

Pressemitteilung

Ruhr-Universität Bochum

Dr. Julia Weiler

12.11.2024

<http://idw-online.de/de/news842782>

Forschungsergebnisse, Wissenschaftliche Publikationen
Chemie
überregional



Neue Erkenntnisse über die Wasserstoffbrückenbindung von Schwefelwasserstoff

Auf den ersten Blick haben der Eiswürfel in Ihrem Getränk und der Geruch von Omas berühmtem Eiersalat nicht viel gemeinsam. Aus chemischer Sicht sind die zugrunde liegenden Moleküle Wasser (H_2O) und Schwefelwasserstoff (H_2S) jedoch nicht unähnlich. Die Bindung des Wasserstoffs eines Wassermoleküls an den Sauerstoff eines anderen Wassermoleküls wurde bereits ausführlich untersucht. Die Frage, ob sich das größere Geschwisterchen H_2S ähnlich verhält, ist jedoch weniger gut verstanden. Eine neue Publikation des Bochumer Exzellenzclusters „Ruhr Explores Solvation“ (RESOLV) schließt jetzt diese Lücke.

Das Team der Physikalischen Chemie 2 der Ruhr-Universität Bochum hat seine Ergebnisse zusammen mit Kolleginnen und Kollegen aus Atlanta und Nijmegen am 5. November 2024 in der Zeitschrift „Nature Communications“ veröffentlicht.

Die experimentellen Ergebnisse der Bochumer Gruppe von Prof. Dr. Martina Havenith wurden durch theoretische Studien von Prof. Dr. Joel Bowman von der Emory University in Atlanta und Prof. Dr. Ad van der Avoird von der Radboud University in Nijmegen ergänzt.

H_2S gilt als eines der einfachsten schwefelhaltigen Moleküle im interstellaren Medium und als wesentlicher Bestandteil verschiedener biologischer Prozesse bei Säugetieren. Es wurde bereits mit mehreren Infrarotstudien untersucht, aber einige Unsicherheiten über das Verhalten von H_2S blieben bisher bestehen.

Hochauflösende IR-Spektroskopie in suprafluiden Helium-Nanotropfen

Die spektroskopische Technik, die zur Untersuchung der H_2S -Moleküle verwendet wurde, ist unkonventionell. Um das Experiment durchzuführen, wurden einzelne Moleküle von H_2S in suprafluide Heliumtropfen in einer Vakuumkammer eingebettet. Durch Variation der Menge an H_2S -Gas in der Vakuumkammer konnten die Bochumer Forschenden Svenja Jäger, Philipp Meyer und Jai Khatri die Anzahl der von den Heliumtropfen aufgenommenen Moleküle statistisch kontrollieren und die Bedingungen so optimieren, dass im Durchschnitt immer zwei Moleküle gleichzeitig aufgenommen werden.

Die Tropfen bestehen aus suprafluidem Helium, welches im Vergleich zu normalen Flüssigkeiten einige einzigartige Eigenschaften hat. Einige dieser besonderen Merkmale sind die sehr hohe Wärmeleitfähigkeit, die die Tropfen und ihre eingebetteten Moleküle nahe dem absoluten Nullpunkt hält, die Transparenz über den Spektralbereich vom UV bis zum fernen Infrarot und die fast nicht vorhandene Wechselwirkung der Flüssigkeit mit den eingebetteten Molekülen. Diese drei Merkmale sind entscheidend für die Durchführung des Experiments, da sie es den Forschenden ermöglichen, die Wechselwirkung zwischen zwei H_2S -Molekülen ohne jegliche Störung durch andere Moleküle oder thermische Energie zu untersuchen. Dies führte zu hochauflösenden IR-Spektren, die nicht nur die Schwingungsbewegungen des

H₂S-Moleküls, sondern auch dessen Rotationen und Tunnelspaltungen zeigten. Der Begriff Tunnelspaltung beschreibt die Trennung von Energieniveaus aufgrund einer kleinen Energiebarriere zwischen zwei verschiedenen Strukturen desselben Moleküls.

Grundlage für ein besseres Verständnis der Wasserstoffbrückenbindung

Die experimentellen Ergebnisse wurden durch theoretische Berechnungen ergänzt, die es ermöglichten, die Energieaufspaltung der H₂S-Moleküle im Grund- und angeregten Zustand zu beschreiben. Im Vergleich zu Wasser stellten die Forschenden fest, dass die Bindung zwischen H₂S-Molekülen im Grundzustand flexibler ist. Bei Anregung eines der Moleküle wird die Wasserstoffbindung derjenigen in Wasser sehr ähnlich.

Darüber hinaus konnten die Forschenden weitere Schwingungssignale charakterisieren und neu zuordnen, die bereits von anderen Gruppen veröffentlicht wurden. Damit stellen die Ergebnisse einen empfindlichen Test für modernste Berechnungsmethoden dar. Diese Methoden werden verwendet, um die Wechselwirkungen verschiedener Moleküle vorherzusagen. Um sicherzustellen, dass diese Vorhersagen korrekt sind, müssen sie mit Experimenten verglichen werden. Die Untersuchung der Bindung zwischen kleinen Molekülen wie Wasser und in diesem Fall H₂S verbessert das Verständnis der grundlegenden Chemie erheblich und ermöglicht daher die Entwicklung noch präziserer theoretischer Berechnungen sowie das Verständnis komplexerer chemischer Systeme.

Förderung

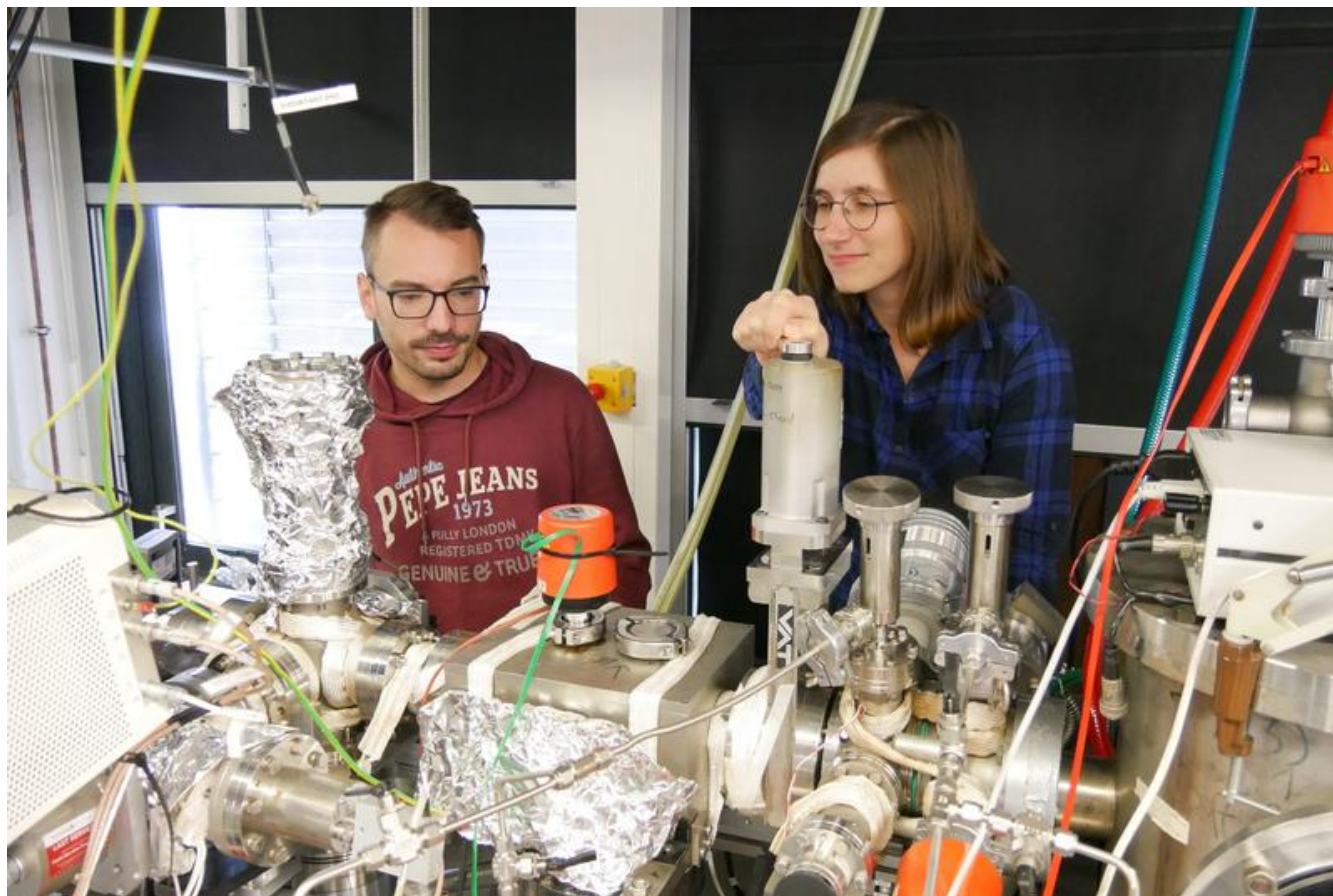
Die Arbeiten wurden unterstützt von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) im Rahmen der Exzellenzstrategie (EXC 2033 – Projektnummer 390677874), der NASA (80NSSC22K1167) und der National Science Foundation (CHE-2154403).

wissenschaftliche Ansprechpartner:

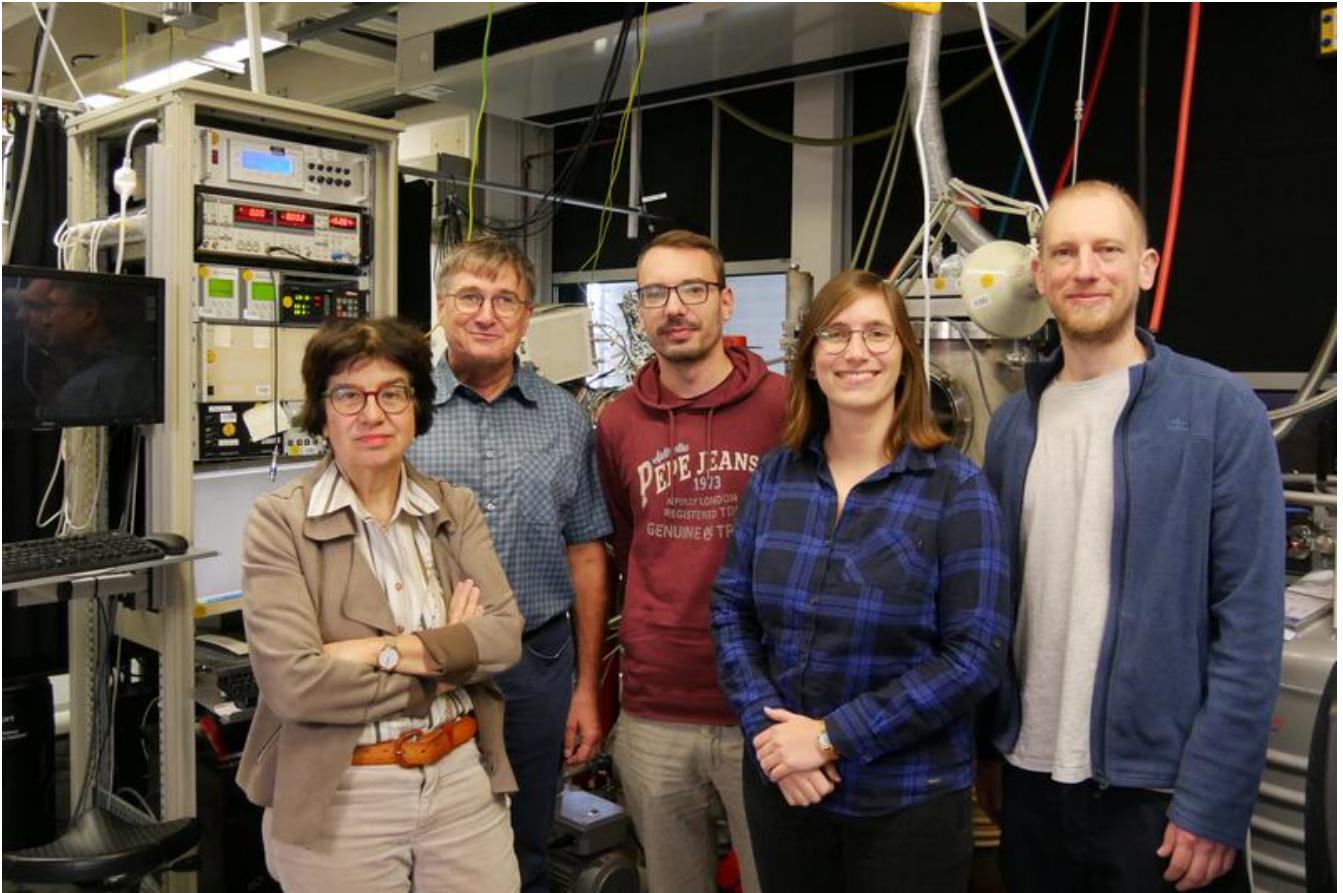
Prof. Dr. Martina Havenith
Physikalische Chemie II
Fakultät für Chemie und Biochemie Ruhr-Universität Bochum
Tel.: +49 234 32 28249
E-Mail: pc2office@ruhr-uni-bochum.de

Originalpublikation:

Svenja Jäger, Jai Khatri, Philipp Meyer et al.: On the Nature of Hydrogen Bonding in the H₂S Dimer, in: Nature Communications, 2024, DOI: [10.1038/s41467-024-53444-6](https://doi.org/10.1038/s41467-024-53444-6), <https://www.nature.com/articles/s41467-024-53444-6>



Philipp Meyer und Svenja Jäger im Labor an der Ruhr-Universität Bochum
Yvonne Kasper



Das Bochumer Forschungsteam: Martina Havenith, Gerhard Schwaab, Philipp Meyer, Svenja Jäger und Stefan Henkel
(von links)
Yvonne Kasper