

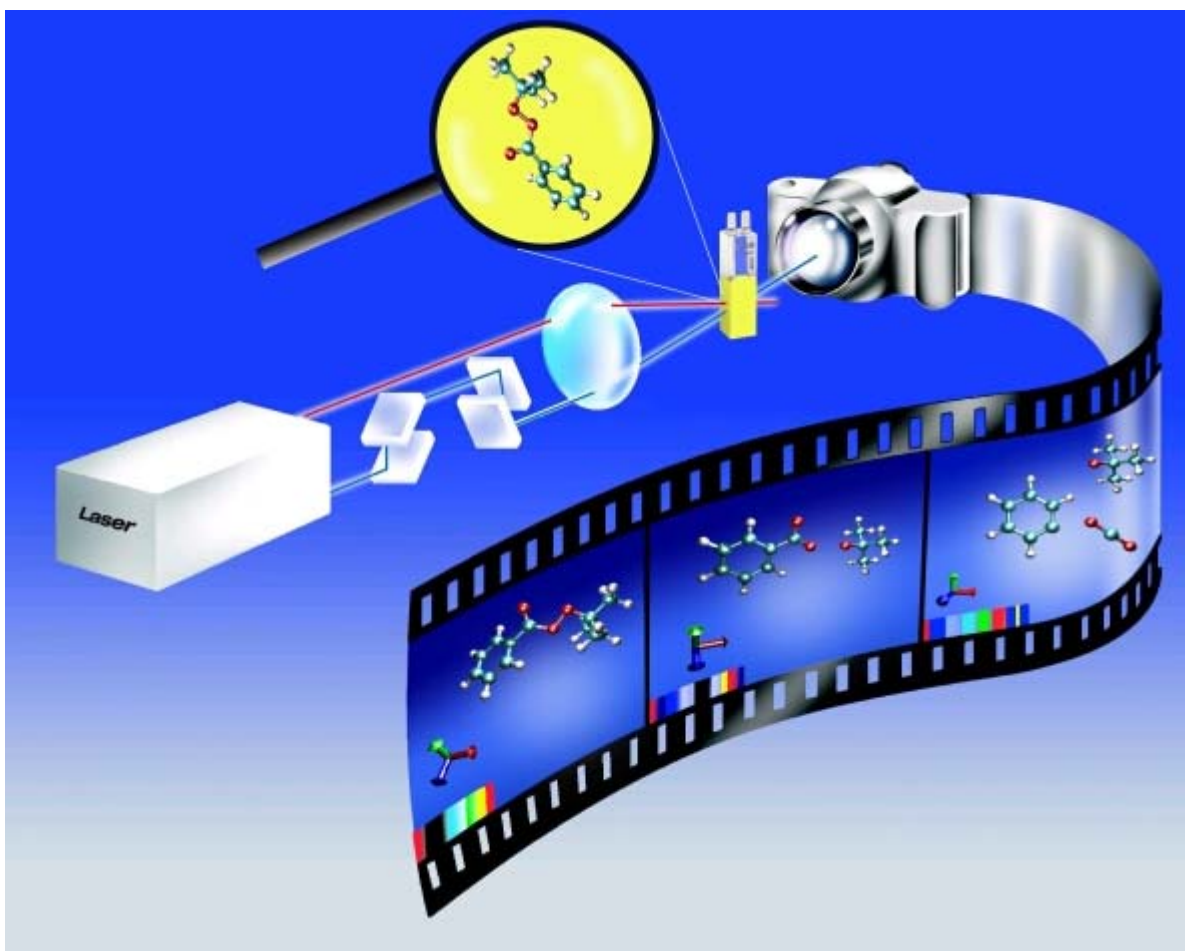
# Momentaufnahmen vom Tanz der Moleküle in chemischen Reaktionen

## Wie schnell laufen chemische Reaktionen ab und wovon hängt ihr Ausgang ab?

Unsere Erfahrung zeigt, daß Geschwindigkeiten chemischer Reaktionen sehr unterschiedlich sein können. Man vergleiche dazu nur einen rostenden Nagel oder die Explosion einer Knallgasmischung! Wir beobachten dabei oft, daß die Moleküle in einer Reaktion erst über eine Energieschwelle angeregt ("aktiviert") werden müssen, damit die Reaktion merklich einsetzt. Dies kann im Prinzip durch Wärme oder Licht geschehen. Setzt die Reaktion schließlich ein, läuft sie vielfach so schnell ab, daß sie sich unserer direkten Beobachtung entzieht. Für den Beobachter ist oft nur das Endresultat - das Produkt - erkennbar und detektierbar, während die Details und der molekulare Ablauf den Wissenschaftlern oft verborgen bleiben.

Es ist lange bekannt, daß die Ausbeuten, Geschwindigkeiten und Mechanismen chemischer Reaktionen von der "Begegnung", der molekularen Umgebung und von allen möglichen Konkurrenzprozessen abhängen (siehe Wochenschau der Abt. Troe). Dies heißt jedoch nicht, daß die teilweise komplexen molekularen Details - vor allem in Lösung - hinreichend verstanden sind!

Die Geschwindigkeit einer Reaktion kann - je nach Reaktionsbedingungen - sehr stark variieren. Die schnellsten Reaktionen laufen allerdings auf der Zeitskala der Bewegung der Atome der reagierenden Moleküle ab.



*Abb.1 Stark vereinfachtes Schema eines Experiments zur zeitaufgelösten Messung des Zerfalls eines organischen Peroxids (=Initiator in Polymerisationsreaktionen) in Lösung.*

## Kann man chemische Reaktionen in Echtzeit messen?

Moleküle bewegen sich im allgemeinen so schnell, daß wir sie normalerweise nicht wahrnehmen können. Stellen wir uns einmal vor, wir könnten den Ablauf einer chemischen Reaktion auf der molekularen Ebene in Zeitlupe sehen! Man kann sich dabei heutzutage der Ultrakurzzeitspektroskopie bedienen, die man in gewisser Weise mit einer sehr schnellen Kamera auf molekularer Ebene vergleichen kann. Dabei werden extrem kurze Laserblitze für die "Zündung" und "Abfrage" der Reaktion mit Zeitauflösungen im Bereich von etwa 50-100 Femtosekunden (fs) ausgenutzt, die es gestatten, Ereignisse auf der Zeitskala der Bewegung der Atome von Molekülen zu messen. Eine Femtosekunde entspricht dabei genau 0,000000000000001 Sekunden. Vorstellbar wird dieser kurze Bruchteil einer Sekunde vielleicht erst, wenn man sich klarmacht, daß er einer Zeit von einer Sekunde in 32 Millionen Jahren entspricht! Im Gegensatz zu einer Aufnahme eines echten "Films" einer chemischen Reaktion mit einer Kamera werden bei der Femtosekundenspektroskopie nicht die Bilder der Atome und Moleküle selbst aufgenommen, sondern spektrale Änderungen. Sie sind detektierbar mit Hilfe der Absorption von Licht, hervorgerufen durch die sich verändernden oder verschwindenden Moleküle aber auch durch konzertierte "Bewegungen" der aktivierten Moleküle während einer chemischen Transformation. Als "Observable" dient oft die Abschwächung der Lichtblitze in der Probe. Diese optische Meßgröße ist in jedem Fall ein direktes Maß für den Fortschritt der chemischen Reaktion und die Dynamik auf der kurzen Zeitskala der Reaktion. Die "Bilder" der Reaktion ergeben sich meist nicht direkt aus dem Experiment, sondern indirekt durch ausgeklügelte Auswertungen der Messungen und durch einen Vergleich mit theoretischen Berechnungen der Dynamik im Computer.

## Kurzzeitspektroskopie mit sehr kurzen Wellenlängen: die ultimative "Kurzzeitkamera" der Zukunft?

Mit moderner Ultrakurzzeitspektroskopie lassen sich heute schon viele Elementarprozesse von chemischen Reaktionen (auch in Lösung) im Detail untersuchen. Sie liefert jedoch keine echten Bilder der Moleküle und keinen Film der chemischen Reaktion. Dies könnte sich jedoch in der Zukunft ändern, wenn man sehr kurzwellige Strahlung (z.B. Röntgenstrahlung) zur Untersuchung von chemischen Elementarreaktionen verwendet.

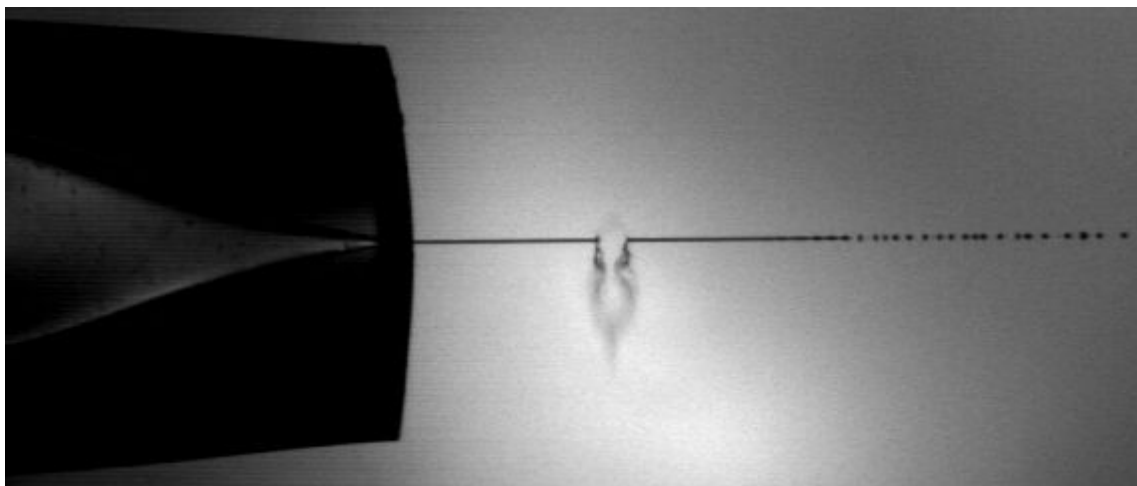


Eine Analyse der Röntgenstrahlbeugung kann (unter günstigen Bedingungen) echte dreidimensionale Strukturen von Molekülen liefern. Es liegt deshalb nahe, gepulste Röntgenstrahlung in Ultrakurzzeitexperimenten einzusetzen, um bessere "Bilder" und Detailinformationen von reagierenden Molekülen auf chemisch relevanten Zeitskalen zu erhalten. Da die Wellenlänge des Röntgenlichts viel kürzer als die des sichtbaren Lichts ist, kann man mit der Röntgenmikroskopie viel kleinere Objekte auflösen als mit "normalen" Mikroskopen.

---

## "Schnappschüsse" von Biomolekülen in Lösung?

Große Biopolymere, organische Moleküle und Ionen in Lösung lassen sich ebenfalls durch schnelle laserinduzierte Flüssigstrahldesorption in Kombination mit hochauflösender Massenspektrometrie untersuchen. Mit dieser neuartigen Technik, die vor einigen Jahren von Brutschy und Mitarbeitern eingeführt wurde, ist es heute möglich, Moleküle in Lösung in der Gasphase mit Hilfe der Massenspektrometrie zu untersuchen. Dabei wird ein Infrarot-Laserstrahl auf die Absorption des flüssigen Wassers abgestimmt und auf den Mikro-Wasserstrahl im Vakuum (Strahldurchmesser: 10-15 Mikrometer) fokussiert. Dabei wird die Energie des Laserpulses absorbiert und der Wasserstrahl explodiert im Fokus des Lasers. Durch Optimierung der Laserparameter (Wellenlänge, Intensität) und der Flüssigkeitsparameter (Temperatur, pH-Wert) können in diesem Prozeß neutrale Moleküle, nicht kovalent gebundene Komplexe und vorgebildete Ionen auf sehr schonende Weise freigesetzt werden. Besonders wertvoll ist die Methode, wenn in diesem Prozeß protonierte Biomoleküle, geladene Aggregate oder Ionen selbst freigesetzt werden können. In diesem Fall ist eine Ionisierung der Moleküle mit einem zweiten Laser nicht notwendig, eine Fragmentierung der labilen Biopolymere oder deren empfindlichen Komplexe unterbleibt. Auch ist es denkbar, daß ionische Reaktionen in Lösung mit dieser Technik in der Gasphase untersucht werden können.



**Abb.2** Die Abbildung zeigt eine Aufnahme (50ns Zeitauflösung) eines Mikroflüssigkeitsstrahls (Lösungsmittel: Wasser) mit einer Hochgeschwindigkeitskamera. Der Flüssigkeitsstrahl mit einem Durchmesser von etwa 15

*Mikrometern wird von einem fokussierten Infrarot-Laserstrahl getroffen. Er "explodiert" sofort, setzt dennoch sehr schonend Ionen und niedrig geladene Ionen-Biomolekül-Aggregate frei, die anschließend massenspektrometrisch untersucht werden können.*

Einsatzbereiche der Technik sind u.a. die Wasseranalytik, die Grundlagenforschung (Präparation und Spektroskopie von Biomolekülen), die Analytik von Biomolekülen (Peptide, Proteine, DNA) sowie die Optimierung von Wirkstoffen in der Pharmaforschung.

---

## **Reaktionen unter exotischen Bedingungen beobachten: Chemie in der Atmosphäre und in interstellaren Wolken**

Für praktische Anwendungen ist es oft wichtig, Geschwindigkeiten und Mechanismen chemischer Reaktionen unter exotischen oder extremen Bedingungen (Druck, Temperatur) zu untersuchen. Für die Atmosphärenchemie und die Chemie in interstellaren Wolken spielen Reaktionen in der Gasphase bei (sehr) tiefen Temperaturen eine wichtige Rolle.



*Abb.3 Für die zeitaufgelöste Messung von Reaktionen bei (sehr) tiefen Temperaturen im Labor können Lavaldüsenexpansionen eingesetzt werden, die einzigartige thermische Bedingungen bis in den Bereich um 7-10K ermöglichen.*

---

## **Grundlagenforschung öffnet Türen für neue Technologien und Anwendungen!**

Viele Techniken und Verfahren, die zunächst innerhalb der Grundlagenforschung entwickelt wurden, sind Ausgangspunkte für neue Technologien und "Kondensationskeime" für Firmen. Die fertigen Produkte helfen schließlich bei der Lösung von Problemen, die uns alle betreffen.

Neue technologische und **industrierelevante Entwicklungen** mit erheblichem Anwendungspotential aus dem Institut für Physikalische Chemie in Göttingen werden auf der diesjährigen **Industriemesse in Hannover** vorgestellt.

---

## **Achtung Schüler und Lehrer!**

An mehreren über das Jahr verteilten Terminen (nach Absprache, jedoch vorzugsweise in der vorlesungsfreien Zeit) können Schüler und Lehrer im Rahmen des X-LAB-Projektes in Göttingen Versuche über spannende Themen der Physikalische Chemie und über Laseranwendungen in der

Chemie (s.o.) selbst durchführen und so die Faszination der angewandten physikalischen Chemie erleben.

Das X-LAB, ein Experimentierlabor für die Fächer Biologie, Chemie, Physik und Informatik bietet Schülerinnen und Schülern hervorragende Möglichkeiten, spannende naturwissenschaftliche Experimente durchzuführen und so in Verbindung mit aktueller Forschung neue Möglichkeiten des Experimentierens zu erschließen.

Viele Göttinger Arbeitsgruppen (u.a. auch die Arbeitsgruppe Abel) bieten in diesem Rahmen Projekte an.

Infos unter <http://www.xlab-goettingen.de>

**Wenn Sie neugierig geworden sind und mehr über diese Themen wissen möchten, klicken Sie hier!**

#### **Ansprechpartner:**

Prof. Dr. Bernd Abel

Email: [babel@gwdg.de](mailto:babel@gwdg.de)

Institut für Physikalische Chemie der Universität Göttingen

Tammannstrasse 6

37077 Göttingen