




Intermolekulare Wechselwirkungen mit "unsichtbarem" Infrarotlaserlicht sichtbar gemacht

Prof. Martina Havenith-Newen
Physikalische Chemie II, Ruhr-Universität Bochum

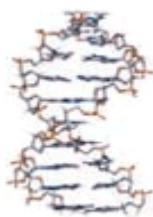
Bilder-Navigation 



Herzlich Willkommen zur Wochenschau im Jahr der Chemie und bei der Deutschen Bunsengesellschaft

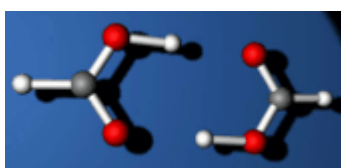
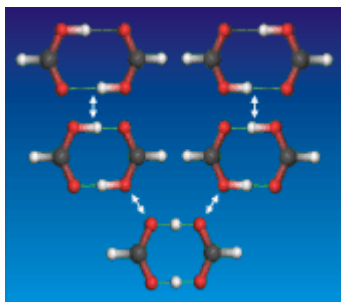
Hinweise zur Nutzung dieses Wochenbeitrags: Die einzelnen Kapitel bauen aufeinander auf. Sie können aber auch mit der obigen Bilder-Navigationsleiste diese Seite erforschen. Wenn Sie den Mauszeiger über ein Bild bewegen und dort halten, erscheint eine Kurzbeschreibung des Bildes. Einige Bilder und die **blauen Links** führen Sie durch die Seite und zu externen Seiten im Internet. Letztere werden in einem neuen Fenster geöffnet. Sie können uns auch eine **E-Mail** schicken, z.B. wenn Ihnen diese Seite gefallen hat. Mit dem Pfeil  gelangen Sie zur Bilder-Navigation zurück. Diese Webseiten wurden mit IE6.0, NC4.78, N6.2 und N7.0 getestet. Weitere Kontaktadressen und Links finden Sie am **Ende** der Seite.

Was sind "Intermolekulare Wechselwirkungen"?



Die intermolekulare Wechselwirkung bewirkt viele Phänomene des Alltags: die Stabilität von Seifenblasen, die Bildung von Wassertropfen, dass Geckos an der Decke laufen können, die Form von Eiskristallen und vieles mehr. Diese Wechselwirkung hält Moleküle zusammen ohne eigentliche "chemische" Bindung. Sie wirkt intermolekular, also "zwischen" den Molekülen. Ein Spezialfall der intermolekularen Wechselwirkung ist die Wasserstoffbrückenbindung. Sie ist stark gerichtet und erlaubt daher die Bildung von Strukturen wie der DNA. Intermolekulare Bindungen sind schwächer als die chemischen Bindungen, sie sind aber bei Zimmertemperatur teilweise stabil und können mit geringem Energieaufwand aufgelöst werden. Diese Art von Bindungen sind in der Biologie essentiell: Sie garantieren z.B. die Stabilität der Doppelhelix aber ermöglichen gleichzeitig die Replikation des genetischen Codes.

Eine Sache des Gleichgewichts oder "Wie schnell tunnelt ein Proton?"



Im Ameisensäure-Dampf bzw. -Gas bilden sich neben Monomeren auch Dimere aus. Das Ameisensäure-Dimer ist ein Prototyp für eine doppelte Wasserstoffbrückenbindung wie sie sich in der DNA-Doppelhelix befindet. Selbst dieses relativ kleine Modellsystem zeigt, dass eine Bindung nicht etwas starres, sondern etwas sehr dynamisches ist. Es gibt zwei Gleichgewichtsstrukturen, wobei das eine Dimer ein Spiegelbild des anderen Dimers ist (siehe Abbildung links oben). Durch einen Effekt der Quantentheorie, der sogenannten Tunnelwahrscheinlichkeit, ist es aber nun möglich, dass ein Wasserstoffatom bzw. ein Proton - wenn wir nur den Kern betrachten - in der Wasserstoffbrückenbindung den Platz wechselt. Gleichzeitig wechselt (tunnelt) auch das andere Proton in der Brücke. Aufgrund von neuen Messungen ist es uns erstmals gelungen, die Zeit zu messen, die Protonen für den Wechsel von der einen zur anderen Seite benötigen. Der Protonentransfer benötigt ca. 6 Nanosekunden (0,00000006 Sekunden) im Grundzustand. Auch wenn bei Tunnelprozessen in der Quantentheorie die Definition einer Geschwindigkeit nicht korrekt ist, wollen wir hier zur Klärung der Größenverhältnisse dennoch eine angeben. Die Distanz der Protonen zwischen den beiden Gleichgewichtslagen beträgt ca. 0,06 Nanometer. Somit erhalten wir eine "Geschwindigkeit" für den Austausch von 1 Zentimeter pro Sekunde.

Mehr Informationen finden Sie auf unserer **Homepage** und unter **Proton-Tunneln** sowie in unseren **Publikationen**.

Wo das Chemie-Lehrbuch irrt oder "Das Rätsel des Ammoniak-Dimers"



Das Ammoniak-Dimer kann sowohl als Protonendonator als auch als Protonenakzeptor dienen. Ammoniak galt als Lehrbuchbeispiel für die Wasserstoffbrückenbindung.



Wenn wir der sogenannten "chemischen Intuition" folgen, würden wir für das Ammoniak-Dimer annehmen, dass es eine lineare Wasserstoff-Brückenbindung ausbildet. In alten Modellen wird Stickstoff (N) eine negative Partialladung zugeordnet und Wasserstoff (H) eine positive. Stickstoff und Wasserstoff sollten sich wie gegensätzlich gepolte Pole zweier Magnete linear ausrichten. Auch alle genauen theoretischen Berechnungen sagten eine lineare H-Brücke voraus (N...H-N).

Unsere Experimente zeigten jedoch, dass sich beim Ammoniak-Dimer KEINE lineare H-Brücke ausbildet. Offensichtlich wurde in vorherigen theoretischen Berechnungen die gegenseitige Abstoßung (Repulsion) des freien Elektronenpaares an der dreizähligen Drehachse des Ammoniak-Monomers unterschätzt. Dies zeigte, dass noch keine verlässlichen Vorhersagen für intermolekulare Wechselwirkung möglich sind. Für zukünftige Forschergenerationen bleibt also noch viel zu tun.



Solche relativ kleinen Molekülsysteme können bestehende Lehrbuchmeinungen korrigieren und neue Impulse für die Verbesserung unserer theoretischen Modelle liefern. Diese können dann mit einer höheren Genauigkeit auf größere Molekülsysteme wie Proteinstrukturen angewendet werden. Mehr Informationen finden Sie auf unserer [Homepage](#) unter "Das Rätsel **Ammoniak-Dimer**" sowie in unseren [Publikationen](#).

Spektroskopie oder "Die Suche nach den Fingerabdrücken der Moleküle"

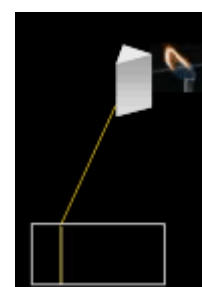


Wie konnten wir die oben gezeigten Strukturen entdecken? Die Messmethode beruht auf der Identifikation chemischer Elemente anhand des Emissions- oder Absorptionsspektrums. Im kurzen historischen Exkurs treffen wir dabei auf den Namensgeber der Bunsengesellschaft.

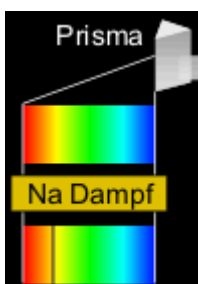


Robert Wilhelm Bunsen, Chemiker und Physiker (1811-1899), und Gustav Kirchhoff, Physiker und Mathematiker (1824-1887), sind wichtige Mitbegründer der modernen Spektroskopie. Darüber hinaus sind sie ein Paradebeispiel für erfolgreiche interdisziplinäre Forschungen - diese sind nachzulesen in ihren Arbeiten "Chemische Analyse durch Spectralbeobachtungen" (1860) und "Abhandlungen über Emission und Absorption" (1859-1862). Bunsen schrieb u.a. am 15. November 1859: "Im Augenblick bin ich und Kirchhoff mit einer gemeinsamen Arbeit beschäftigt, die uns nicht schlafen lässt. Kirchhoff hat nämlich eine wunderschöne, ganz unerwartete Entdeckung gemacht, indem er die Ursache der dunklen Linien im Sonnenspektrum aufgefunden hat."

Bunsen und Kirchhoff fanden heraus, dass Stoffe wie das chemische Element Natrium charakteristische Farben emittieren. Die Bunsen'sche Gaslampe (*Bunsen-Brenner*) hatte eine hohe Brenntemperatur und eine geringe Eigenlumineszenz, sodass die gelbliche Farbe des Natriums deutlich sichtbar war. Sie beobachteten das Licht durch ein Prisma und konnten zwei scharfe gelbe Linien erkennen.



Beleuchtet weißes Licht ein Prisma, so wird es in die Farben des Regenbogens zerlegt. Wird Natrium-Dampf zwischen das Prisma und eine weiße Lichtquelle gehalten, so fehlen nun die scharfen gelben Linien im Farbspektrum.



Kirchhoff und Bunsen bewiesen damit die These, dass der Natrium-Dampf das gelbe Licht absorbiert, welches es in der Flamme emittiert. Weiterhin fanden sie, dass JEDES Element eine charakteristische Reihe von Farben absorbiert und emittiert. Aus dem Vergleich der dunklen Linien im Sonnenspektrum mit Linien verursacht durch verschiedene Stoffe in der Flamme konnte eine Vielzahl der dunklen Linien nach und nach den verschiedenen chemischen Elementen zugeordnet werden. Die dunklen Linien im Sonnenspektrum entstehen also durch Absorption der chemischen Elemente und Gase, die in der Sonnen- sowie in der Erdatmosphäre vorhanden sind, und welche das Licht auf dem Weg zu uns passieren muss.

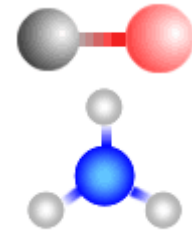
Heute wissen wir, dass die Elektronenstruktur der Atome jedes chemischen Elements die charakteristischen Linien verursacht. Ein Photon im optischen Spektralbereich wird absorbiert, wenn ein Elektron in einen angeregten Zustand übergeht. Diese Übergänge sind diskret, wie es in der Quantentheorie beschrieben wird. Sie führen zu scharfen Linien. Da das Linienmuster in Anzahl, Form und Intensität für jedes Element charakteristisch ist, ähnlich wie ein Fingerabdruck für den Menschen, hat sich der Begriff des "spektralen Fingerabdrucks" eingebürgert.



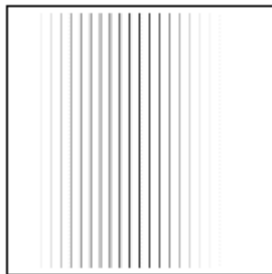
Moderne Laserspektroskopie und das Infrarot



Zusätzlich zu den elektronischen Übergängen können die Atomkerne im Molekül schwingen und rotieren. Die Schwingungen und Rotationen eines Moleküls sind charakteristisch für die gebundenen Elemente und Moleküle sowie für die Massenverteilung und Position der Atome in der Struktur. Aus dem infraroten, unsichtbaren, spektralen Fingerabdruck kann die Struktur erschlossen werden. Dies erlaubt wiederum Rückschlüsse auf die intermolekulare Wechselwirkung mit Hilfe von theoretischen Modellen der Quantentheorie. Links sehen Sie eine Schwingung (Vibration) im Kohlenmonoxid-Molekül (CO) und ein rotierendes Ammoniak-Molekül (NH₃).



Temp.: +27°C = 300 K



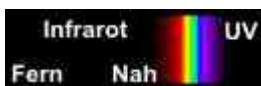
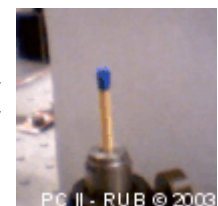
Rotierendes Kohlenmonoxid (CO) zeigt ein Absorptionsspektrum im fernen Infrarot mit Linien in regelmäßigen Abständen. Wenn das Molekülgas von Raumtemperatur abgekühlt wird, so absorbiert es nach und nach nur noch kleine Frequenzen bzw. große Wellenlängen. Die Animation zeigt Linienspektren für das CO-Molekülgas, beginnend bei einer Temperatur von +27 Grad Celsius (300 Kelvin) bis -273 Grad Celsius (0,3 Kelvin). Diese tiefen Temperaturen können wir in unseren Labors herstellen.

Ameisensäure-Dimer



Ausschnitt aus dem Spektrum des Ameisensäure-Dimers. Das Dimer ist ein sogenannter asymmetrischer Kreisel und verursacht ein komplexes Spektrum im mittleren Infrarot. Mit einiger Detektiv-Arbeit können dennoch Muster gefunden und anhand theoretischer Modelle der Quantentheorie in eine Struktur umgesetzt werden. So wurde auch das **Tunneln der Protonen** festgestellt.

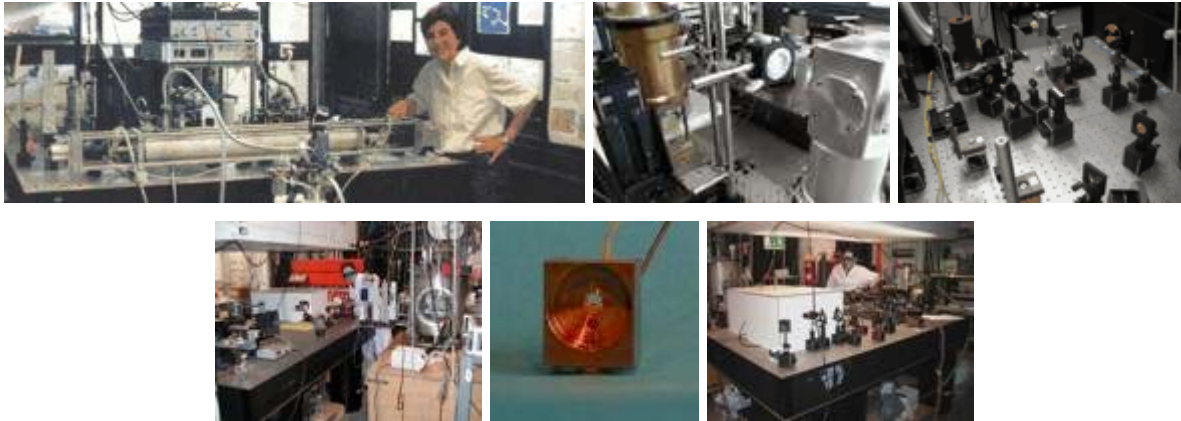
In der modernen hochauflösenden Spektroskopie ist die Lichtquelle ein intensiver Infrarot-Laser, der eine scharfe Frequenz ("infrarote Farbe") emittiert. Auch wenn der Strahl unsichtbar ist, kann die hohe Intensität dieser als Wärme empfindbaren Strahlung Papier oder ein Streichholz entzünden. Beachten Sie im Video, dass sich zuerst das Papier schwarz färbt und Rauch aufsteigt. Der kreisförmige Infrarot-Laserstrahl wird durch das Streichholz unten links etwas abgeschattet, sodass der kreisförmige Brennfleck im Schatten des Streichholzes nicht vollständig ist ([Download](#): 354kByte MPEG-4 Video Codec V2 mit Labortonspur).



Durch verschiedene Techniken kann die Emissionsfrequenz dieser Laser variiert werden, sodass es möglich wird das infrarote Linienmuster aufzuzeichnen. Die Ursache dieser Muster sind die Absorptionen der angeregten Schwingungen und Rotationen der Moleküle.

Diese durchstimmbaren Infrarot-Laser sind oft sehr komplex und erfordern eigene Forschungsarbeiten in ihrer Entwicklung. Mehr Informationen zu speziellen und einzigartigen Hightech Infrarot-Lasern, die in Zusammenarbeit mit unseren Studenten im Eigenbau entwickelt wurden, finden Sie auf unserer [Homepage](#). Eine neue Laserlichtquelle mit hoher Leistung und breiter Überdeckung von infraroten Spektralbereichen erlaubt neue grundlegende Erkenntnisse über den Aufbau und über die Funktionsweise von Molekülen und deren Strukturen. Diese Erkenntnisse testen bestehende und führen zu besseren und neuen Modellen in der Quantentheorie.

Einblicke ins Labor - Klicken Sie auf die Bilder für eine Vergrößerung



Vom Molekül zur Flüssigkeit, zur Zelle, zum Menschen f

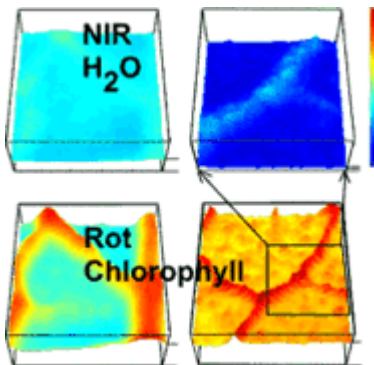
Moleküle in Gasen können anhand ihres spektralen Fingerabdrucks identifiziert werden. Dies gilt auch für Moleküle in Flüssigkeiten oder als Teil von Festkörpern. Allerdings sind hier die Linien nicht mehr so scharf. Es sind aber immer noch breite Absorptionen erkennbar, die eindeutig Molekülen zuzuordnen sind.



vergrößert mit Versuchsaufbau

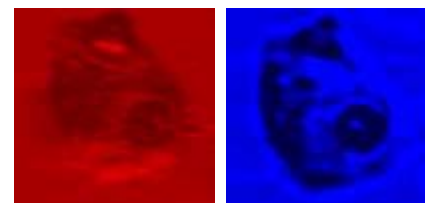


Durch zweidimensionales Rastern eines fokussierten Laserstrahls auf einer Probe, können mikroskopische Aufnahmen hergestellt werden. Diese zeigen wie in einer molekularen Landkarte die Verteilung der Moleküle auf der Probenfläche. Als Beispiel sehen Sie mikroskopische Bilder eines Blatts, welche während eines Studenten-Praktikums aufgenommen wurden. Es wurden zwei Laser verwendet: ein roter Helium-Neon-Laser (Wellenlänge 632,8 nm) und ein unsichtbarer Nah-Infrarotlaser (Wellenlänge 1530 nm). Rotes Licht wird insbesondere durch das Molekül Chlorophyll absorbiert. Deshalb reflektieren Blätter die Komplementärfarbe Grün. Das Nah-Infrarotlicht wird insbesondere von Wasser absorbiert.



Links unten sehen Sie eine mikroskopische Aufnahme eines frischen grünen Blatts. Hier wurde rotes Laserlicht verwendet. Es wird besonders stark an den dunkleren, hier rot dargestellten Blattadern absorbiert (Größe des Ausschnitts: 0,25 Quadratmillimeter). Links oben: Der gleiche Ausschnitt des frischen Blatts, aufgenommen mit dem Nah-Infrarotlaser (NIR). Wasser absorbiert fast überall gleich, etwas mehr in den Blattadern. Das Bild rechts unten zeigt eine Aufnahme mit dem roten Laser eines nun trockenen und roten Blatts (Ausschnitt: 0,25 Quadratmillimeter). Rechts oben ist ein 0,06 Quadratmillimeter-Ausschnitt dieses roten Blatts dargestellt. Es wurde mit dem NIR-Laser aufgenommen. Das trockene Blatt absorbiert deutlich weniger (dunkelblau anstatt türkis) da insgesamt weniger Wasser enthalten ist. Das meiste Wasser befindet sich in den Blattadern.

Der Wassergehalt von Zellen, u.a. steuerbar durch Medikamente, beeinflusst Prozesse in der Zellbiochemie. Zum Beispiel kann ein zu hoher oder zu niedriger Wassergehalt als normal zu einer Reduktion der Proteinverdauung (Proteolyse) führen. Rechts sehen Sie Leberzellen einer Ratte im roten und Nah-Infrarotenlaserlicht, hier rot und blau dargestellt (Ausschnitt: 0,01 Quadratmillimeter).



Die Bestimmung des Wassergehalts in Zellen ist eine laufende Forschungsarbeit, die wir zusammen mit Studenten der Biochemie und Fakultäten der Medizin interdisziplinär durchführen.

Links und Informationen f



Mehr Informationen finden Sie zum Thema der Webseite auf unserer [Homepage](#) sowie in unseren [Publikationen](#).

Besuchen Sie auch unsere [Fakultät](#) im Netz. Dort finden Sie weitere Informationen u.a. zur Großveranstaltung in Bochum unter dem Link [Jahr der Chemie 2003](#) sowie zur Großveranstaltung in Bochum mit dem Thema "[Der Stoff - Materie und Chemie](#)".

Zum Schluss



Inhalt, Gestaltung und technische Umsetzung: [Dr. Erik Bründermann](#), [Prof. Martina H](#)
Copyright © 2003, [Lehrstuhl für Physikalische Chemie II](#), Ruhr-Universität Bochum, Stand