idw - Informationsdienst Wissenschaft
Nachrichten, Termine, Experten

Press release

Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH
Dr. Ina Helms

08/21/2013
http://idw-online.de/en/news547848

Research results
Chemistry, Physics / astronomy
transregional, national

Neue Werkzeuge, um molekulare Wechselwirkungen zu verstehen

Chemische Prozesse in Organismen aber auch in anorganischen „nassen“ Systemen wie Katalysatoren sind höchst komplex und viele sind bisher nur sehr grob verstanden. Denn es ist überaus schwierig, experimentell zu verfolgen, wie Atome oder Moleküle in Lösung miteinander reagieren. Bisher konnten Forscher mit spektroskopischen Verfahren nur eine Überlagerung aller Wechselwirkungen beobachten, nicht jedoch einzelne Bindungsvorgänge unterscheiden. Das könnte sich durch eine aufsehenerregende Arbeit von HZB-Forschern um Emad Flear Aziz und theoretischen Physikern der Universität Rostock nun ändern, die jetzt in den Physical Review Letters veröffentlicht wurde.

“Im Grunde beobachten wir, wie Atome und Moleküle in Lösung miteinander wechselwirken”, erklärt Professor Dr. Emad Flear Aziz, Helmholtz-Nachwuchsgruppenleiter am HZB und Professor an der Freien Universität Berlin. Seine jetzt veröffentlichte Arbeit basiert auf einer Entdeckung, mit der Aziz bereits 2010 eine große Debatte ausgelöst hatte: Bei röntgenspektroskopischen Untersuchungen an BESSY II fand er in seinen Proben eine Art „Dunklen Kanal“, in dem Photonen bestimmter Energie verschwanden. Diese Ergebnisse, die von anderen Teams weltweit reproduziert werden konnten, könnten Aufschluss über einzelne Bindungsvorgänge geben, vermutete Aziz bereits damals.

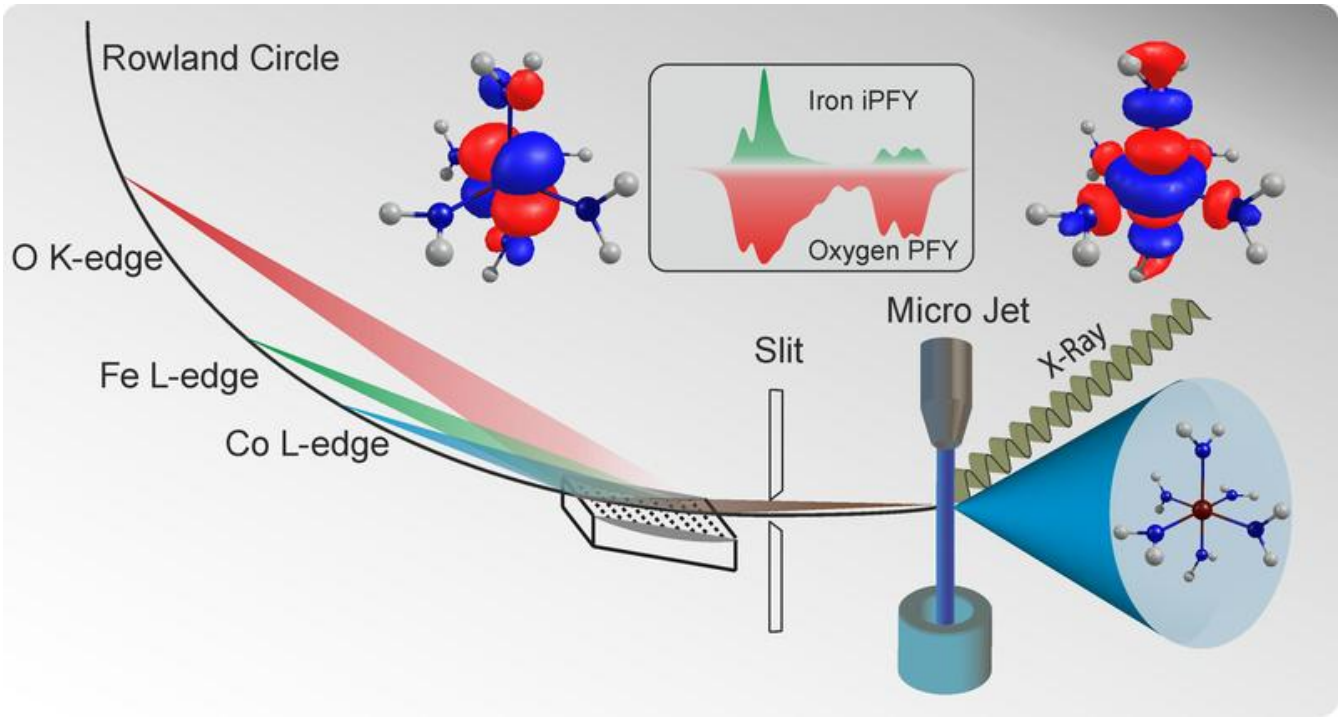
Nun kann er seine Vermutung untermauern. Professor Dr. Oliver Kühn und Postdoktorand Dr. Sergey Bokarev, Universität Rostock, berechneten die Energielevels der möglichen Bindungsprozesse und stellten damit ein Werkzeug zur Verfügung, um die experimentellen Daten zu interpretieren. Auch das Team von Aziz schärfte das experimentelle Verfahren weiter und entwickelte einen neuen Ansatz für die hochauflösende Röntgenspektroskopie. „Wir können nun alle elektronischen Zustände im System, das wir messen, einzeln zuordnen und diejenigen unterscheiden, die mit ihren Nachbarn Bindungen eingehen, von jenen, die es nicht tun“, erklärt Aziz.

Das neue Verfahren ähnelt damit einem Hörgerät, mit dem man im Partylärm gezielt einzelnen Gesprächen zuhören kann, anstatt nur ein Durcheinander von Stimmen wahrzunehmen. Die Forscher sind überzeugt, dass ihre Arbeit dazu beitragen wird, die Chemie des Lebens besser zu verstehen.

Die Arbeit "State-Dependent Electron Delocalization Dynamics at the Solute-Solvent Interface" wurde jetzt in den Physical Review Letters veröffentlicht: DOI:10.1103/PhysRevLett.111.083002

URL for press release: http://prl.aps.org/abstract/PRL/v111/i8/e083002 zum PRL-Paper

URL for press release: http://www.helmholtz-berlin.de/pubbin/news_seite?nid=13140&sprache;=de&typoid;=25487 Zur Presseinfo 2010 "Hilfe von der dunklen Seite".



Diese Grafik zeigt die von Aziz entwickelte Fließzelle, die es ermöglicht, biologische Proben in ihrer natürlichen, wässrigen Umgebung mit Röntgenstrahlung zu untersuchen. Nach Durchgang durch die Probe lassen insbesondere die dunklen Stellen im Spektrum nun dank theoretischer Arbeiten der Gruppe um Oliver Kühn sehr genaue Rückschlüsse auf molekulare Interaktionen in der Probe zu.
Grafik: Uni Rostock