

# Der unmögliche Kristall

Moleküle mit Fünffachsymmetrie ordnen sich auf einer Oberfläche als zweidimensionale Kristalle an. Einen Ansatz zum Verständnis dieses «unmöglichen» Verhaltens lieferten kürzlich Forscher der Empa und der Universität Zürich, indem sie die komplizierten Prozesse dieser Kristallisation mit einem Rastertunnelmikroskop verfolgt haben.

TEXT: Martina Peter

Was die machen, ist theoretisch eigentlich gar nicht möglich», lacht Karl-Heinz Ernst von der Empa-Abteilung «Nanoscale Materials Science» und meint damit seine Moleküle mit Fünffachsymmetrie, die sich auf einer Oberfläche möglichst dicht anordnen und in zweidimensionale Kristalle «verwandeln». In der Kristallographie ist das ein Ding der Unmöglichkeit – aus dem gleichen Grund, weshalb sich nämlich ein Boden nicht lückenlos mit gleichzeitigen fünfeckigen Kacheln fliesen lässt. Es sei denn, weitere geometrische Formen werden dazu genommen und zu einer Ebene kombiniert.

Zusammen mit Jay Siegel vom Institut für organische Chemie der Universität Zürich untersuchte Ernst so genannte Corannulen-Moleküle. Diese Moleküle mit fünfzähliger Symmetrie besitzen eine gewölbte Form – wie eine Schüssel – und gelten als Fragment von Buckminster-Fulleren, dem so genannten Buckyball. Sie werden deshalb auch als «Buckybowls» bezeichnet. Die Kohlenstoffatome der Corannulen-Moleküle sind in fünf Hexagonen um einen zentralen Fünfering angeordnet. Von Corannulen und seinen Derivaten erhoffen sich die For-

scher eine wichtige Rolle für die Weiterentwicklung neuer Materialsysteme, insbesondere für die Photovoltaik und Elektronik.

## Wenn Moleküle beim Kristallisieren «schummeln»

Um zu beobachten, wie Moleküle mit fünfzähliger Symmetrie sich auf metallenen Oberflächen zu zweidimensionalen Kristallen anordnen, nutzten die Empa-Forscher das Rastertunnelmikroskop. Sie erwarteten, dass sie entweder eine unregelmässige Struktur beobachten würden, oder aber, dass die Moleküle eine perfekte Anordnung bildeten, dann jedoch mit einer von der Zahl fünf abweichenden Kristallgittersymmetrie. In der Tat moagelten die Moleküle, um eine möglichst dichte Packungsform auf der Oberfläche zu erreichen und «kippten» von der Fünffachsymmetrie weg.

«Wir griffen deshalb in einem nächsten Experiment zu Molekülen mit sperrigen Seitengruppen. Die konnten nicht einfach umkippen und mussten weiterhin der Fünffachsymmetrie gehorchen», erzählt Ernst. Trotzdem bildeten diese Moleküle eine enge Packung. In ihren zweidimensionalen Kristallen sind die Moleküle auf einem sechseckigen Gitter angeordnet – sie bilden also eine sechszählige Symmetrie –, doch im Gegensatz zu Molekülen mit Sechsfachsymmetrie unterscheiden sich die einzelnen Corannulen-Moleküle in ihrer Ausrichtung parallel zur Oberfläche. Dieses Resultat, das die Forscher vor kurzem in der Fachzeitschrift «Journal of the American Chemical Society» veröffentlichten, wurde sowohl von mathematischen Simulationen als auch aufgrund einfacher mechanischer Modellierungen mit fünfeckigen Styropor- und Aluminiumscheiben auf Luftkissen oder Schütteltischen vorhergesagt. //

1 Nicht nur bei den «Buckybowl»-Molekülen zu finden – auch der Querschnitt einer Okraschote offenbart eine Fünffachsymmetrie. (Foto: iStock)

2 Beispiel einer Anordnung von Corannulen-Pentamethyl-Derivaten: Die schwarzen Punkte zeigen das regelmässige hexagonale Gitter, zu dem sich die fünfzähligen Moleküle «zusammenraufen», doch ist jedes Molekül unterschiedlich auf den Gitterpunkten platziert. (Foto: Empa)

