

MO  
LE  
KU  
LA  
RE

ÄSTHETIK

MOLEKULARE ÄSTHETIK

# CHEMIE ODER DIE LIEBE ZUR GEOMETRIE

PETER COMBA

**Moleküle sind Kunstwerke. Dort, wo man sie strukturell fassen kann, sind sie wie Skulpturen. Wie in der Architektur folgt ihre Funktionalität der Form und der zugrunde liegenden Konstruktion. Starr, so wie wir Moleküle in Strukturformeln zeichnen, sind sie nie. Es gibt sogar Moleküle, bei denen es wie bei Amöben kaum gerechtfertigt ist, von Struktur im eigentlichen Sinne zu sprechen. In der Form und Dynamik der Moleküle liegt ihre Funktion verborgen. Die Formelsprache, die Sprache der Modelle, bringt Ordnung in die Welt der Chemie und hilft uns, diese Zusammenhänge zu verstehen.**

# N

Nach einer anstrengenden und aufregenden Woche in meinem ersten Forschungspraktikum – anorganische Chemie, sechstes Semester – unterhielt ich mich am Wochenende während der Fahrt im Zug zurück nach Hause mit einem ehemaligen Mitschüler, einem Maschinenbaustudenten. Ich berichtete ihm, warum mich mein Praktikum, das Studium der Chemie insgesamt so fasziniert. Gerade hatte ich zwei neue Verbindungen synthetisiert, zwei Kobaltkomplexe, rot der eine, violett der andere, je 100 oder 200 Milligramm, rein und eindeutig charakterisiert, in kleine Fläschchen abgefüllt – meine ersten neuen Verbindungen, Materialien, die die Welt vorher nicht kannte.

Synthetisch arbeitende Chemiker machen das immer wieder: Es ist unsere tägliche Arbeit, neue Verbindungen, Materialien, Wirkstoffe zu erfinden, herzustellen und zu untersuchen. Es gibt keine Wissenschaft außer der Chemie, in der dies so konsequent geschieht. Wenn ein Biologe Gene verändert und daraufhin andere Proteine entstehen – auch veränderte Gene und Proteine sind neue Moleküle –, ist das Chemie an biologischen Systemen, Molekularbiologie also. Und wenn Physiker neue Materialien produzieren und untersuchen, ist die Herstellung der chemische Teil ihrer Projekte.

Synthetische Chemiker sind Erfinder, Handwerker und Produzenten neuer Stoffe. Erfolgreich sind sie dann, wenn sie sich die richtigen Fragen stellen und wenn sie Verbindungen planen, erfinden und mit handwerklichem

# „Bindungen sind räumlich gerichtet, jeder Verknüpfungspunkt ist ein Konstruktionselement für die Architektur des Moleküls. Daraus ergibt sich die Geometrie von Verbindungen.“

Geschick produzieren, die Wissenschaft und Gesellschaft weiterbringen. Dafür von größter Bedeutung ist die Struktur, die Geometrie und Form der Moleküle. Ebenso wichtig sind Beziehungen zwischen Struktur und molekularen Eigenschaften, zwischen Form und Funktion. Nur mit der richtig gewählten und der richtig konstruierten Struktur wird die Substanz die gewünschten Eigenschaften erhalten. Mein Mitschüler konnte meine Begeisterung für die Chemie spüren. Für ihn war aber die Chemie in der Schule ein Buch mit sieben Siegeln, und so war es zu einem großen Teil geblieben. Vielen Menschen, mit denen ich mich über meine Arbeit unterhalte, geht es ebenso.

## Die Sprache der Chemie

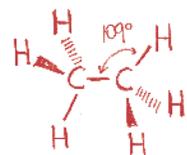
Meist hat dies damit zu tun, dass die Sprache der Chemie nicht verstanden wird. Wie kann ich etwas durchdringen, Fragen stellen und Antworten suchen, wenn mir die Sprache dazu fehlt? Eine wichtige Grundlage der chemischen Sprache sind Strukturformeln von Molekülen: Zwei Kohlenstoffatome, die ein Strich miteinander verbindet (Einfachbindung), tragen jeweils drei Wasserstoffatome; doppelgebundene Kohlenstoffatome haben je zwei und dreifachgebundene Kohlenstoffatome je ein zusätzliches Wasserstoffatom, das sie an sich binden - von einem Kohlenstoffatom gehen immer vier Striche aus. Bei Dreifachbindungen ist jeder Wasserstoff in einem Winkel von 180 Grad an die  $C \equiv C$  Einheit gebunden, bei Doppel-

**„Nur mit der richtig gewählten und der richtig konstruierten Struktur wird die Substanz die gewünschten Eigenschaften erhalten.“**

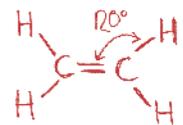
bindungen beträgt der Winkel zwischen dem  $C = C$  Fragment und jedem Wasserstoff 120 Grad, bei Einfachbindungen sind die  $H - C - C$  Winkel 109 Grad.

Bindungen sind räumlich gerichtet, jeder Verknüpfungspunkt ist ein Konstruktionselement für die Architektur des Moleküls. Daraus ergibt sich die Geometrie, die dreidimensionale Struktur von Verbindungen. Das ist ein wichtiger Teil der Grammatik unserer chemischen Sprache. Wenn eines der beiden Kohlenstoffzentren durch Stickstoff, Sauerstoff oder Chlor ersetzt wird, gibt es an diesem Zentrum ein, zwei oder drei Wasserstoffatome weniger - von Stickstoff gehen drei Bindungen (Striche) aus, von Sauerstoff zwei und von Chlor eine. Man kann dann die zwei Atome (beispielsweise Kohlenstoff und Chlor) nicht mehr drei- oder zweifach, sondern nur noch einfach aneinander binden. Die Art der möglichen Zusammensetzungen, der möglichen Strukturen und der daraus resultierenden

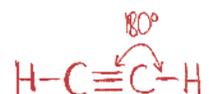
C-C Einfachbindung  
Ethan



C=C Doppelbindung  
Ethen

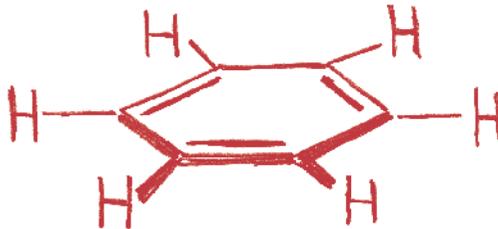


C≡C Dreifachbindung  
Ethin bzw. Acetylen

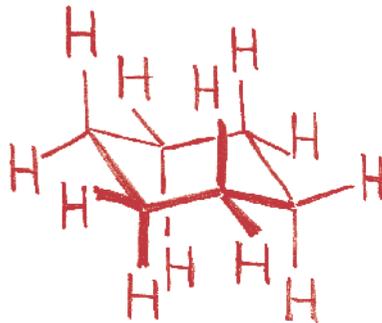


Eigenschaften ist also eingeschränkt. Sie hängt von der Atomsorte ab – und davon gibt es im Periodensystem 115. Der russische Chemiker Dmitri Mendelejew, der 1859 bei dem deutschen Physiker Gustav Kirchhoff in Heidelberg Spektroskopie betrieb, beschäftigte sich mit der Periodizität der Elemente. Auch dies ist ein wichtiger Teil der Sprache der Chemie. Wenn man die chemische Sprache erlernt, lernt man die Konzepte mit. Die Konzepte muss man verstehen: Sie bringen Ordnung in die Welt der Chemie.

**Benzol** Ecken sind C-Atome



**Cyclohexan** Ecken sind C-Atome



### Bilder auf der Basis von Konzepten

Schwierig an den Konzepten der Chemie ist, dass ich das, was ich mit Strukturformeln darstelle, nicht mit meinen Augen sehen kann. Atome, Moleküle und Molekülstrukturen sind nur Bilder auf der Basis von Konzepten, es sind Geschichten, erzählt mit der Sprache der Chemie: Ein flaches, hochsymmetrisches Sechseck steht für Benzol mit je einem Wasserstoff pro Kohlenstoff, und ein sesselförmig gefaltetes Sechseck repräsentiert Cyclohexan mit je zwei Wasserstoffen pro Kohlenstoff – beides sind zyklische Moleküle mit sechs Kohlenstoffatomen, aber ganz unterschiedlichen Eigenschaften.

In der chemischen Sprache, bei chemischen Konzepten und Modellen steht die Struktur im Zentrum: Alle Eigenschaften molekularer Systeme sind abhängig von der Struktur, der Geometrie, der Form der Moleküle. Farben, Reaktivitäten,

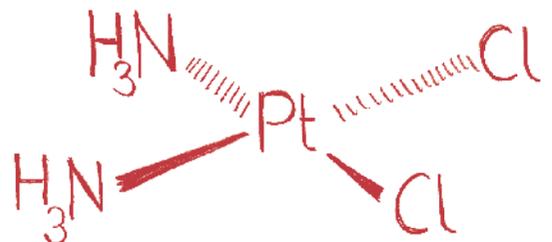
Stabilitäten – alles, was uns an Materialien und Wirkstoffen interessiert wird davon bestimmt. Die Struktur aber, die ich mit der Sprache der Chemie beschreibe, die Struktur und die Sprache, die auf wichtigen Konzepten, Modellen, Theorien beruhen – der Periodizität der Elemente, der Quantenmechanik –, genau diese Struktur kann ich nicht sehen. Ganz abgesehen davon, dass Struktur auf der Basis der Quantenchemie nur durch eine Näherung von Born und Oppenheimer (BO Approximation) definiert ist: Stationäre Punkte auf der Born-Oppenheimer-Hyperfläche (vieldimensionale Fläche) entsprechen Strukturen molekularer Systeme mit einer spezifischen Stabilität.

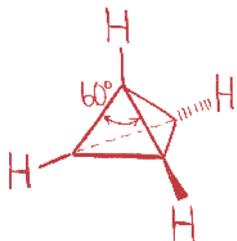
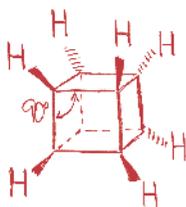
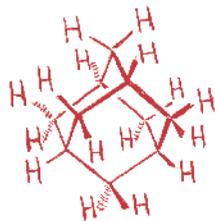
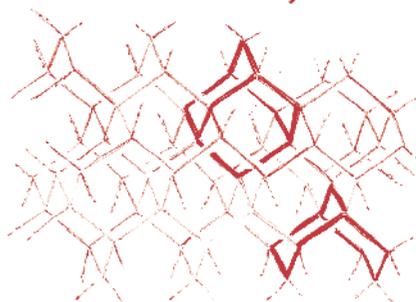
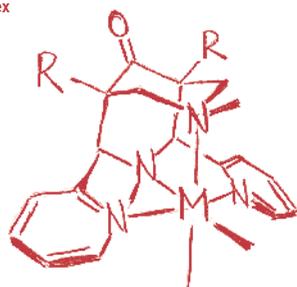
All das macht es Laien schwer, die Sprache der Chemie zu verstehen. Ein minimaler Wortschatz aber ist notwendig, um Konzepte und Modelle, neue Ergebnisse und deren Bedeutung für Wissenschaft und Gesellschaft nachzuvollziehen oder die Schönheit der Chemie zu empfinden – genauso, wie ich nur mit einem zumindest minimalen französischen Wortschatz die Chance habe, das Wesen der Camargue und ihrer Bewohner zu erleben und zu begreifen. Wie hätte sich die Chemie wohl entwickelt, wenn die Väter unserer Wissenschaft, aufbauend auf einem anderen Konzept als dem Strukturkonzept von Lewis, eine ganz andere Sprache entwickelt, dem ursprünglichen Chaos eine andere Ordnung, der Chemie damit eine andere Basis gegeben hätten?

### Die Form bestimmt die Funktion

Eigenschaften sind mit Strukturen korreliert: Stabilitäten, Reaktivitäten, Selektivitäten, elektrochemische, elektronische und spektroskopische Eigenschaften ergeben sich aus der Struktur. Betrachten wir als Beispiel Cisplatin, eine quadratisch planare Platin(II)-Verbindung mit je zwei Chloridionen und zwei Ammoniakmolekülen, die in cis-Geometrie an Platin gebunden sind. „Cis“ bedeutet benachbart, im Gegensatz zu „trans“, gegenüber. Mit nur elf Atomen ist Cisplatin eine sehr einfache Verbindung. Der amerikanische Wissenschaftler Barnett Rosenberg hat vor fast 50 Jahren die zytostatische Wirkung dieser Verbindung entdeckt; Cisplatin ist auch heute noch einer der wichtigsten Wirkstoffe der Krebstherapie.

**Cisplatin**



**Tetrahedran** Ecken sind C-Atome**Cuban** Ecken sind C-Atome**Helvetan** Ecken sind C-Atome, an jedes dieser C-Atome ist noch ein H-Atom gebunden**Israelan** Ecken sind C-Atome, an jedes dieser C-Atome ist noch ein H-Atom gebunden**Adamantan****Diamantenstruktur****Bispidin****Bispidin-Metallkomplex**

Die cis-Anordnung der Ammoniakliganden ist für die Wirkung als Krebsmedikament wichtig, die zwei an das Metallzentrum gebundenen Chloridionen sind es ebenso – die Struktur insgesamt entscheidet über die Funktion von Cisplatin. Die an Platin gebundenen Chloridionen erlauben einen effizienten Transport durch die Zellmembran. Im Innern der Krebszelle wird die Verbindung hydrolysiert – die Chloride werden durch Wasser ( $\text{H}_2\text{O}$ ) und Hydroxid ( $\text{OH}^-$ ) ersetzt. Dies erlaubt eine Bindung an das Erbmolekül DNA. Hierbei spielen auch die beiden cis-ständigen Ammoniakliganden eine Rolle. Schlussendlich ist es die von Cisplatin erzwungene strukturelle Veränderung der DNA, die für das Absterben der Krebszelle verantwortlich ist. Die entsprechende trans-Verbindung ist an entscheidenden Stellen des Wirkmechanismus viel weniger effizient: So wichtig ist die molekulare Struktur einer Verbindung für ihre Funktion.

### Struktur und Stabilität

Wie ästhetisch und funktional vielfältig chemische Strukturen sein können, sieht man an den „Käfigverbindungen“ der Kohlenwasserstoffe: Wie bei einem Vogelkäfig umschließt das Kohlenwasserstoffgerüst bei Käfigverbindungen einen strukturierten Innenraum. Tetrahedran ( $\text{C}_4\text{H}_4$ ) und Cuban ( $\text{C}_8\text{H}_8$ ) gehören als platonische Körper zu den Klassikern. Attraktiv und aufregend ist auch das Paar Helvetan und Israelan: Beide haben die gleiche Zusammensetzung ( $\text{C}_{24}\text{H}_{24}$ ), sie sind also zueinander isomer und stellen unterschiedliche Minima auf der gleichen Energiehyperfläche dar. Der Organiker Albert Eschenmoser hat die Stabilität der beiden Verbindungen untersucht und ist zum Schluss gekommen, dass Helvetan stabiler ist.

Die Käfigverbindung Adamantan ( $\text{C}_{10}\text{H}_{16}$ ) entspricht einem Ausschnitt des Diamantgitters und ist viel stabiler als Tetrahedran, Cuban, Helvetan und Israelan: Um jedes Kohlenstoffatom besitzt es den für Einfachbindungen idealen Winkel von 109 Grad – ein gutes Beispiel dafür, wie die Struktur die Stabilität einer Verbindung bestimmt.

Abkömmlinge des Kohlenwasserstoffs Adamantan sind die Bispidine: Sie stellen Metallionen zwei Amine (Stickstoffdonoren) und je nach Verbindung noch weitere Atome zur Komplexbildung zur Verfügung. Eine wichtige Eigenschaft von Adamantan und Diamant haben auch die Bispidine: Sie sind äußerst stabil und starr und zwingen den Metallzentren ihre Struktur gleichsam mit eiserner Faust auf. Von den Metallzentren geht bei derartigen Verbindungen zwischen Metallionen und organischen Molekülen (Liganden) die Reaktivität aus. Mit Liganden wie den Bispidinen kann man die Struktur um die Metallzentren modulieren und damit die Eigenschaften, Reaktivitäten, Stabilitäten, Selektivitäten der entstehenden Verbindung nach Wunsch beeinflussen. Auch an diesem Beispiel zeigt sich: Struktur bewirkt Funktion.

CHEMISTRY OR THE LOVE OF GEOMETRY

# MOLECULAR AESTHETICS

PETER COMBA

Molecules are works of art. Whenever we catch a glimpse of their structure, they seem like sculptures to our eye. As in architecture, their properties – colours, reactivity, stability – follow their shape and underlying construction. They are never as rigid as we draw them in structural formulas. There are even molecules that, much like amoebas, have no structure in the stricter sense. A molecule's function is determined by its shape and dynamics. The language of formulas and models brings order to the world of chemistry and helps us understand these relationships.

No wonder, then, that the concept of molecular structure is of fundamental importance in chemistry and forms the basis of the chemical language. The difficult part in learning this language is that molecular structure, for instance the position of the molecules' constituents, the atoms, is not visible to the human eye. It is a language based on concepts and models that we need to know in order to appreciate the importance and beauty of chemistry and the relevance of recent discoveries for science and society.

A major part of this essay deals with the relation between structure and stability of simple organic molecules, such as the carbohydrate cages tetrahedrane, cubane, helvetane and israelane, which are severely strained, in contrast to the diamond structure derived adamantane. It is shown that bispidines are derived from this very rigid diamond structure and hence exhibit interesting properties when bound to metal ions: they are able to impose specific structures on the ions, allowing us to design specific properties into these metal-based compounds. The flexibility of molecular structures is also of importance, as evidenced by the copper chemistry of natural cyclic peptide molecules that are found in ascidians in the Pacific and the Indian Ocean: these copper compounds are very efficient carbonic anhydrase catalysts and may help the ascidians to transport and activate  $\text{CO}_2$  for photosynthesis. ●

**“As equal parts architects and craftsmen, chemists build the structure of a compound and thereby determine its function.”**

PROF. DR. PETER COMBA has been teaching and conducting research at Heidelberg University's Department of Inorganic Chemistry since 1992. He is the Director of the International Science Forum (IWH) and serves on the Directorate of the Interdisciplinary Center for Scientific Computing (IWR) of Heidelberg University. Born in Switzerland, Prof. Comba has worked as a researcher at the Australian National University in Canberra, the University of Lausanne and the University of Basel. He was a guest scientist at the University of Tasmania, the Australian National University and the University of Queensland in Australia, the University of Pretoria and the University of Osaka. Peter Comba's particular research interest lies in transition metal compounds. Application areas of his research include catalysis, molecular magnetism, and biological and medicinal chemistry.

Contact: [peter.comba@aci.uni-heidelberg.de](mailto:peter.comba@aci.uni-heidelberg.de)

### Schlüsseltechnologie des 21. Jahrhunderts: das Wissenschaftliche Rechnen

Das Interdisziplinäre Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen (IWR) wurde im Jahr 1987 als das bundesweit erste universitäre Forschungszentrum seiner Art gegründet. Die Forscher am IWR befassen sich mit Fragestellungen aus Natur-, Technik- und Geisteswissenschaften und bearbeiten sie mit dem Methodenrepertoire des Wissenschaftlichen Rechnens: der mathematischen Modellierung, Simulation und Optimierung, der Bild- und Datenverarbeitung sowie der Visualisierung. Als Querschnittsdisziplin trägt das Wissenschaftliche Rechnen entscheidend zur Lösung anspruchsvoller Probleme aus Wissenschaft und Technik bei und gilt damit als eine Schlüsseltechnologie des 21. Jahrhunderts. Seine Methoden kommen bei so unterschiedlichen Fragestellungen zum Einsatz wie dem Entwurf effizienter Brennstoffzellen, dem Design neuer Wirkstoffe, der Prognose des Pestizidabbaus im Boden oder etwa der Rekonstruktion antiker Papyrusfragmente.

Das IWR umfasst heute mehr als vierzig Forschungsteams aus den unterschiedlichsten Fakultäten sowie zahlreiche von jungen Wissenschaftlern geführte Nachwuchsgruppen. Rund sechshundert Forscherinnen und Forscher arbeiten im Rahmen des Zentrums in interdisziplinären Kooperationen zusammen. Neben Mathematik, Physik, Chemie und Informatik sowie den Lebenswissenschaften sind hier zunehmend auch die Wirtschafts- und Sozialwissenschaften, die Psychologie, die Kognitionswissenschaften sowie die Geistes- und Kulturwissenschaften vertreten. Die Infrastruktur des IWR, auf die die Forscher zurückgreifen können, umfasst unter anderem Hochleistungsrechner, 3D-Graphiklabore sowie spezielle Laser-Scanner. Auf Initiative des IWR entstand 2007 die „Heidelberger Graduiertenschule der mathematischen und computergestützten Methoden in den Wissenschaften“ (HGS MathComp), die in der Exzellenzinitiative gefördert wird. Hier forschen derzeit gut 150 Doktoranden aus allen am Zentrum vertretenen Fächern.

[www.iwr.uni-heidelberg.de](http://www.iwr.uni-heidelberg.de)

### Schwerpunkt der Heidelberger Forschung

Gleichermaßen Architekt und Handwerker, plant und baut der Chemiker die Struktur einer Verbindung und bestimmt dadurch ihre Funktion. Unsere Arbeitsgruppe in Heidelberg ist vor allem an der Chemie der Übergangsmetallverbindungen interessiert. Das chemische Spiel, das wir betreiben, ist immer das gleiche: Wir „quetschen“ das

Metallzentrum mit den Liganden in einer Verbindung so, dass sie die gewünschte Eigenschaft entwickelt. Damit waren wir in den letzten Jahren vor allem mit Bispidinen als Liganden erfolgreich. Mittlerweile gibt es über fünfzig Variationen von Bispidinen, die in der Koordinationschemie eingesetzt werden; im Bereich der Eisenchemie gibt es eine Reihe von Patenten für die katalytische Bleichung und das katalytische Aushärten von Farben; zur Krebsdiagnose werden derzeit Methoden entwickelt, die radioaktive Kupfer(II)bispidine nutzen, um Tumoren besser abzubilden; auch im Bereich des molekularen Magnetismus gibt es grundlegende Arbeiten, für die Bispidine wichtig sind.

## „Gleichermaßen Architekt und Handwerker, plant und baut der Chemiker die Struktur einer Verbindung und bestimmt dadurch ihre Funktion.“

Ein Beispiel für den erfolgreichen Einsatz von Bispidinen ist die katalytische Aziridierung mit Kupfer(II)bispidinen. Aziridine sind dreieckige Ringverbindungen mit einem Stickstoffatom und zwei Kohlenstoffatomen. Sie werden genutzt, um medizinische Wirkstoffe zu synthetisieren. Es zeigt sich nun Folgendes: Wenn an den zwei Pyridinringen der vierzähligen Bispidinliganden je ein Wasserstoffatom durch eine Methylgruppe (-CH<sub>3</sub>) ausgetauscht wird, verändert sich die Struktur, und das Cu<sup>II/I</sup>-Redoxpotenzial verschiebt sich um mehr als 300 Millivolt. Dies macht einen zuvor lausigen zu einem sehr effizienten Katalysator: Struktur bewirkt Funktion.

### Die Geheimnisse der Manteltiere

Auf den Korallenriffen des Pazifiks und des Indischen Ozeans leben interessante Tiere, sogenannte Manteltiere oder Tunicata. Sie produzieren ringförmige Eiweißverbindungen (Peptide), deren biologische Funktion bis heute nicht bekannt ist. Das Einzige, was wir derzeit sicher wissen, ist, dass die zyklischen organischen Naturprodukte mit zwei Kupfer(II)ionen recht stabile Verbindungen ausbilden. Die Struktur und Dynamik dieser Verbindungen fasziniert uns seit Jahren: Wir untersuchen natürliche und synthetische zyklische Peptide und ihre Kupfer(II)komplexe in Lösung mit verschiedenen spektroskopischen Methoden sowie quantenchemischen und molekularmechanischen Berechnungen. Dabei haben wir gelernt, dass die Struktur der Verbindungen flexibel ist und dass sie möglicherweise als spezielle Enzyme, als „Carboanhydrasen“, wirken.

Carboanhydrasen – bislang sind nur Zink(II)-haltige Carboanhydrasen bekannt – sind sehr wichtige und effiziente



**PROF. DR. PETER COMBA** forscht und lehrt seit 1992 am Anorganisch-Chemischen Institut der Universität Heidelberg. Zudem ist er Direktor des Internationalen Wissenschaftsforums (IWH) und Direktoriumsmitglied des Interdisziplinären Zentrums für Wissenschaftliches Rechnen (IWR) der Universität Heidelberg. Seine wissenschaftliche Laufbahn führte den gebürtigen Schweizer an die Australian National University in Canberra, die Universität de Lausanne und die Universität Basel. Als Gastwissenschaftler war er darüber hinaus an der University of Tasmania, der Australian National University und der University of Queensland in Australien, der University of Pretoria sowie der University of Osaka tätig. Das besondere Interesse von Peter Comba gilt den Übergangsmetallverbindungen. Die Anwendungsgebiete seiner Forschung umfassen Theorie, Spektroskopie, Katalyse, molekularen Magnetismus, biologische und medizinische Chemie.

Kontakt: [peter.comba@aci.uni-heidelberg.de](mailto:peter.comba@aci.uni-heidelberg.de)

# „Das Wissen um den Zusammenhang von Struktur und Funktion ist die Grundlage vielversprechender Bereiche der Chemie.“

Metalloenzyme. Sie helfen, den natürlichen Kohlenstoffdioxid-Kreislauf zu regeln. Dies geschieht, indem sie Kohlenstoffdioxid ( $\text{CO}_2$ ) in die leicht zu transportierende Kohlensäure ( $\text{HCO}_3^-$ ) umwandeln (Hydratisierung). Damit spielen Carboanhydrasen sowohl bei der Photosynthese der Pflanzen als auch bei unserer Atmung eine zentrale Rolle:  $\text{CO}_2$  aus der Luft muss im Pflanzenkörper leicht dorthin transportiert werden können, wo es während der Photosynthese enzymatisch in Kohlenhydrate umgewandelt wird; als Produkt von Verbrennungsprozessen im menschlichen Körper muss  $\text{CO}_2$  als Abfallstoff umgehend in die Lunge gelangen. Die unkatalysierte Hydratisierung von  $\text{CO}_2$  ist mit circa  $10^{-2} \text{ s}^{-1}$  sehr langsam. Sie wird durch die natürliche Carboanhydrase etwa zehnmillionenfach beschleunigt. Die mit Kupfer(II)verbindungen der zyklischen Peptide gemessene Geschwindigkeit beträgt immerhin bis zu  $10^4 \text{ s}^{-1}$  – schneller als mit allen anderen bekannten künstlichen Carboanhydrasen.

Ob die zyklischen Peptide der Manteltiere tatsächlich als Kupfer(II)komplexe vorliegen und Carboanhydrase-Funktion übernehmen, wissen wir noch nicht. Fraglich ist auch, ob man unsere Beobachtungen technisch auswerten kann – beispielsweise um das Treibhausgas  $\text{CO}_2$

abzufangen. Über beide Fragen nachzudenken lohnt sich – auch über die Beobachtung, dass nicht die Rigidität der Strukturen (wie bei den Bispindinen), sondern die Flexibilität für die Funktion bedeutend ist. In beiden Fällen ist es der organische Ligand, der es vermag, an Metallionen zu binden, die geometrische Form, Flexibilität oder Rigidität zu erzwingen und damit die gewünschten Eigenschaften gezielt zu modulieren. Die Struktur und Dynamik von Verbindungen zu planen, den Zusammenhang von Struktur und Funktion zu verstehen und das Handwerk zu beherrschen, mit dem dieses Wissen umgesetzt und zur Anwendung gebracht werden kann, ist die Grundlage vielversprechender Bereiche der Chemie. ●

WARUM IST QUECKSILBER BEI RAUMTEMPERATUR FLÜSSIG?

# DAS GEHEIMNIS DES QUECKSILBERS

**Metalle zeichnen sich üblicherweise durch eine regelmäßige geordnete Gitterstruktur aus. Ihnen muss viel Wärme zugefügt werden, bis diese Struktur zerfällt und sie flüssig werden. Der Schmelzpunkt von Zink etwa liegt bei knapp 420 Grad Celsius, der von Gold bei 1.337 und der von Wolfram sogar bei 3.695 Grad Celsius. Warum aber ist Quecksilber als einziges Metall bei Raumtemperatur flüssig? Auf diese Frage wussten Wissenschaftler viele Jahre keine eindeutige Antwort. Nun hat ein internationales Forscherteam unter Beteiligung von Wissenschaftlern der Universität Heidelberg das „Geheimnis“ des Quecksilbers mit Hilfe von Computerexperimenten gelöst.**

(red) „Quecksilber stellt mit seinen Eigenschaften die theoretische Chemie seit langem vor viele Rätsel. Es ähnelt in seinem Verhalten häufig eher einem Edelgas als einem Metall“, erklärt der Physiker Dr. Michael Wormit, der am Interdisziplinären Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen (IWR) der Universität Heidelberg auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie forscht. Gemeinsam mit Wissenschaftlern aus Neuseeland und Frankreich ist er der Frage nachgegangen, warum sich Quecksilber anders verhält als alle anderen Metalle. Die Antwort darauf haben Physiker schon lange vermutet, doch erst jetzt gelang der Nachweis. Auf der Basis von Simulationen und numerischen Verfahren konnte das Forscherteam zeigen, dass sich der niedrige Schmelzpunkt des Quecksilbers aus der Relativitätstheorie Albert Einsteins ergibt – mit hin ein sogenannter relativistischer Effekt ist.

Einsteins spezielle Relativitätstheorie beschreibt die Eigenschaften von sehr schnell bewegter Materie, wie sie auch im Quecksilberatom vorkommt. Denn Quecksilberatome zeichnen sich durch eine einmalige Elektronenkonfiguration, bestehend aus 82 Elektronen, aus, die nur sehr schwache Bindungen zwischen den einzelnen Atomen zulässt. Vielmehr umrunden die inneren Elektronen den relativ schweren Atomkern von Quecksilber mit so hohen Geschwindigkeiten, dass offenbar eine Beschreibung per Relativitätstheorie erforderlich wird. Michael Wormit hat zusammen mit Dr. Florent Calvo (Universität de Lyon, Frankreich), Dr. Elke Pahl und Prof. Dr. Peter Schwerdtfeger (beide Massey University, Auckland, Neuseeland) die atomare Struktur von Quecksilber, bestehend aus dem Atomkern und den dazugehörigen Elektronen, am Rechner modelliert. Mit Hilfe von Computersimulationen untersuchten sie anschließend die Wechselwirkung der Quecksilberatome bei unterschiedlichem Druck und bei verschiedenen Temperaturen.

„Lange Zeit reichte die Leistung von Computern für Simulationen und Berechnungen dieser Art einfach nicht aus“, erläutert der Heidelberger Wissenschaftler. „Mit unserem Forschungsansatz, der sich erstmals mit den entsprechenden Rechnerkapazitäten realisieren ließ, konnten wir zeigen, dass die relativistischen Effekte für die Simulation von Quecksilbermaterialien von entscheidender Bedeutung sind.“ Ohne diese Effekte läge der Schmelzpunkt von kristallinem, sprich festem Quecksilber um 105 Grad Celsius höher. Quecksilber wäre dann bei Raumtemperatur nicht flüssig, sondern fest. ●

WHY IS MERCURY LIQUID AT ROOM TEMPERATURE?

# THE SECRET OF MERCURY

Metals are usually characterised by a regular lattice structure. They must absorb a great deal of heat for this structure to break down, converting the metals from their solid to a liquid state. Zinc, for instance, melts at roughly 420 degrees Celsius, gold at 1,337 degrees and tungsten at 3,695 degrees Celsius. So why is mercury the only metal that is liquid at room temperature? For a long time, scientists have struggled to answer this question. Now an international team that includes researchers of Heidelberg University has uncovered the secret of mercury with the aid of computer experiments. Based on simulations and numerical methods, the researchers were able to prove that the low melting point of mercury is a result of Albert Einstein's theory of relativity and thus represents what is known as a relativistic effect.

Einstein's special theory of relativity describes the properties of matter moving at great speed, such as occurs in the mercury atom: These atoms have a unique configuration of 82 electrons that only permits very weak bonds between individual atoms. The inner electrons orbit the heavy nucleus at such great speeds that they must apparently be described by means of relativity.

The scientists – among them Heidelberg physicist Dr. Michael Wormit – created a computer model of the atomic structure of mercury that consists of the nucleus and the associated electrons. Then they ran simulations to investigate the interaction of mercury atoms at different pressures and temperatures. They were able to demonstrate that the relativistic effects are of paramount importance for the simulation of mercury materials. Without these effects, the melting point of crystalline (i.e. solid) mercury would be 105 degrees Celsius higher – turning mercury from a liquid to a solid metal at room temperature. ●