

Guinness-Moleküle

Auf der Suche nach dem stabilsten Kohlenhydrat

Wintersemester 2013/14 Forschungsorientiertes Lehren und Lernen (FoLL)

Was ist ein Kohlenhydrat?

- Molekül der Summenformel $C_nH_{2n}O_n$ ($n=1,2,3,\dots$)
- Wichtige Energielieferanten in biochemischen Prozessen
- Bekanntes Beispiel: Glucose ($C_6H_{12}O_6$)

Motivation der Suche?

- Erkenntnis „Wer ist energetischer Spitzenreiter?“ – rekordverdächtige Moleküle [1]
- Verständnis chemischer energetischer Umwandlungen in Gärungsprozessen

Wann ist ein Molekül stabil?

- Stabilität ein Begriff der Thermodynamik
- Betrachtung der minimalen Energie des Moleküls
- Je kleiner die Verbrennungswärme, desto stabiler
- Suche des globalen Energieminimums schwierig, da
 - die Existenz mehrerer Minima möglich ist
 - Energiebarrieren zu überwinden sind

Methodik

Suche nach Molekülen und schwach gebundenen Komplexen am Temperaturnullpunkt 0 K (-273,15 °C)

1. „Die Natur befragen“
 - Suche nach Molekülen im Weltraum: Spektroskopische Untersuchung interstellarer Wolken [3]
 - Recherche experimenteller Nachweise von Molekülen in simulierter Weltraumumgebung
 - Nachweis im Weltraum aussagekräftig, da tiefe Temperaturen herrschen und Reaktionen über sehr lange Zeiträume ablaufen können?
2. Vergleich von Bildungsenthalpien „Brennwerte“
 - Literaturrecherche in thermodynamischen Datenbanken
 - Addition einfacher Bindungsenergien von C-C, C-O, O-H, C-H Bindungen [2]
3. Anwendung quantenchemischer Rechnungen (Turbomole und Gaussian09)
 - Näherungslösungen mathematischer Gleichungen zur Beschreibung der Molekülenergie
 - Optimierung von Molekülgeometrien – „Wie sind Atome innerhalb des Moleküls zueinander angeordnet?“
 - Berechnung der Energie der Wechselwirkung von Molekülen

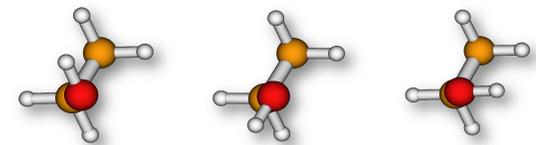
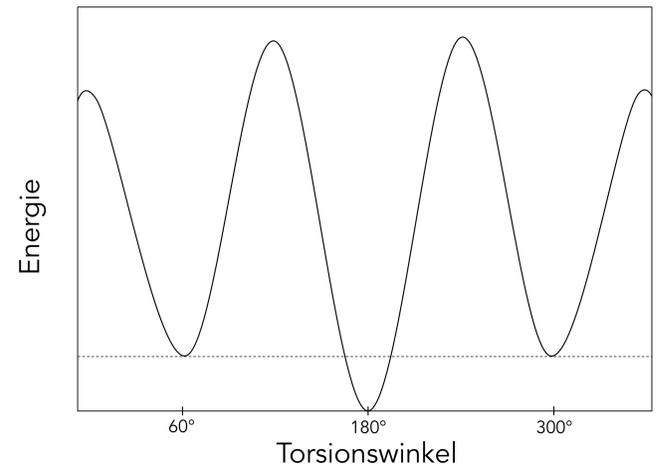
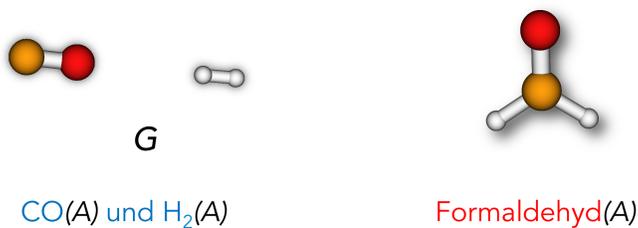
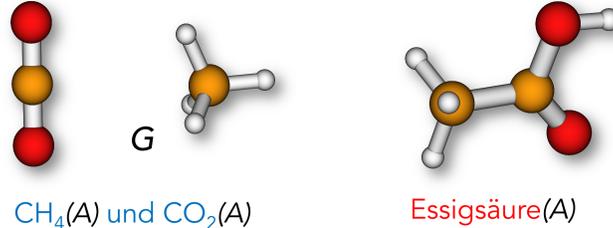


Abb.: Energie des Ethanol-Moleküls in Abhängigkeit des Torsionswinkels der OH-Gruppe

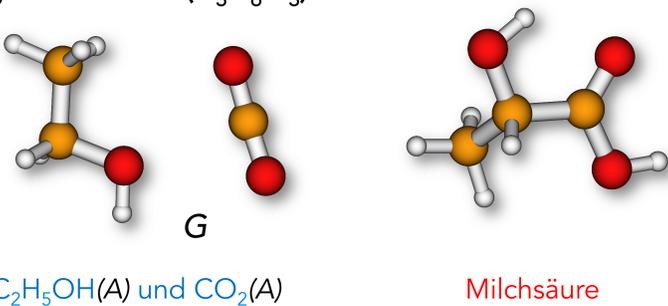
Ergebnisse n=1 (CH_2O)



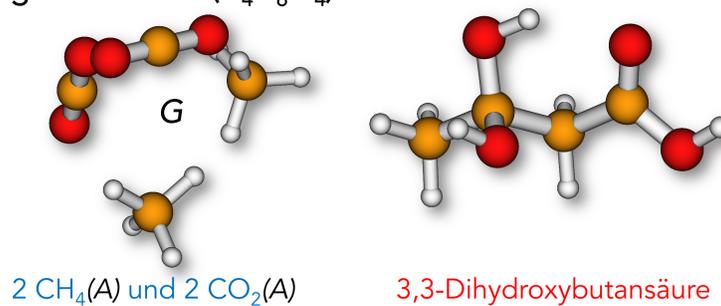
Ergebnisse n=2 ($C_2H_4O_2$)



Ergebnisse n=3 ($C_3H_6O_3$)



Ergebnisse n=4 ($C_4H_8O_4$)



Legende

- Stabilster Komplex
- Stabilstes Molekül
- Nachgewiesene Existenz im Weltraum (A) [4]
- Gewinner der Summenformel: G

Fazit:

Die auf n skalierte Stabilität der Kohlenhydrate steigt mit steigendem n und findet vermutlich sein Optimum in einem System aus Graphit und Eis ($n=\infty$). Die Berechnungen für n=4 widerlegen die Faustregel, dass geminale OH-Gruppen instabil sind. Gerade n weisen durch die Existenz des Komplexes aus Methan und Kohlenstoffdioxid im Verhältnis zu den Favoriten für die ungeraden n eine größere Stabilität auf. Die Mehrzahl der favorisierten Komplexe sind bisher noch nicht experimentell nachgewiesen, sodass deren Untersuchung ein Ziel weiterführender Forschung sein kann.

Autoren:

Kerstin Krüger, Dmitry Borodin, Darius Rohleder, Lennart Reuter, Fabian Hecker, Roland Schulz, Helen Preiß, Xuan Thuy Nguyen, Marco Eckhoff, Marcel Levien, Martin A. Suhm, Jonas Altnöder

Referenzen:

- [1] M. A. Suhm, *Angew. Chem.* **2014**, 126, 1742-1743.
- [2] N. Cohen, *J. Chem. Phys.* **1996**, 25, 1411.
- [3] W. Watson, *Acc. Chem. Res.* **1977**, 10, 221-226.
- [4] J. M. Hollis, *The Astrophys. J.* **2001**, 554, 81-85.