillierte Charakterisierung des Gesamtmaterials zu ermöglichen. Der Schwerpunkt liegt hier in der Isolierung hochaktiver Cs- und Co-Isotope mittels immobilisierter Calixaren- und Pyridinliganden. Kooperationen existieren mit dem Forschungszentrum Jülich (D), der FU Berlin (D), ENEA (I) und der Universität Eindhoven (NL).



A. Univ.-Prof. Mag. Dr. Michael R. Buchmeiser  
Institut für Analytische Chemie und Radiochemie

## IV. Synthese neuer funktionalisierter Trenn- und Trägermaterialien.

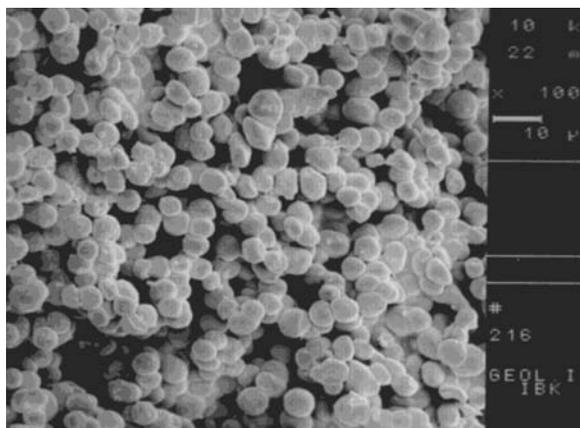
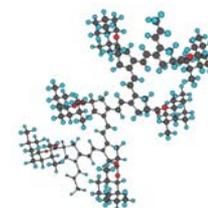


Abb. 3: Monolithische Struktur zur Trennung biologisch relevanter Proteine (Mayr, Tessadri, Post, Buchmeiser, Anal. Chem. 2001)

Hier werden vor allem organische, **monolithische** aber auch mittels **Propfpolymerisation** modifizierte anorganische Träger synthetisiert und polymeranalytisch charakterisiert. Ziel ist die maßgeschneiderte Herstellung von Trennmedien für die **Trennverfahren** (z. B. HPLC,  $\mu$ -HPLC). Die Hauptanwendungen liegen vor allem in der chiralen Chromatographie sowie der Mikroanalytik von Biopolymeren. Letztere erlaubt die direkte Kopplung mit konzentrationsempfindlichen strukturanalytischen Methoden wie der Massenspektrometrie. Kooperationen existieren mit der Universität des Saarlandes (D) und der Universitätsklinik Graz (A).



Arbeitskreis Makromolekulare Chemie und Polymeranalytik (Stand 1.7.2002)



A. Univ.-Prof. Mag. Dr. Michael R. Buchmeiser

Institut für Analytische Chemie und Radiochemie

---

*Ausgewählte Publikationen:*

*Metathesis Polymerization (ROMP): Applications in Palladium-Mediated Coupling Reactions.* M. R. Buchmeiser, K. Wurst, J. Am. Chem. Soc. 121, 11101-11107 (1999)

*Ring-Opening Metathesis Polymerization (ROMP) for the Preparation of Surface-Grafted Polymer Supports.* M. R. Buchmeiser, F. Sinner, M. Mupa, K. Wurst, Macromolecules, 33, 32-39 (2000)

*Ringöffnende Metathesepolymerisation: Zugang zu einer neuen Klasse funktionalisierter, monolithischer stationärer Phasen für die Flüssigkeitschromatographie.* F. Sinner, M. R. Buchmeiser, Angew. Chem. 112, 1491-1494 (2000) (Angew. Chem. Int. Ed. 39, 1433-1436 (2000))

*Quantification of Lanthanides in Rocks Using Succinic Acid-Derivatized Sorbents For On-Line SPE-RP-Ion-Pair HPLC.* M. R. Buchmeiser G. Seeber, R. Tessadri, Anal. Chem. 72 (11), 2595-2602 (2000)

*A New Class of Continuous Polymer Supports Prepared by Ring-Opening Metathesis Polymerization: A Straightforward Route to Functionalized Monoliths.* F. Sinner, M. R. Buchmeiser, Macromolecules, 33, 5777-5786 (2000)

*Metathesis-Based Monoliths: Influence of Polymerization Conditions on the Separation of Biomolecules.* B. Mayr, R. Tessadri, E. Post, M. R. Buchmeiser, Anal. Chem. 73, 4071-4078 (2001)

*Monolithische Materialien als Hochleistungsträger permanent immobilisierter Metathesekatalysatoren.* M. Mayr, B. Mayr, M. R. Buchmeiser, Angew. Chem. 113, 3957-3959 (2001), (Angew. Chem. Int. Ed. 40 (20), 3839-3842 (2001))

*Homogeneous Ring-Opening Metathesis Polymerization by Well-Defined Group VI and Group VIII Transition Metal Alkylidenes: Fundamentals and Applications in the Preparation of Advanced Materials.* M. R. Buchmeiser, Chem. Rev, 100(4), 1565-1604 (2000)

*Stereoselektive Zyklopolymerisation von 1,6-Heptadiinen: Zugang zu alternierenden cis-trans-1,3-(Zyklopent-1-en)vinylenen durch optimierte Molybdän Imidoalkyliden Initiatoren.* U. Anders, O. Nuyken, M. R. Buchmeiser, Angew. Chem. 114, 4226-4230 (2002), Angew. Chem. Int. Ed., 41, 4044-4047 (2002)

# Metallorganische Chemie und Katalyse

A. Univ.-Prof. Dr. Benno Bildstein

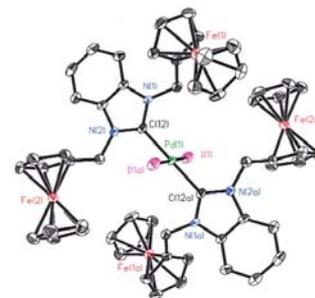
Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie

Universität Innsbruck, Innrain 52a, A-6020 Innsbruck

Tel. +43 512 507 5141; Fax:+43 512 507 2662

email: [benno.bildstein@uibk.ac.at](mailto:benno.bildstein@uibk.ac.at)

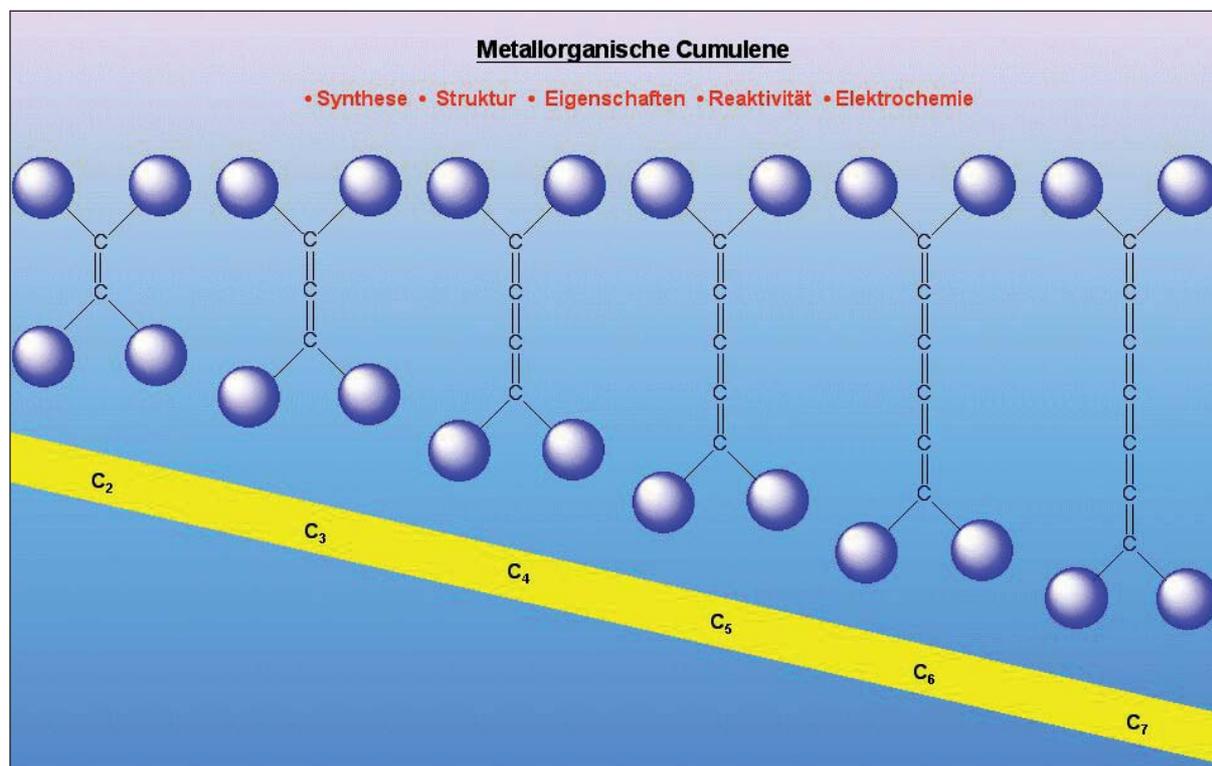
<http://www-c724.uibk.ac.at/staff/bildstein>



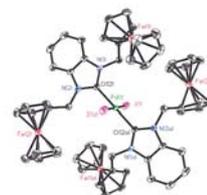
• **Metallorganische Chemie und Koordinationschemie** mit Fokus auf elektronisch und strukturell neuartigen Verbindungsklassen von anwendungsorientierter Relevanz und Reaktivität. Synthetische Chemie unter inerten Bedingungen, umfassende Charakterisierung (IR, Raman, UV-Vis, DSC, GPC, NMR, MS, PES, EPR, CV, Einkristallröntgenstrukturanalyse) der Zielmoleküle in Zusammenarbeit mit Innsbrucker und internationalen Arbeitsgruppen.

## • Modellverbindungen für die molekulare Elektronik

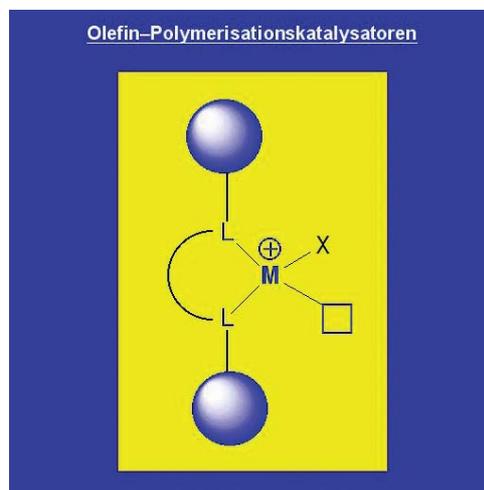
Die Kombination von endständigen redoxaktiven metallorganischen Gruppen (Ferrocenen) mit eindimensionalen, maximal ungesättigten Kohlenstoffketten (Cumulenen) erlaubt die Evaluierung solcher "molekularen Drähte" als mögliche Bauelemente einer zukünftigen NanoElektronik. Durch eine modulare Synthesestrategie werden homologe Modellverbindungen hergestellt und deren physikalische und elektronische Eigenschaften in Abhängigkeit von der Anzahl der cumulierten Kohlenstoffe beziehungsweise als Funktion der Länge untersucht.



Review: Coord. Chem. Rev. 2000, 206-207, 255.



## • Übergangsmetall-Olefin-Polymerisationskatalysatoren

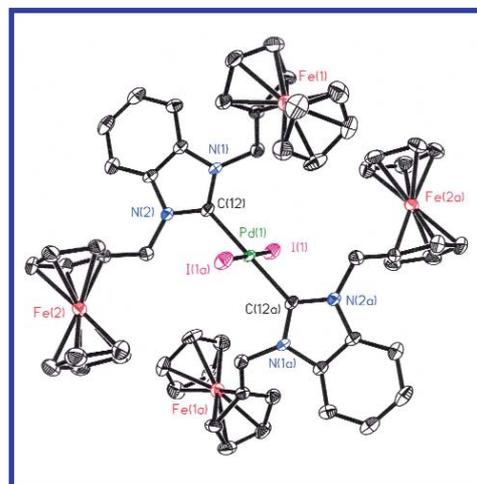


Homo- und Co-Polymere basierend auf Olefinen sind die bei weitem wichtigsten großtechnisch verwendeten makromolekularen Werkstoffe. In Kooperation mit dem Kunststofflaboratorium der BASF AG in Ludwigshafen werden neue, patentfreie und in ihrer Selektivität kontrollierbare Metallkatalysatoren mit sterisch und elektronisch optimierten Ligandgerüsten entwickelt und unter technisch relevanten Bedingungen getestet.

Patente und Patentanmeldungen: [BASF AG] DE 10206116 (2002), DE 10206113 (2002), DE 10107045 (2001), DE 10107043 (2001), DE 10106902 (2001), EP 1174442 (2000), WO 2002008236 (2000), EP 1142899 (2000), WO 2001021586 (1999), WO 20011014391 (1999), WO 200006600 (1999).

## • N-heterozyklische Carbene als Steuerliganden in katalytisch aktiven Metallkomplexen

Carbene mit zwei benachbarten Stickstoff- $\pi$ -Donorsubstituenten sind starke Kohlenstoff- $\sigma$ -Donoren die mit fast allen Elementen des Periodensystems isolierbare und stabile Koordinationsverbindungen bilden. Von besonderem Interesse in Hinblick auf katalytische Anwendungen sind Metallkomplexe die einerseits reversible reduktive Eliminierungen und oxidative Additionen zulassen oder deren freie Koordinationsstelle Insertionsreaktionen erlauben, unter anderem Kohlenstoff-Kohlenstoff Verknüpfungsreaktionen, Kohlenstoff-Wasserstoff Aktivierungen und Olefinmetathesen.

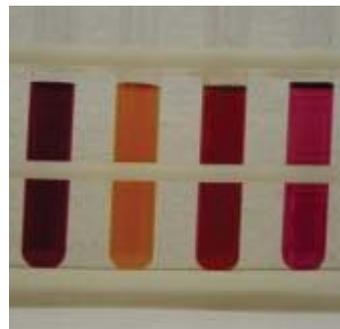


### Ausgewählte Publikationen:

J. Mol. Catal. A 2002, 185, 105; J. Organomet. Chem. 2001, 617-618, 28; Organometallics 1999, 18, 4325; J. Organomet. Chem. 1999, 572, 177; J. Organomet. Chem. 1998, 552, 45

# Materialwissenschaftliche Synthesechemie

A. Univ.-Prof. Dr. Herwig Schottenberger  
Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie  
Universität Innsbruck, Innrain 52a, A-6020 Innsbruck  
Tel. +43 512 507 5118; Fax:+43 512 507 2934  
email: [herwig.schottenberger@uibk.ac.at](mailto:herwig.schottenberger@uibk.ac.at)  
<http://www-sc724.uibk.ac.at/staff/schottenberger>



## Forschungsschwerpunkte:

- Metallorganische Acetylenchemie
- Wechselwirkend verbundene Metallocene
- Monomerchemie zum Aufbau geträgerter oberflächenaktiver Polymermaterialien
- Schwach koordinierende Anionen
- Metallorganische Naturstoffchemie
- Solvatochrome Donor-Akzeptor Konjugate
- Ionische Flüssigkeiten

## Derzeitige Kooperationsgebiete:

- **Elektrochromie, Solvatochromie, und Halochromie neuer Sondenfarbstoffe**  
In Zusammenarbeit mit Dr. Gerhard Laus, Immodal Pharmaka, Volders, Tirol
- **Metallorganische Naturstoffchemie**  
In Zusammenarbeit mit Prof. Dr. Helmut Schmidhammer und Dr. Johannes Schütz,  
Institut für Pharmazie, Universität Innsbruck
- **Ionische Flüssigkeiten**  
In Zusammenarbeit mit Prof. Dr. Helgard Raubenheimer, University of Stellenbosch, ZA
- **Monomerchemie zum Aufbau geträgerter oberflächenaktiver Polymermaterialien**  
In Zusammenarbeit mit Prof. Dr. M. Buchmeiser, Institut für Analyt. Chemie, Universität Innsbruck



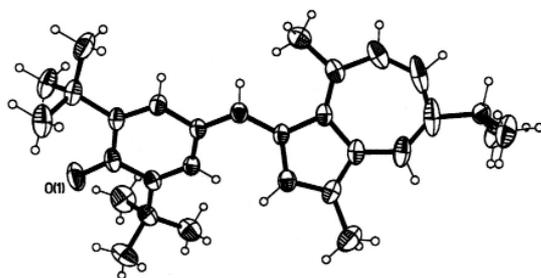
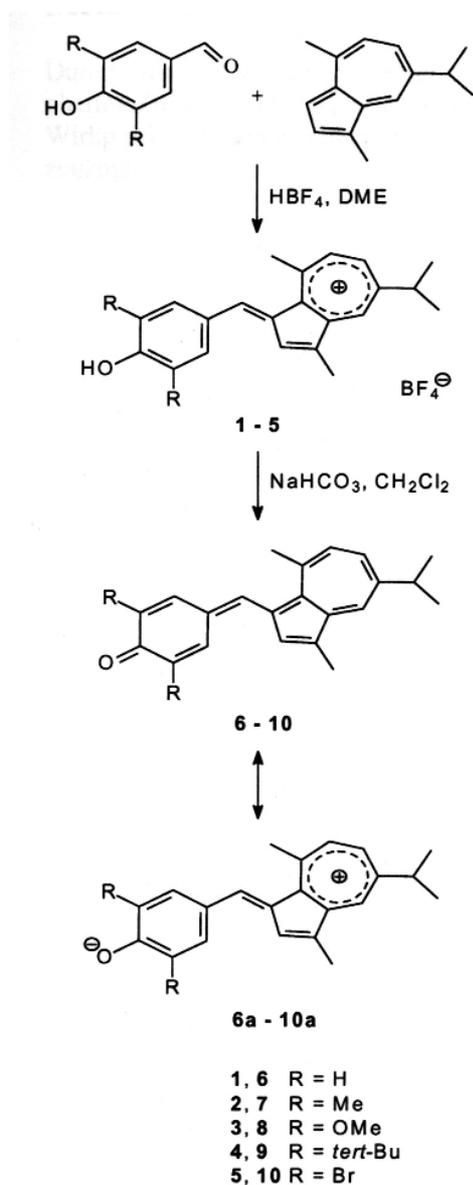
Dr. Adrian Müller



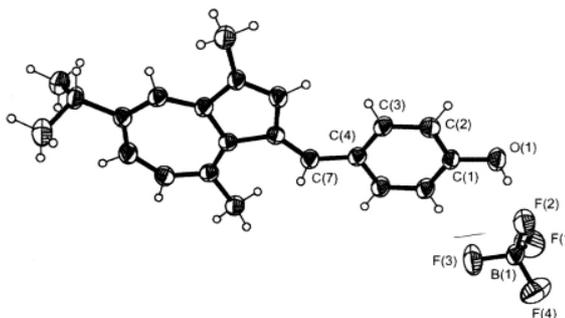
Dr. H. Schottenberger



## Elektrochromie, Solvatochromie und Halochromie neuer Sondenfarbstoffe



Solvatochrome Verbindungen können in Abhängigkeit der Polarität ihrer physikalischen Umgebung (elektrische Felder, Lösungsmittel) ihre eigene Polarität (neutral oder ionisch durch Ladungstrennung) und damit einhergehend ihre Eigenfarbe ändern.



Aus kostengünstigen Naturstoffen lassen sich in wenigen einfachen Syntheseschritten derartige Substanzen herstellen, die den bisher gebräuchlichen Verbindungen in ihren spezifischen, materialwissenschaftlich relevanten Eigenschaften überlegen sind :

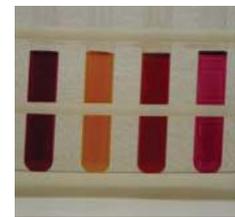
Halochromie stellt einen Sonderfall von Solvatochromie dar, bei dem die Anwesenheit von Elektrolyten (gelösten Salzen) konzentrationsabhängige Farbänderungen bewirkt. Im Zuge dieses Forschungsprojektes ist es erstmalig gelungen, einen massgeschneiderten solvatochromen Farbstoff herzustellen, der nur die Polarität des Lösungsmittels bemerkt, ohne durch die Anwesenheit anderer Ionen (Salze) gestört zu werden.

Ihre filmbildenden Eigenschaften machen manche Vertreter auch für den Einsatz als Photonische Materialien in elektrooptischen Bauteilen wie Digitaldisplays interessant.

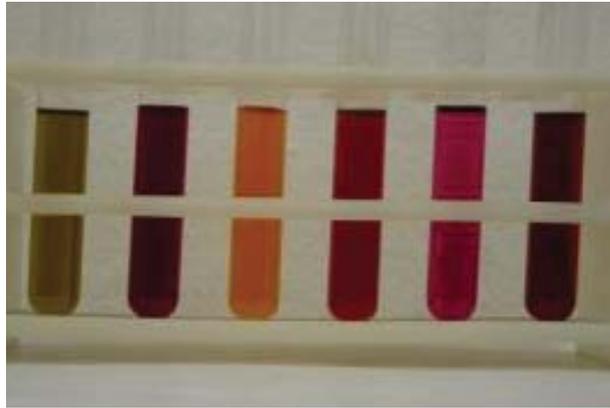
# Materialwissenschaftliche Synthesechemie

A. Univ.-Prof. Dr. Herwig Schottenberger

Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie



## Lösungsmittelabhängige Farbunterschiede eines Stoffes:



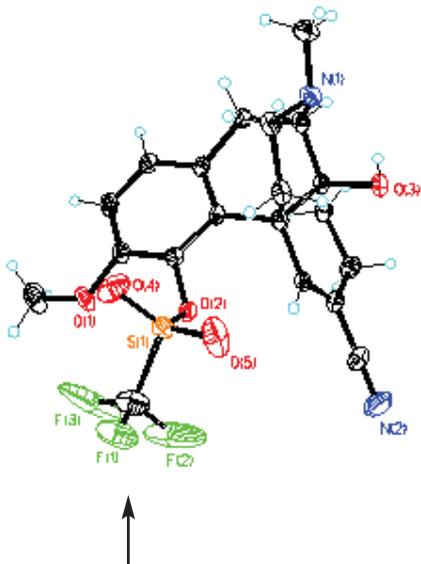
1 2 3 4 5 6

Einfaches Sichtbarmachen von Materialeigenschaften

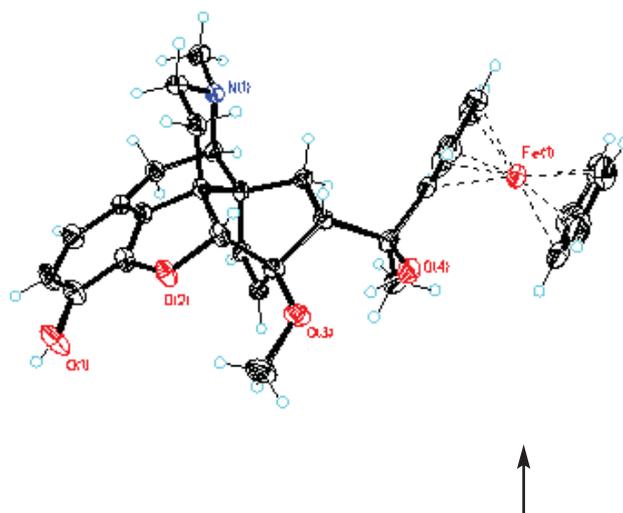
- 1 Pentan
- 2 Dichlormethan
- 3 Wasser / Essigsäure,
- 4 Wasser / Dimethylsulfoxid
- 5 Dimethylsulfoxid
- 6 Essigester

## Metallorganische Naturstoffchemie

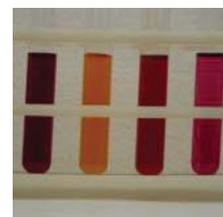
Durch die Anwendung moderner Katalyseverfahren lassen sich gänzlich neue Derivate pharmazeutisch bedeutsamer Substanzklassen, wie Morphinanschmerzmittel mit bedarfsoptimiertem Wirkprofil, etwa einer reduzierten ZNS-Gängigkeit zur Unterdrückung des Suchtpotentials synthetisch zugänglich machen:



Metallorganische Verknüpfungseinheit



Metallorganische Seitenkette

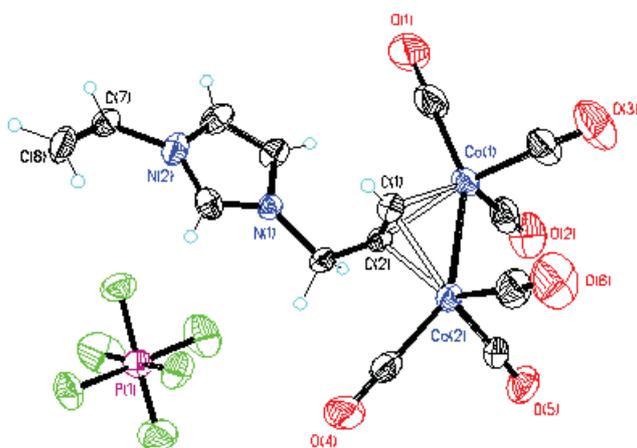


## Ionische Flüssigkeiten

Ionische Flüssigkeiten sind organische Salze, die sich durch erstaunlich niedrige Schmelzpunkte (üblicherweise im Bereich von ca.  $-30$  bis  $+70$  °Celsius) auszeichnen. In diesen stark polaren Medien sind unzählige chemische Reaktionen auf besonders effiziente Weise durchführbar geworden.

Im Sinne von "Green Chemistry", also von umweltbedachten Herstellungsverfahren ist hervorzuheben, dass durch Ausfrieren der Ionischen Flüssigkeiten die gewünschten Reaktionsprodukte einfach abgetrennt werden können, und das Reaktionsmedium sofort wiederverwendet werden kann.

Ein weiteren neuen Aspekt ermöglicht das Anbringen metallorganischer, aktiver Zentren auf den Ionischen Spezies selbst, wodurch Katalysatoreinheiten im wiederverwendbaren Reaktionsmedium verbleiben.



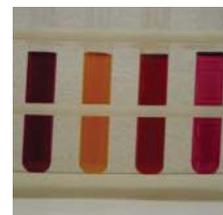
Metallorganisches aktives Fragment  $\uparrow$ ,  
am Kation chemisch gebunden

## Monomerchemie zum Aufbau geträgerter oberflächenaktiver Polymermaterialien

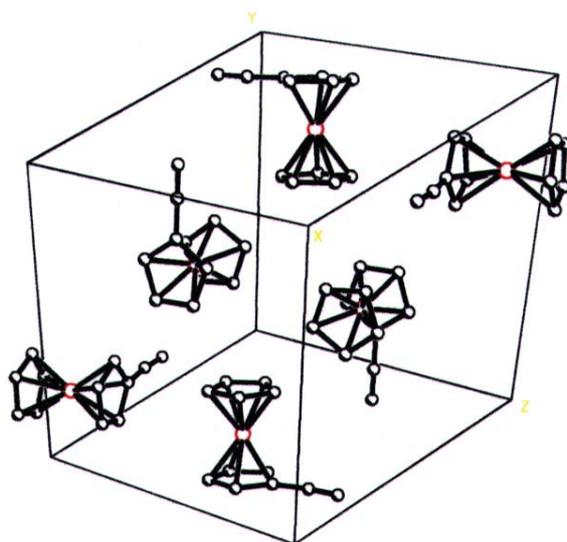
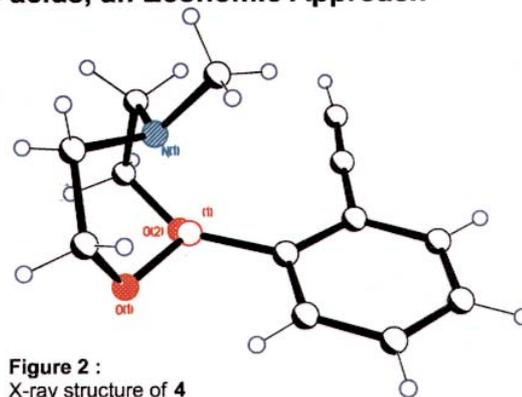
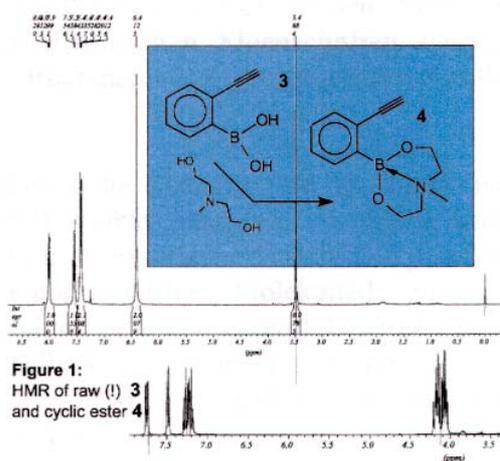
Mit ein und demselben Syntheserepertoire metallorganischer Katalyse lässt sich Dienstleistungschemie nicht nur für Life Sciences, sondern auch für materialwissenschaftliche Aufgabenstellungen verwirklichen :

Massgeschneiderte Grundbausteine für arbeitende Kunststoffoberflächen müssen sowohl polymerisationsfähige, also – wiederum über Katalyse – mit sich selbst verknüpfbare Reste, als auch die gewünschten endgültigen Funktions-Einheiten, oder deren maskierte Vorstufen aufweisen, ohne dass diese einander in den einzelnen Herstellungsschritten stören.

Polyboronsäuren sind beispielsweise eine von den Materialwissenschaften verfügbar gemachte, wiederum für die Biowissenschaften bedeutsame Verbindungsklasse, da sie besonders gut geeignet sind eine effiziente Trennung komplexer Zuckergemische zu ermöglichen. Hierzu ist etwa die chemische Anbindung der polymerisierbaren Acetylen-Kohlenstoff-Kohlenstoff-Dreifachbindung an einer stabilen Benzolboronsäure ein geeignetes chemisches Realisierungskonzept.



## Ethynylboronic acids, an Economic Approach



© Materialwissenschaftliche Synthesechemie 2002

Müller, Laus, Schütz, Schwärzler, Horvath, Wurst, Schottenberger, unveröffentlichte Resultate

# Synthese, Struktur und Selbstorganisation von Fullerenen und funktionalisierten Fulleren-Derivaten

o. Univ.-Prof. Dr. Bernhard Kräutler

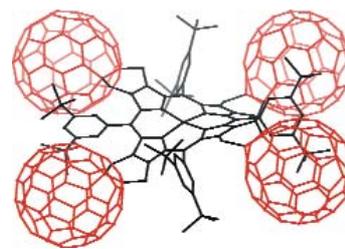
Institut für Organische Chemie

Universität Innsbruck, Innrain 52a, A-6020 Innsbruck

Tel. +43 512 507 5200; Fax:+43 512 507 2892

email: [bernhard.kraeutler@uibk.ac.at](mailto:bernhard.kraeutler@uibk.ac.at)

<http://www.uibk.ac.at/c/c7/c726>



Die Beiträge des Instituts für Organische Chemie im Bereich der Materialwissenschaften sollen mit konkurrenzfähigen Leistungen in folgenden zwei Teilbereichen erbracht werden:

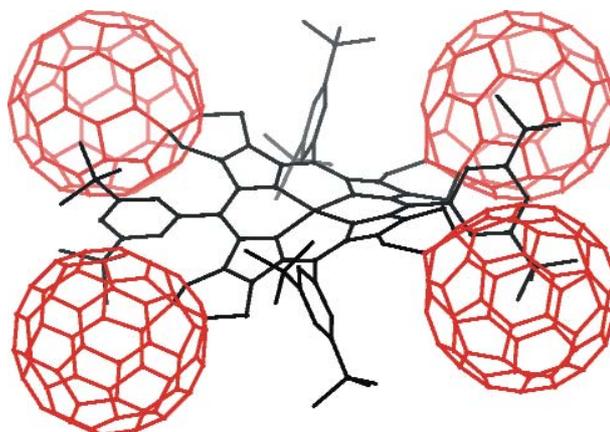
Durch Entwicklung und Anwendung neuartiger synthetischer Methoden (Festkörpersynthese) werden **Fulleren-Derivate mit interessanten strukturellen und elektronischen Eigenschaften** synthetisiert. Von besonderer Bedeutung sind in diesem Zusammenhang rigide strukturierte Fulleren-Konjugate mit Anthrazenen und Porphyrinen.

Die hohe Tendenz von Fullenderivaten mit konkav strukturierten Addendeteilen sich im Festkörper dank ihrer rigiden form-komplementären Molekülteile zu ordnen, führen zu interessanten 1-D-, 2-D- und 3-D-Selbststrukturierungen (vgl. Ref. 1, 3). Bei der Festkörper-Synthese werden solche Selbststrukturierungen in topochemisch kontrollierten Reaktionen nutzbar (vgl. Ref. 5, 6) Die topologische Analyse von Selbststrukturierung generierenden molekularen Eigenschaften werden beim Konzept des Designs 1-, 2- und 3-dimensionaler Kristalle optimiert.



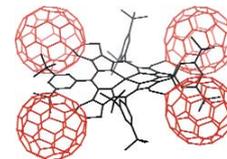
Festkörper-Packung des Adduktes von  $C_{60}$  und Anthrazen in einer Dimension

Weitreichende 3-D-Selbststrukturierungen im Festkörper werden für entsprechend konkav strukturierte Porphyrine und Fullerene beobachtet (vgl. Ref. 2). In den neuesten Arbeiten zu diesem Thema werden durch kovalente Verknüpfung von Porphyrinen und Fullerenen räumlich gut definierte molekulare Nanoobjekte mit interessanten elektronischen Eigenschaften hergestellt und untersucht (vgl. Ref. 2, 4).



Modell der molekularen Struktur eines Tetrafullereno-Porphyrins

# Synthese, Struktur und Selbstorganisation von Fullerenen und funktionalisierten Fulleren-Derivaten



o. Univ.-Prof. Dr. Bernhard Kräutler  
Institut für Organische Chemie

Am Institut für Organische Chemie wurden im Bereich der Fulleren-Chemie in jüngerer Zeit international anerkannte Forschungsarbeiten geleistet, welche in dem geplanten Schwerpunkt mit dem Design und der Herstellung neuer programmierbarer ("intelligenter") Materialien auf Fulleren-Basis fortgesetzt werden sollen (B. Kräutler). Mehrere, fachlich unterschiedlich ausgerichtete internationale Kooperationen stärken unsere experimentellen Arbeiten über Fullerene und Fullerenderivate und erweitern deren möglichen Verwendungsbereich.

Durch Anwendung und Entwicklung von **massenspektrometrischen Methoden** (wie auch NMR-spektroskopischer Methoden) soll die strukturelle Zusammensetzung der im Schwerpunkt hergestellten nieder- und hochmolekularen Materialien (Fulleren-Derivate, Fulleren-Porphyrine, molekulare Drähte, Polymere, mittel- und hoch-molekulare Metallkomplexe) charakterisiert werden (vgl. Ref. 7, 8). Die massenspektrometrische Analyse mittels eines **MALDI-TOF-Massenspektrometers** von materialwissenschaftlich relevanten Verbindungen mit mittlerem und höherem Molekulargewicht (1000 – 50000 Da) wird angestrebt.

Am Institut für Organische Chemie wurde in diesem Bereich in jüngerer Zeit an einem modernen Sektorfeld-Massenspektrometer anerkannte Pionierarbeit geleistet (K.-H. Ongania), welche in dem geplanten Schwerpunkt bei der Charakterisierung neuer Materialien fortgesetzt werden soll.

*Eine Auswahl neuerer Publikationen:*

*Efficient Preparation of Monoadducts of [60]-Fullerene and Anthracenes by Solution Chemistry and their Thermolytic Decomposition in the Solid State* B. Kräutler, T. Müller & A. D. Ruiz. Chem. Eur. J. 15, 3223 (2001).

*Metal-Complexes of a Biconcave Porphyrin with D4-Structure – Versatile Chiral Shift Agents.* R. Schwenninger, J. Schlögl, J. Maynollo, K. Gruber, P. Ochsenbein, H.-B. Bürgi, R. Konrat & B. Kräutler. Chem. Eur. J. 7, 2676 (2001).

*The Bisadducts of the [5,6]-Fullerene C<sub>60</sub> and Anthracene.* A. Duarte-Ruiz, T. Müller, K. Wurst & B. Kräutler. Tetrahedron 57, 3709 (2001).

*Loading a Porphyrin with Fullerene-Units.* A. Rieder & B. Kräutler. J. Am. Chem. Soc. 122, 9050 (2000).

*A Concise Route to Symmetric Multi-Adducts of [60]Fullerene: Preparation of an Equatorial Tetra-Adduct by Orthogonal Transposition.* R. Schwenninger, T. Müller & B. Kräutler. J. Am. Chem. Soc. 119, 9317 (1997).

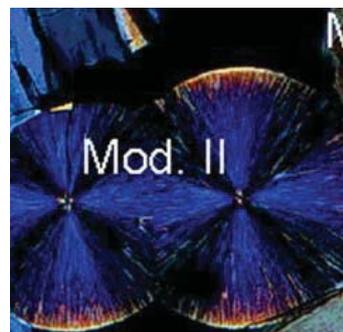
*Eine topochemisch kontrollierte, regiospezifische Fulleren-bis-Funktionalisierung.* B. Kräutler, T. Müller, J. Maynollo, K. Gruber, P. Ochsenbein, D. Schwarzenbach & H.-B. Bürgi. Angew. Chem. 108, 1294 (1996).

*Tetraferrocenyl[5]cumulene, (Fc)<sub>2</sub>C=C=C=C=C=C(Fc)<sub>2</sub>: Synthesis, electrochemistry and reactivity, including Ni(0)-promoted [3]-Ferrocenophane formation and [2+2]-cycloaddition with Fullerene C<sub>60</sub>.* B. Bildstein, M. Schweiger, K. Wurst, K.-H. Ongania et al., Organometallics, 18, 4286 (1999)

*Semimasked 1,1-diethynylferrocenes: synthesis, concepts, preparations and reactions.* H. Schottenberger, J. Lukasser, H. Kopacka, K. Wurst, K.-H. Ongania et al., J. Organomet. Chem., 637, 558 (2001).

# Polymorphie und Festkörpereigenschaften von Arznei- und Hilfsstoffen

A. Univ.-Prof. Dr. Ulrich J. Griesser  
Institut für Pharmazie, Abt. Pharmazeutische Technologie  
Universität Innsbruck, Innrain 52a, A-6020 Innsbruck  
Tel. +43 512 507 5309; Fax:+43 512 507 2939  
email: [ulrich.griesser@uibk.ac.at](mailto:ulrich.griesser@uibk.ac.at)  
<http://www.uibk.ac.at/c/c7/c740>



Unter **Polymorphie** versteht man im chemisch-physikalischen Sinn die *Eigenschaft von Stoffen in mehreren Kristallformen existieren zu können*. In anderen Worten: ein Stoff kann unterschiedliche Festzustände mit gleicher chemischer Zusammensetzung annehmen. Sobald diese Festphasen in Lösung gebracht, geschmolzen oder in die Gasphase überführt werden, sind sie vollkommen identisch. Diesem Festkörperphänomen begegnet man bei sämtlichen Materialklassen, am bekanntesten sind jedoch zwei der festen Erscheinungsformen des reinen Kohlenstoffs, nämlich Graphit und Diamant, die aufgrund der unterschiedlichen Bindungsverhältnisse und Anordnung der Bausteine (Kohlenstoffatome) im Kristallgitter extreme Unterschiede in ihren Festkörpereigenschaften zeigen.

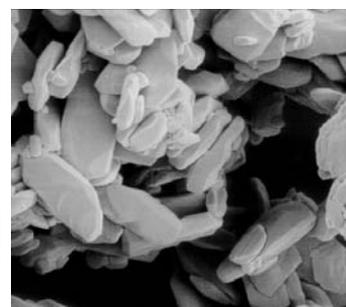


Graphit



Diamant

*Polymorphe Formen unterscheiden sich in ihren physikalisch-chemischen Eigenschaften* (mechanische Eigenschaften, Löslichkeit, Schmelzverhalten, Dichte, Oberflächeneigenschaften etc.), in der Regel sind diese allerdings nicht so extrem ausgeprägt wie bei Graphit und Diamant. Die unterschiedlichen Festkörpereigenschaften haben aber einen Einfluss auf das *Produktionsverhalten* und die *Stabilität von Materialien* und Produkten. Beispielsweise zeigen viele Metalle wie Eisen, Zinn, Nickel und Chrom und auch deren Legierungen Polymorphie, was unter anderem einen Einfluss auf die mechanische Stabilität und die „Alterung“ solcher Materialien hat. Da mindestens 80 % aller Arzneimittel aus festen, meist kristallinen Materialien bestehen, ist diese Eigenschaft für **Arzneistoffe** von größter Relevanz. Man weiß heute, dass weit mehr als die Hälfte aller Wirkstoffe in mehreren Kristallformen vorkommen kann, was bei der Herstellung eines Fertigarzneimittels in vieler Hinsicht berücksichtigt werden muss und in Extremfällen sogar zu völlig *unwirksamen Arzneimitteln* führen kann. Häufig verursacht Polymorphie *Probleme bei der Arzneimittelproduktion*, die, wenn sie zu spät



Elektronenmikroskopische Aufnahmen  
zweier Kristallformen von Vitamin B1

# Polymorphie und Festkörpereigenschaften von Arznei- und Hilfsstoffen

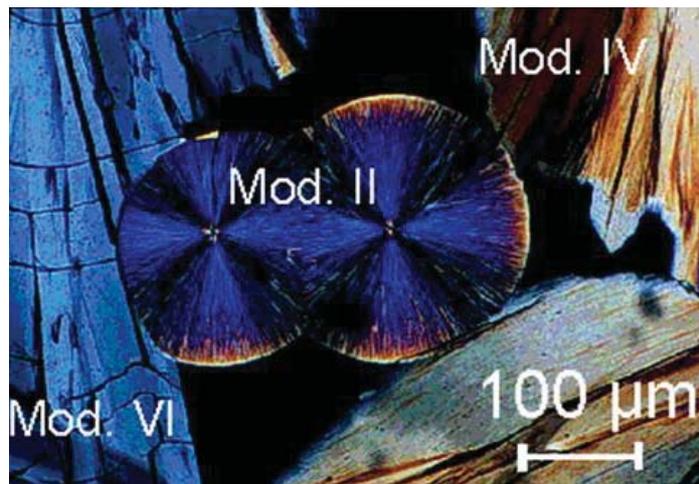
A. Univ.-Prof. Dr. Ulrich J. Griesser

Institut für Pharmazie, Abt. Pharmazeutische Technologie



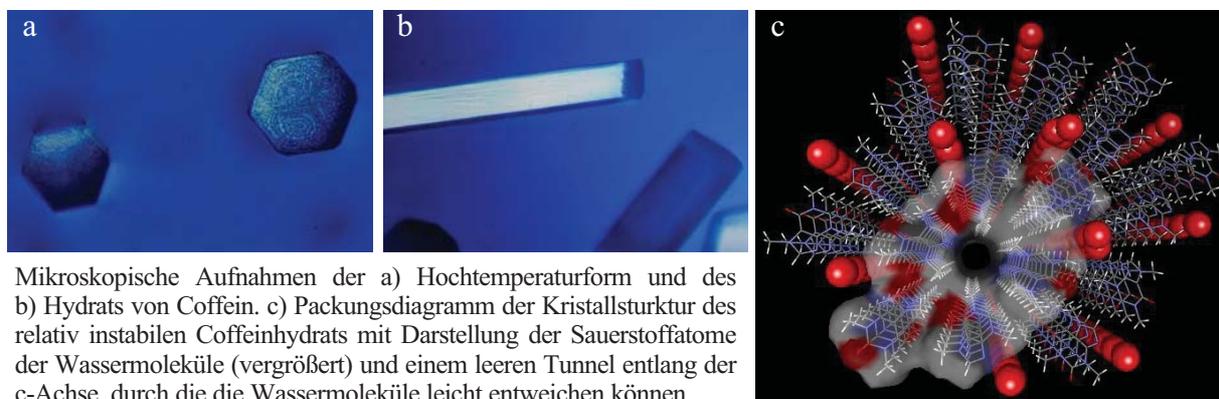
erkannt werden, zu Fehlproduktionen und/oder Produktionsverzögerungen führen können. All dies schlägt sich schließlich in der Arzneimittelsicherheit und auch im Arzneimittelpreis nieder. Die Arzneimittelbehörden verlangen daher seit einigen Jahren die Vorlage adäquater Untersuchungen zu diesem Festkörperphänomen bei der Zulassung neuer Arzneistoffe.

Die Erforschung von Festkörpereigenschaften von Arzneistoffen insbesondere der Polymorphie wird am Institut für Pharmazie der Universität Innsbruck seit mehr als sechzig Jahren erfolgreich und international wegweisend betrieben und gelehrt. Diese Forschungsthematik begann in Innsbruck mit der Entwicklung von mikrothermoanalytischen Geräten und Methoden (Kofler Heiztisch und Heizbank). Die Mikrothermoanalyse spielt auch bei den aktuellen Forschungsthemen der Arbeitsgruppe eine zentrale Rolle. Neben verschiedenen Heiztischtypen



Polarisationsmikroskopische Aufnahme von drei Kristallformen (Phenobarbital).

(Kofler, Mettler, Linkam), ausgerüstet mit digitaler Bilddokumentation, kommt heute eine breite Palette an modernen Analysetechniken zum Einsatz. Dazu gehören u.a. die Differenz-Scanning-Kalorimetrie (DSC), Thermogravimetrie, Lösungskalorimetrie, FTIR-Mikroskopie, FT-Raman-Mikroskopie und die Pulverröntgendiffraktometrie mit temperaturvariabler Probenkammer. Zur Herstellung und Auffindung verschiedener Kristallformen werden verschiedene



Kristallisationsmethoden mit Lösungsmitteln und Schmelzen sowie Lyophilisation und thermische Methoden angewendet. Mit Hilfe der genannten Analytik und Methoden der Strukturaufklärung

# Polymorphie und Festkörpereigenschaften von Arznei- und Hilfsstoffen



A. Univ.-Prof. Dr. Ulrich J. Griesser

Institut für Pharmazie, Abt. Pharmazeutische Technologie

(Einkristallröntgendiffraktometrie, Festkörper-NMR-Spektroskopie) werden die thermodynamischen und strukturellen Daten von Kristallformen ermittelt, die einerseits zur **systematischen Erforschung von Struktur-(Polymorphie)-Eigenschafts-Beziehungen** dienen und andererseits die Grundlage für **Erkenntnisse der Zusammenhänge zwischen dem molekularen Aufbau (Kristallgitter, Ordnungsgrad) fester Arzneistoffe und den Verarbeitungseigenschaften** (Zerkleinerung, Trocknung, Granulierung, Tablettierung etc.) zu Arzneimitteln untersucht. Für angewandte, pharmazeutisch technologische Untersuchungen stehen verschiedene Partikelmessmethoden (Bildanalyse, Quecksilber-Porosimetrie), eine instrumentierte Tablettenpresse, eine Gefriertrocknungsanlage, Wirbelschicht- und Gefriertrockner u.a. Geräte zur Verfügung.

Ein Arbeitsgebiet der Gruppe beschäftigt sich mit **Wasseraddukten und Hydraten von Arzneistoffen**. Diese binären Kristallformen stellen höhere Anforderungen an die Analytik und die Verarbeitung zu Arzneimitteln als polymorphe (lösungsmittelfreie) Kristallformen. Das Wasser kann sehr unterschiedlich im Kristallgitter gebunden sein und kann bei verschiedenen Produktionsschritten abgegeben und/oder aufgenommen werden. Dabei kommt es in der Regel zu starken und oft unkontrollierbaren Veränderungen der Materialeigenschaften. Die Kenntnis des Wasserabgabe- und Aufnahmeverhaltens ist daher ein Schlüsselparameter für produktionstechnische Entscheidungen und muss im Vorfeld bei allen Arzneistoffen die solche Wasseraddukte bilden (ca. 30%) untersucht werden. Die Arbeitsgruppe verfügt über eine

speziell auf diese Problematik ausgerichtete Analytik, wie z.B. feuchtekontrollierte Pulverröntgendiffraktometrie, Thermogravimetrie u.a. Neuerdings stehen spezielle Messgeräte für automatische Analyse der Wasseraufnahme von Materialien bei verschiedenen Luftfeuchten zur Verfügung, die zusammen mit der Fa. Projekt-Messtechnik (Ulm, D) in mehrjähriger Arbeit entwickelt wurden. Diese Geräte sind hinsichtlich der Analysengeschwindigkeit von Feuchtesorptionsprozessen weltweit konkurrenzlos. Der

Probendurchsatz liegt bei einem zehnfachen von handelsüblichen Geräten, was neue Perspektiven für die wissenschaftlichen Untersuchung von feuchteabhängigen Veränderungen von festen Materialien setzt. Dies betrifft nicht nur Arzneistoffe, sondern auch andere Materialien wie Textilien (Kooperation mit dem Institut für Textilchemie, Univ. Innsbruck), Naturstoffe und Baumaterialien (Kooperation mit Inst. für Mineralogie und Petrographie, Univ. Innsbruck), Papier, Lebensmittel etc.



Das „High throughput“ Feuchtesorptionsprüfgerät SPS11 (Eigenentwicklung)

# Polymorphie und Festkörpereigenschaften von Arznei- und Hilfsstoffen



A. Univ.-Prof. Dr. Ulrich J. Griesser

Institut für Pharmazie, Abt. Pharmazeutische Technologie

## *Ausgewählte Publikationen:*

*The Polymorphic drug Substances of the European Pharmacopoeia, Part 9: Crystal structure and thermodynamic properties of Acetazolamide crystal forms.* U. J. Griesser, A. Burger & K. Mereiter (1997): J. Pharm. Sci. 86, 352-358.

*Effect of Freeze-Dry Processing Conditions on the Crystallization of Pentamidine Isethionate.* S. Chongprasert, U. J. Griesser, A. T. Bottorff, N. A. Williams, S. R. Byrn & S. L. Nail (1998): J. Pharm. Sci. 87(9), 1155-1160.

*Vapor Pressure and Heat of Sublimation of Crystal Polymorphs.* U. J. Griesser, M. Szelagiewicz, U. Ch. Hofmeier, C. Pitt & S. Cianferani (1999): J. Therm. Anal. Cal. 57, 45-60.

*Theoretical approaches to transformations of active pharmaceutical ingredients during manufacturing processes.* K. R. Morris, U. J. Griesser, C. J. Eckhardt & J. G. Stowell (2001): Advanced Drug Delivery Reviews 48, 91-114.

*Reactivity of Indomethacin Modifications with Ammonia Gas.* X. Chen, J. Stowell, K. Morris, U. J. Griesser & S. R. Byrn (2002): J. Am. Chem. Soc. (in print).

*Novel, high-throughput water vapor sorption analyzer for scientific and industrial applications.* U. J. Griesser & J. Dillenz (2002): American Laboratory (in print).

## *Ausgewählte nationale und internationale Kooperationen:*

- Department of Chemistry University of Durham, GB (Festkörper-NMR-Spektroskopie von Kristallformen)
- Department of Industrial and Physical Pharmacy, Purdue University, USA (Kristallstruktursimulationen, prozessinduzierte Phasenumwandlungen, Systematik von Hydraten)
- Institut für Mineralogie und Petrographie, Univ. Innsbruck (SEM-, BET- und Laserdiffraktionsmessungen, Hochdruckuntersuchungen)
- Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie, Univ. Innsbruck (Einkristallstrukturanalysen).
- Institut für Chemische Technologien und Analytik, TU-Wien (Einkristallstrukturanalysen).
- Institut für Textilchemie, Univ. Innsbruck (Feuchtesorptionsuntersuchungen von Textilfasern)
- European Network of Polymorphism (ESF, European Science Foundation)

## *Ausgewählte Industriekooperationen:*

- Biochemie Kundl (A)
- Lenzing AG (A)
- Claro products GmbH (A)
- Solvias AG (Basel, CH)
- Gen-Plus-Ratiopharm (D)
- Hexal AG (D)
- Roche Diagnostics (D)
- BASF (D)

## Fasern und Textilien

A. Univ.-Prof. Dr. Thomas Bechtold  
Institut für Textilchemie und Textilphysik  
Universität Innsbruck, Höchsterstraße 73, A-6850 Dornbirn  
Tel. +43 5572 28533; Fax:+43 5573 28629  
email: [textilchemie@uibk.ac.at](mailto:textilchemie@uibk.ac.at)  
<http://textilchemie.www.uibk.ac.at>



Die Weltproduktion an Textilfasern erreicht ein jährliches Volumen von rund 60 Mio. t Fasermaterial. Rund die Hälfte dieser Fasern sind Naturfasern wie Baumwolle, Wolle oder bestehen aus dem Naturprodukt Cellulose, z.B. Lyocell-, Viskosefasern. Die zweite Hälfte der weltweiten Faserproduktion besteht aus Synthefasern, wie beispielsweise Polyester, Polyamid, Elasthan.

Durch Vielfalt der Materialien haben sich die Möglichkeiten und damit die Anforderungsprofile an textile Produkte völlig verändert. Aus einer klassischen Industrie zur Abdeckung eines Grundbedarfs hat sich eine stark differenzierte Faser- und Textilindustrie entwickelt, deren Produkte verschiedenste Leistungsprofile und Funktionen aufweisen.

Anstelle einer empirischen Gestaltung eines textilen Produkts ist die Spezifizierung eines umfangreichen Leistungsprofils getreten, in welchem Optik, textilchemische, textilphysikalische Eigenschaften und technische Funktionen definiert werden.

Im Bereich der Materialwissenschaften kommt der Erforschung textilchemischer und textilphysikalischer Grundlagen hohe Bedeutung zu. Eine erfolgreiche Produktinnovation gelingt nur auf der Basis entsprechender wissenschaftlicher Ergebnisse. Eine besondere Bedeutung kommt dabei der Bildung wissenschaftlicher und industrieller Forschungsk Kooperationen zu. Die früher praktizierte isolierte Betriebsforschung ist heute nicht mehr effizient.

Die Vielfalt der Forschungsthemen reicht vom Prozeß der Faserentstehung und Fasermodifikation über chemische und physikalische Vorgänge bei der Verarbeitung zu textilen Produkten bis zum Verhalten eines Textils unter Anwendungsbedingungen, Beispiele sind Cellulosefaserforschung, Färbetechnologien, Trage- und Pflegeverhalten von Bekleidung, spezielle technische Produkte.

### **Christian-Doppler-Laboratorium für Chemie Cellulosischer Fasern und Textilien**

Lyocell, Modal und Viskose, eine wichtige Gruppe von Chemiefasern, bestehen wie die Naturfasern Baumwolle und Leinen aus dem natürlichen Rohstoff Cellulose. Bei der Faserherstellung, der Faser nachbehandlung und den verschiedenen Textilveredlungsprozessen läßt sich eine hohe Variationsbreite ihres Eigenschaftsprofils erreichen. Für eine zielgerichtete Produktgestaltung ist ein eingehendes Verständnis über die dabei ablaufenden chemischen und physikalischen Vorgänge erforderlich. Durch einen vertikalen Forschungsansatz, bei dem die Veränderungen einer Faser im Verlauf der verschiedenen aufeinanderfolgenden Behandlungsprozesse betrachtet werden, sollen Kausalketten für beobachtete Eigenschaften aufgeklärt und effiziente Fasermodifikationen ermöglicht werden.

# Fasern und Textilien

A. Univ.-Prof. Dr. Thomas Bechtold  
Institut für Textilchemie und Textilphysik



Im Rahmen der Aufgaben des CD-Labors werden insbesondere bearbeitet:

- Chemische Modifikation von Cellulosefasern und Synthese von Fasern mit neuen Eigenschaftsprofilen
- Untersuchung der strukturellen Eigenschaften von Cellulosefasern mit besonderem Schwerpunkt auf der Charakterisierung der Zustände während der Fadenbildung
- Erarbeitung einer wissenschaftlichen Basis und Entwicklung von Modellen zum Verständnis der Trage- und Pflegeeigenschaften von Textilien aus cellulosischen Fasern, sowie Möglichkeiten zur chemischen Modifikation in der Textilveredlung

Die industriellen Kooperationspartner kommen sowohl aus dem Bereich der Faserherstellung (Lenzing AG, Lenzing) als auch aus der Textilherstellung und Textilveredlung (FM Hämmerle Textilwerke, Dornbirn; Degerdon Textilveredlung, Gais). Für die Lenzing AG als Leitunternehmen in der Forschungsk Kooperation ist eine wissenschaftliche Bearbeitung faserrelevanter Themen von vorrangiger Bedeutung. Der Forschungsbereich erstreckt sich dabei über Untersuchungen zur Fadenbildung bis hin zum Verhalten der Fasern beim Tragen fertig konfektionierter Produkte. Beispiele sind Faserstruktur und Fasermodifikation, chemische Modifikation, Gebrauchsverhalten, mikrobiologische Fragestellungen.

Für die Textilveredlungsunternehmen ist die Erarbeitung einer wissenschaftlichen Basis für die Beschreibung des Verhaltens von Fasern in Veredlungsprozessen von Interesse. Weiters ist die Erforschung gezielter Veränderungen von Eigenschaften textiler Produkte geplant. Beispiele sind neue Ausrüstungstechnologien, verändertes Wassertransportverhalten und optimierte Produktprofile.



Mehrkathodenzelle zur kathodischen  
Reduktion von Azofarbstoffen



Leinen mit Naturstoffen gefärbt



## Elektrochemische Verfahrenstechniken in der Textilindustrie

Zahlreiche textilchemische Prozesse erfordern den Einsatz nicht regenerierbarer Reduktionsmittel, welche hohe Kosten und ökologische Schwierigkeiten verursachen. Im Rahmen einer internationalen Forschungsk Kooperation werden wissenschaftliche Grundlagen zum Einsatz elektrochemischer Verfahrenstechniken als Basis für nachhaltige Technologien erforscht. Sowohl Reduktionsprozesse wie Oxidationsvorgänge werden untersucht. Durch die Kooperation mit Industriepartnern ist eine Implementierung in technischem Maßstab in Arbeit. Einsatzbereiche für diese Technologie sind beispielsweise:

- Reduktion von Küpenfarbstoffen und Indigo durch indirekte Elektrolyse mit löslichen Mediatorsystemen
- Reduktion von Schwefelfarbstoffen durch direkte kathodische Reduktion
- direkte Reduktion von Azofarbstoffen zur Entfärbung von konzentrierten Textilabwässern
- in-situ Erzeugung von Bleichchemikalien in der Jeans-Produktion

Aus der wissenschaftlichen Bearbeitung der Forschungsgebiete ist bei einigen Forschungsthemen bereits ein Scale-up in den technischen Maßstab erfolgt.

Neben Einrichtungen für cyclische Voltammetrie stehen zur Bearbeitung dieser Fragestellungen elektrochemische Zellen in unterschiedlichen Ausführungen und Größen bis 200 A Zellenstrom zur Verfügung. Ein besonderer Schwerpunkt ist dabei die Erforschung leistungsfähiger Elektroden-systeme wie beispielsweise Mehrkathodenzellen mit dreidimensionalen Elektroden.

## Textilchemische Prozesse

Bei der Erforschung ausgewählter textilchemischer Prozesse werden Grundlagenforschungsarbeiten ebenso wie wissenschaftliche Arbeiten in enger Kooperation mit Unternehmen durchgeführt.

Beispiele für solche Themen sind:

- formaldehydfreie Hochveredlung von Textilien durch Vernetzung mit Polycarbonsäuren
- Quellverhalten von cellulosischen Materialien
- moderne Applikationstechnik für die Gewinnung und Anwendung von Naturfarbstoffen in Textilfärbeprozessen

Durch die Situierung des Instituts innerhalb einer textilspezifisch geprägten Infrastruktur (Unternehmen, HTL-Dornbirn, Versuchsanstalt für Textilindustrie) steht eine umfangreiche Ausrüstung zur Bearbeitung der Forschungsthemen zur Verfügung. Das Institut verfügt über die erforderliche textilspezifische Analytik (Farbortmessung, FTIR, GC, AAS, HPLC), für Naß- und Trockenbehandlungsprozesse stehen Laboreinrichtungen bis zu Mustermaßstab (5 kg) zur Ver-



fügung. Das Ergebnis eines Versuchs kann durch entsprechende Qualitätsprüfungen (z.B. Naß-, Lichtechtheiten) bewertet werden.

Der Einfluß klimatischer Größen kann in Klimakammern und unter Normalklima untersucht werden, für textilphysikalische Messungen stehen u.a. Festigkeitsprüfgeräte, Scheuerprüfgeräte für die verschiedenen Stufen der textilen Produktion (Fasern, Garne und Fläche) zur Verfügung.

#### *Ausgewählte Publikationen:*

*Determination of Glyoxal via an Internal Cannizzaro reaction by Means of HPLC*, Schramm C., Rinderer B., *Analytical Chemistry*, 72 (2000) 5829-5833.

*Different Hypophosphite As Catalysts in Non-Formaldehyde Durable Press Finishing With Polycarboxylic Acids*, Schramm C., Rinderer B., *Textile Chemist and Colorist and American Dyestuff Reporter*, 32 (2000) 37-40.

*Cathodic decolourisation of textile waste water containing reactive dyes using a multi-cathode electrolyser*, Bechtold T., Burtscher E., Turcanu A., *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 76, (2001) 303-311.

*Electrochemical Vat Dyeing – Combination of an Electrolyser with a Dyeing Apparatus*, Bechtold T., Turcanu A., *J. Electrochem. Soc.*, 149 (2002) D7-D14.

*Process balance and product quality in the production of natural indigo form Polygonum tinctorium Ait. applying low-technology methods*, Bechtold T., Turcanu A., Geissler S., Ganglberger E., *Bioresource technol.* 81 (2002) 171-177.

*Ca<sup>2+</sup>-Fe<sup>3+</sup>-D-gluconate-complexes in alkaline solution. Complex stabilities and electrochemical properties*, Bechtold T., Burtscher E., Turcanu A., *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, (2002) 2683-2688.

#### *Ausgewählte nationale und internationale Kooperationen:*

- UMIST, University of Manchester, Department of Textiles, Institute of Science and Technology, England, (Vernetzersynthese und Chemismus)
- Institut für Molekularbiologie, Universität Innsbruck (mikrobielles Verhalten von Textilien)
- Institut für Physik der Montanuniversität Leoben (Themenbereich Fasermikroskopie)
- Institut für Pharmazeutische Technologie, Universität Innsbruck (Themenbereich Wassertransportverhalten)
- Fakultät für Textiltechnologie, Zagreb (Formaldehydfreie Ausrüstung)
- Österreichisches Ökologieinstitut, Wien, (Farbstoffliefernde Pflanzen, "Fabrik der Zukunft")

#### *Ausgewählte Industriekooperationen:*

##### *Faser- und Textilindustrie:*

Lenzing AG, Lenzing (A), Degerdon Textilveredlung, Gais (A), FM Hämmerle, Dornbirn (A) Getzner Textil AG, Bludenz (A), Riedel&Tietz, Limbach-Oberfrohna (D), Schoeller Hard (A), Wolford, Bregenz (A), Johnson&Johnson, Hallein (A)

##### *Chemie und Farbenindustrie:*

DyStar, Frankfurt, (D), BASF Ludwigshafen, (D)

##### *Maschinen und Apparatebau:*

DE NORA Deutschland, Rodenbach (D), Thies Textilmaschinen, Coesfeld (D), Benninger AG, Uzwil (CH)

## Modellkatalysatoren

Univ.-Prof. Dr. Konrad Hayek

Institut für Physikalische Chemie

Universität Innsbruck, Innrain 52a, A-6020 Innsbruck

Tel. +43 512 507 5062; Fax:+43 512 507 2925

email: [konrad.hayek@uibk.ac.at](mailto:konrad.hayek@uibk.ac.at)

[http://orawww.uibk.ac.at/public\\_prod/owa/psp\\$web.groups](http://orawww.uibk.ac.at/public_prod/owa/psp$web.groups)



Die moderne chemische Industrie beruht zu einem großen Teil auf neueren Entwicklungen im Bereich der heterogenen Katalyse. Zu diesen gehören die gezielte Präparation (Design), die richtige Auswahl und die gerichtete Anwendung von Katalysatoren. Die klassische Aufgabe eines Katalysators besteht in der Beschleunigung einer gewünschten chemischen Reaktion und in der Unterdrückung unerwünschter Reaktionen. Schon seit langem ist bekannt, dass die beste Kontaktierung des Katalysators mit dem Reaktionsgemisch durch dessen feinste Verteilung, d. h. die Bereitstellung der größtmöglichen Grenzfläche, erzielt wird. Daher haben Nanopartikel von Metallen, Oxiden und Sulfiden bereits zu einer Zeit großtechnische Anwendung in der Katalyse gefunden, als der Begriff "Nanotechnologie" noch lange nicht in Gebrauch war, etwa für Kohlenwasserstoffumwandlungen, Verbrennungsreaktionen, partielle Oxidationen u. v. a. Inzwischen weiß man allerdings, dass die Vergrößerung der Oberfläche, bzw. die Verkleinerung der Teilchen, zumeist auch mit einer Veränderung der chemischen und damit der katalytischen Eigenschaften verknüpft ist (e. g. Teilchengrößeneffekt). So ist das "inerte" Edelmetall Gold heute in feiner Verteilung ("Nanopartikel") und in Verbindung mit leicht reduzierbaren Oxiden ein vielversprechender Katalysator für technisch relevante Oxidationsreaktionen.

Voraussetzung für den Katalysator der Zukunft ist allerdings nicht nur eine hohe Aktivität, sondern vor allem auch eine hohe, möglichst hundertprozentige Selektivität, d. h. Ausbeute in Richtung des gewünschten Produktes. Die Vermeidung unerwünschter Nebenprodukte ist eine Grundbedingung für eine saubere chemische Industrie. Die Erreichung dieses Zieles erfordert nun allerdings die Untersuchung und Steuerung der Struktur und der Funktion der Katalysatoroberfläche im Nanometerbereich.

Am Institut für Physikalische Chemie der Universität Innsbruck wurden erfolgreich Studien an Modellkatalysatoren durchgeführt, welche aus kleinen Edelmetallteilchen auf einem dünnen oxidischen Träger bestehen [1]. Diese Forschungsaktivitäten gipfeln in der seit 1998 bestehenden Mitwirkung am österreichweiten Forschungsschwerpunkt „Gas-Oberflächen-Wechselwirkungen“ des österreichischen Forschungsfonds (Gas Surface Interactions, S 81). Im Rahmen dieser Kooperation wird die Chemie von Testmolekülen auf Katalysatoroberflächen auf molekularem Niveau untersucht, um ein grundlegendes Verständnis des Reaktionsablaufs an Oberflächen zu erzielen. Durch kontrollierte chemische Modifizierung erhalten Metall- und Oxidoberflächen neuartige physikalisch-chemische Eigenschaften, welche gezielt erforscht und gesteuert werden. Dabei ist die Zusammenarbeit von verschiedenen Fachrichtungen sowie die enge Interaktion von Experiment und Theorie von großer Bedeutung. Untersuchungen an Mehrkomponentensystemen sind von großer praktischer Bedeutung für das Gebiet der heterogenen Katalyse, für die Aufklärung des Wachstumsmechanismus von Dünnen Schichten und somit für die Technologie von Oberflächenvergütungen, Korrosionsschutz u.v.a.m.

## Modellkatalysatoren

Univ.-Prof. Dr. Konrad Hayek  
Institut für Physikalische Chemie



Im Rahmen des genannten FWF-Schwerpunkts stellt das in Innsbruck durchgeführte Teilprojekt die Verbindung zwischen Oberflächenphysik und -chemie und heterogener Katalyse dar, welche über den Weg von der "idealen" zur "realen" Oberfläche führt. Bisher wurden Katalysatoren untersucht, welche aus einem Edelmetall (Rhodium, Platin, Palladium) und einem Übergangsmetall (Titan, Vanadium, Cer) bestehen. Dabei liegt das letztere entweder im metallischen Zustand vor und bildet mit ersterem eine Legierung (s.u.), oder es bedeckt als reduzierbares Oxid ( $\text{VO}_x$ ,  $\text{CeO}_{2-y}$ ) zum Teil die Metalloberfläche. Die chemische Wechselwirkung zwischen dem Edelmetall und dem Träger hat Auswirkungen auf die katalytische Aktivität und kann durch Messung von Reaktionen einfacher Moleküle an „reellen“ und „inversen“ Modellkatalysatoren bestimmt und anschließend gesteuert werden. Reduziert man ein Oxid bis zum Metall, oder geht man von vorneherein vom metallischen Zustand aus, so kann es zur Ausbildung von Oberflächenlegierungen kommen. "Subsurface Alloys" unterscheiden sich vom reinen Edelmetall und von konventionellen Legierungen durch eine Anreicherung des Fremdmetalls in der 2. Oberflächenlage und haben völlig neue und vielversprechende katalytische Eigenschaften [2–5].

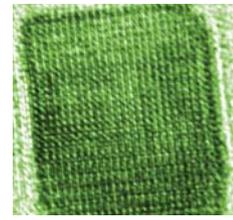
Das im Rahmen des erwähnten Projektes gewonnene Know-how soll in den materialwissenschaftlichen Forschungsschwerpunkt der Fakultät eingebracht werden. Bisher wurden Modellkatalysatoroberflächen untersucht, welche strukturell einheitlich, aber auch chemisch weitgehend homogen und daher leicht charakterisierbar sind. Zu diesen zählen Oberflächen von Einkristallen und kleine Kristallite von Edelmetallen. Viele Modellsysteme entwickeln ihre besonderen katalytischen Eigenschaften aber erst dann, wenn sie bereits strukturell oder chemisch komplex sind oder es im Laufe der Reaktion werden. Daher ist der nächste logische Schritt die Entwicklung von Modellkatalysatoren mit strukturell geordneten Oberflächen, welche zwar komplexe, aber einheitliche chemische und elektronische Eigenschaften haben. Dies entspricht im Grunde einer großen Zahl von regelmäßig angeordneten aktiven Zentren, oder einer nanostrukturierten Katalysatoroberfläche im engeren Sinne. In Kombination mit geeigneten Testreaktionen stellt dies einen neuartigen Ansatz zur stereo-elektronischen Kontrolle von chemischen Prozessen auf festen Oberflächen dar.



Arbeitsbereich Katalyse am  
Institut für Physikalische Chemie  
Von links: R. Kramer, D. Eder,  
B. Klötzer, K. Hayek, B. Jenewein,  
S. Penner, W. Unterberger

# Modellkatalysatoren

Univ.-Prof. Dr. Konrad Hayek  
Institut für Physikalische Chemie

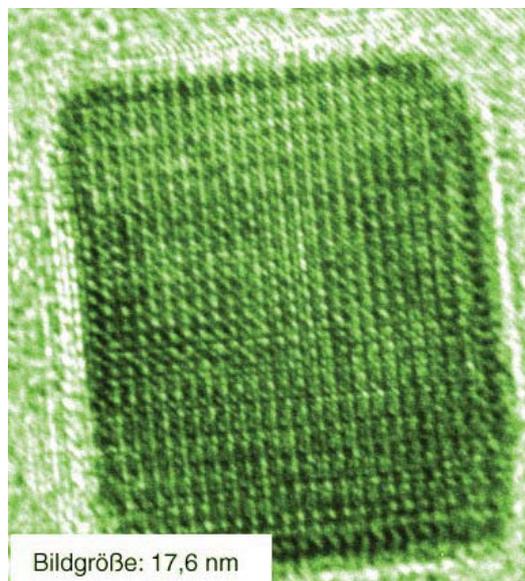
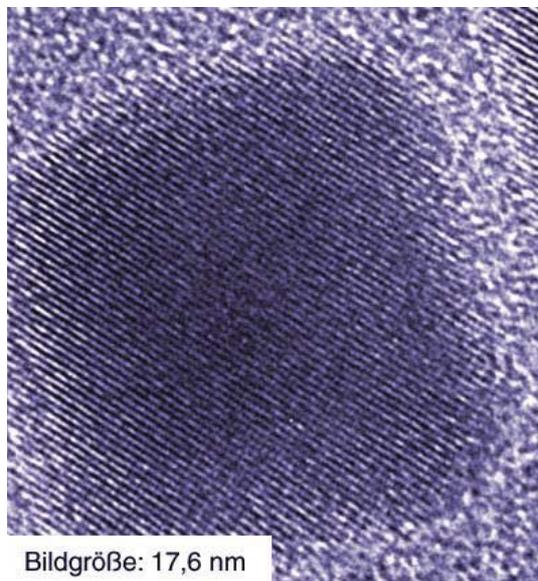


Es ist geplant, folgende Systeme zu untersuchen:

- Nanostrukturierte Modellsysteme mit atomaren Stufen und Kanten, insbesondere Legierungsoberflächen:  
Neuere Studien von Katalysatoroberflächen mit dem Rastertunnelmikroskop haben gezeigt, dass sowohl Inhibitoren (Katalysatorgifte) als auch Promotoren sich bevorzugt an solchen Plätzen festsetzen. Daher sind solche Modellsysteme besonders geeignet zur Untersuchung von Promotion und Inhibierung von strukturabhängigen Reaktionen. Diese Stufen können durch "Dekoration" mit Metallen, Nichtmetallen oder Oxiden blockiert oder aktiviert und damit katalytisch verändert werden.  
Die bereits zitierten neuartigen katalytischen Eigenschaften von Subsurface-Legierungen machen es möglich, die elektronische Beeinflussung von chemischen Reaktionen durch das zweite Metall unter Ausschluss von "Ensemble- Effekten" zu studieren, da die Fremdatome nur in der unteren Atomlage anzutreffen sind und somit kein konventionelles Oberflächenensemble bilden können. Solche Katalysatoren sind zum Beispiel zur CO-Methanierung, zur partiellen Oxidation von Alkoholen etc. bestens geeignet.
- Nanostrukturierte Oberflächenoxide:  
Manche Oberflächenoxide wie zum Beispiel Vanadiumoxid bilden auf Metalleinkristallen periodische zweidimensionale Strukturen, welche spezifische Adsorptions- und Reaktionszentren in regelmäßiger Anordnung enthalten. Sie sind hervorragende Kandidaten für die Katalyse von partieller Oxidation, z.B. von kleinen Kohlenwasserstoffmolekülen wie Ethen oder Propen zu den entsprechenden Aldehyden oder Säuren.  
Das Wachstum und der Abbau von Oxidphasen an einer Metalloberfläche verlaufen als Nanoprozesse nur in nächster Nähe der Phasengrenze, sie können jedoch die Reaktionsrate und die Richtung einer Redox-Reaktion stark beeinflussen. Das Studium der nichtlinearen Kinetik des Wachstums von Oxidschichten ist daher zum Verständnis solcher Prozesse notwendig. Bekannt ist z. B. die oszillierende Kinetik von Oxidationsreaktionen an einigen Edelmetallen, welche durch Umwandlungsprozesse der oxidischen Phasen gesteuert wird.
- Nanostrukturierte Dünnschicht-Modellkatalysatoren aus reduzierbaren Oxiden und Edelmetallteilchen:  
Kleine Metallpartikel sind sehr reaktiv und können bereits unter milden Reduktionsbedingungen regelmäßige, nanostrukturierte Legierungsteilchen mit neuen interessanten katalytischen Eigenschaften ausbilden [6]. Diese Modellsysteme lassen sich besonders gut mit dem Elektronenmikroskop untersuchen (vgl. untenstehende Abbildung).

## Modellkatalysatoren

Univ.-Prof. Dr. Konrad Hayek  
Institut für Physikalische Chemie



Platin-Nanokristall auf einem Ceroxid-Träger vor und nach der Reduktion in Wasserstoff bei 550 °C-Bildung von nanostrukturiertem Pt<sub>3</sub>Ce (Elektronenmikroskopische Aufnahme. D.S. Su und S. Penner, 2001)

Alle Untersuchungen sind in Zusammenarbeit mit Partnern innerhalb und außerhalb des Schwerpunktes geplant. Im Rahmen des Institutes für Physikalische Chemie bestehen enge Kontakte mit den Arbeitsgruppen von R. Kramer (Kinetik und Katalyse an Metall-Oxid-Systemen), R. Abermann (Dünne Schichten von reduzierbaren Oxiden) und E. Bertel (Rastertunnelmikroskopie von nanostrukturierten Oberflächen). Weitere Kooperationen bestehen bereits mit R. Tessadri (Institut für Mineralogie) auf dem Gebiet der Strukturanalyse von Modellkatalysatoren, und mit dem Institut für Ionenphysik (Spurenanalytik von Reaktionsprodukten). Zahlreiche Anknüpfungspunkte mit den Arbeitsgruppen von M. Buchmeiser, B. Bildstein, H. Schottenberger und P. Jaitner betreffen das Gebiet der Katalyse und Kinetik (Vergleich von homogener und heterogener Katalyse sowie von Gas- und Flüssigphasenkinetik an verwandten Systemen etc.).

Außerhalb der Universität Innsbruck sind vor allem die Kooperationen im erwähnten Forschungsschwerpunkt des Österreichischen Wissenschaftsfonds zu nennen (Universität Graz, Technische Universität Graz, Technische Universität Wien, Center for Computer Materials Science, Wien). Enge Zusammenarbeit im Ausland besteht mit dem Department of Chemistry, University of California, Berkeley, dem Max-Planck-Institut für Physikalische Chemie (Fritz-Haber-Institut) in Berlin, und mit der Universität Cádiz, Spanien, wobei daran gedacht ist, die letzteren beiden Kooperationen im Rahmen des nächsten EU-Forschungsprogramms zu einem europäischen Netzwerk ("Network of Excellence") auszubauen.

# Modellkatalysatoren

Univ.-Prof. Dr. Konrad Hayek  
Institut für Physikalische Chemie



Die folgende apparative Ausrüstung steht zur Verfügung:

Elektronenmikroskop LEO 10C; Ultrahochvakuumapparaturen mit Möglichkeit für Beugung langsamer Elektronen, Augerelektrovenspektroskopie, Molekülstrahltechniken und angeschlossener "High Pressure Cell" für kinetische Messungen; Anlagen zum Beschichten im Hochvakuum; Mikroreaktorsystem zur Untersuchung von Modellkatalysatoren, u. a. m.

## *Ausgewählte Publikationen:*

*Studies of metal-support interactions with "real" and "inverted" model systems: Reactions of CO and small hydrocarbons with hydrogen on noble metals in contact with oxides.* K. Hayek, M. Fuchs, B. Klötzer, W. Reichl, G. Rupprechter: *Top. Catal.* 13 (2000) 55.

*Surface reactions on inverse model catalysts: CO adsorption and CO hydrogenation on vanadia and ceria modified surfaces of rhodium and palladium.* K. Hayek, B. Jenewein, B. Klötzer, W. Reichl: *Top. Catal.* 14 (2001) 25.

*Vanadium oxide overlayers on rhodium: Influence of the reduction temperature on the composition and on the promoting effect in CO hydrogenation.* W. Reichl, K. Hayek: *J. Catal.* 208 (2002) 422.

*Strong and coverage-independent promotion of CO hydrogenation by subsurface vanadium on Rh.* W. Reichl, K. Hayek: *Phys. Rev. Lett.* (2002), submitted.

*Adsorption and hydrogenation of CO on Pd(111) and Rh(111) modified by subsurface vanadium* Surf. B. Klötzer, W. Unterberger, K. Hayek. *Sci* (2002), in press.

*Platinum nanocrystals supported by silica, ceria and alumina: metal-support interactions due to high-temperature reduction in hydrogen* Surf. S. Penner, D. Wang, D. S. Su, G. Rupprechter, R. Schlögl, K. Hayek. *Sci.* (2002), in press.

# Heterogene Katalyse und Elektrochemie

A. Univ.-Prof. Dr. Reinhard Kramer

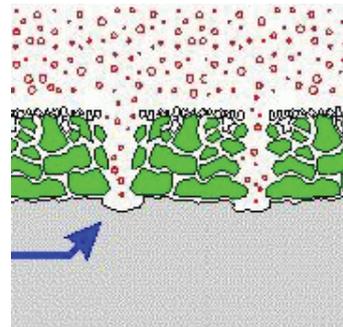
Institut für Physikalische Chemie

Universität Innsbruck, Innrain 52a, A-6020 Innsbruck

Tel. +43 512 507 5057; Fax:+43 512 507 2925

email: [reinhard.kramer@uibk.ac.at](mailto:reinhard.kramer@uibk.ac.at)

[http://orawww.uibk.ac.at/public\\_prod/owa/psp\\$web.groups](http://orawww.uibk.ac.at/public_prod/owa/psp$web.groups)



Die Arbeitsgruppe „Heterogene Katalyse und Elektrochemie“ befaßt sich mit der Herstellung und Charakterisierung von Metall-Trägerkatalysatoren und hat ihre Aktivität erweitert in den Bereich der Charakterisierung und elektrochemischen Untersuchung von oxidischen Materialien, die als Trägermaterialien für Metall-Trägerkatalysatoren, wie auch als Feststoffelektrolyten, Sensoren und Sputtertargets verwendet werden.

Die für diese Untersuchungen verwendeten Methoden sind: Umsatz-Zeit-Messungen in einem Rezirkulationsreaktor, Volumetrische Messung der Adsorption von H<sub>2</sub>, CO und O<sub>2</sub>, Volumetrische Titration von Sauerstoff-Fehlstellen, In-situ Transmissions-FTIR Messung, Temperaturprogrammierte Reduktion und In-situ Elektrochemische Impedanzspektroskopie.

Als Beispiel der Herstellung von Katalysatoren sei die trockene Präparation von Palladiumkatalysatoren durch den Festkörperaustausch von Palladiumchlorid mit Zeolithen [1]. Es konnte gezeigt werden, daß der Austausch über einen Transport von Pd<sub>6</sub>Cl<sub>12</sub>-molekülen durch die Gasphase erfolgt. Eine solche trockene Präparationsmethode könnte die Reaktivierung von gebrauchten Abgaskatalysatoren wirtschaftlich interessant machen. Auf Grund der Untersuchungen konnten die Bedingungen für einen solchen Austausch optimiert werden.

Im Rahmen der Charakterisierung von Metall-Trägerkatalysatoren wurde untersucht, warum die Hydrogenierung von Kohlenmonoxid und die Hydrodeoxygenierung von Propanol(2) auf TiO<sub>2</sub> geträgerten Platinkatalysatoren deutlich rascher verlaufen als bei der Verwendung von SiO<sub>2</sub> oder Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> als Trägermaterial. Die Charakterisierung des Trägermaterials TiO<sub>2</sub> erbrachte das Ergebnis, daß bei Wasserstoffbehandlung an der Titandioxid-Oberfläche Sauerstoff-Fehlstellen gebildet werden, deren Dichte nach folgender Reaktionsgleichung über ein partielles Gleichgewicht bestimmt wird.

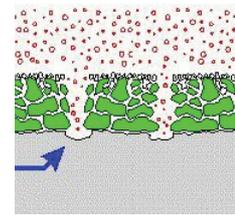


Die Fehlstellendichte kann demnach durch das Verhältnis der Partialdrucke von Wasserstoff und Wasser kontrolliert werden [2]. Die Untersuchung der genannten Reaktionen unter kontrollierten Reduktionsbedingungen ergab, daß die katalytische Aktivität mit der Zahl der Sauerstoff-Fehlstellen an der Titandioxid-Oberfläche korreliert [3]. Daraus konnte der Schluß gezogen werden, daß das am katalytisch aktiven Ensemble für diese Reaktion eine solche Oberflächenfehlstelle beteiligt ist.

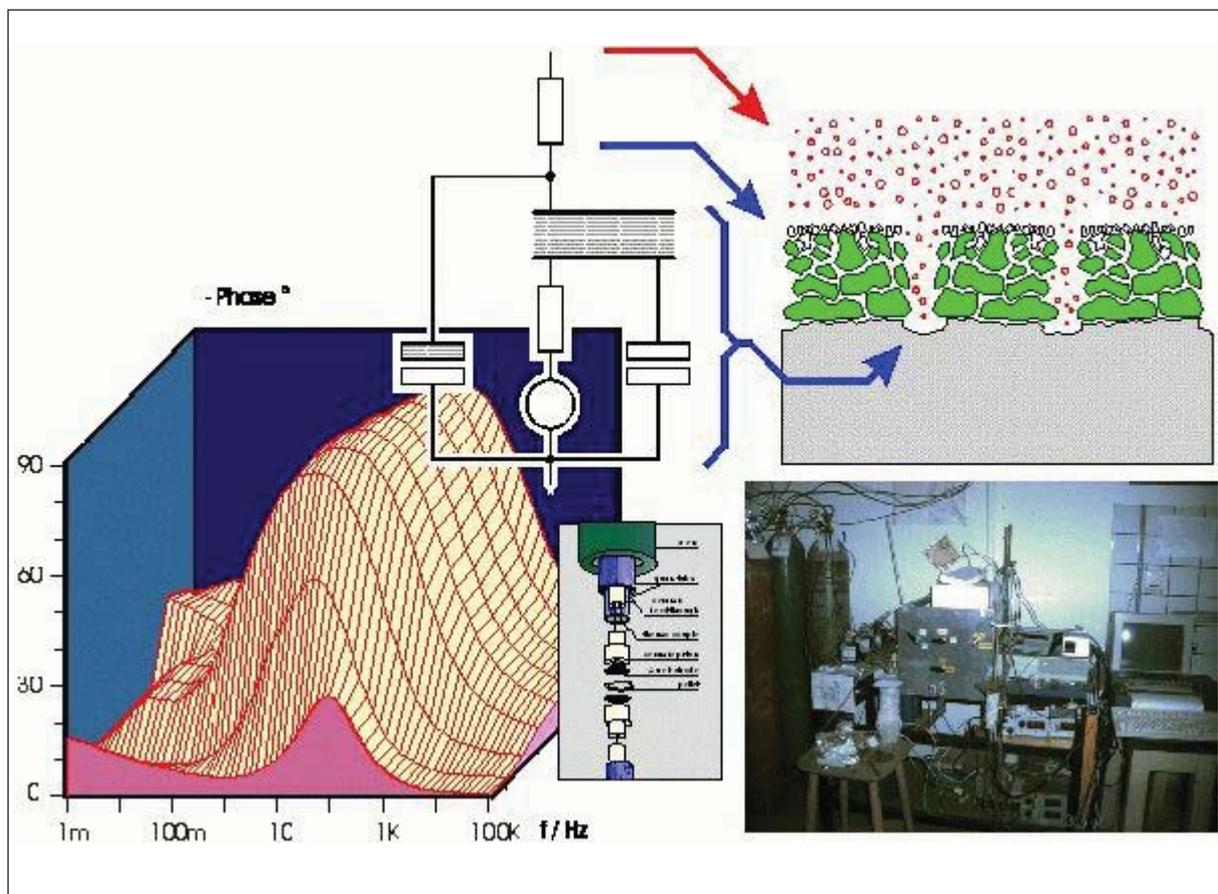
Die bei der Charakterisierung von TiO<sub>2</sub> verwendete Methode der volumetrischen Titration von Sauerstoff-Fehlstellen wurde auf weitere substöchiometrische Oxide angewandt. So eignet sich diese Methode zur Bestimmung der Stöchiometrie der Oxide von Zirkonium [4], Niob, Tantal, Wolfram, Vanadium und Cer nach einer Wasserstoffbehandlung als Funktion der Behandlungstemperatur und Behandlungszeit.

# Heterogene Katalyse und Elektrochemie

A. Univ.-Prof. Dr. Reinhard Kramer  
Institut für Physikalische Chemie



Bei der Bildung von Sauerstoff-Fehlstellen werden Elektronen erzeugt, die meist Donor-Plätze zwischen dem Valenz- und dem Leitungsband besetzen und damit die elektrische Leitfähigkeit erhöhen. Mit Hilfe der Elektrochemischen Impedanzspektroskopie (EIS), bei welcher der Wechselstromwiderstand (Impedanz) und der Phasenwinkel zwischen Strom und Spannung als Funktion der Stromfrequenz gemessen wird, können die Leitungsmechanismen (elektronische oder ionische Leitung), Leitung durch die Bulk-Phase oder längs der Kornoberfläche unterschieden und entkoppelt werden. Die Analyse der Impedanzspektroskopie erlaubt eine Berechnung der energetischen Lage der Donorzustände relativ zum Leitungsband und eine Abschätzung der Mobilität und der Zahl der Ladungsträger.

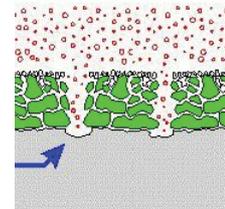


Die elektrischen Eigenschaften der Metalloxide sind eine wichtige Information für materialwissenschaftliche Fragestellungen, sei es bei der Verwendung von Oxiden als Festkörperelektrolyt (z.B. in der Lambda-Sonde oder in Brennstoffzellen), bei der Entwicklung von Sensoren, bei denen oft die elektrische Leitfähigkeit durch selektive Adsorption von Probemolekülen verändert wird, oder bei piezoelektrischen und piezoresistiven Oxiden als Kraftdetektoren.

# Heterogene Katalyse und Elektrochemie

A. Univ.-Prof. Dr. Reinhard Kramer

Institut für Physikalische Chemie



Für Titandioxid konnte gezeigt werden, dass der Stromtransport großteils über Elektronen erfolgt, besonders im reduziertem Zustand, bei dem die Leitfähigkeit um einen Faktor von 10<sup>5</sup> größer ist als im oxidierten Zustand – ein Beweis für die Bildung von Elektronen bei der Reduktion des Titandioxid [5]. Diese hohe Leitfähigkeit im reduzierten Zustand kann auch zur Erklärung des SMSI-Effekts in der Katalyse beitragen. Bei erhöhter Zahl von Ladungsträgern wird die zur Angleichung der Fermi-niveaus notwendige Raumladungszone an der Phasengrenze von Trägermaterial und Metallphase schmaler, die Folge davon ist eine erhöhte Ladungsübertragung zwischen den Phasen und eine höhere elektrische Feldstärke an der Phasengrenze.

## *Ausgewählte Publikationen:*

*Solid-state exchange of palladium in zeolite NaX.* Cécile Stolz, Arnaud Sauvage, Pascale Massiani, Reinhard Kramer, Appl. Catal, A, 167, 113-121 (1998)

*Surface stoichiometry of 'titanium suboxide'* Hery Haerudin, Stephan Bertel, Reinhard Kramer, J.Chem.Soc., Faraday Trans., 94, 1481-1487 (1998)

*Effect of water vapour on the catalytic activity of supported platinum catalysts.* Sandra Lunzer, Reinhard Kramer. Studies in Surface Science and Catalysis (2000), 130C, 2303-2308.

*The stoichiometry of hydrogen reduced zirconia and its influence on catalytic activity. Part 1: Volumetric and conductivity studies.* Dominik Eder, Reinhard Kramer. Physical Chemistry Chemical Physics (2002), 795-801.

*Stoichiometry of "titanium suboxide" Part 2: Electric properties,* Dominik Eder, Reinhard Kramer, submitted

# Festkörperoberflächen

o. Univ.-Prof. Dr. Erminald Bertel

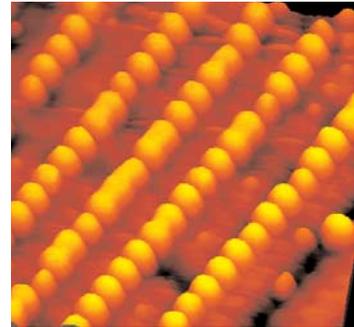
Institut für Physikalische Chemie

Universität Innsbruck, Innrain 52a, A-6020 Innsbruck

Tel. +43 512 507 5050; Fax:+43 512 507 2925

email: [erminald.bertel@uibk.ac.at](mailto:erminald.bertel@uibk.ac.at)

<http://www.uibk.ac.at/c/c7/c710/homepage/ag1/index.html>



**Geometrie und elektronische Eigenschaften fester Oberflächen**, insbesondere von Metalloberflächen, stehen im Mittelpunkt unserer Forschungen. Mechanische, elektronische und chemische Eigenschaften von Oberflächen beeinflussen Prozesse wie Reibung, Schmierung, Korrosion, elektrischen Kontakt, optische Reflexion und Absorption, chemische Reaktionen in der Katalyse u.s.w. ganz entscheidend. Das Ziel unserer Arbeit ist, ein detailliertes Verständnis der fundamentalen Zusammenhänge zwischen Struktur, Zusammensetzung und Oberflächen-Eigenschaften bis hinab auf atomare Dimensionen zu gewinnen. Ein solches Verständnis eröffnet den Weg zur Konstruktion neuer Materialien mit gezielt auf bestimmte Anwendungen hin optimierten Eigenschaften. Besonders wichtige Methoden zur Steuerung von Oberflächen-Eigenschaften sind die **Selbst-Strukturierung auf nanoskopischer Skala**, das heißt, die Erzeugung von Nanostrukturen nicht durch direkte mikroskopische Eingriffe, sondern unter Ausnutzung der vom Material selbst vorgegebenen Energien und Ordnungsprinzipien. Eine zweite, oft auch in Verbindung damit angewandte Methode ist die Präparation neuer Oberflächenverbindungen, die als Volumenmaterial nicht stabil wären.

## Untersuchungstechniken

Die Untersuchungen werden unter extrem reinen Vakuumbedingungen durchgeführt, um die chemische Zusammensetzung in und an der Oberfläche exakt kontrollieren zu können. Zur Untersuchung der Oberflächen werden Rastertunnelmikroskopie, Atomkraftmikroskopie, Elektronenbeugung, Massenspektrometrie, Photoemission, Ionenstreuung und Transportmessungen (Leitfähigkeitsmessungen), sowie in Zusammenarbeit mit anderen Gruppen optische Reflexionsmessungen durchgeführt. Die Modifizierung der Oberflächen erfolgt vor allem durch Deposition kleinster Mengen von Atomen oder Molekülen und thermische Behandlung, bzw. durch Abscheidung dünner Schichten auf der Oberfläche. Beispiele für auf diese Weise hergestellte nanoskopische Strukturen werden in Abb. 1 vorgestellt.

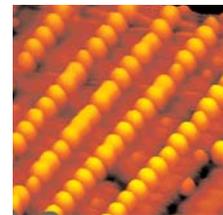
## Projekte

- **Adsorptionsplätze katalytischer Oberflächen-Modifikatoren**

Viele Metalloberflächen sind katalytisch aktiv, das heißt sie ermöglichen oder beschleunigen chemische Reaktionen ohne durch diese bleibend verändert zu werden. Dieser Effekt wird heute für eine überwältigende Zahl großtechnischer chemischer Prozesse ausgenützt. Kleinste Verunreini-

# Festkörperoberflächen

o. Univ.-Prof. Dr. Erminald Bertel  
Institut für Physikalische Chemie



gungen der Katalysatoren können deren Aktivität dramatisch erhöhen, aber auch zunichte machen oder die Zusammensetzung der Reaktionsprodukte verändern. Um diese Effekte verstehen (und ausnützen) zu können, ist es notwendig, die genaue Konzentration und Anordnung der Verunreinigungsatome auf der Oberfläche zu bestimmen. Dies wurde für einige wichtige Oberflächen-Modifikatoren in dem vor kurzem abgeschlossenen Projekt durchgeführt. (FWF Projekt Nr. P 13657; abgeschlossen).

- **Hochkorrelierte, niederdimensionale Systeme auf Metalloberflächen**

Schränkt man die Bewegung von Elektronen in leitfähigen Materialien auf eine einzige Richtung entlang atomarer oder molekularer Ketten ein, so erhöht sich die Wechselwirkung der Elektronen untereinander so stark, dass völlig neue Materialeigenschaften auftreten, die bislang noch wenig verstanden sind. Solche Materialien – man nennt sie hochkorreliert – können durch geringfügige Änderung äußerer Parameter wie Druck oder Temperatur zwischen unterschiedlichen Eigenschaften hin- und hergeschaltet werden, z.B. leitend-nichtleitend, paramagnetisch-antiferromagnetisch, supraleitend-normalleitend. Wir führen eine solche eindimensionale Eingrenzung der Elektronenbewegung mittels selbststrukturierter nanoskopischer Ketten auf Oberflächen durch. (FWF Projekt Nr. P 14988 finanziert durch die Österr. Nationalbank).

- **Selbststrukturierung an Oberflächen**

Zur nanoskopischen Selbststrukturierung von Oberflächen können unterschiedliche Prinzipien benützt werden, zum Beispiel elastische Verspannung von Oberflächen, langreichweitige periodische Wechselwirkungen zwischen adsorbierten Atomen, Molekülen oder Gitterdefekten, die Erzeugung von Oberflächenschichten mit unterschiedlicher (im Idealfall durchstimmbarer) Periodizität etc. Mit Hilfe elastischer Verspannungen wurden beispielsweise die Struktur in Abb. 1a oder kürzer periodische Strukturen auf einer Kupfer-Kupferoxid-Oberfläche erzeugt. Durchstimmbare Periodizitäten erhält man über Oberflächen-Ladungsdichte-Wellen. Sie liegen der Struktur in Abb. 1b zugrunde. Die Silber-Nanodrähte in Abb. 1c entstehen durch Wechselwirkung der Silberatome mit einem anderen Adsorbat in einer von uns entwickelten Präparation von Wolfram-Oberflächen. (Wolfram-Projekt in Zusammenarbeit mit der Universität Kassel).

# Festkörperoberflächen

o. Univ.-Prof. Dr. Erminald Bertel  
Institut für Physikalische Chemie

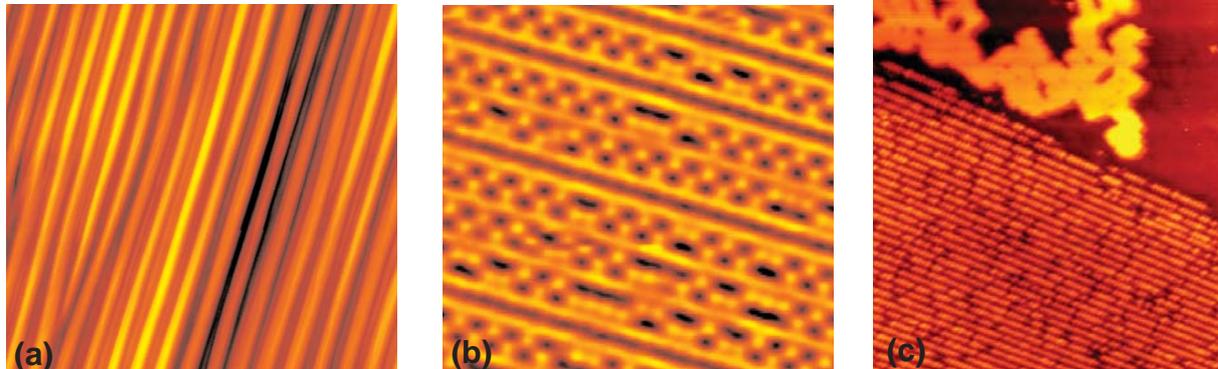
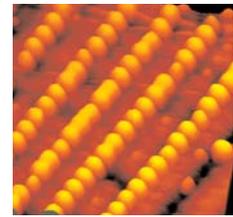


Abb. 1: (a) Rastertunnelmikroskopie (RTM)-Abbildung eines selbst-strukturierten Wellenmusters auf einer reinen Platin-Oberfläche. Der Abstand der Wellen beträgt ca 150 Nanometer. Bildausschnitt: 3300x3300 Nanometer.

(b) RTM-Bild einer selbst-strukturierten Anordnung von Stickoxid-Molekülen auf einer bromierten Platin-Oberfläche. Bildausschnitt: 14x14 Nanometer.

(c) RTM-Bild von Silberclustern auf einer Wolfram-Oberfläche. Im rechten oberen Teil erkennt man eine unregelmäßig geformte Silberabscheidung mit der Dicke einer Atomlage auf einer reinen Wolframfläche. Im linken unteren Teil wurde die Wolframfläche so dotiert, d.h. geringfügig chemisch verändert, dass die Silberatome sich von selbst zu Reihen ordnen (Selbst-Strukturierung). Es beginnen sich sogenannte Quantendrähte auszubilden. Bildausschnitt: 120x120 Nanometer.

- **Transporteigenschaften und chemische Sensitivität von Pulverproben**

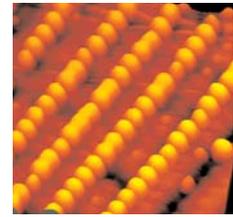
Alle bisher genannten Projekte werden an Einkristall-Oberflächen durchgeführt, um die atomare Geometrie präzise unter Kontrolle halten zu können. Für technische Anwendungen sind solche Oberflächen normalerweise ungeeignet. Ziel des in Planung befindlichen Projektes ist es, die an Einkristallen gewonnenen Kenntnisse auf technisch verwertbare Materialien umzulegen. Das Verhalten von Pulver-Pellets wird weitgehend durch die Eigenschaften (innerer) Oberflächen bestimmt. Unsere Absicht ist, durch gezielte Veränderung der Oberflächen die Materialeigenschaften in technisch verwertbarer Form zu steuern. (Projekt in Zusammenarbeit mit dem Institut für Ionenphysik im Rahmen des Materialschwerpunktes).

- **Niederdimensionale Strukturen auf Basis organischer Moleküle an Oberflächen**

Niederdimensionale elektronische Systeme können auch in Form von (leitfähigen) organischen Molekülen verwirklicht werden. Vieles deutet darauf hin, dass diese organischen Systeme ein ähnliches universelles Phasendiagramm aufweisen, wie etwa niederdimensionale keramische Systeme. Wenn es gelingt, derartige organische Verbindungen, die von mehreren Arbeitsgruppen innerhalb des Materialschwerpunktes synthetisiert werden können, mit Hilfe von Selbstorganisationsprozessen geordnet auf Oberflächen abzuscheiden, dann wäre ein detaillierter Vergleich mittels Photoelektronenspektroskopie möglich. Eindimensional selbststrukturierte Oberflächen

# Festkörperoberflächen

o. Univ.-Prof. Dr. Erminald Bertel  
Institut für Physikalische Chemie



könnten bei der geordneten Deposition als sogenannte Templates dienen. Hier zeichnet sich eine interessante Kooperationsmöglichkeit im Materialschwerpunkt ab. (Geplantes Projekt mit universitätsinterner Kooperation im Materialschwerpunkt).



Arbeitsgruppe Festkörper-Oberflächen (Stand 10.8.2002);  
Im Uhrzeigersinn von links oben:  
Norbert Memmel, Alexander Menzel, Rebecca Beer,  
Clemens Deisl, Erminald Bertel

## Ausgewählte Publikationen:

- Elektronische Oberflächenzustände an Metallen – Ursache und Bedeutung.* N. Memmel, E. Bertel, Phys. Bl. 53, 323-328 (1997)
- Mesoscopic Self-Organization Induced by Intrinsic Surface Stress on Pt(110).* P. Hanesch, E. Bertel, Phys. Rev. Lett. 79, 1523-1526 (1997)
- Electronic Structure of Self-Organized Lateral Superlattices on a Metal Surface: O/Cu(110).* E. Bertel, J. Lehmann, Phys. Rev. Lett. 80, 1497-1500 (1998)
- Charge-Density Waves in Self-Assembled Halogen-Bridged Metal Chains.* K. Swamy, A. Menzel, R. Beer, E. Bertel, Phys. Rev. Lett. 86, 1299-1302 (2001)
- Structure tuning by Fermi-surface shifts in low-dimensional systems.* C. Deisl, K. Swamy, R. Beer, A. Menzel, E. Bertel, J. Phys.: Condens. Matter 14, 4199-4209 (2002)
- Is the Onset of High-Temperature Superconductivity Associated with a Dimensional Crossover?* A. Menzel, R. Beer, E. Bertel, Phys. Rev. Lett. 89, 076803-1-076803-4 (2002)

## Ausgewählte Kooperationen:

- Lehrstuhl für Festkörperphysik, Universität Erlangen (dynamische Elektronenbeugungsrechnungen).
- Center for Computational Materials Science (CMS), TU Wien (ab-initio Theorie der elektronischen Struktur)
- Experimentalphysik II, Universität Kassel (adsorbat-induzierte Restrukturierung)
- Center for Atomic-scale Materials Physics (CAMP), Aarhus (temperaturvariable Rastertunnelmikroskopie)

## Stress, Struktur und Wachstum Dünner Schichten

A. Univ.-Prof. Dr. Reinhard Abermann

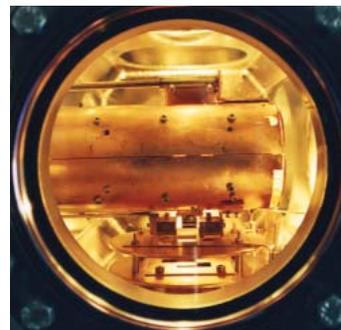
Institut für Physikalische Chemie

Universität Innsbruck, Innrain 52a, A-6020 Innsbruck

Tel. +43 512 507 5056; Fax:+43 512 507 2925

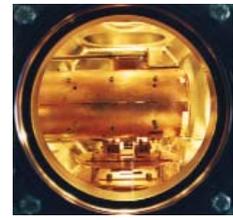
email: [reinhard.abermann@uibk.ac.at](mailto:reinhard.abermann@uibk.ac.at)

<http://www.uibk.ac.at/c/c7/c710/homepages/ag2/index.html>



Während der Abscheidung von Aufdampfschichten auf einer Unterlage werden in den Schichten innere Spannungen aufgebaut. Diese Schichtspannungen können die mechanischen, thermischen, elektrischen, magnetischen oder optischen Eigenschaften des jeweiligen Schichtsystems beeinflussen. So hängt z. B. die Funktion und Lebensdauer von integrierten Schaltungen (IC's), optischen Vergütungsschichten etc. unter anderem entscheidend davon ab, ob stabile Schichten mit möglichst kleinen Spannungen und ausreichender Haftung auf der Unterlage abgeschieden werden können. Aus diesem Grund ist die Messung dieser Schichtspannungen sowohl aus der Sicht der Grundlagen- als auch angewandten Forschung von größtem Interesse. Am Institut für Physikalische Chemie ist es gelungen, eine **Spannungsmessapparatur** (Biegebalkenprinzip) zu entwickeln, mit der diese inneren Spannungen in situ während der Schichtabscheidung unter definierten UHV-Bedingungen gemessen werden können. Die an einer Reihe von Dünnschichtsystemen erhaltenen Messergebnisse haben zu einem **Spannungsmodell** geführt, in dem die in den Schichten bei Abscheidung auf amorphen Unterlagen aufgebauten Spannungen mit der Mikrostruktur der Aufdampffilme korreliert werden. Dabei konnte erstmals gezeigt werden, dass charakteristische Spannung/Schichtdicke-Kurven bestimmten Schichtwachstumstypen zugeordnet werden können. Je nach Beweglichkeit des jeweiligen Aufdampfmaterials lassen sich die Spannungskurven in zwei Gruppen einteilen. In unbeweglichen Materialien werden nur Zugspannungen aufgebaut, die fallweise so groß sein können, dass die Schichten entweder bereits während der Abscheidung oder nachher während einer eventuellen praktischen Anwendung reißen. Eine derartige Spannungskurve ist charakteristisch für ein **Lagenwachstum von amorphen bis nanokristallinen Schichten**. In beweglichen Materialien werden hingegen zum einen deutlich kleinere und zum anderen Zug- und Druckspannungen aufgebaut. Eine solche Spannungskurve ist typisch für das Wachstum von polykristallinen Schichten mit ausgeprägtem Inselwachstum am Beginn der Schicht-Abscheidung. Während die Spannungsänderungen in unbeweglichen Schichten nach der Abscheidung vernachlässigbar klein sind, was auf stabile Schichten hinweist, werden die vergleichsweise großen Spannungsänderungen in beweglichen, polykristallinen Schichten als Hinweis auf Rekristallisationsprozesse in diesen Schichten gedeutet, die noch längere Zeit nach der Abscheidung andauern. Diese Spannungsänderungen können dann ihrerseits wieder der Grund für Änderungen in den Schichteigenschaften sein. In letzter Zeit ist der Aufbau der Messanordnung soweit verbessert worden, dass irreversible Spannungsänderungen während des Aufheizens der Schichten (beschleunigte Schichtalterung) reproduzierbar gemessen werden können. Damit sind mit der entwickelten Meßmethode erstmals **in situ Untersuchungen des Wachstums und der mechanischen Stabilität Dünner Schichten** möglich, ohne dass die Schichtdicke begrenzt ist oder das Wachstum der Schichten durch die Messung selbst beeinflusst wird, wie dies bei in situ elektronenmikroskopischen bzw. – spektroskopischen Untersuchungen der Fall sein könnte. In einer

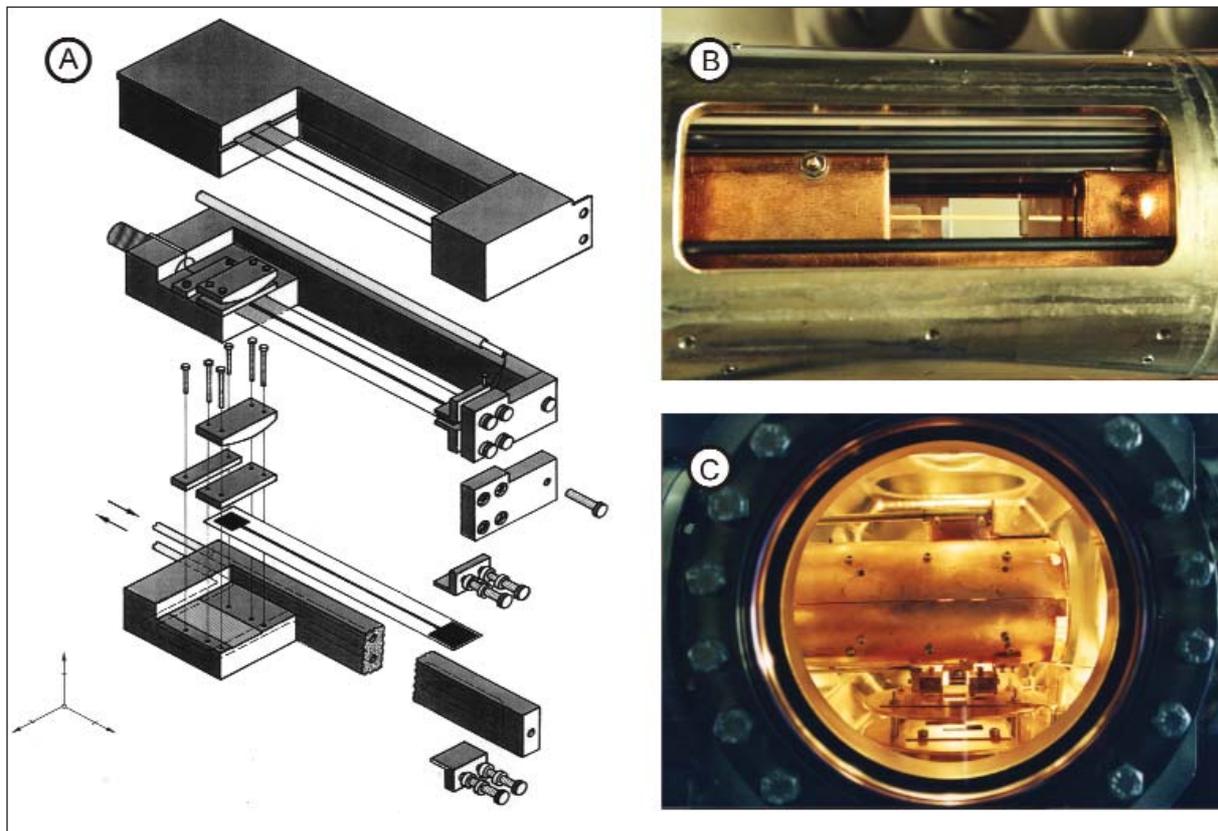
# Stress, Struktur und Wachstum Dünner Schichten



A. Univ.-Prof. Dr. Reinhard Abermann  
Institut für Physikalische Chemie

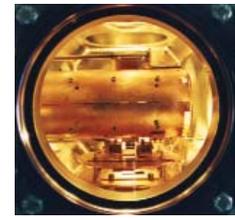
weiteren Versuchsreihe ist es erstmals gelungen hochgeordnete  $\text{TiO}_2$ -Filme auf dem Biegebalken abzuscheiden. Auf diesem Substrat wächst z. B. eine nahezu einkristalline Titanschicht durch **epitaktisches Wachstum** auf. Die gemessene Wachstumsspannung ist deutlich von den oben beschriebenen Spannungskurven verschieden. Damit konnte gezeigt werden, dass man mit dieser Messmethode nicht ausschließlich auf amorphe Substratfilme beschränkt ist.

Wie in einer neueren Versuchsreihe gezeigt werden konnte, ist neben dem **Einfluss der Materialeigenschaften und bestimmter Abscheidungsparameter** (Restgaskomponenten, Substrattemperatur etc.) auch der **Einfluss der Substrateigenschaften** auf das Schichtwachstum von entscheidender Bedeutung. Änderungen der physikalisch chemischen Eigenschaften einer Unterlage spiegeln sich in deutlichen Änderungen der Wachstums-Spannung der abgeschiedenen Schichten wider. Bei solchen Versuchen werden die Substrateigenschaften durch die Abscheidung von wenigen Monolagen einer Zwischenschicht in definierter Weise verändert. Dabei werden auch etwaige Reaktionen zwischen dem Material der abgeschiedenen Zwischenschicht und der Substratoberfläche über die Wachstumsspannung verfolgt.



Spannungsmessapparatur

# Stress, Struktur und Wachstum Dünnere Schichten



A. Univ.-Prof. Dr. Reinhard Abermann  
Institut für Physikalische Chemie

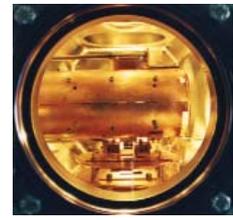
---

Zur Zeit wird die Meßmethode auch zur Untersuchung der **Wachstumsspannungen von Legierungen** (Ti/Cu, Ti/Al) verwendet. Die untersuchten Schichtsysteme sind aussichtsreiche Kandidaten für Metallisierungsschichten in integrierten Schaltkreisen. Bisher wurde für diese Legierungen die Abhängigkeit des Wachstums von Substrattemperatur und Stöchiometrie studiert. Dabei hat sich gezeigt, dass neben den für Einkomponentensysteme typischen Spannungskurven und damit Wachstumsmoden charakteristische Merkmale in den Spannungskurven neue Wachstumsmechanismen (Interdiffusion, Legierungsbildung etc.) andeuten. Dabei sind besonders die während der Abscheidung bei höherer Substrattemperatur und bestimmten Legierungsstöchiometrien auftretenden und auffallend großen **Instabilitäten in den Spannungskurven** von größtem Interesse. Da diese Instabilitäten im Schichtwachstum immer dann auftreten, wenn sich die jeweiligen Schichtsysteme auch nach ihrer Abscheidung bei tiefer Temperatur während einer Temperung stark umlagern, sind sie in Hinblick auf eine eventuelle praktische Verwendung dieser Schichten wichtig. Anhand der Spannungskurven von Titan/Aluminium-Multilagern ist es z.B. gelungen, die bei der Legierungsbildung ablaufenden Prozesse definierten Wachstumsspannungen zuzuordnen.

Im Rahmen des materialwissenschaftlichen Schwerpunktes werden die oben exemplarisch beschriebenen Untersuchungen des Wachstums Dünnere Schichten fortgesetzt, wobei speziell das Wachstum von epitaktischen Schichten studiert werden soll. Weiters ist in Zusammenarbeit mit A. Hallbrucker (Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie) und R. Tessadri (Institut für Mineralogie) geplant, die vorhandenen Röntgenstrukturanalysegeräte zur Untersuchung Dünnere Schichten zu adaptieren. Dies würde eine Untersuchung von dickeren Schichten ermöglichen, die mittels Elektronenmikroskopie nicht analysiert werden können, obwohl in den entsprechenden Spannungskurven charakteristische Merkmale Änderungen im Schichtwachstum bei höherer Schichtdicke anzeigen. Als weitere, von der Spannungsmessung unabhängige Methode empfiehlt sich speziell für Multischichtsysteme die Kraftmikroskopie (AFM) womit die Analyse der Oberflächenmikrostruktur von Schichten in bestimmten Wachstumsstadien möglich und der entsprechende Wachstumsmodus auf dicken Substraten ableitbar und mit der gemessenen Spannungskurve korrelierbar ist. Ein solches Gerät wird auch die systematische Untersuchung des Einflusses der geometrischen Struktur der Unterlage auf das Wachstum einer Aufdampfschicht ermöglichen. Es ist geplant durch Vergleich der durch Änderungen in der Substratrauhigkeit bewirkten Änderungen in den Spannungskurven mit der mittels AFM bestimmten Oberflächenstruktur den Parameter "**Substratrauhigkeit**" in das entwickelte Spannungsmodell zu integrieren. Weiters soll mit dieser Meßmethode auch der Einfluss von Oxidschichten auf dicken Metallfilmoberflächen auf das Wachstum (Insel- oder Lagenwachstum) einer weiteren Schicht untersucht werden.

Schließlich kann mit einem AFM auch die Ursache für die oben erwähnten Instabilitäten in den Spannungskurven von Legierungsschichten wesentlich effizienter untersucht werden. Zur Zeit deutet vieles darauf hin, dass diese Instabilitäten in den Spannungskurven Segregationsprozesse einzel-

# Stress, Struktur und Wachstum Dünnere Schichten



A. Univ.-Prof. Dr. Reinhard Abermann  
Institut für Physikalische Chemie

---

ner Legierungskomponenten zur Filmoberfläche andeuten. Dabei nehmen wir an, dass diese Segregation vornehmlich entlang von Korngrenzen in der Legierungsschicht erfolgt und dies daher zu einer Änderung in der Oberflächentopographie führt, die mit dem AFM quantifizierbar ist.

## *Ausgewählte Publikationen:*

*A UHV compatible thin film stress measuring apparatus based on the cantilever beam principle.* R. Koch, H. Leonhard, G. Thurner, R. Abermann, *Sci. Instrum.* 61 (1990) 3859.

*Measurements of the intrinsic stress in thin metal films.* R. Abermann, *Vacuum* 41 (1990) 1279.

*Influence of substrate properties on the growth stress of titanium films. Parts I-IV.* M. Poppeller, P. Oberhauser, R. Abermann, *Thin Solid Films* 295 (1997) 60; 320 (1998) 331; 350 (1999) 59; submitted (2002).

*Evolution of stress and microstructure in thin Ti/Cu-alloy films: influence of substrate temperature.* St. Bertel, R. Abermann, *Thin Solid Films*, (2002) submitted.

*In situ investigation of  $Ti_xAl_y$  film growth as a function of substrate temperature and film stoichiometry.* St. Lackner, R. Abermann, *Mat. Res. Symp. Proc.* 648 (2000) P3.20

# Technologie Dünne Schichten

Prof. Dr. Hans K. Pulker

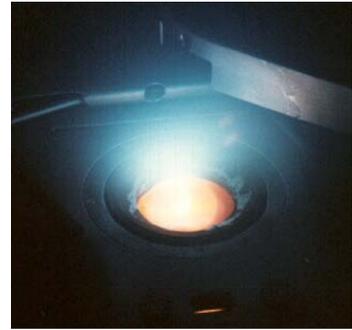
Institut für Ionenphysik

Universität Innsbruck,Technikerstraße 25, A-6020 Innsbruck

Tel. +43 512 507 6248; Fax:+43 512 507 2932

email: [georg.strauss@uibk.ac.at](mailto:georg.strauss@uibk.ac.at)

<http://www.uibk.ac.at/c/c7/c722>



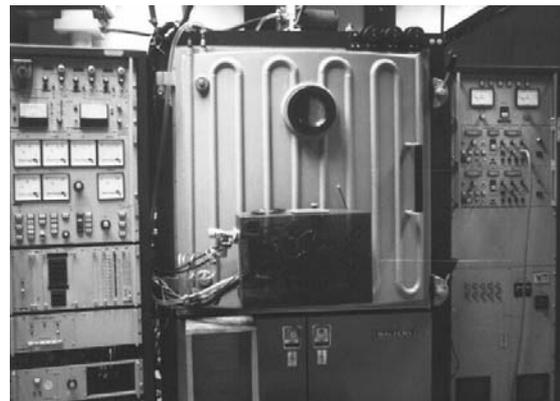
## Allgemeines

Dünne Schichten kommen vor allem aus Gründen der Verbesserung der physikalischen und chemischen Oberflächeneigenschaften von Bulk-Materialien, der Oberflächenkonservierung und der Verbesserung der Wirtschaftlichkeit zur Anwendung.

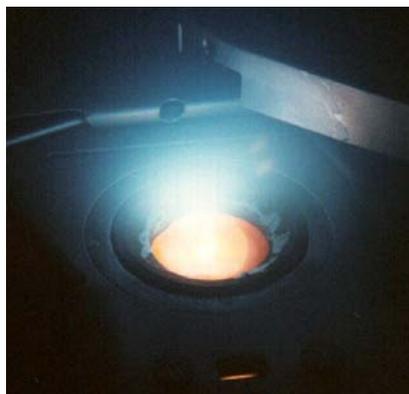
## Arbeitsschwerpunkte

- **Herstellung dünner Schichten**

Als Herstellungsverfahren werden von uns vor allem PVD (physical vapour deposition) Verfahren, wie z.B. Magnetron Sputtering, Ion Plating und Arc Source Evaporation eingesetzt, mit denen hauptsächlich Metalloxide, -nitride, -fluoride und -karbide auf unterschiedlichen Substraten abgeschieden werden. Die Optimierung von Schichteigenschaften und die Abhängigkeiten der Schichteigenschaften von den Prozessparametern steht dabei meist im Mittelpunkt des Interesses.

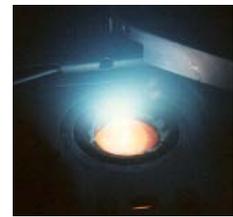


- **Diagnostik industrieller Beschichtungsplasmen**



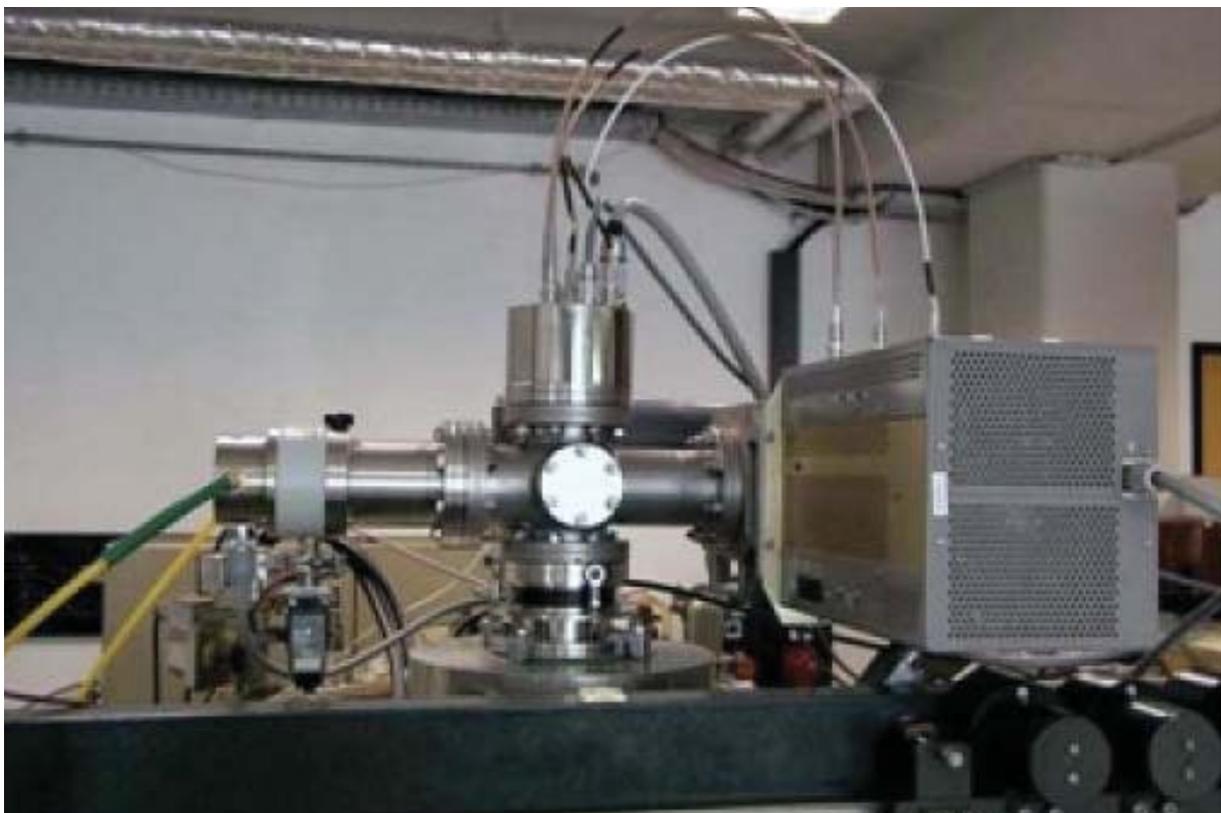
Die Diagnostik von ionen- und plasmaunterstützten Beschichtungsprozessen hat zum Ziel die Eigenschaften von industriell eingesetzten Prozessen zu ermitteln und Korrelationen zwischen den Prozessparametern, den Plasmaeigenschaften und erzielten Schichteigenschaften herzustellen. Solche Untersuchungen stellen die Grundlage zur Verbesserung bestehender Prozesse beziehungsweise zur Entwicklung neuer Beschichtungsverfahren dar.

Plasma im RLVIP Prozess während der Abscheidung von TiN Schichten



- **Charakterisierung dünner Schichten**

Die mit den verschiedenen Verfahren hergestellten Schichten werden hinsichtlich ihrer optischen (Brechwert, Transmission, Reflexion, Absorption), mechanischen (Dichte, Stress, Härte, Adhäsion, Rauigkeit) und chemischen (Beständigkeit, Zusammensetzung) Eigenschaften charakterisiert. Hier ist vor allem eine Korrelation dieser Schichteigenschaften mit den gewählten Prozessparametern von Interesse.



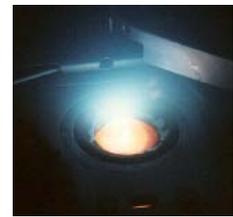
Plasmamonitor System zur Charakterisierung von industriellen ionen- und plasmaunterstützten Beschichtungsprozesses

- **Biomedizinische Schichten**

Die Entwicklung und Charakterisierung von Schichten und Schichtsystemen für biomedizinische Anwendungen ist von zunehmender Bedeutung und hat in den letzten Jahren neue Anwendungsgebiete eröffnet. Der aktuelle Forschungsschwerpunkt liegt hierbei in der Herstellung und Untersuchung funktioneller Schichtsysteme für verschiedene medizinische Implantate.

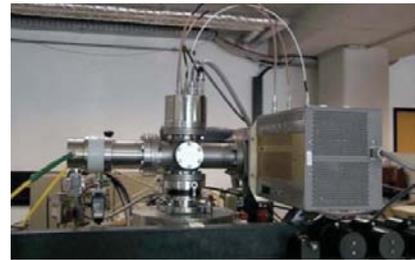
# Technologie Dünne Schichten

Prof. Dr. Hans K. Pulker  
Institut für Ionenphysik



## Untersuchungsmethoden und Laborausstattung:

- **Schichterzeugung:** Diverse PVD-Beschichtungsanlagen von Balzers und Edwards mit verschiedenen Verfahrenstechniken wie: Reaktives und ionenunterstütztes Aufdampfen, DC- und RF-Magnetron-Sputtern und Ionenplattieren.
- **Plasmadiagnostik:** Zur Analyse von beschichtungstechnisch relevanten kalten Niederdruckplasmen stehen neben einem energieauflösenden Massenspektrometer auch elektrostatische Sonden (Langmuir-Sonde und spezielle Faraday Cups) mit entsprechender Softwareunterstützung zur Verfügung.
- **Schichtcharakterisierung:** Die Charakterisierung optischer Schichten erfolgt mittels Spektralem Photometer, Photothermal Deflection Spectroscopy und dem Guided Wave Verfahren.



## Das TFT-Innsbruck-Team



Thomas

Georg

Stefan

Petra

Daniel

Aktueller Stand (13.9.02):

Georg Strauss – [georg.strauss@uibk.ac.at](mailto:georg.strauss@uibk.ac.at)

Stefan Schlichtherle – [stefan.schlichtherle@uibk.ac.at](mailto:stefan.schlichtherle@uibk.ac.at)

Thomas Lechleitner – [thomas.lechleitner@uibk.ac.at](mailto:thomas.lechleitner@uibk.ac.at)

Markus Nagl – [markus.f.nagl@uibk.ac.at](mailto:markus.f.nagl@uibk.ac.at)

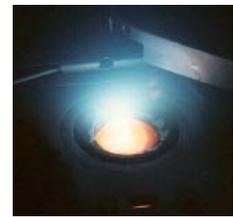
Daniel Huber

Ronald Stärz

Konrad Buchauer

# Technologie Dünne Schichten

Prof. Dr. Hans K. Pulker  
Institut für Ionenphysik



## *Ausgewählte Publikationen:*

*Coatings on Glass*, H.K. Pulker, Elsevier (1999), ISBN: 0-444-50103-7

*Plasma Analysis of different Tin PVD processes at various process parameters*, G.N. Strauss, et.al., *Galvanotechnik* 6 (2002), 1575

*Charakterisierung des Plasma in ionen- und plasmaunterstützten PVD Prozessen*, G.N. Strauss, *Galvanotechnik* 9 (2000), 2586

*Gas pressures influence on the optical and mechanical properties of Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> films produced by RLVIP*, G.N. Strauss, W. Lechner, H.K. Pulker, *Thin Solid Films*, 351 (1999), 53-56

*Mechanical stress in thin SiO<sub>2</sub> and Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> films produced by RLVIP*, G.N. Strauss, Q.D. Nguyen, H.K. Pulker, *J. Non-Crystalline Solids*, 218 (1997), 256

*J. Vac.Sci. Technol. A10*, H.K. Pulker, (1992), 1669

*Verschleiss-Schutzschichten*, H.K. Pulker, et.al., expert Verlag (1985), ISBN 3-8169-0070-4

## *Ausgewählte nationale und internationale Kooperationen:*

- *Fraunhofer Institut Jena, IOF, Germany*, (Angewandte Optik und Feinmechanik)
- *CeTeV, Carsoli, Italy*, (Research Center of Thin Films)
- *Univerity of Rom, Italy*, (Prozessanalyse, TiC Schichten)

## *Ausgewählte Industriekooperationen:*

- *Tafelmaier Dünnschichttechnik, Rosenheim, Germany* (Dünnschichttechnologie, Prozessanalyse)
- *Ion Bond, Newcastle, GB*, (Tribologische Schichten, Prozessanalyse)
- *EADS, München, Germany*, (Sputtertechnologien, tribologische schichten)
- *Swarovski, Wattens, Austria*, (Oberflächenschutz, Schichtherstellung)
- *MedEl, Innsbruck, Austria*, (Barrierschichten)
- *Plansee AG, Reutte, Austria*, (Tribologische Schichten, Prozessanalyse)

# Arbeitskreis Cluster und Nanoteilchen

A. Univ.-Prof. Mag. Dr. Paul Scheier

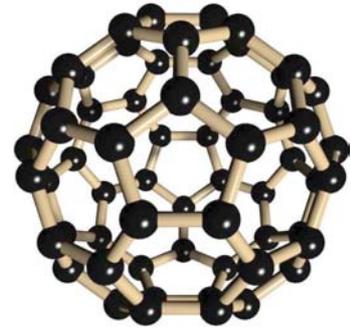
Institut für Ionenphysik

Universität Innsbruck, Technikerstraße 25, A-6020 Innsbruck

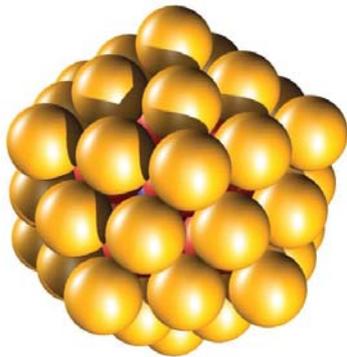
Tel. +43 512 507 6243; Fax:+43 512 507 2932

email: [paul.scheier@uibk.ac.at](mailto:paul.scheier@uibk.ac.at)

<http://info.uibk.ac.at/ionenphysik>

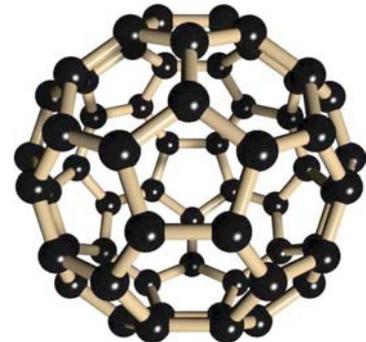


## Einleitung



Cluster sind winzige Tröpfchen von Materie, die aus 2 bis zu etwa einer Million von Atomen oder Molekülen bestehen. Bei solchen Dimensionen sind mehr als 10% der Teilchen, die den Cluster bilden, an der Oberfläche. Die Eigenschaften von Clustern unterscheiden sich oft stark von den kondensierten Phasen (fest und flüssig) der jeweiligen Substanz und hängen oft von der exakten Zahl der Bausteine ab. So weisen z.B. manche kleine Metallcluster deutliche katalytische Eigenschaften auf, während die entsprechenden Festkörper die selben chemischen Reaktionen gar nicht beeinflussen.

Am Institut für Ionenphysik werden seit mehr als 20 Jahren Cluster untersucht. Dabei wurden sowohl sehr schwach gebundene Van-der-Waals Cluster, Cluster aus Metall und Halbleitermaterialien als auch extrem stabile Kohlenstoffcluster (Fullerene) erforscht. Neben der Untersuchung spezifischer Eigenschaften massenselektierter freier Cluster, wie deren Stabilität, werden inzwischen auch Filme aus Clustern untersucht.



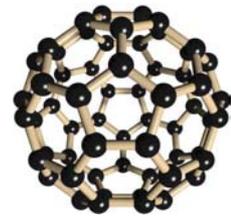
## Untersuchungstechniken

Am Institut für Ionenphysik stehen 4 verschiedene Massenspektrometer zur Verfügung um die Wechselwirkung von Clustern mit Elektronen, Photonen und Oberflächen zu studieren. Ein weiteres Tandemmassenspektrometer befindet sich gerade im Aufbau und soll in Kürze bei sehr massereichen Clustern zum Einsatz kommen. Die Erzeugung der Cluster wird je nach Substanz auf verschiedene Weisen gemacht. Cluster aus gasförmigen Stoffen werden durch eine Überschalldüsenexpansion erzeugt. Metallcluster können in einer sogenannten PACIS (pulsed arc cluster ion source) gebildet werden. Über Gasaggregation oder Dampf-Kondensation an kalten Oberflächen können Cluster aus zerstäubten Festkörpern erzeugt werden. Zum Zerstäuben steht eine Magnetron-Sputterquelle zur Verfügung.

Falls die Cluster nicht schon in geladener Form erzeugt worden sind, können neutrale Cluster auf verschiedene Arten ionisiert werden. Die Wechselwirkung mit energiedefinierten Elektronen bis zu einer Auflösung von 30 meV kann an zwei Apparaturen studiert werden. Für höhere Ionenintensitäten

# Arbeitskreis Cluster und Nanoteilchen

A. Univ.-Prof. Mag. Dr. Paul Scheier  
Institut für Ionenphysik



stehen mehrerer Kreuzstrahl-Ionenquellen zur Verfügung und für höchste Intensitäten gibt es eine 2.45 GHz Elektronenzyklotronresonanz-Ionenquelle.

An sauberen Oberflächen deponierte Cluster können in Honolulu und Wien mittels Rastertunnel- und Rasterkraftmikroskop erforscht werden. Darüber hinaus können deponierte Cluster auch mittels lokaler Tunnelspektroskopie (STS), Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS) und UV-Photolumineszenz (UV-PL) untersucht werden.

## Projekte

### Stöße von Elektronen und Ionen mit dünnen molekularen Filmen

Reaktionen, die durch den Beschuss von dünnen molekularen Filmen mit Elektronen und Ionen definierter Energie und guter Energieauflösung im Energiebereich nahe 0eV bis 100eV ausgelöst werden sind das Ziel dieser Untersuchungen. Als Targets werden fluoridierte selbstorganisierte Monoschichten sowie homogene und binäre Filme verwendet. Um auch flüchtige Moleküle verwenden zu können, werden diese in definierter Menge und Zusammensetzung auf eine kalte Oberfläche kondensiert. Die rückgestreuten Produkt-Ionen werden in Abhängigkeit von der Projektilenergie massenspektrometrisch analysiert. Grundsätzliche Mechanismen der zugrundeliegenden komplexen Energie-, Ladungs- und Stoffübertragungsprozesse sollen dabei aufgeklärt werden und gegebenenfalls werden derartige Prozesse zur gezielten Synthese von Molekülen bzw. zur Modifikation von Oberflächen eingesetzt. Für die Zukunft sollen speziell Metallclusterionen definierter Größe als Projektile eingesetzt werden um deren katalytische Eigenschaften zu charakterisieren.

(FWF-Projekt P13900-PHY)

### Nanolithographie an Filmen aus Siliziumclustern

Im Rahmen einer Kooperation mit Prof. Sattler in Hawaii wurden Filme aus Nanoteilchen hergestellt, die interessante neuartige Eigenschaften aufweisen. Mit einem Rastertunnel-Mikroskop können diese Cluster gezielt verdampft bzw. verschmolzen werden. Damit lassen sich erstmalig echte Graustufenbilder im Nanometerformat herstellen. In einer Kooperation mit dem Institut für Allgemeine Physik der TU-Wien soll diese Methode der Nanolithographie perfektioniert werden. Gleichzeitig werden in Innsbruck die Silizium-Nanoteilchen massenspektrometrisch analysiert um deren chemische Zusammensetzung genau herauszufinden. Damit soll geklärt werden, ob Sauerstoff für die Eigenschaften eine wichtige Rolle spielt.

## Arbeitskreis Cluster und Nanoteilchen

A. Univ.-Prof. Mag. Dr. Paul Scheier  
Institut für Ionenphysik

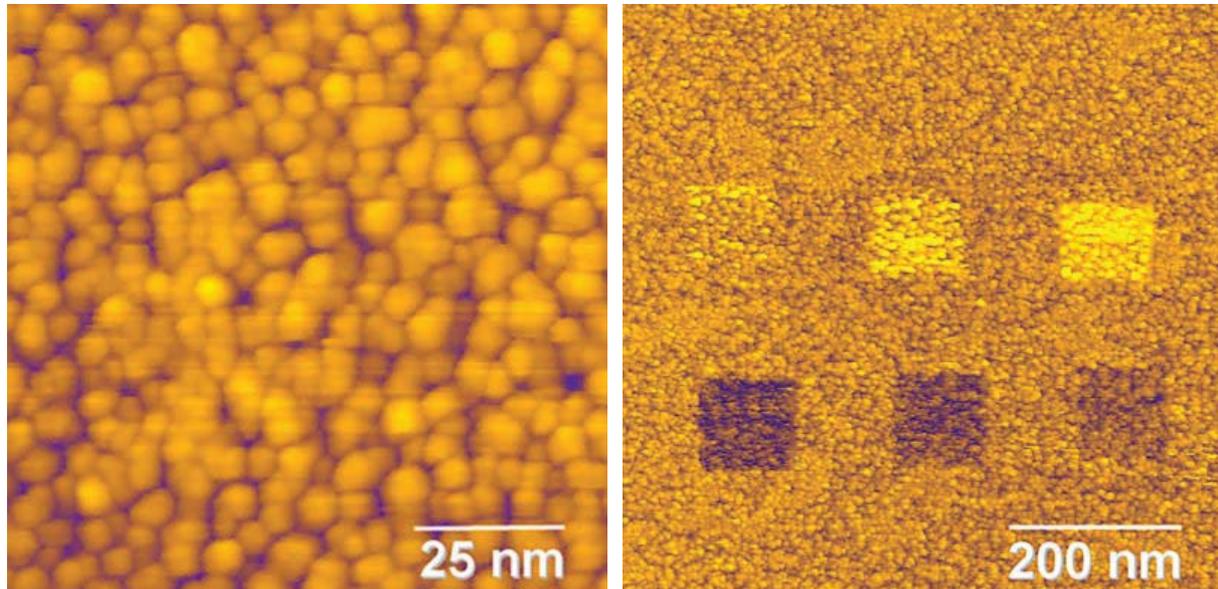
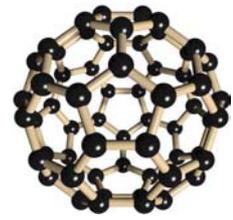
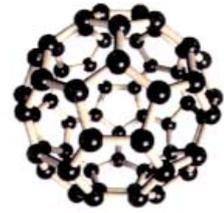


Abbildung 1: Eine Rastertunnelmikroskopie-Bild eines Films aus Silizium-Nanoteilchen. In einer UHV-Kammer wurde reines Silizium mit einer Magnetronsputterquelle zerstäubt und auf einer HOPG-Oberfläche kondensiert. Der mittlere Durchmesser der Teilchen beträgt 3.7 nm. Durch geeignete Wahl des Tunnelstroms bzw. der Spannung zwischen der Spitze und dem Substrat können diese Teilchen verdampft bzw. verschmolzen werden (siehe rechte Abbildung). Dadurch können Graustufenbilder im Nanometerformat hergestellt werden.



Arbeitsgruppe Cluster und Nanoteilchen  
(Stand 17. 9. 2002)



A. Univ.-Prof. Mag. Dr. Paul Scheier  
Institut für Ionenphysik

---

## *Ausgewählte Veröffentlichungen:*

- Experimental evidence of critical behavior in cluster fragmentation using an event by event data analysis*, B. Farizon, M. Farizon, M.J. Gaillard, F. Gobet, M. Carre, J.P. Buchet, P. Scheier and T.D. Märk, Phys. Rev. Lett. 81 (1998) 4108-4111
- Kinetic energy release distributions and evaporation energies for metastable fullerene ions*, S. Matt, O. Echt, M. Sonderegger, R. David, P. Scheier, J. Laskin, C. Lifshitz and T.D. Märk, Chem. Phys. Lett. 303 (1999) 379-386
- Stability of multiply-charged fullerene ions*, P. Scheier, B. Dünser, G. Senn, H. Drexel, H.P. Winter, F. Aumayr, G. Betz, F. Biasioli, T. Fiegele, T.D. Märk, Eur. Phys. J. D 9 (1999) 91-94
- Multiple-ionization and fragmentation of negatively-charged fullerene ions by electron impact*, P. Scheier, D. Hathiramani, W. Arnold, K. Huber and E. Salzborn, Phys. Rev. Lett. 84 (2000) 55-58
- Growth of silicon nanostructures on graphite*, P. Scheier, B. Marsen, M. Lonfat, W.-D. Schneider and K. Sattler, Surface Science 458 (2000) 113-122
- Multiply charged clusters*. O. Echt, P. Scheier and T.D. Märk, Comptes Rendus de l'Academie des Sciences, Serie IV (Physique, Astrophysique) 3 (2002) 353-364

## *Ausgewählte Kooperationen:*

- Institut de Physique Nucleaire de Lyon, IN2P3-CNRS et Universite Claude Bernard, Villeurbanne Cedex, Frankreich (Stoßinduzierte Fragmentation von Wasserstoffcluster)
- Department of Physics, University of New Hampshire, Durham, USA (Unimolekulare Zerfälle von Clusterionen)
- Department of Physics and Astronomy, University of Hawaii at Manoa, Honolulu, USA (Rastertunnelmikroskopie an Nanoteilchen)
- Institut für Allgemeine Physik, TU-Wien, Österreich (Oberflächenstöße von Cluster und Filme aus Nanoteilchen)
- Department of Physical Chemistry, Hebrew University, Jerusalem, Israel (Stabilität von Fullerenen)
- Strahlencentrum der Justus Liebig Universität, Giessen, Deutschland (Wechselwirkung von Elektronen mit Fullerenionen)

# Praxisorientierte Grundlagenforschung und materialwissenschaftliche Applikationen

o. Univ.-Prof. Dr. Peter W. Mirwald

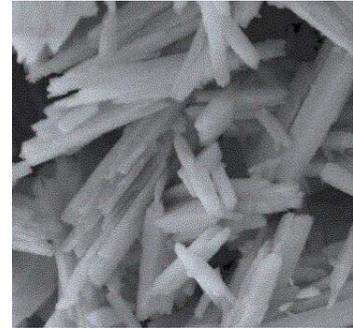
Institut für Mineralogie und Petrographie

Universität Innsbruck, Innrain 52, A-6020 Innsbruck

Tel. +43 512 507 5500, Sekr.: 5501; Fax:+43 512 507 2926

email: [peter.mirwald@uibk.ac.at](mailto:peter.mirwald@uibk.ac.at)

<http://www.uibk.ac.at/c/c7/c714/>



---

Die am Institut betriebenen materialwissenschaftlichen Forschungen haben sich im Laufe der letzten Dekade aus der Anwendung mineralogischer Untersuchungsmethoden bei angewandten Fragestellungen entwickelt. Vielfach handelte es sich hierbei um Anwendungen im engeren Bereich der Mineralogie. Eine Ausweitung auf mineralische Werkstoffe, industrielle Mineralprodukte und anorganische/organische Industrie-Materialien ist seit geraumer Zeit im Gange. Entsprechend dieser Entwicklung wurde eine Professur für angewandte Mineralogie eingerichtet, die ab kommendem Jahr (Februar 2003) besetzt ist. Im Rahmen des „Materialwissenschaftlichen Schwerpunkts-Advanced Materials“ an der Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Innsbruck soll diese Entwicklung fortgesetzt und in Koordination mit anderen Arbeitsgruppen und Instituten erweitert werden.

## Überblick über Forschungskapazität und Ausstattung des Instituts

Personal: mit materialkundlichen Themen befassen sich derzeit am Institut 11 Mitarbeiter (3 Planstellen, 6 Dissertanten, 2 Diplomanden).

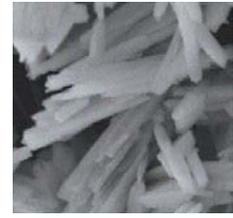
Für materialkundliche Analytik stehen eine Reihe verschiedener Untersuchungsmöglichkeiten zur Verfügung (detailliertere Angaben hierzu am Ende des Papiers):

- Chemische Elementar-Analytik von Feststoffen
- Kristallographische Stoffuntersuchungen
- Mineralogischer - Materialphysikalischer Untersuchungsbereich
- Experimentelles Hochdruck-Hochtemperatur-Labor (bis zu 45 Kbar und 1800°C)
- Experimentelles Verwitterungslabor

## Themenbereiche am Institut für Mineralogie und Petrographie

Derzeit bestehen am Institut vier verschiedene Themenbereiche, in denen Forschung im Rahmen von Kooperationen (z.T. derzeit laufende, z.T. abgeschlossene Projekte) betrieben wird:

# Praxisorientierte Grundlagenforschung und materialwissenschaftliche Applikationen



o. Univ.-Prof. Dr. Peter W. Mirwald  
Institut für Mineralogie und Petrographie

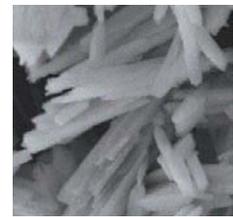
---

- Technische Werkstoffe:  
Korund (Edelstein, Schleifmaterial-Eigenschaften)  
chemisch modifizierte Cordierite als hochfeuerfeste keramische Werkstoffe  
SiC (Chemie/Kristallographie und die Auswirkungen auf Härteeigenschaften)  
Charakterisierung von CrN-Schichten im Hochtemperaturbereich  
Charakterisierung von sprühgranulierten Schlacken als Zementrohstoffe
- Korrelation zwischen Kristallstruktur und Eigenschaften:  
Kristallchemie von dentalen Füllstoffen  
Ionenaustausch und Ionenbeweglichkeit in Kristallen  
Strukturelle Phasenübergänge
- Pharmazeutischer Bereich:  
Phasenidentifikation, Polymorphie, Kristallstrukturen, Pulvereigenschaften
- Materialkundliche Forschung in der Denkmalpflege:  
Materialkundliche Objektaufnahmen  
Eigenschaften und Verwitterung von Naturbaustein  
Mörtel/Zement Eigenschaften und Verwitterung  
Verwitterungsexperimente (Freiland und Laborsimulation)  
Steinmaterialien als Umweltindikatoren

## Apparative Ausstattung am Institut für Mineralogie und Petrographie

- Chemische Analytik:  
Elektronenstrahlmikrosonde (Elementarmikrobereichsanalyse)  
E-dispersive Röntgenfluoreszenz zur Haupt- und Spurenanalytik  
Flammen-AAS zur Haupt- und Spurenanalytik  
Atomemission (ICP-OES) zur Haupt- und Spurenanalytik  
Verwitterungslabor-Experimentalkammer (NO<sub>x</sub>-SO<sub>2</sub>-Ozon-Analytik)  
Massenspektrometrie für stabile Isotope (Sauerstoff, Kohlenstoff)  
Materialvorbereitung (diverse Mühlen, Aufschlusslabors etc.)

# Praxisorientierte Grundlagenforschung und materialwissenschaftliche Applikationen



o. Univ.-Prof. Dr. Peter W. Mirwald  
Institut für Mineralogie und Petrographie

- Hochdruck-Hochtemperatur-Labor:
  - 2 endgeladene Piston-Zylinder (1/2-inch und 22 mm) einsetzbar bis 50 kbar
  - Johannes-Typ Piston-Zylinder bis 20 kbar
  - Multi-Anvil Presse mit 500-t Zylinder einsetzbar bis 22 GPa
  - Hydrothermal-Anlage mit cold-seal vessels einsetzbar bis max. 4 kbar und 750°C
  - 1 Hochtemperatur (1700°C) Vertikal-Röhrenofen (Vakuum- und Mischgasbetrieb)
  - diverse Muffelöfen geeignet bis max. 1000°C bzw. 1500°C

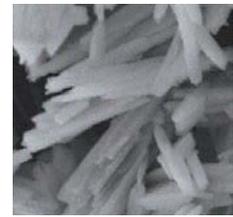


Multi-Anvil-Press für Experimente und Synthesen im Hochdruckbereich (> 100 kbar)

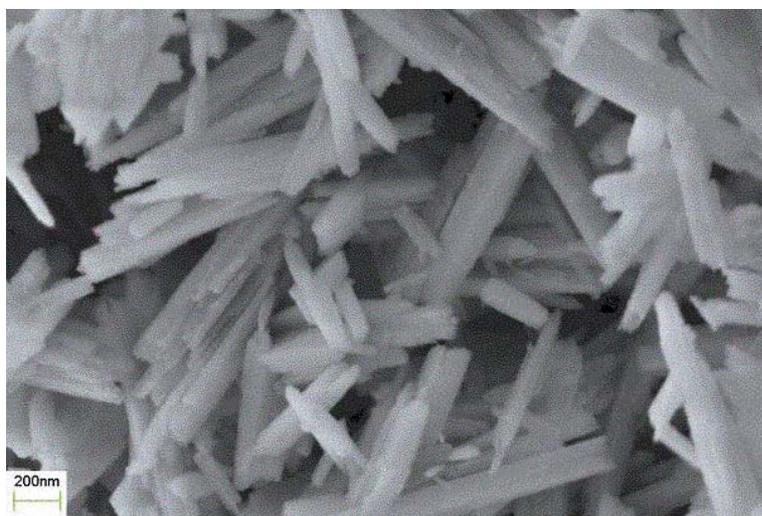
- Mineralogisch-Kristallographische Analytik:
  - Pulverdiffraktometer mit E-dispersivem Detektor + Probenwechsler
  - Pulverdiffraktometer mit Hochtemperaturausrüstung (1200°C) + div. Detektoren
  - Pulverdiffraktometer mit Probenweckler + Parallelstrahl-optik
  - Einkristalldiffraktometer mit Hochtemperaturzusatz (ab 2003)
  - Polarisations-Durchlicht- und Auflichtmikroskopie (mit Reflexionsmessung)
  - Rasterelektronenmikroskopie

# Praxisorientierte Grundlagenforschung und materialwissenschaftliche Applikationen

o. Univ.-Prof. Dr. Peter W. Mirwald  
Institut für Mineralogie und Petrographie

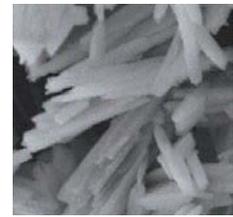


Beispiele für die Röntgenbeugungsausrüstung zur Materialcharakterisierung (Pulverdiffraktometrie) am Institut (z.B. Hochtemperaturdiffraktometrie bis 1200°C)



Beispiel für die optische Dokumentation von Materialien durch Rasterelektronenmikroskopie im 1000- bis 100 nm-Bereich

# Praxisorientierte Grundlagenforschung und materialwissenschaftliche Applikationen



o. Univ.-Prof. Dr. Peter W. Mirwald  
Institut für Mineralogie und Petrographie

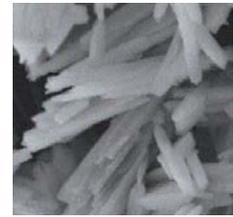
---

- Mineralogisch-materialphysikalische Analytik:  
Thermoanalyse bis 1700°C mit gekoppeltem MS (ab 2004)  
Spezifische Oberflächenbestimmung (BET-Apparatur)  
Korngrößenanalytik im Grobbereich (Sieblabor)  
Korngrößenanalytik im Feinbereich (Sedimentation, Laserbeugung)  
Experimentelle Verwitterungskammer  
Hygrische Eigenschaftsuntersuchungen (Sorption, Kapillarität, Wasseraufnahme)

## Kooperationen am Institut für Mineralogie und Petrographie

- Universitäre Kooperationen und Zusammenarbeit:  
Pharmazeutisches Institut (vor allem mit der Arbeitsgruppe Polymorphie)  
Chemische Institute (Anorganische, Analytische, Physikalische)  
Institut für Baustofflehre und Bauphysik
- Kooperationen und Zusammenarbeit mit öffentlichen Institutionen:  
Universitätsklinik für Urologie/Innsbruck  
Bundesdenkmalamt/Wien  
Landeskonservat/Innsbruck  
Kulturabteilung des Tiroler Landtages  
Denkmalamt Autonome Provinz Bozen
- Industriekooperationen (Dienstleistung und Forschungsprojekte):  
Tyrolit-Schleifmittelwerke/Schwaz  
Swarovski/Wattens  
Plansee/Reutte  
Wattener Papierfabrik/Wattens  
Jenbacher Werke/Jenbach  
Biochemie (Novartis)/Kundl  
Tribovent (Holcim)/Bludenz  
Clariant GmbH/Hürth-Köln

# Praxisorientierte Grundlagenforschung und materialwissenschaftliche Applikationen



o. Univ.-Prof. Dr. Peter W. Mirwald  
Institut für Mineralogie und Petrographie

---

## *Ausgewählte Arbeiten zum Schwerpunkt*

- Selective Extraction of Rare-Earth Elements from Rocks Using a High-Capacity cis-1,4-Butanedioic Acid-Functionalized Resin*, M.R. Buchmeiser, R. Tessadri, G. Seeber & G.K. Bonn (1998): *Anal. Chem.*, Vol. 70, 2130-2136
- Mineralogical and technological investigations on silicon carbide powder material used in grinding tool industry*. P. Ramminger, S. Bohr & R. Tessadri (1999): Beiheft zum *European journal of Mineralogy*, Vol. 11, p. 187
- Quantification of Lanthanides in Rocks using succinic acid-derivatized sorbents for on-line SPE-RP-Ion-Pair HPLC*, M.R. Buchmeiser, G. Seeber & R. Tessadri (2000): *Analytical Chemistry*, 72, 2595-2602.
- Reexamination of the thermal Expansion of natural and synthetic Cordierite between 25 and 800°C*. J. Schneider, R. Tessadri & P.W. Mirwald (2001): *Journal of Conference Abstracts*, Vol 6, No. 1, pp.699, Strasbourg
- Application of High Temperature X-Ray Diffraction as a tool for material-characterisation and product-optimisation*. P. Ramminger, R. Krismer, R. Tessadri & P. Willhartitz (2001): *Proceedings 15th International Plansee Seminar 2001*, GT48, 1-13.
- Thermal expansion behavior of disordered and ordered (Na)-Mg-cordierite between 25 and 700°C – a high resolution XRD study*. Mirwald P. W. & Tessadri R. (2001): *Mitt. Österr. Mineral. Ges.*, 146, 196-199.
- Experimental investigation in the system Na-Mg-SO<sub>4</sub>-NO<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O - damaging salts on natural building materials*. Franzen, C., & Tessadri, R. (2001): *Annual Meeting 2001, German Mineralogical Society, European Journal of Mineralogy*, Vol. 13, Beih. 1, p. 54
- Preliminary Results of steam Processed slags Produced by Spray Granulation (Pilot-Projekt DGM-Tribovent/Loruens): Mineralogical and Physical Parameters*. C. Potocan, F Vavtar & R Tessadri (2001) *Mitt Oesterr Miner Ges* 146, 232.
- Indanivir: a rare urinary stone in HIV-1-infected patients – occurrence and crystal properties*. R. Tessadri, U. Griesser, M. Prillinger & K. Wurst (2002): *EPDIC-8 - Uppsala*, 23.-26. *Mat. Sc.Forum* (in press).
- Building stone on and in Historic Objects of the Region Tyrol*, Franzen, C., Bidner, T., Mirwald, P. W., Hauser, W., Stampfer, H. (2002), *Proceedings 5<sup>th</sup> EC Conference Cultural Heritage Research: a Pan-European Challenge*, Cracow
- Indoor Environment Measurements and Salt Degradation on Cultural Heritage*, Troi, A., Franzen, C., Hausladen, G. (2002), *Proceedings 5<sup>th</sup> EC Conference Cultural Heritage Research: a Pan-European Challenge*, Cracow

### Veranstaltungen der Gesellschaft Österreichischer Chemiker

Die Gesellschaft Österreichischer Chemiker (GÖCh) ist die größte chemische Gesellschaft Österreichs mit über 2200 Mitgliedern aus dem akademischem und industriellem Umfeld. Die Zweigstelle für Tirol und Vorarlberg der GÖCh veranstaltet regelmäßig öffentlich zugängliche Vorträge ausgewiesener internationaler Experten zu aktuellen Forschungsthemen. Diese Veranstaltungsreihe dient wissenschaftlicher Information, Diskussion und Kooperation und fördert die internationale Vernetzung.

#### Kontaktinformation:

Gesellschaft Österreichischer Chemiker,  
Zweigstelle für Tirol und Vorarlberg  
A. Univ. Prof. Dr. B. Bildstein  
Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie;  
Universität Innsbruck, Innrain 52a, 6020 Innsbruck  
Tel: +43 (0) 512 507 5141; email: benno.bildstein@uibk.ac.at

In den letzten zwei Jahren wurden folgende Gastvorträge mit materialwissenschaftlichem Bezug abgehalten:

- |            |  |
|------------|--|
| 15.01.2001 | Prof. Dr. R. K. GRASSELLI [University of Delaware, USA]<br><a href="#">Principles Governing Selective Heterogeneous Catalysis</a>  |
| 22.01.2001 | Dr. Henrik TOPSØE [Haldor Topsøe Research Lab., Denmark]<br><a href="#">Development of Nano-materials: Application of in situ Techniques and Other Experimental and Theoretical Approaches</a> |
| 12.03.2001 | Prof. Dr. Karl-Heinz RIEDER [FU Berlin]<br><a href="#">Chemie und Physik mit einzelnen Atomen und Molekülen</a>  |
| 26.03.2001 | Prof. Dr. Jürgen HAFNER [Universität Wien]<br><a href="#">Auf dem Weg zu einer quantenmechanischen Modellierung katalytischer Prozesse</a>   |
| 21.05.2001 | Prof. Dr. Karl KIRCHNER [Universität Wien]<br><a href="#">Rutheniumunterstützte Alkin-Alkin Verknüpfungen – Entwicklung neuer Cyclo-trimerisierungskatalysatoren</a>                           |
| 28.05.2001 | Prof. Dr. Hugo KUBINYI [BASF AG, Ludwigshafen]<br><a href="#">Leitstruktursuche und -optimierung: Vom Zufall zum gezielten Entwurf</a>   |

## Materialwissenschaftliche Vorträge 2001 – 2002

---

- 11.06.2001 Prof. Dr. Arnulf SCHLÜTER [FU Berlin]  
Von kleinen Molekülen zu kovalenten Nanoobjekten
- 26.06.2001 Prof. Dr. Roland BÖSE [Universität Essen]  
Die Schmelzpunktalternanz von n-Alkanen und Derivaten, molekulare Komplexe und Hydrate von Methan und Acetylen sowie deren Kristallisation
- 05.11. 2001 Prof. Dr. Alois FÜRSTNER [MPI für Kohlenforschung, Mühlheim]  
Beiträge zur Metathese von Alkenen und Alkinen
- 12.11.2001 Dr. Marc O. KRISTEN [BASF AG, Ludwigshafen]  
High Throughput Screening in Katalyse und Polymerisation: Auf dem Weg in das Labor von Morgen
- 26.11.2001 Prof. Dr. Walter KAMINSKY [Universität Hamburg]  
Polymerisation von Olefinen mit Metallocenkatalysatoren
- 03.12.2001 Prof. Dr. H. RITTER [Universität Düsseldorf]  
Cyclodextrine als molekulare Reaktionsgefäße für Monomere. Umwelt-freundliche Polymerisationen in Wasser
- 10.12.2001 Prof. Dr. Edmund TAGLAUER [MPI für Plasmaphysik, Garching]  
Morphologie und Oberflächenreaktionen von Rh/VO<sub>x</sub>/SiO<sub>2</sub> Modellkatalysatoren
- 17.12.2001 Univ.-Doz. Dr. Manfred AUER [Novartis Forschungsinstitut Wien]  
Confocal Fluorescence Detection in Drug Discovery Technology: The Integration of NanoScanning and Single Molecule Spectroscopy with Combinatorial Chemistry and Orphan Target Screening
- 14.01.2002 Prof. Dr. Jürgen BEHM [Universität ULM]  
Elementare Reaktionen in der Niedertemperatur-Brennstoffzellentechnologie
- 11.03.2002 Prof. Dr. Bernhard RIEGER [Universität Ulm]  
Kunststoffe nach Bauplänen der Natur
- 22.04.2002 Dr. Paul LICKISS [Imperial College, London, UK]  
Applications of Ultrasound to Synthesis
- 13.05.2002 Prof. Dr. Steven NOLAN [University of New Orleans, USA]  
Nucleophilic Carbenes in Homogeneous Catalysis
- 07.10.2002 Prof. Dr. Bernhard SCHRADER [Universität Essen]  
Zerstörungsfreie FT-Raman Spektroskopie in der Praxis

## Materialwissenschaftliche Vorträge 2001 – 2002

---

- 14.10.2002 Prof. Dr. Werner MORMANN [Universität Siegen]  
[Chemie mit Polymeren in \(überkritischem\) Ammoniak](#)
- 21.10.2002 Prof. Dr. Rolf MÜLHAUPT [Universität Freiburg]  
[Steuerung von Materialeigenschaften durch maßgeschneiderte Katalyse](#)

### Veranstaltungen der Österreichischen Mineralogischen Gesellschaft bzw. Berufungsvorträge „Angewandte Mineralogie“:

- 20.03.2002 W. SCHMAHL [Inst. f. Geologie, Mineral. & Geophysik/Ruhr-Univ. Bochum]  
[Ferro-elastische und co-elastische Phasen bei Mineralen und Werkstoffen](#)
- 20.03.2002 C. GEIGER [Inst. f. Mineralogie/Universität Kiel]  
[IR- und Raman-Spektroskopie: Methoden zur Wasserbestimmung in Mineralen und Werkstoffen](#)
- 21.03.2002 V. KAHLENBERG [Inst. f. Geowiss.-Kristallographie/Univ. Bochum]  
[Aspekte angewandter Kristallstrukturforschung: drei Fallbeispiele](#)
- 23.03.2002 R. MILETICH [Laboratorium für Kristallographie/ETH Zürich]  
[Megabar-Alchemie – Materentwicklung der Superlative](#)
- 23.03.2002 P. MAJEWSKI [Max-Planck-Inst. f. Metallforschung/Stuttgart]  
[Mineralogische Aspekte von modernen Werkstoffen am Beispiel des Brennstoffzellen-Festelektrolyts LaGaO<sub>3</sub>](#)
- 22.03.2002 T. HÄGER [Inst. f. Geowissenschaften/Universität Mainz]  
[Farbmechanismen von Edelsteinen unter besonderer Berücksichtigung des Korunds](#)

### Seminarreihe der Forschungsinitiative "Advanced Materials":

- 10.04.2002 Prof. Dr. B. BILDSTEIN [Inst. f. Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie]  
[Metallorganische und koordinationschemische Beiträge für molekulare Elektronik und Olefin-Polymerisationskatalyse](#)

## Materialwissenschaftliche Vorträge 2001 – 2002

---

- Dr. E. BURTSCHER [Inst. f. Textilchemie und Textilphysik]  
Ausgewählte chemische und physikalische Verfahren zur Modifikation textiler Substrate
- 17.04.2002 Prof. Dr. M. BUCHMEISER [Inst. f. Analytische und Radiochemie]  
Übergangsmetall-katalysierte Polymerisation: Synthese und Anwendungen funktionalisierter Trägermaterialien und hochkonjugierter polymerer Systeme
- Prof. Dr. E. BERTEL [Inst. f. Physikalische Chemie]  
Materialeigenschaften zwei- und eindimensionaler Systeme
- 08.05.2002 Prof. Dr. R. KRAMER [Inst. f. Physikalische Chemie]  
Substöchiometrische Übergangsmetalloxide: Elektrische und katalytische Eigenschaften
- Prof. Dr. K. HAYEK [Inst. f. Physikalische Chemie]  
"Surface"- und "Subsurface Layers" von Metallen und Metalloxiden als Promotoren in der heterogenen Katalyse
- 15.05.2002 Prof. Dr. H. SCHOTTENBERGER [Inst. f. Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie]  
Filmbildende ionische und zwitterionische Systeme zur Oberflächenmodifikation von Metallsubstraten
- Prof. Dr. B. KRÄUTLER [Inst. f. Organische Chemie]  
Selbst-strukturierende Fullerenderivate
- 29.05.2002 Prof. Dr. P.W. MIRWALD [Inst. f. Mineralogie und Petrographie]  
Cordierit: Ein wichtiges Mineral der Petrologie als Hochleistungswerkstoff
- Dr. R. TESSADRI [Inst. f. Mineralogie und Petrographie]  
Beispiele für die Charakterisierung von polykristallinen Materialien mit Pulver-Röntgendiffraktometrie
- 05.06.2002 Prof. Dr. P. SCHEIER [Inst. f. Ionenphysik]  
Rastertunnelmikroskopie-Untersuchungen an Silizium Nanostrukturen
- 12.06.2002 Prof. Dr. U. GRIESSER [Inst. f. Mineralogie und Petrographie]  
Materialeigenschaften von Arznei- und Hilfsstoffen

## Materialwissenschaftliche Vorträge 2001 – 2002

---

- 19.06.2002 Prof. Dr. P. JAITNER [Inst. f. Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie]  
[Metallorganische Spintransmitter](#)
- Prof. Dr. R. ABERMANN [Inst. f. Physikalische Chemie]  
[Untersuchungen zum Wachstum dünner Schichten](#)
- 27.08.2002 Dr. B. RESSEL [National Laboratory TASC-INFM Trieste und Karls-Universität Prag]  
[Multitechnique spectro-microscopy study of lead on Si\(111\) at low coverages](#)
- 3.10.2002 Dr. A. SCHWARTZ [Harvard University, Cambridge, MA]  
[Selbstorganisation – Anwendung eines Bauprinzips der Natur für Mikrofabrikation](#)

# Lehrveranstaltungen mit Bezug zur Materialwissenschaft WS 2002/2003

---

Thema	Dozent	Art der LV
-------	--------	------------

## Institut für Analytische Chemie und Radiochemie:

Makromolekulares Grundpraktikum	Buchmeiser	UE 2
Polymeranalytik	Buchmeiser	VO 1

## Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie:

Anorganische Werkstoffe	Sladky	VO 1
Nichtmetallische Metalle und Keramische supraleiter	Sladky	VO 1
Homogene Katalyse	Schottenberger	VO 1

## Institut für Pharmazie:

Thermomikromethoden in der Pharmazie	Griesser, Schmidt	VU1
Hot stage Microscopy and Polymorphism	Griesser	Kurse mit Fokus Materialwissenschaften (Industrie, international)

## Institut für Physikalische Chemie:

Kinetik der Phasenbildung	Hayek	VO2
Stress und Filmwachstum	Abermann	VO2
Elektronische Struktur kondensierter Materie	Bertel	VO1
Festkörperphysik II	Memmel	VO2
Prozesse auf Oberflächen	Menzel	VO1

## Institut für Mineralogie & Petrographie:

Erzmikroskopie	Vavtar	VO1/UE2
Atomspektrometrie (AAS/ICP-OES)	Tessadri	VO1/UE1
Nichtsilikate	Vavtar	VO2

# Lehrveranstaltungen mit Bezug zur Materialwissenschaft WS 2002/2003 bzw. SS 2003 (Planung)

---

## Institut für Textilchemie und Textilphysik:

Textilchemie I	Bechtold	VO1
Textilchemie II	Bechtold, Burtscher, Schramm	VO1
Angewandte Elektrochemie	Bechtold	VO1
Chemischer Apparatebau	Schramm	VO1
Chemische Technologie	Bechtold, Burtscher, Schramm,	VO2
Chemische technologische Schramm	Bechtold, Burtscher, Schramm,	UE3, Praktikum
Chemische technologische Schramm	Bechtold, Burtscher, Schramm,	VO1, Berechnungen

## **Auszug aus den für das SS 2003 geplanten Veranstaltungen:**

### **Vorträge:**

- 10.03.2003 Prof. Dr. A. MÜLLER [Universität Bayreuth]  
[Polymere für Polymer-Protein-Konjugate und Wirkstofftransport durch kontrollierte radikalische Polymerisation](#)
- 17.3.2003 Prof. Dr. R. CLAESSEN [Universität Augsburg]  
[Eindimensionale Metalle](#)
- 05.05.2003 Dr. Ralf WEBERSKIRCH [Technische Universität München]  
[Amphiphile Blockcopolymere und deren Verwendung als Trägermaterialien in der organischen Synthese und der Polymersynthese](#)

### **Lehrveranstaltungen:**

Makromolekulare Chemie	Buchmeiser	VO2
Polymertechnologie	Buchmeiser	VO1
Koordinations- u. Metallorganische Chemie	Schottenberger	VO2
Kinetik und Katalyse I (Modellkatalysatoren)	Hayek	VO2

## Lehrveranstaltungen mit Bezug zur Materialwissenschaft WS 2002/2003 bzw. SS 2003 (Planung)

---

Einführung in die Eigenschaften hochkorrelierter Materialien	Hüfner (Univ. d. Saarlandes)	VO2
Materialwissenschaften I (Elektronenmikroskopie)	Abermann	VO2
Materialwissenschaften II (Halbleiter)	Menzel	VO2
Materialwissenschaften III (Experimentsteuerung mit dem PC)	Memmel	VO2
Surface Science I (Nanostrukturen an Oberflächen)	Bertel	VO2
Festkörperphysik III (Nanoteilchen)	Märk	SV3
Oberflächenphysik	Scheier	SE2
Dünne Schichten	Pulker	SE1

# Stichwortverzeichnis

---

AAS (Atomic Absorption Spectrometry) 13, 32, 59, 69  
Absorption 42, 51  
Acetylenchemie, metallorganische 18, 22, 64  
Adsorption 36, 38, 39, 40, 42  
AFM (atomic force microscopy), siehe Atomkraftmikroskopie 42, 48, 49  
Aktivität 8, 14, 34, 35, 39, 43  
Alkinpolymerisation 14  
analytische Chemie 13, 14, 15, 16, 69  
anorganische Chemie 13, 15, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 29, 48, 58, 62, 64, 66, 67, 68, 69  
Arc Source 50  
Atomkraftmikroskopie 42, 48, 49  
ATRP (Atom-Transfer Radical Polymerization) 13  
Beschichtungsprozesse 50, 51, 52  
Biomedizinische Schichten 41  
Carbene 18, 65  
Cellulosefasern 30  
Ceroxid 35  
Cluster 8, 54, 55, 56, 57  
Cumulene 16  
CV (Cyclo-Voltamperometrie) 17  
Design von Katalysatoren 9, 10, 11, 13, 24, 25, 34, 35, 38, 43  
DSC (Differential Scanning Calorimetry) 13, 17, 27  
Dünne Schichten 9, 37, 50, 51, 52, 53, 70  
Einkristallröntgenstrukturanalyse 13, 17, 27, 29, 35, 44, 60  
Elektrochemie 39, 40, 41, 70  
Elektrolyse 32  
Elektronenbeugung 42, 45  
Elektronenmikroskopie 13, 48, 71  
EPR (Electron Paramagnetic Resonance), Elektronenspinresonanz 17  
Faraday Cups 52  
Färben 33  
Farbstoffe, solvatochrome 20  
Fasern 8, 9, 10, 30, 31, 33  
Ferrocen 17, 25  
FES (Flame Emission Spectrometry) 13  
Festkörper-Synthese 24, 26, 27, 29, 39, 40, 42, 43, 44, 45, 54, 69, 71  
FTIR (Fourier-Transform Infrarot-Spektroskopie) 27, 32, 39  
Fullerene 24, 25, 54, 57  
GC-MS (Gas-Chromatography-Mass Spectrometry) 13  
GPC (Gel Permeation Chromatography) 13, 17  
Heterogenkatalyse 13, 14, 39, 40, 41, 64  
high-throughput screening (HTS) 13

## Stichwortverzeichnis

---

Hochveredlung 32  
HPLC (High-Performance Liquid Chromatography) 13, 15, 16, 32, 33, 63  
ICP (Inductively-Coupled Plasma) 13, 59, 69  
Impedanz 39, 40  
intelligente Materialien 24  
Ion Plating 50  
Ionenstreuung 42  
Ionische Flüssigkeiten 15, 19, 22  
IR (Infrarot-Spektroskopie) 13, 17, 27, 32, 39, 65  
Katalysator 11, 13, 14, 22, 34, 35, 36, 39, 65  
Katalyse 9, 11, 13, 17, 18, 21, 22, 34, 35, 36, 37, 38, 40, 41, 42, 65, 66, 67, 69, 70  
kationische Polymerisation 13  
kombinatorische Chemie 13  
konjugierte Materialien 8, 10, 19, 24  
Kontakt 34, 42  
Koordinationschemie 17  
Korrelation 50, 51, 58  
Korrosion 34, 42  
Langmuir-Sonden 19, 20, 52  
LEED (Low energy electron diffraction), siehe Elektronenbeugung 42, 45  
Legierungswachstumsinstabilitäten 26, 35, 36, 48, 49  
Leitfähigkeit 10, 40, 42  
Lyocell 30  
Makromolekulare Chemie 13, 14, 15, 16, 70  
Massenspektrometrie 15, 42, 59  
Mechanische Schichtspannungen 46  
Metallkomplexe 18, 25  
Metallocene 19  
Metallorganische Chemie 9, 17, 18  
Metalloxide 40, 50, 66  
Metathesekatalysatoren 13, 16  
Metathesepolymerisation 15  
Molekulare Drähte 17, 25  
Molekulare Elektronik 17, 66  
monolithische Träger 13  
MS (Massenspektrometrie) 13, 17, 62  
Nanodrähte 43  
NanoElektronik 17  
Nanolithographie 55  
Nanoobjekte 24, 65  
Nanopartikel 34  
Nanostrukturen 9, 42, 67, 70

# Stichwortverzeichnis

---

Nanostrukturierte Modellsysteme 36  
Naturfarbstoffe 32  
Naturstoffchemie, metallorganische 19, 21  
N-heterozyklische Carbene 18, 65  
Niederdimensionale Systeme 44  
NMR (Nuclear Magnetic Resonance), Kernresonanzspektroskopie 13, 14, 17, 25, 27, 29  
Oberflächen 8, 10, 13, 26, 34, 35, 36, 37, 39, 42, 43, 44, 45, 48, 49, 50, 53, 54, 55, 57, 62, 65, 67, 69, 71  
Oberflächeneigenschaften 26, 50  
Oberflächenoxide 36  
Olefinpolymerisation 13, 18  
Olefin-Polymerisationskatalysatoren 18  
Optische Eigenschaften 13, 14, 20, 42, 46, 51, 52  
Organische Chemie 24, 25, 67  
Oxidationskatalysatoren 13  
Palladium 15, 35, 39  
PES (Photoelektronenspektroskopie) 17  
Photoemission 42  
Physical Vapour Deposition – PVD 50, 52, 53  
Plasmadiagnostik 50, 51, 52, 53, 65  
Platin 35, 37, 38, 39, 44, 50  
Polymeranalytik 13, 14, 15, 16, 69  
Polymere Boronsäuren 22  
Polymerisation 13, 18, 65, 66, 67, 70  
Polymerisationskatalysatoren 13, 18  
Porphyrine 24, 25  
programmierbare Materialien 25  
Pulver 27, 28, 44, 59, 60, 61, 67  
radioaktiv 14  
Raman 17, 27, 65, 66  
Rastertunnelmikroskopie 37, 42, 44, 45, 56, 57, 67  
redoxaktiv 17  
Reflexion 42, 51, 60  
Reibung 42  
Restgaseinfluss 47  
Rhodium 35  
Röntgenbeugung 13, 61  
Sandwichkomplexe (siehe auch Metallocene) 19  
Schichtcharakterisierung 52  
Schichterzeugung 46, 47, 48  
Schichtwachstum 42  
Schmierung 42  
Schwach koordinierende Anionen 19

# Stichwortverzeichnis

---

- Selbstorganisation 24, 25, 44, 68
- Selbststrukturierung 24, 43
- Selektivität 18, 34
- Sputtern 52
- STM (Scanning tunneling microscopy), siehe Rastertunnelmikroskopie 37, 42, 44, 45, 56, 57, 67
- Substrateigenschaften 47, 48, 50, 56, 67
- Substratrauhigkeit 47, 48, 50, 56, 67
- Substrattemperatur 47, 48, 50, 56, 68
- Subsurface Alloy 35
- Supraleitung 11
- Synthese 6, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 17, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 30, 31, 55, 60, 67, 70
- Synthesechemie, materialwissenschaftliche 19, 20, 21, 22, 23
- Textilien 7, 28, 29, 30, 31, 32, 33
- TGA (Thermogravimetric Analysis) 13, 27, 28
- Ti/Al-Legierungsschichten 48
- Ti/Cu-Legierungsschichten 48, 49
- Titanoxid 35, 39, 40, 47, 48
- Trägerkatalysatoren, Titandioxid, Zirkonium, Cer, SMSI-Effekt 35, 37, 39, 40, 41
- Trägermaterialien 15, 39, 67, 70
- Trennverfahren 13, 15
- Tribologie (siehe auch Reibung, Schmierung) 42
- Übergangsmetallionen 14
- UHV-Technologie 38, 46, 49, 56
- Ultrahochvakuum 38, 46, 49, 56
- UV-Vis 17
- Vakuum 42, 60
- Vanadiumoxide 35, 36, 38, 39
- Vernetzung 6, 10, 32, 64
- Viskose 30
- Zeolithe 39
- Zuckertrennung 22



