

Anorganische Chemie

Prof. Dr. Rüdiger Kniep

Die wissenschaftliche Zielsetzung unseres Instituts liegt in der experimentellen Erforschung intermetallischer Phasen mit neuartigen chemischen und physikalischen Eigenschaften. Unmittelbar damit verbunden ist die Frage nach der Natur der chemischen Bindung in metallischen Systemen, eine grundlegende Problemstellung, deren Behandlung ein breites Spektrum präparativer, charakterisierender und theoretisch orientierter Methoden erfordert. Die stofflichen Beiträge des Forschungsbereichs Anorganische Chemie sind auf die Gebiete **Quasi-kristalle/Approximanten** („*The Crystal Structure of (Ga,Zn)_{175-δ}Mg_{97+δ} - a Large 3/2-2/1-2/1 Fibonacci Approximant*“), **Nitride** („*Preparation, Crystal Structure, Magnetic and Electronic Properties of Ternary Rare-Earth Nitrides of Indium (R₃N)In*“, „*Ternary Alkaline-Earth Gold Nitrides*“, „*Volume-Chemistry of Nitrogen in Binary Metal-Nitrides and -Subnitrides*“), **Nitridometallate** („*Low-Valency Nitridonickelates*“, „*Chemical Bonding Induced Large Local Magnetic Effects in Li₂[(Li_{1-x}Fe_x)N]*“), **Diazenide** („*N₂²⁻ - Dumb-Bells Trapped within a Cage of Alkaline Earth Metals*“) und **Hydride/Hydridometallate** („*Cs₃ReD₁₀ High-Pressure Synthesis and Crystal Structure*“) fokussiert. Die Stickstoffverbindungen überstreichen ein Spektrum zwischen Valenzverbindungen und metallischen Systemen. Dabei führt die hohe Polarisierbarkeit des Stickstoff-Anions zu besonderen Bindungssituationen und zur Stabilisierung ungewöhnlicher Valenzzustände metallischer Elemente. Hohe Polarisierbarkeit des Anions spielt auch bei den Hydriden eine wesentliche Rolle.

Carbometallate wären in diesem Sinne eine weitere Herausforderung.

Im Forschungsbereich Anorganische Chemie werden zudem Themen aus dem weiteren Gebiet „Chemische Physik fester Stoffe“ behandelt, die der Zielsetzung des Hauses zunächst noch ferner stehen, sich jedoch in die gemeinsame Richtung entwickeln können. Die Seltenerd-Nitride des Indiums (Forschungsbericht 2000, „*Anorganische Chemie*“) repräsentieren ein solches Beispiel (s. o.). Die derzeit noch eher „randständigen“ Themen betreffen:

- Vorläufermethoden zur topochemischen Darstellung von Silicium-Subnitriden (Abb. 3) aus Erdalkalimetall-Siliciden (Patentanmeldung PCT / EP 02 / 05733).
- Cyanamide mit ausgedehnten komplexen Kationenverbänden.
- Inkommensurabilität bzw. niederdimensionale Modulation in ternären Nitriden des Galliums, Indiums, Thalliums und Silbers.
- Borophosphate (Abb. 2): Verbindungen der Systeme $M_2O/MO/M_2O_3-B_2O_3-P_2O_5(-H_2O)$. Synthesen, Kristallstrukturen, Porosität, Chiralität sowie chemische und physikalische Eigenschaften.
- Biomimetik: Morphogenese, Charakterisierung und Eigenschaften von Apatit-Gelatine-Kompositen. (Abb. 1)

Der Forschungsbereich Anorganische Chemie begleitet den Aufbau und die Entwicklung der Kompetenzgruppe Analytik. Die Kompetenzgruppe Theorie wird methodisch und personell unterstützt.

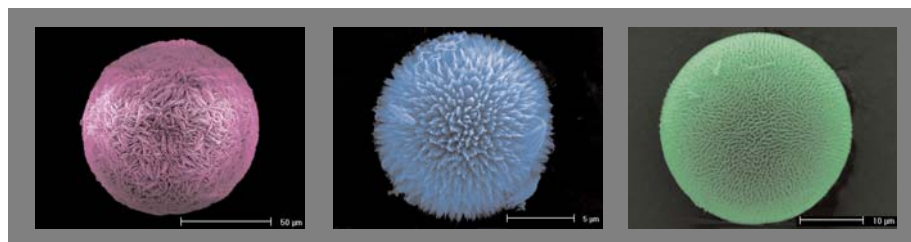


Abb. 1: Biomimetik/Selbstorganisation. Kugelaggregate von Calciumphosphat-Gelatine-Kompositen. Änderung von Morphologie in Abhängigkeit vom Fluoridgehalt.

Fig. 1: Biomimetics/Selforganization. Sphere-aggregates of calcium phosphate-gelatin-composites. Change in phase and morphology in dependence of the fluoride content.

Inorganic Chemistry

Prof. Dr. Rüdiger Kniep

The scientific objective of our Institute comprises the experimental investigation of intermetallic phases with novel chemical and physical properties. This immediately relates to the question of the nature of chemical bonding in metallic systems, a fundamental issue whose treatment requires a wide range of preparative, characterizing and theoretically-oriented methods. The contributions of the research field Inorganic Chemistry concerning materials are focussed on the areas of **Quasi-crystals/Approximants** („*The Crystal Structure of $(\text{Ga,Zn})_{175-8}\text{Mg}_{97+8}$ - a Large 3/2-2/1-2/1 Fibonacci Approximant*“), **Nitrides** („*Preparation, Crystal Structure, Magnetic and Electronic Properties of Ternary Rare-Earth Nitrides of Indium $(\text{R}_3\text{N})\text{In}$* “, „*Ternary Alkaline-Earth Gold Nitrides*“, „*Volume-Chemistry of Nitrogen in Binary Metal-Nitrides and -Subnitrides*“), **Nitridometalates** („*Low-Valency Nitridonickelates*“, „*Chemical Bonding Induced Large Local Magnetic Effects in $\text{Li}_2[(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{N}]$* “), **Diazenides** („ *N_2^{2-} - Dumb-Bells Trapped within a Cage of Alkaline Earth Metals*“) and **Hydrides/Hydridometalates** („ *$\text{Cs}_3\text{ReD}_{10}$, High-Pressure Synthesis and Crystal Structure*“). The nitrogen compounds cover a spectrum between valence compounds and metallic systems. In that, the high polarizability of the nitrogen anion leads to special bonding situations and to the stabilization of unusual valence states of metallic elements. High polarizability of the anion also plays a substantial role in hydrides. In that respect, carbometalates would represent another challenge.

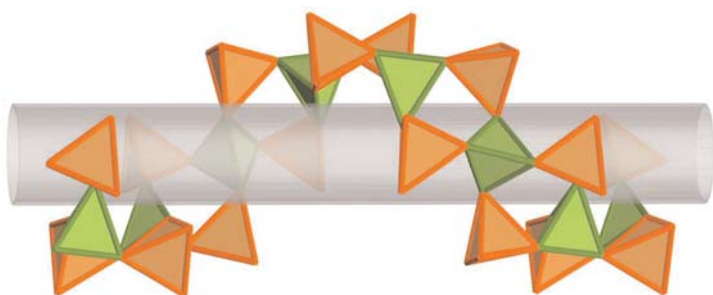


Fig. 2: Helical ribbons $\infty^1\{[\text{BP}_2\text{O}_8]^{3-}\}$ with $6_1(6_5)$ -symmetry.
Abb. 2: Helicale Tetraederbänder $\infty^1\{[\text{BP}_2\text{O}_8]^{3-}\}$ mit $6_1(6_5)$ -Symmetrie.

Furthermore, the research field Inorganic Chemistry treats subjects from the broader area of "Chemical Physics of Solids", which, for the time being, are more distant from the objectives set to the Institute, but may develop along the joint direction. The rare earth nitrides of indium (Research Report 2000, "Inorganic Chemistry") represent such an example (see above). The currently still rather "marginal" topics relate to:

- Precursor methods for the topochemical formation of silicon subnitrides from alkaline earth metal silicides (Patent registration PCT / EP 02 / 05733).
- Cyanamides with extended frameworks of complex cations.
- Incommensurability and low-dimensional modulation, respectively, in ternary nitrides of gallium, indium, thallium and silver.
- Borophosphates: Compounds of the systems $\text{M}_2\text{O}/\text{MO}/\text{M}_2\text{O}_3\text{-B}_2\text{O}_3\text{-P}_2\text{O}_5(-\text{H}_2\text{O})$. Syntheses, crystal structures, porosity, chirality as well as chemical and physical properties.
- Biomimetics: Morphogenesis, characterization and properties of apatite-gelatine composites.

The research field Inorganic Chemistry accompanies the setup and development of the competence group Analytics. The competence group Theory is supported methodologically and by personnel.

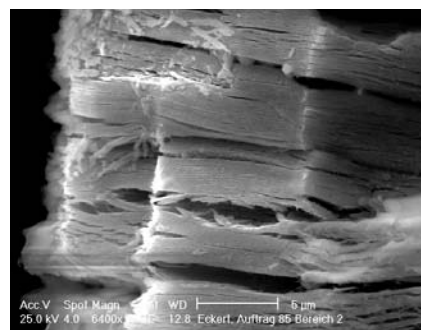


Fig. 3: Silicon subnitride Si_2N obtained by topochemical reaction from CaSi_2 .
Abb. 3: Silicium-Subnitrid Si_2N dargestellt über topochemische Reaktion aus CaSi_2 .