idw - Informationsdienst Wissenschaft
Nachrichten, Termine, Experten

Press release

Max-Planck-Institut für Kernphysik
Dr. Bernold Feuerstein

01/13/2012
http://idw-online.de/en/news459030

Research results, Scientific Publications
Physics / astronomy
transregional, national

Das mehratomige Schlüsselion der Chemie im Universum entschleiert

In der Chemie in interstellaren Wolken spielt das dreiatomige Wasserstoffion eine Schlüsselrolle. In diesen Reaktionen entstehen auch einfache organische Moleküle. Obwohl H_3^+ das einfachste mehratomige Molekülion ist, war bisher sein Schwingungsspektrum bei hohen Anregungen weder experimentell exakt bekannt noch theoretisch verstanden. Präzise Messungen am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg lieferten nun die entscheidenden Hinweise für eine dramatische Verbesserung der quantentheoretischen Berechnungen. (Physical Review Letters 108, 023002 (2012))

Die Elektronenverteilung in einem Molekül bestimmt die stabile Lage der Atomkerne und die Frequenzen, mit denen sie um diese Positionen schwingen können. Grund- und Obertonfrequenzen der Schwingungen bilden eine Art Fingerabdruck der Molekülstruktur. Auch zeigen sie, wie stark die Elektronenwolke Deformationen des Moleküls entgegenwirkt. Um die Kräfte im Molekül auch bei starker Deformation zu verstehen, ist es erforderlich, die Frequenzen sehr schwacher hoher Obertöne zu messen. Selbst für das einfachste neutrale Molekül, H_2, gelang es erst vor drei Jahrzehnten, experimentelle und quantentheoretisch berechnete Werte exakt in Übereinstimmung zu bringen.

Fügt man ein weiteres Proton zu H_2 dazu, resultiert H_3^+, das einfachste mehratomige Ion. Mit diesem einzigen hinzugefügten Proton steigen die Herausforderungen enorm, und zwar sowohl für die Messung der schwachen hohen Oberton-Schwingungsfrequenzen als auch für deren exakte quantentheoretische Berechnung. Obwohl H_3^+ im interstellaren Raum ein häufiges und chemisch sehr aktives Molekülion ist, kann es im Labor nur in extremer Verdünnung hergestellt werden, zumeist in Entladungsplasmen. Dazu kommt, dass in solchen Umgebungen die Temperatur der H_3^+-Ionen sehr hoch ist, was zu einem nahezu undurchdringlichen Wald von Frequenzen führt, bei denen diese Ionen zu Schwingungen angeregt werden können. Schließlich hat nur nicht deformiertes kaltes H_3^+ eine hochsymmetrische dreieckige Form, während das stark deformierte Ion alle Arten von asymmetrischen dreieckigen und selbst lineare Formen annehmen kann.

Die experimentellen Herausforderungen konnten nun am MPI für Kernphysik gemeistert werden. In einer kryogenen Ionenfalle gelingt es seit einiger Zeit, mittels eines Puffergases H_3^+-Ionen abzukühlen und bei etwa -210°C mit präziser Laserspektroskopie zu untersuchen. In den neuen Experimenten wurde sichtbares Licht anstelle des bisher verwendeten Infrarotlichts eingesetzt, um die Ionen in Schwingungen zu versetzen. So konnten Schwingungen bis zum achten Oberton als extrem schwache Resonanzen angeregt werden. Die Wissenschaftler suchten weite Bereiche rund um die nur ungenau vorhergesagten Frequenzen ab und fanden so erstmals Obertonlinien weit im sichtbaren Spektralbereich.

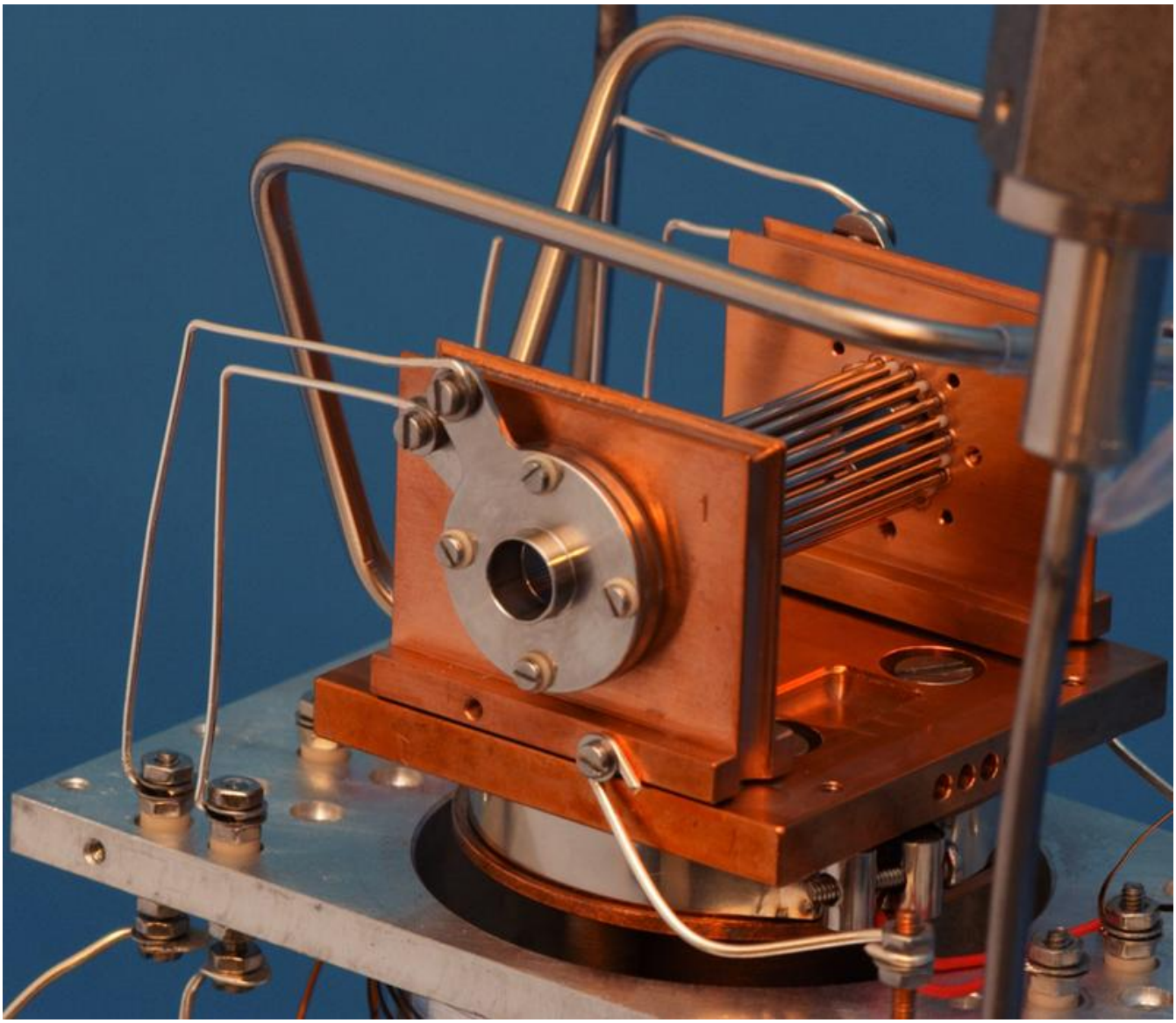
Die präzise gemessenen Obertonfrequenzen gaben einer internationalen Gruppe von Theoretikern die entscheidenden Hinweise, wie sie ihre quantentheoretischen ab-initio-Berechnungen des H_3^+-Ions dramatisch verbessern konnten. So zeigen nun zum ersten Mal Messungen und Rechnungen für ein mehratomiges Molekül bis hin zu starker Deformation genaue Übereinstimmung untereinander – dreißig Jahre nachdem dies für das zweiatomige Wasserstoffmolekül gelang.

Originalpublikation:

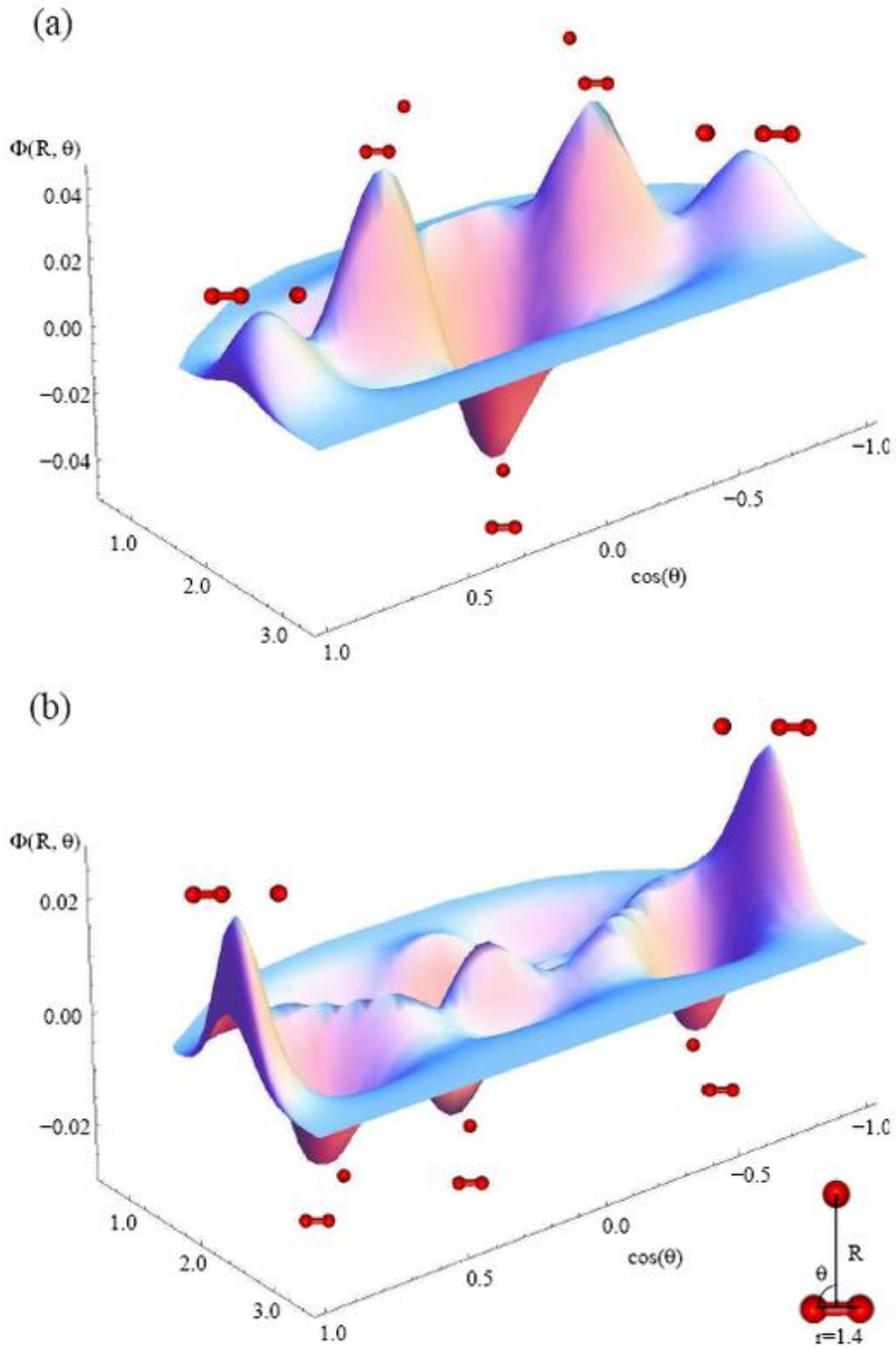
“Precision measurements and computations of transition energies in rotationally cold triatomic hydrogen ions up to the mid-visible spectral range”
M. Pavanello et al., Physical Review Letters 108, 023002 (2012).
doi: 10.1103/PhysRevLett.108.023002

URL for press release: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.023002 Originalpublikation

URL for press release: http://www.mpi-hd.mpg.de/blaum/molecular-qd/index.de.html Atomare und molekulare Quantendynamik am MPI für Kernphysik



Laserspektroskopie von dreiatomigen Wasserstoffionen wird am MPI für Kernphysik bei etwa -210°C in dieser kryogenen Ionenfalle durchgeführt, einem 22-poligen Ionenkäfig, weiterentwickelt aus der ursprünglichen Konstruktion von D. Gerlich an der Universität Freiburg.
Foto: MPIK, O. Novotný.



Zwei Beispiele für quantenmechanische Wellenfunktionen der Atomkerne in H_3^+-Molekülen bei hoher Anregung (sechste (a) und siebte (b) Harmonische der Biegeschwingung) aus den Ergebnissen der neuen Rechnungen (elektronisches Supplement des Artikels bei Physical Review Letters). Das Quadrat dieser Funktion gibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Atomkerne. Die Wellenfunktionen zeigen eine hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit

der Kerne in linearen Konfigurationen des H_3^+, extrem entfernt von der Struktur eines gleichseitigen Dreiecks im nicht schwingenden H_3^+. Die neue Theorie ermöglicht die exakte Beschreibung solcher Konfigurationen.
Autoren der Originalveröffentlichung