

Die Synthese und Charakterisierung von Kohlensäure ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ ) blieb bis Anfang der Neunziger ein unantastbares Ziel. In Lehrbüchern hieß es, Kohlensäure könne nicht isoliert werden, weil sie unmittelbar in ihre Bestandteile Kohlendioxid und Wasser zerfiele. 1993 war es in unserer Gruppe erstmals möglich Kohlensäure im festen Zustand erstmals mittels eines neu entwickelten Kälteverfahrens zu isolieren und mittels FT-IR Spektroskopie zu charakterisieren [Hage et al., J. Am. Chem. Soc., 115 (1993) 8427]. Mittlerweile hat der Vergleich von Labor-IR-Spektren mit Spektren von Himmelskörpern die Möglichkeit des Vorkommens von  $\text{H}_2\text{CO}_3$  etwa auf der Marsoberfläche, auf Kometen wie zB dem Halleyschen Kometen, auf den galileischen Satelliten des Jupiters oder auf dem Edgeworth-Kuiper Gürtel suggeriert.

Durch eine leichte Abänderung des Verfahrens zur Herstellung von Kohlensäure, nämlich durch den Umstieg von Wasser auf Methanol als Lösungsmittel für die Reaktion, konnten wir eine zweite polymorphe Modifikation von kristalliner Kohlensäure im Labor erzeugen und charakterisieren. Ein Hauptziel des vorgeschlagenen Projektes ist es, zu untersuchen ob ein Wechsel zu einem anderen Lösungsmittel bzw. der Gebrauch von Mischungen von Methanol und Wasser im Kälteverfahren weitere Polymorphe von Kohlensäure bringt. Die zwei bekannten sowie die zu entdeckenden Polymorphe werden dann mittels in situ FT-IR Spektroskopie sowie erstmalig mittels ex situ Raman Spektroskopie, differentieller Scanningkalorimetrie sowie Röntgenpulverbeugung untersucht. Letztere Methode erlaubt es, auch die mikroskopische Kristallpackung der Polymorphe zu ergründen. Dies wird in Zusammenarbeit mit Prof. Sally L. Price (UCL) geschehen.

Neben der astrophysikalischen Relevanz im festen Aggregatzustand wird auch über eine mögliche Bildung von gasförmiger Kohlensäure in der Venus- bzw. Erdatmosphäre spekuliert. Um diese Behauptung zu verifizieren bzw. zu falsifizieren sind Spektren von  $\text{H}_2\text{CO}_3$  im gasförmigen Aggregatzustand vonnöten. Unser erfolgreiches Experiment der Sublimation und Rekondensation eines  $\text{H}_2\text{CO}_3$ -Polymorphen von 1998 [Hage et al., Science, 279 (1998) 1332] ermöglicht nun, solche Spektren im Labor aufzuzeichnen. Während es nicht möglich ist Kohlensäure direkt in der Gasphase nachzuweisen, ermöglicht die Technik der Matrixisolierung die Messung von immobilisierten Molekülen aus der Gasphase bei niedrigen Temperaturen. Das Ziel ist es also, solche Spektren in einer Argon Matrix bei sehr tiefen Temperaturen aufzunehmen.