

Das Fraunhofer-Institut für Naturwissenschaftlich-Technische Trendanalysen berichtet über neue Technologien

Metall-organische Gerüstverbindungen

Metall-organische Gerüstverbindungen (metal-organic frameworks, MOF) gehören zu der vielfältigen Gruppe der hochporösen Materialien und besitzen extrem große Oberflächen auch bei sehr kleinen Volumina. Diese relativ jungen Materialien tauchten vor etwa 20 Jahren erstmals in der Literatur auf und haben seitdem eine rasante Entwicklung durchlaufen. Im zivilen Bereich werden sie beispielsweise als Elektrodenmaterialien in Batterien, als Katalysatoren oder Sensoren, aber vor allem zur Speicherung und Absorption von Gasen erforscht und teilweise bereits genutzt. Forschungsarbeiten für militärische Anwendungen befinden sich im Wesentlichen noch im Grundlagenstadium. Hier ist z.B. an den Einsatz von MOF zur Detektion und Zerstörung von Chemikalien oder als Explosivstoffe zu denken.

MOF sind aus Metallionen oder Metallionen-Gruppen, die als Knotenpunkte dienen, und organischen Verbindungsmolekülen (sogenannten Linkern) aufgebaut, die jeweils zwei oder mehr der Metallknotenpunkte verbinden. So entstehen sehr gleichmäßige Gitternetze. Typischerweise sind Größe und Eigenschaften der regelmäßigen Poren in MOF insbesondere durch die genutzten Linker schon bei der Herstellung einstellbar. Dies ist ein besonderer Vorteil von MOF gegenüber anderen hochporösen Materialien wie Zeolithen oder Aerogelen. So führen längere Linker beispielsweise zu größeren Poren, wobei die Porengröße von derzeit weniger als 1 nm bis hin zu 50 nm variiert werden kann. Zudem kann die Beschaffenheit der Porenwände in einem MOF durch den Einsatz von speziell funktionalisierten Linkermolekülen auf eine bestimmte Anwendung hin zugeschnitten werden. So können beispielsweise katalytische Zentren zur Zersetzung von Chemikalien oder selbstleuchtende Strukturen als Sensorik-Komponenten direkt eingebaut werden. MOF können zudem elektrisch leitende Eigenschaften aufweisen, und im Verhältnis zu rein organischen Polymeren weisen sie eine hohe thermische Stabilität auf.

Für die **Herstellung** von MOF können verschiedene Verfahren, wie z. B. sogenannte hydro- oder solvothermale Prozesse ge-

nutzt werden. Dabei werden Metallsalze und Linker gemeinsam mit einem Lösungsmittel über Stunden bis hin zu mehreren Tagen erhitzt, wobei die MOF langsam auskristallisieren. Diese Verfahren sind häufig jedoch nur für kleinere Mengen geeignet, weshalb beständig an der Optimierung dieser und weiterer Prozesse geforscht wird. Beispielsweise werden auch analoge Prozesse in Mikrowellengeräten oder gänzlich lösungsmittelfreie Methoden getestet. Auch der gezielte Aufbau an speziellen Oberflächen durch schichtweises Wachstum wird erforscht. Eine spätere Modifikation der fertigen Gerüststrukturen ist zum Teil ebenfalls möglich. Auf diese Weise können neue oder noch benötigte Funktionalitäten auch nachträglich eingeführt werden

Besonders relevante militärische Anwendungsbereiche sind die Detektion und Zerstörung von Kampf- und Explosivstoffen. Die Detektion toxischer Chemikalien und deren Unschädlichmachung durch die Aufnahme in das metall-organische Gerüst sind aber auch im zivilen Bereich von großem Interesse. Beispielsweise könnten entsprechende MOF als Filter in Industrieanlagen eingesetzt oder im Bereich der Kriminalaufklärung genutzt werden. Zur Detektion bestimmter Chemikalien werden dabei bevorzugt MOF genutzt, die selbst leuchten. Sind solche Chemikalien bei der Prüfung anwesend, lagern sie sich in das metall-organische Gerüst ein und das Leuchten lässt nach oder verschwindet ganz. Bei der katalytischen Zerstörung von giftigen Stoffen mit MOF werden hingegen Gerüstverbindungen genutzt, die in ihrem Inneren katalytische Zentren besitzen. Das können zum einen die Metallionen des Gitters sein (z. B. Kupfer-Ionen), aber auch speziell eingebaute chemische Strukturen, die an den Linkern befestigt und in der Lage sind, spezifische Chemikalien zu zersetzen. Neben der Detektion und Zerstörung von Kampfstoffen sind militärisch aber auch MOF mit hoher Energiedichte z.B. als Spreng- und Treibstoffe von Interesse. Ihre Wirkung und Einsetzbarkeit sind dabei entscheidend von ihrem inneren Aufbau abhängig. Vorteile von MOF gegenüber

konventionellen Explosivstoffen sind ihre relative Unempfindlichkeit gegenüber mechanischen Belastungen wie Schlag oder Reibung und ihre relativ gute Stabilität gegenüber hohen Temperaturen. Konventionelle MOF können darüber hinaus potentiell auch als stabilisierende Wirtsgitter für Explosivstoffe wie z. B. TNT genutzt werden.

Die Forschung und Entwicklung dieser Bereiche steht jedoch noch vor großen Herausforderungen. Beispielsweise gibt es derzeit noch keine geeigneten Produktionsverfahren für die Massenfertigung solcher MOF. Zudem ist in den Bereichen Detektion und Zersetzung giftiger Chemikalien das Spektrum der detektierbaren Stoffe noch sehr gering. Auch die Zersetzungsgeschwindigkeiten sind noch nicht ausreichend hoch, um wirklich effektiv zu sein. Häufig stellt auch noch die Integration katalytischer Zentren in ein MOF ein Problem dar. Eine besondere Herausforderung für MOF mit hoher Energiedichte stellt au-Berdem deren systematische Erschließung dar, da sie in direkter Konkurrenz zu bereits existenten hochenergetischen Materialien stehen. In vielen Fällen wurden bisher auch die Explosionswärmen lediglich rechnerisch abgeschätzt und nicht experimentell bestimmt.

Insgesamt sind MOF durch ihre Vielseitigkeit für viele verschiedene zivile und militärische Anwendungsbereiche von Interesse. Daher nehmen Forschung und Entwicklung dieser hochporösen Materialien in der Breite weiterhin stark zu. Viele potentielle Anwendungsgebiete von MOF werden allerdings auch von anderen bereits etablierten Werkstoffen wie Zeolithen, Aerogelen oder anderen Polymernetzwerken sehr gut bedient; hier müssen sich die metall-organischen Gerüstverbindungen erst durchsetzen. Während die Forschung in den genannten militärischen Anwendungsbereichen noch im Grundlagenstadium und daher langfristig anzusehen ist, ist die Bandbreite der Entwicklungsstufen im Zivilen deutlich größer; dort reicht die Spanne heute von ersten Forschungsansätzen bis hin zur Marktreife.

Dr. Diana Freudendahl