

Chemie im 21. Jahrhundert

Chemische Forschung enthält nicht nur einen guten Teil an Handwerk und Methodik, sondern ist, nimmt man Kreativität und Schaffung von neuen Strukturen, durchaus mit der Kunst vergleichbar. Wohin sind also Kunst und Handwerk der Chemie heute und zukünftig gerichtet?

Die chemische Industrie wird auch in Zukunft eine Schlüsselrolle für die Ökonomie und Wertschöpfung eines Landes spielen. Im Zeichen der Globalisierung ändern sich allerdings traditionelle Standorte, Märkte und Technologien. Noch immer ist das Bild der chemischen Großindustrie in vielen Bevölkerungsschichten davon geprägt, dass negative Einflüsse auf die Umwelt ausgeübt werden. Daher ist es von großer Bedeutung, die Risiken chemischer Produktion zu minimieren. Während gesetzliche Regularien des Umgangs mit Chemikalien die Einwirkung letzterer auf die Umgebung kontrollieren und dadurch das Risiko senken, besteht ein weiterer Ansatz darin, die potentielle Gefahr der chemischen Produktion selbst zu senken, indem die so genannte »grüne« Chemie (nachhaltige Entwicklung) die intrinsischen Gefahrenfaktoren von Prozessen und Produkten minimiert [1]. Die Zeit seit der Prägung des Begriffes »green chemistry« vor zehn Jahren ist noch zu kurz, um systematisch neue Technologien in die chemische Industrie einzuführen. Nichtsdestoweniger gibt es schon einige Fortschritte in dem Bestreben, gefährbringende Chemikalien aus den Produktionsprozessen zu entfernen (z.B. N_2O als Oxidationsmittel, tri-Butylzinnhydrid als Antifäulnismittel, Ersatz von Fluorchlorkohlenwasserstoffen durch Treibmittel ohne ozonschädigende Wirkung etc.).

»Grüne Chemie« ist eine Herausforderung auch an die akademische Forschung für die Entwicklung von alternativen Lösungsmitteln (wie superkritische Flüssigkeiten), alternative Synthesewege über katalytische Prozesse mit hoher Selektivität und Atomökonomie einschließlich der Nutzung von Enzymen als Katalysatoren

Abb. 1
DNA-Analoga für die Hemmung der DNA-Methyltransferase (siehe dazu den Beitrag von O. Seitz: Biopolymers)

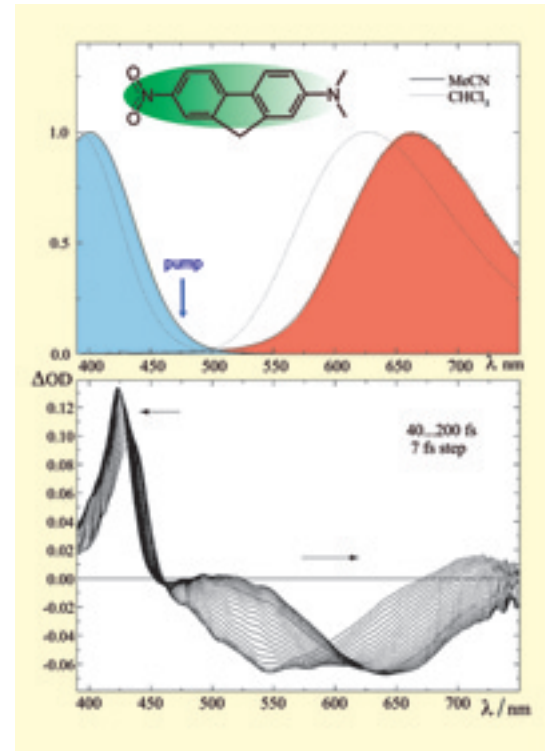
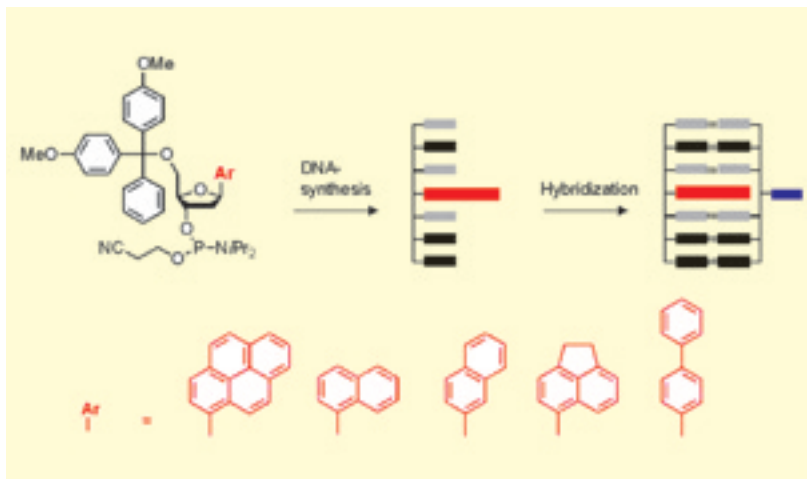


Abb. 2
Verfolgung der Änderungen der transienten Absorption eines Farbstoffs in fs-Schritten (siehe dazu den Beitrag von N. Ernsting: Optical Broadband Spectroscopy with Femtosecond Time Resolution)

und gekoppelte Prozesse, die die Nebenprodukte des einen Verfahrens zum Rohstoff eines zweiten machen.

Chemische Forschung enthält nicht nur einen guten Teil an Handwerk und Methodik, sondern ist, nimmt man Kreativität und Schaffung von neuen Strukturen, durchaus mit der Kunst vergleichbar. Wohin sind also Kunst und Handwerk der Chemie heute und zukünftig gerichtet?

1. Synthese von neuen Molekülen und Materialien

Die Synthese von neuen Molekülen und Materialien steht nach wie vor im Mittelpunkt chemischen Wirkens. Möglicherweise vollzieht sich in der biologischen Wirkstoffforschung ein Wandel von natürlich vorkommenden Molekülen als Zielstruktur zur Synthese von Molekülen oder Aggregaten, die eine Funktion auf molekularer Ebene ausüben, die Zielfunktion tritt in den Vordergrund. Albert Eschenmoser hat sogar die Synthese eines lebenden molekularen Systems als eine Aufgabe des 21. Jahrhunderts genannt. Synthesetechniken mit Automaten, die kombinatorische Chemie sowie immer empfindlichere Analysenmethoden werden die Bereitstellung von immer mehr neuen Verbindungen in immer kürzeren Zeiten erlauben. Die Chemie der nichtkovalenten Bindungen (supramolekulare Chemie) wird die Synthese von komplexen Funktionsmaterialien, beispielsweise von molekularen Maschinen ermöglichen, deren Vorbild uns die Natur liefert [2]. Der Synthetiker greift zunehmend auf die Ressourcen der Natur zurück, indem er Kombinationen von zellularen Substrukturen mit synthetischen Elementen verbindet. So kann das Potential von Nukleinsäuren für die Informationsspeicherung genutzt werden, um

mittels Nanotechnologie elektronische Bauelemente, Sensoren, medizinische Diagnostika (Abb. 1), elektrisch kontrollierbare Biomoleküle oder Datenspeichersysteme zu entwickeln [3]. Biologie und Chemie verbinden sich, um den Vorteil der Evolution über Millionen von Jahren technologisch zu nutzen.

Große Anstrengungen werden aber auch unternommen, mit ausgeklügelten entworfenen neuen Molekülen und Nanofabrikationstechniken eine molekulare Elektronik zu entwerfen [4].

2. Schneller, kleiner, genauer

Unter dieses Motto könnte man Entwicklungstrends zusammenfassen, die darauf abzielen, immer bessere Einblicke in den Ablauf chemischer Reaktionen und die Struktur der Materie zu gewinnen. Die Entwicklung von Laserimpulsen im Femto- (Abb. 2) und nun sogar schon im Attosekundenbereich erlaubt es, die Primärprozesse chemischer Umwandlung zu studieren. Damit werden Übergangszustände chemischer Reaktionen sichtbar und die Zeitauflösung einer einzigen Schwingung in einem Molekül oder Molekülensemble erreicht.

Kleiner werden die Beobachtungsobjekte (Abb. 3). Die Entwicklungen in der Nanooptik gestatten die Verfolgung des Schicksals einzelner Moleküle, Peptide oder auch Viren, während bisher überwiegend das durchschnittliche Verhalten einer Vielzahl von Molekülen untersucht worden ist. Die Beziehungen zwischen Größe und Eigenschaften von beispielsweise Metallen

erschließen sich bei der Untersuchung von Clustern, die aus einer begrenzten Anzahl von Atomen bestehen.

Stetig genauer werden die Methoden der Analytik, in der Methoden zum Nachweis immer kleinerer Mengen von Stoffen und Molekülen entwickelt werden. Über den »bloßen« Nachweis hinaus ermöglichen aber analytische Methoden den Nachweis kleinster Änderungen der Molekülgestalt bei der Wechselwirkung untereinander.

3. Theoretische Chemie

Selbst bei zunehmender Empfindlichkeit sowie räumlicher und zeitlicher Auflösung der Untersuchungsmethoden werden Bereiche des Ablaufs chemischer Reaktionen oder von Strukturen bleiben, die einer direkten Beobachtung nicht zugänglich sind. Hier hilft mit verfeinerten Rechenmethoden (und mit enorm gesteigerten Rechnerkapazitäten) die theoretische Chemie, die den Zugang zu Eigenschaften von immer größeren Molekülen und Molekülensembles errechnet. Gerade das Design von funktionalen Molekülen kommt ohne quantenchemische und Kraftfeldrechnungen nicht aus.

Literatur

- [1] M. Poliakoff / J. M. Fitzpatrick / T. R. Farren / P. T. Anastas, *Science* 297 (2002) 807.
- [2] M. Schliwa / G. Woehlke, *Nature* 422 (2003) 759
- [3] R. F. Service, *Science* 298 (2002) 2322.
- [4] Molecular Electronics, A »Chemistry for the 21st Century« monograph (Eds. J. Jortner, M. Ratner, Blackwell Science 1997.



Abb. 3
Ein Gedicht von Hermann Hesse, geschrieben in ein Polymer mit der Spitze eines Kraftfeldmikroskops (siehe dazu den Beitrag von K. Rademann / C. Ritter: *Friction on the Nanometer-Scale*)

Kontakt

Prof. Dr.
Hans-Werner Abraham
Humboldt-Universität
zu Berlin
Mathematisch-Naturwis-
senschaftliche Fakultät I
Institut für Chemie
Brook-Taylor-Str. 2
D-12489 Berlin
Tel.: +49-30-2093-7348
Fax: +49-30-2093-7266
E-Mail: abraham@
chemie.hu-berlin.de
www.chemie.hu-berlin.de/
abraham/index.html