

## Universität Innsbruck

Institut für Ionenphysik und Angewandte Physik

Presseausendung 02/12 – 4. Juni 2012



### **Passt die Geometrie, stimmt die Chemie** **Innsbrucker Physiker entschlüsseln chemische Austauschreaktionen**

**Chemische Austauschreaktionen laufen in unserem Körper ab, sind in unserer Umwelt allgegenwärtig. Industriell setzen wir sie zum Herstellen von Medikamenten ein. „Hinter dieser enormen, praktischen Bedeutung stecken ebenso große Rätsel für uns Forscher“, sagt Prof. Roland Wester. Der Innsbrucker Physiker hat mit der direkten Beobachtung von „Geometrieeffekten“ einen Beitrag zur Entschlüsselung dieser Reaktionen vorgelegt. Die Fachzeitschrift *Nature Chemistry* berichtet darüber in ihrer Online-Ausgabe.**

Die Arbeitsgruppe um Roland Wester vom Institut für Ionenphysik und Angewandte Physik der Universität Innsbruck, vormals an der Universität Freiburg in Deutschland, hat experimentell gezeigt, dass bei chemischen Austauschreaktionen nicht alleine die Energie die tragende Rolle spielt. „Bei Reaktionen in Anwesenheit von Wasser dürfte dies vielmehr auch die Geometrie sein, und damit die Frage, wo bestimmte Moleküle sitzen. Sehr vereinfachend könnte man daher sagen, passt die Geometrie, stimmt auch die Chemie“, so Wester. Die Physiker untersuchten in ihrem jüngsten Experiment einzelne Wassermoleküle und deren Einfluss auf die Reaktionsdynamik von Austauschreaktionen bei der Entstehung von Methanol.

#### **Unerwartete Effekte**

Das Team ließ dabei in einer eigens entwickelten Apparatur im Vakuum einzelne, negativ geladene Hydroxyl-Ionen mit Iodmethan-Molekülen ( $\text{CH}_3\text{I}$ ) kollidieren. Bei dieser Reaktion entstehen Methanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ) und ein negativ geladenes Jod-Atom. An die Hydroxyl-Ionen hängten die Forscher dann kontrolliert genau ein oder zwei Wassermoleküle an. Dieses Experiment „förderte verschiedene unerwartete Effekte zutage. Entgegen der einfachen Vorstellung verlangsamt und verwischt ein Wassermolekül nicht einfach diese Reaktion, sondern steuert sie vielmehr durch die geometrische Anordnung der Moleküle. So läuft die Reaktion überhaupt erst durch die Anwesenheit eines Wassermoleküls in der Weise ab, wie dies in Chemie-Lehrbüchern beschrieben ist. Dabei nähert sich das Ion dem  $\text{CH}_3\text{I}$ -Molekül von einer Seite und das Jod-Atom fliegt nach der Umordnung des molekularen Komplexes in entgegengesetzter Richtung davon. Ohne den Einfluss des Wassers finden wir dagegen ganz andere Reaktionsmechanismen.“, sagt Rico Otto, der mit diesen Experimenten seine Dissertation abschloss. Mit diesen Grundlagenforschungen wollen er und seine Kollegen einen Beitrag zum verbesserten Verständnis dieser komplexen Abläufe liefern. „Letztlich und dies ist ein sehr langfristiges Ziel, könnte dies auch ein Beitrag dazu sein, industrielle Prozesse effizienter ablaufen zu lassen“, sind Wester und Otto überzeugt.

Die in diesen Forschungen untersuchten „Nukleophilen Substitutionsreaktionen“ sind eine der wichtigsten Reaktionsklassen in der Organischen Chemie. Solche chemischen Austauschprozesse, bei denen eine funktionale Gruppe gegen eine andere ausgetauscht wird, laufen z.B. bei der Adrenalin-Synthese in unserem Körper ab. Dort, wie auch in vielen technischen Anwendungen, finden sie normalerweise in Flüssigkeiten statt. Was auf der Ebene der einzelnen beteiligten Teilchen und Moleküle dabei wirklich im Detail passiert, ist bisher kaum erforscht. Warum? Chemische Formeln fassen Reaktionen in einfacher Weise zusammen, sie können aber die komplexe Dynamik der verschiedenen Reaktionsschritte und deren Wechselwirkungen nur sehr schlecht beschreiben. Außerdem kann die Wissenschaft erst seit wenigen Jahren mit ausgeklügelten Laborexperimenten einen Blick auf diese Austauschprozesse werfen und im Grenzgebiet zwischen Chemie und Physik deren Dynamiken besser erfassen. Wie gefragt diese Fähigkeiten sind, konnte Rico Otto bereits

persönlich erfahren, er bekam schon vor seiner Dissertation mehrere Angebote auf Forscherstellen weltweit und ist inzwischen an der University of California in San Diego aktiv. Wester wurde für seine Forschungen im Feld der Ion-Molekül-Reaktionen 2009 mit dem Gustav-Hertz-Preis ausgezeichnet. Der Physiker forscht und lehrt seit Oktober 2010 als Professor am Institut für Ionenphysik und Angewandte Physik der Universität Innsbruck. Im Vorjahr erhielt er einen „Starting Grant“ des European Research Council (ERC).

**Publikation:** Single solvent molecules affecting the dynamics of substitution reactions. R. Otto, J. Brox, S. Trippel, M. Stei, T. Best, R. Wester. Nature Chemistry. Advanced Online Publication, am 3. Juni 2012  
doi: 10.1038/NCHEM.1362

**Kontakt:**

**Univ.-Prof. Dr. Roland Wester**

Institut für Ionenphysik und Angewandte Physik

Technikerstrasse 25, A-6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-6420

Mail: roland.wester@uibk.ac.at

Web: <http://www.uibk.ac.at/ionen-angewandte-physik/molsyst/>

**Mag.a Gabriele Rampl**

Public Relations Ionenphysik

Telefon: +43 650 2763351

Mail: office@scinews.at

Web: <http://www.scinews.at>