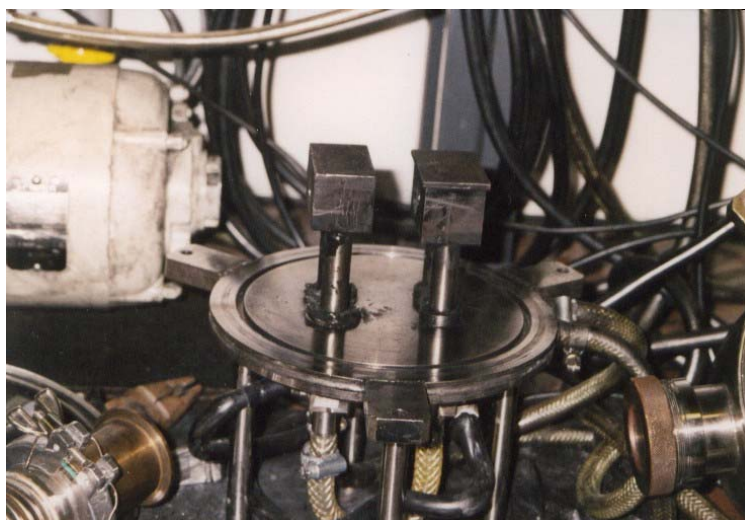


## "Kleiner, schwarzer Mann" oder das Faszinierende an Chemie...

Jeffrey Iqbal, Goetheschule Neu-Isenburg, Dreieich

Schon vor der Schule mit fünf Jahren wurde mein Interesse an Chemie durch eine Fernsehsendung der Reihe "Telekolleg" geweckt, der klischeehafte Professor mit Bart und Brille berichtete wohl über Säuren und Laugen, deren farbenfroher Nachweis mit Indikatoren gelänge. Fasziniert von der mystischen Fachsprache und den bunten Flüssigkeiten begann ich gleich darauf die Wasch- und Putzmittelvorräte meiner Mutter zu plündern, um damit "hochwissenschaftliche Experimente" durchzuführen, bei denen ich "natürlich nicht gestört werden durfte". Nach den ersten Hexenküchenexperimenten wurden meiner Mutter ihre Hausmittelchen wohl doch zu lieb und ich durfte mit einem Kosmos-Chemiekasten vorlieb nehmen, der mit mir aber bald in ein neues Kellerlabor mit selbstgebasteltem Abzug und Mobiliar aus dem Baumarkt umziehen musste.

In der siebten Klasse (2000) schrieb ich nach einem Jugend forscht-Projekt zur Analytik von Kontaminanten in Babynahrung einen Brief an die Technische Universität Darmstadt und bat um Informationen zu Fullerenen. Vorher hatte ich ein Buch von J. Dettmann zu dem Thema gelesen und fasziniert von diesen ästhetischen Molekülen mit anscheinend so vielen Anwendungsmöglichkeiten wollte ich mehr erfahren. Bald darauf wurde ich in den Arbeitskreis von Herrn Prof. Dr. Klaus-Peter Dinse eingeladen und durch deren Laboratorien geführt. Auf meine Frage hin, ob es eventuell möglich sei, einige Experimente bei ihnen durchführen zu können, kam man mir mit großer Aufgeschlossenheit entgegen und nach Klärung der (versicherungs-) rechtlichen Lage durfte ich im Oktober 2000 mit den geplanten Versuchen zum Einfluss von Metallen auf die Fullerenbildungsprozesse im Krätschmer-Huffman-Lichtbogen-Verfahren beginnen. Bewaffnet mit Staubschutzmaske, Schutzbrille und Kittel stand ich wochenlang im Ofenraum und fabrizierte unter Anleitung von Peter Jakes fullerenhaltigen Ruß im Grammmaßstab, der dann im "großen chemischen Labor" mit verschiedensten Lösungsmitteln per Soxhlet-Methode extrahiert wurde. Die großen Mengen Ruß sorgten schon Mal dafür, dass nicht nur mein Gesicht am Ende des Tages sehr eingeschwärzt war, weshalb mich ein Doktorand des Nachbararbeitskreises gerne mal "Kleiner, schwarzer Mann" nannte.



**Fullerene** In den frühen 80er Jahren beschäftigten sich zwei Gruppen kooperativ mit der Zusammensetzung von interstellarem Staub, Wolfgang Krätschmer von MPI f. Kernphysik in Heidelberg und Donald Huffman von der Universität Tucson/Arizona. Da bekannt war, dass der Staub hauptsächlich aus Kohlenstoff bestand, bauten sie eine Lichtbogenapparatur auf, bei der zwei Graphitstäbe unter Vakuum mit hohem Strom verdampft werden. Der entstehende C-Gasstrom wird dabei durch Helium geleitet, abgekühlt und niedergeschlagen. Sie fanden im Massenspektrum zwei „Höcker“, die sie jedoch Verunreinigungen zuschrieben, sie nannten diese Probe „Kamelhöckerprobe“. Seit den Siebzigern beschäftigte sich Harry Kroto von der Sussex University mit der chemischen Analyse des Alls, spezialisiert auf so genannte Polyincyanide. Er reiste an die Rice University, um dort zusammen mit Richard Smalley und Robert Curl Kohlenstoff mit einem Laser zu verdampfen, den sie mit verschiedenen Gasen kühlten und dann ein Massenspektrum aufnahmen. Mit dem Kühlgas Helium zeigten sich zwei besonders markante Peaks bei 720 und 840 m/z. Obwohl Smalley wegen seinen geplanten Germanium-Experimenten nur wenig Zeit hatte, setzte sich Curls Idee durch, Parameter zu suchen, bei denen die Peaks maximal sind. Die Forscher dachten an eine Käfigstruktur, mit der sich die hohe Stabilität bedingt durch die großen Peaks erklären lassen sollte. Aufgrund der Massenzahlen, sollte es sich um Cluster mit 60 bzw. 70-Kohlenstoffatomen handeln. Kroto

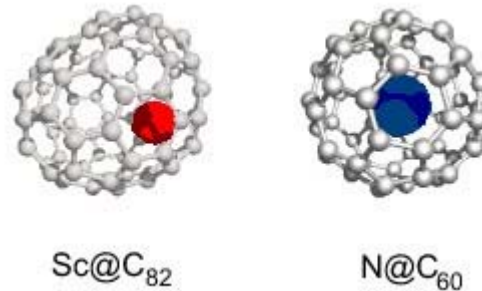
erinnerte sich an die Bauten von Richard Buckminster Fuller zur Weltausstellung in Montreal 1967 und an Modelle, die er mit seinem Sohn gebaut hatte, da die Modelle in England waren, versuchte er sie zu rekonstruieren. Nach langer Überlegung, erinnerte er sich, dass einfache Sechsecken nur planare Oberflächen bilden, zur Krümmung benötigte er Fünfecke. Nach einer Nacht kam er zu einem Modell mit sechzig Ecken, er schickte ein Bild an einen befreundeten Mathematiker und bat um eine mathematische Beschreibung, der einfach mit „Fußball“ antwortete.

Huffman las die Veröffentlichung und plante, die Experimente von 82 zu wiederholen. 1989 wurden sie dann am MPI Heidelberg durch Kosta Fostiropoulos und einem unb.

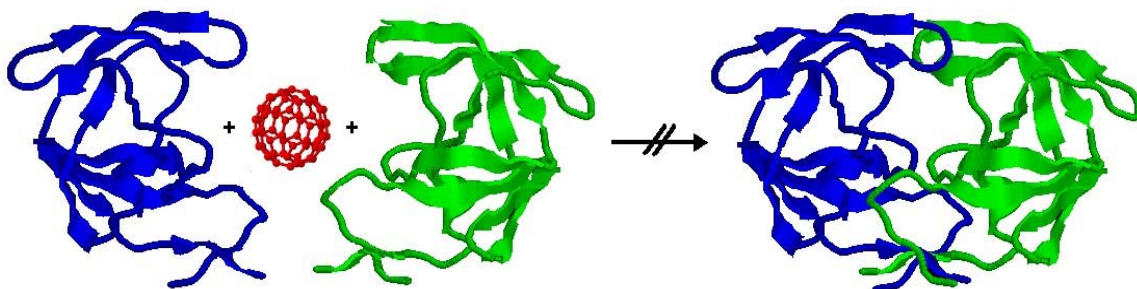
Lehramtsstudenten wiederholt und der entstandene Ruß, der 10% Fullerene enthalten sollte, wurde in Benzol gelöst. Eine rotviolette Lösung entstand über Nacht; nach der spektroskopischen Charakterisierung per UV-vis- und IR-Spektroskopie wurden die

Ergebnisse veröffentlicht, die nun jedem Labor die Teilnahme an der Fullerenforschung ermöglichen. Kurz nach der Veröffentlichung wurde ein  $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektrum aufgenommen, das die völlige Äquivalenz der 60 Kohlenstoff-Atome bestätigte. Kroto formulierte das Stabilitätskriterium IPR. Die „isolated pentagon rule“, nach der ein Fulleren nur stabil ist, wenn die Fünfecke an allen Seiten von Sechsecken abgeschlossen sind. Das kleinste Fulleren, das diese Regel erfüllt ist das  $\text{C}_{60}$  mit 12 Fünfecken und 20 Sechsecken, danach folgt das  $\text{C}_{70}$ . Der eigentliche IUPAC-Name des  $\text{C}_{60}$  wäre

[29.29.0.0.2,14.0<sup>3,12</sup>.0<sup>4,59</sup>.0<sup>5,10</sup>.0<sup>6,58</sup>.0<sup>7,55</sup>.0<sup>8,53</sup>.0<sup>9,21</sup>.0<sup>11,20</sup>.0<sup>13,18</sup>.0<sup>15,30</sup>.0<sup>16,28</sup>.0<sup>17,25</sup>.0<sup>19,24</sup>.0<sup>22,52</sup>.0<sup>23,50</sup>.0<sup>26,49</sup>.0<sup>27,47</sup>.0<sup>29,45</sup>.0<sup>32,44</sup>.0<sup>33,60</sup>.0<sup>34,57</sup>.0<sup>35,43</sup>.0<sup>36,56</sup>.0<sup>37,41</sup>.0<sup>38,54</sup>.0<sup>39,51</sup>.0<sup>40,48</sup>.0<sup>42,46</sup>]hexaconta-1,3,5(10),6,8,11,13(18),14,16,19,21,23,25,27,29(45),30,32(44),33,35(43),36,38(54),39(51),40(48),41,46,49,52,55,57,59-triaconten, da dieser zu kompliziert ist, nutzt man den Trivialnamen Buckminsterfulleren bzw. gibt einfach  $\text{C}_{60}$  an.



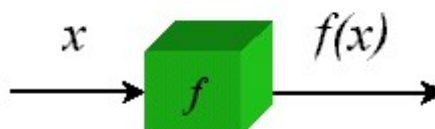
Der physikalischen Chemie untreu wurde ich, als ich mit der Synthese eines neuen wasserlöslichen Fulleren-Derivats anfang, dieses auf Cytotoxizität mit sogenannten HeLa-Zellen (Gebärmutterkrebszellen) und schließlich auf Inhibition der Protease des HIV testete. Dazu durfte ich Ende 2001 eine Woche am Pharmaforschungszentrum der Bayer AG in Wuppertal verbringen. Das Derivat war zwar neu und die Tests hatten mir viel Wissen und Erfahrungen eingebracht, doch interessierten mich nun eher Fragestellungen, die noch kaum oder nicht ausreichend bearbeitet wurden. Als problematisch stellte sich jedoch die Literaturrecherche heraus, so ließ ich eine Probe des endohedralen Fullerenes  $\text{La@C}_{82}$  am Forschungsreaktor TRIGA Mainz bestrahlen, um herauszufinden, ob die Neutronenaktivierung des Lanthans-139 zu La-140 oder der anschließende Beta-Zerfall zu Ce-140 eine Zerstörung des Käfigs verursacht. Nachdem der Käfigzerfall zumindest in nennenswerten Mengen ausgeschlossen war, dachte ich an eine Verwendung als Radiotracer. Dabei wäre besonders die chemische Isolierung des eingeschlossenen Nuklids interessant gewesen, die auch als Matrix für eine chemische Funktionalisierung dienen könnte. Allerdings hätte dieses System aufgrund der begrenzten Bandbreite der dadurch erzeugbaren Isotope innerhalb des Käfigs gegen die etablierte Tc-99m-Methode keine Chance. Eine zweite Literaturrecherche ergab mittlerweile, dass ein derartiger Ansatz bereits vor zwei Jahren verfolgt wurde.



Da die Arbeitsgruppe um Professor Dinse sich schon seit einigen Jahren mit Elektronenspinresonanz-Experimenten an dem System  $\text{N@C}_{60}$  beschäftigt, sah ich einige interessante Fragestellungen, die

besonders in Hinblick auf die mögliche Realisierung eines Quantencomputers durch die Berliner HMI-Gruppe um Prof. Weidinger und Dr. Harneit interessant sind. Unter anderem versuchte ich einen effektiveren Weg zur Synthese des Fulleren-Dimers zu finden, was mit der Übertragung der simplen Wittig-Reaktion gelang. Viele Stunden verbrachte ich auch vor der HPLC bzw. dem ESR-Spektrometer, denn sehr viele einfache Derivate (wir vernachlässigen die langweilige Malonatchemie...) führen zu einer starken Verbreiterung des Signals, was wiederum dazu führt, dass es wegen den niedrigen Stoffmengen höchst schwierig ist, überhaupt ein Signal zu detektieren.

**Quantencomputing** Man teilt in der Mathematik nach der Komplexitätstheorie Aufgaben in die Bereiche Leicht und Schwer. Leicht heißt dabei, dass eine Lösung in wenigen Rechenschritten möglich ist. Ein schweres Problem ist z.B. die Faktorisierung einer Zahl  $N$ ; man benötigt sehr lange um  $P, Q$  aus  $N=PQ$  zu finden. Auf diesem Problem beruht der RSA-Algorithmus zur sicheren Verschlüsselung im Rahmen der public key codes. Peter Shor hat 1994 einen Algorithmus entwickelt, der das Faktorisieren einer großen Zahl (es werden üblicherweise Zahlen mit hunderten von Stellen gebraucht) nun erheblich erleichtert und das „Knacken“ von verschlüsselten Daten ermöglicht, sofern ein sog. Quantencomputer zur Verfügung steht. Ein Quantencomputer nutzt nun die Eigenschaft einer möglichen Superposition von z.B. Spins. Daraus ergeben sich die kleinsten Informationseinheiten, die sog. Quantum Bits (Qubits) analog zum Bit. Ein Qubit ist natürlich zu wenig, um damit eine sinnvolle Rechnung durchführen zu können, daher führt man mehrere dieser in einem Register zusammen. Das Gatter ist nun die eigentliche Operation, um einen Quantencomputer zu bauen benötigt man grundsätzlich nur zwei verschiedene dieser Elementaroperationen, das NOT- und das C-NOT-Gatter. Beim NOT-Gatter werden die Qubits invertiert, das Controlled-NOT-Gatter nutzt zusätzlich ein Control-Qubit und nur an dem ersten Qubit wird manipuliert. Ein Programm ist dann die Abfolge mehrerer Gatter-Operationen. Zunächst muss man aber die Präparation von Zuständen vornehmen, den so genannten Input, die Messung der Register nach einem Programm nennt man Output. Auch wenn der Quantencomputer vielleicht nicht als Quanten-PC nutzbar sein wird, da er zur Zeit noch auf wenige Spezialprobleme beschränkt ist, ist eine Entwicklung doch nötig, um nach einem Stagnieren der Minimalisierung im Computerbau, wenn es bereits in den Bereich der Quanteneffekte kommt, ein weiteres alternatives System zur Verfügung zu haben.



Die endohedralen Fullerene  $N@C_{60}$  und  $P@C_{60}$  eignen sich nun besonders gut, da sie hohe Spinlebensdauern (lange Relaxationszeiten) besitzen und damit auch hohe Kohärenzzeiten aufweisen, die für eine Realisierung des QC nötig sind. Eine Ansteuerung der Zustände kann problemlos über die einzelnen Resonanzfrequenzen geschehen, eine beliebige Erweiterbarkeit ist zur Zeit nur mit dem Festkörperansatz denkbar, der zur Erprobung des Systems mit ersten Rechenoperationen gedachte Ansatz des doppelt-stickstoff-gefüllten Dimers ist nicht erweiterbar. Am Beispiel des einfachen Epoxids kann nun angenommen werden, dass  $N@C_{60}O$  aufgrund von rapid-moving-Effekten des Sauerstoff-Atoms auf der Oberfläche sehr schnell relaxiert und diese Spezies von der ESR nicht erfasst werden kann.

Zur Zeit beschäftige ich mich mit dem potentiellen System  $N@Nanotube$ , das möglicherweise dargestellt werden kann, wozu derzeit die noch zur Darstellung von stickstoffendohedralen Fullerenen genutzte Plasmarohranlage erprobt wird. Zusätzlich darf ich dankenswerterweise den Hochleistungsparallelrechner des DZWR zur Simulation des Stickstoffaustrittsmechanismus an der Kohlenstoffwand mit dem Programmpaket Gaussian 98 und MNDO/PM3 nutzen, um die Eigenschaften der stickstoffgefüllten Nanotubes mit denen der bereits gerechneten Fullerene zu vergleichen. Geplant ist, diese Arbeiten als besondere Lernleistung im Rahmen der im Jahr 2005 anstehenden Abiturprüfungen anrechnen zu lassen.

Nach dem hoffentlich erfolgreichen Erreichen des Abiturs strebe ich an, ein Chemie-Studium mit anschließendem Nebenstudium der Betriebswirtschaftslehre zu absolvieren. Trotz der betriebswirtschaftlichen "Einlage" möchte ich jedoch später nicht als Wirtschaftskemiker tätig sein, sondern nach meiner Promotion gerne die akademische Laufbahn einschlagen.

Weitere Informationen unter  
[www.chemie.tu-darmstadt.de/PCIII/jeff](http://www.chemie.tu-darmstadt.de/PCIII/jeff)

