

Laborjournal

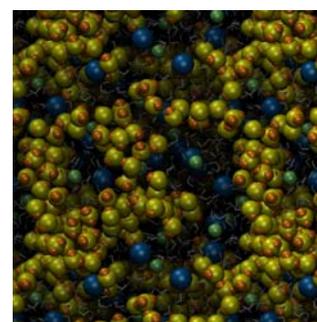
Neues vom Wasser

Themen in dieser Ausgabe:

- [Neues vom Wasser](#)
- [Tanz der Moleküle](#)
- [Theorie und Experiment im Labor](#)
- [Aktuelle Projekte](#)

„Druck- und Salzeffekte in simuliertem Wasser: Zwei Seiten einer Medaille?“ Diesem Beitrag aus der Physikalischen und Theoretischen Chemie der Universität Rostock hat die Zeitschrift *Angewandte Chemie* jüngst zum „Hot Paper“ erkoren. Die *Angewandte Chemie* ist die führende Chemiezeitschrift weltweit. Gemeinsam konnten die Arbeitsgruppe von Prof. Ludwig und die Dortmunder Kollegen Dietmar Paschek und Alfons Geiger zeigen, dass sich die freie Wasserphase in einer wässrigen Salzlösung ähnlich verhält wie reines Wasser unter Druck. Dies gilt für das thermische Ausdehnungsverhalten, die Dynamik und die lokale Struktur des Wassers.

Molekulardynamische Simulationen geben das anomale Verhalten von Wasser und wässriger Salzlösungen nahezu quantitativ wieder. Überraschenderweise führt im unterkühlten Bereich die Gegenwart von Ionen zur Stabilisierung der „hochdichten“ Konfiguration und damit zu einer erhöhten Beweglichkeit des Wassers. „Die Ergebnisse zeigen wieder einmal, dass es sich beim Wasser um einen ganz besonderen Saft handelt“, erklärt Jörg Holzmann, der sich im AK von Prof. Ludwig promoviert und zu den Mitautoren dieses aufregenden wissenschaftlichen Beitrags gehört.



Die „freie Wasserphase“ (gelb/orange) in einer wässrigen Salzlösung macht das Wasser schneller.

Inhalt

Spektroskopie	2
Virtuelles Labor	2
Wasser und Luft	2
Japanreise	3
Kontraste	3
Vibrationen	3
Wir über uns	4

Herbstball: Tanz der Moleküle

Den „Tanz der Moleküle“ präsentieren die Physikochemiker in einem kleinen Filmbeitrag auf dem Herbstball der Universität Rostock. Zu bekannten Melodien bewegen sich kleine und große Moleküle. Sie swingen, steppen und rocken. „Manchmal fragt

man sich, was zuerst da war, die Musik oder die Molekülbewegung“, findet Julian Riemen-schneider, Filmvorführer und Mitautor des Streifens.

Molekulardynamische Simulationen erlauben das Studium der Struktur und Dynamik von Mole-

külen, angefangen bei einem kleinen Wassermolekül bis hin zu großen Biomolekülen, den Proteinen oder einer DNA.

Mal sehen, ob die TeilnehmerInnen des Herbstballs eine ähnliche Bewegungsfreude zeigen wie die Moleküle.

Moleküle in Schwingung versetzen



Man at work:
Alexander Wulf bei der
Vorbereitung eines
Raman-Experiments.

Moleküle können in Schwingung versetzt werden. Sie können gestreckt und deformiert werden.

Für die Untersuchung von Wechselwirkungen innerhalb von Molekülen aber auch zwischen Molekülen eignen sich sowohl die Infrarot-Spektroskopie wie auch die Raman-Spektroskopie. Beide Spektroskopiearten stehen im Arbeitskreis von Prof. Ludwig für die Untersuchung von

Clustern und Molekülen zur Verfügung. Dabei spielt es überhaupt keine Rolle, ob es sich um Festkörper oder Flüssigkeiten, transparente oder undurchsichtige Substanzen handelt. Eine der beiden Methoden und das entsprechende Zubehör eignen sich immer, um die Struktur zum Tanzen zu bringen.

Die Betreuung der Schwingungsspektroskopie liegt bei Alexander Wulf. „Bei uns wird

die Schwingungsspektroskopie nicht einfach zur Analytik eingesetzt, sondern zum Studium von Strukturen und Wechselwirkungsenergien“, erklärt er. So soll die Struktur von Wasser und Ionischen Flüssigkeiten bei unterschiedlichen Temperaturen und Drücken untersucht werden. Im Vergleich zur NMR erlaubt die schnellere Schwingungsspektroskopie eine bessere Auflösung und kann Spezies mit entsprechenden Lebensdauern getrennt detektieren.

Das virtuelle Labor: Chemie im Computer

„Ein Chemiker, der kein Physiker ist, ist gar nichts.“

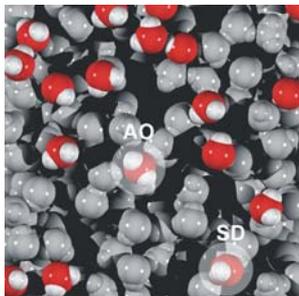
*Robert W. Bunsen,
Deutscher Chemiker,
1811-1899.*

„Das Glas ist voll. Mehr Computer fassen die beiden Serverschränke nicht“, stellen Jörg Holzmann und Kai Wittler fest. Die beiden Doktoranden betreuen die Computercluster im AK von Prof. Ludwig. Dazu gehört ein einfacher Rechencluster mit vierzig PCs. Das Prunkstück ist aber zweifellos der High Performance Computing Cluster (HPCC), der aus

zwei Serverschränken besteht, die inzwischen bis zum Rand mit 64 Rechnern mit jeweils zwei bzw. vier Prozessorkernen bestückt sind. Insgesamt stehen dem Arbeitskreis exklusiv über 250 Prozessoren zur Verfügung. Die Rechenknechte sind rund um die Uhr im Einsatz: ein virtuelles Labor. Anstatt im Reagenzglas oder in Messgeräten werden die strukturellen, thermodynamischen

und dynamische Eigenschaften von Wasser, Ionischen Flüssigkeiten oder Biomolekülen im Computer untersucht. „Dabei benötigt man keinen Laborkittel, die Finger macht man sich auch nicht schmutzig. Aber leider spucken die Computer nur brauchbare Ergebnisse aus, wenn sie mit guten Programmen gefüttert werden“, beklagt Kai Wittler.

An der Grenze zwischen Wasser und Luft



Die Grenzfläche Wasser/Luft:
Einige H₂O-Moleküle besitzen
freien OH-Bindungen.

Substanzen, die nicht mischbar sind, bilden eine Grenzfläche. Die häufigste Grenzfläche auf der Erde ist die zwischen Wasser und Luft. Die Grenzfläche zwischen Meerwasser und Luft, genauer die zwischen Ostseewasser und Luft wird in dem Projekt FILGAS studiert. Das

Projekt wurde im Rahmen des Pakts für Forschung und Innovation des Bundesministeriums für Bildung und Forschung durch das Leibniz-Institut für Ostseeforschung Warnemünde (IOW) eingeworben. Untersucht werden soll die Funktion der Filmbildung an dieser

Grenzfläche für den Transport und die Produktion von Spurengasen. Die AG Ludwig versucht mit MD-Simulationen herauszufinden, wie der Gasaustausch durch Filmbildung beeinflusst wird. Mehr Informationen finden Sie unter: www.io-warnemuende.de

Yokohama: Alles über Ionische Flüssigkeiten

Starker Auftritt im Land der aufgehenden Sonne. Allein acht WissenschaftlerInnen aus dem Institut für Chemie der Universität nahmen Anfang August an der weltgrößten Konferenz über Ionische Flüssigkeiten teil. In Yokohama wurden sämtliche Aspekte der Grundlagenforschung und der Anwendung Ionischer Flüssigkeiten diskutiert. Ionische Flüssigkeiten bestehen rein aus geladenen Teilchen, den Ionen. Da sie bei

Raumtemperatur flüssig sind und nur einen geringen Dampfdruck aufweisen, werden sie als „grüne Alternative“ zu den leichtflüchtigen organischen Lösungsmitteln gehandelt. Wozu Ionische Flüssigkeiten noch fähig sind und welche weiteren interessanten Eigenschaften diese neuen Materialien besitzen, wird die Zukunft zeigen. Die nächste COIL (Conference of Ionic Liquids) wird 2009 in Australien am Great Barrier

Reef stattfinden. Anreiz genug, um die Forschung in Rostock voranzutreiben. Der AK von Prof. Ludwig war gleich als Quartett in Yokohama ange-reist. Postdoktorand Koichi Fumino konnte seinen Heimvorteil voll ausspielen und den Doktoranden Alexander Wulf und Thorsten Köddermann noch die „schönsten Ecken“ von Tokyo und Kyoto zeigen. Ein Besuch des Mt. Fuji gehörte zum Konferenzprogramm.



Mount Fuji, der heilige Berg der Japaner, aufgenommen aus der Luft und von der Erde. Die schönen Fotos machte Koichi Fumino.

Schärfer sehen mit Kontrastmitteln

Ein erfolgreiches Projekt zwischen dem AK von Prof. Ludwig und der Firma Bayer-Schering findet seine Fortsetzung. Bekanntlich darf über die Inhalte von Industrieprojekten nichts verraten werden. Soviel aber schon: Bei diesem Vorhaben geht es darum, mit Hilfe von Molekulardynamischen Simulationen die Eigenschaften von Röntgen- und MRI-

Kontrastmitteln zu optimieren. Solche Kontrastmittel hat jeder schon einmal kennen gelernt, der sich einer unter Computertomographie unterzogen hat. Kontrastmittel sorgen für scharfe Bilder, ähnlich wie eine entsprechende Blende und kurze Belichtungszeit beim Fotografieren.

Bei den Röntgenkontrastmitteln handelt es sich um iodierte

Verbindungen, bei den MRI-Kontrastmitteln um Metallkomplexe. Die Simulationen in der Arbeitsgruppe führt Doktor in spe Thorsten Köddermann durch: „Wir machen richtige Computerversuche und schlagen damit eine Brücke zwischen Theorie und Experiment“. Und natürlich einen Bogen zwischen Grundlagen und Anwendung.

„Man ist auf Glück angewiesen - aber man muss es auch erkennen“

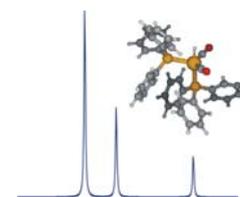
*Manfred Eigen,
Nobelpreis Chemie
1967*

Vibrationen in der Katalyse

Den Aufbau einer in-situ Hochdruck-Infrarotspektroskopie in der Katalyse haben sich die Doktoranden Enrico Barsch und Christoph Kubis auf die Fahnen geschrieben. Die Mitarbeiter von Prof. Ludwig werden am Leibniz-Institut für Katalyse (LIKAT) ihr Know How aus

der Schwingungsspektroskopie einbringen und für den Einsatz in der Katalyse optimieren. Unterstützt werden diese Arbeiten durch quantenchemische Berechnungen und Molekulardynamische Simulationen der Arbeitsgruppe. Finanziell getragen werden die Vorhaben durch

das Exzellenzprogramm der Leibniz-Gemeinschaft und ein Industrieprojekt mit der Oxeno-C4-Chemie, die zur Evonik vormals Degussa gehört. „Die Vorstellung an etwas zu arbeiten, das in der Industrie Anwendung findet fasziniert mich“, erklärt Enrico Barsch.



Die Carbonyl (C=O) schwingungen in einem Rhodium-Katalysator

Physikalische und Theoretische Chemie
Institut für Chemie
Universität Rostock
Dr.-Lorenz-Weg 1

Telefon: 0381 - 498 6517
Fax: 0381 - 498 6524
E-Mail: ralf.ludwig@uni-rostock.de



UNIVERSITÄT ROSTOCK

Carpe diem.

www.chemie.uni-rostock.de

Unsere Arbeitsgruppe „Physikalische und Theoretische Chemie“ gehört zur Abteilung „Physikalische Chemie“ im Institut für Chemie. Mit unserem Methodenspektrum versuchen wir eine Brücke zu schlagen zwischen Theorie und Experiment. Der IR-, Raman- und NMR-Spektroskopie stehen quantenchemische Rechnungen, CPMD-Simulationen und klassische Molekuldynamische Simulationen gegenüber. Was untersuchen wir?

Anomalien, Struktur und Dynamik von Wasser und wässrigen Lösungen, Eigenschaften Ionischer Flüssigkeiten, Wasserstoffbrücken-Netzwerke, Hydratation von Ionen, organischen und biologischen Molekülen, hydrophobe Effekte, den Einfluss von Temperatur, Druck and Additiven auf das Aggregationsverhalten organischer Moleküle und auf die Struktur von Biomolekülen.

Das strukturelle und dynamische Verhalten von Clustern, Flüssigkeiten und Grenzflächen wird auf der molekularen Ebene untersucht. Hauptziel ist die Vorhersage makroskopischer Eigenschaften auf Grundlage molekularer Wechselwirkungen. Die wachsende Mächtigkeit von Computern in Verbindung mit neuen Simulationsmethoden erlaubt das Studium komplexer Probleme in den Material- und Biowissenschaften.

Wir im Dr.-Lorenz-Weg

Anders als der Großteil der Chemie ist unsere Arbeitsgruppe nicht im neuen Chemie-Gebäude in der Einstein-Straße 3a, sondern gemeinsam mit anderen Arbeitsgruppen aus der Physikalischen Chemie, der Analytischen Chemie und der Didaktischen Chemie im Dr.-Lorenz-Weg zu Hause. „Eingesperrt“ zwischen städtischem Tierheim und Zoo bemühen wir uns um eine gute Lehre und ausgezeichnete Forschung. Dabei haben wir viele Freude, die wir den Studierenden in Vorlesungen, Seminaren und Praktika gerne vermitteln. Wer sich ein Bild von uns und unserer Arbeit machen möchte, ist jederzeit herzlich in den Dr.-Lorenz-Weg eingeladen.



Sprudelnde Ideen für Forschung und Lehre: Gut gelaunt zeigt sich der Arbeitskreis von Prof. Dr. Ludwig vor dem Brunnen der Lebensfreude und dem Hauptgebäude der Universität in der Rostocker Innenstadt.