

## Medieninformation der Universität Innsbruck

22. Juni 2017

# Atomen beim Wettstreit um Bindungen zugeschaut

**Auf atomarer Ebene beobachten Innsbrucker Physiker und Chemiker um Roland Wester im Labor komplexe chemische Reaktionen. In einer Arbeit in der Fachzeitschrift Nature Communications liefern die Forscher nun eine Antwort auf eine alte Frage zum Wettstreit zweier wichtiger Reaktionsmechanismen der organischen Chemie.**

Viele chemische Reaktionen sind eine Abfolge von sehr komplexen Prozessen, die bis heute nicht vollständig verstanden werden. Mit Laborexperimenten versucht Roland Wester vom Institut für Ionenphysik und Angewandte Physik der Universität Innsbruck einen neuen Blick auf solche Reaktionen zu werfen und deren Dynamiken besser zu erfassen. Wester baute dazu ein einzigartiges Experiment, mit dem Ionen und Moleküle zur Reaktion gebracht und dabei beobachtet werden können. Seinem Team ist es so erstmals gelungen, die atomare Dynamik der sogenannten nukleophilen Substitutionsreaktion exakt zu beschreiben.

In einer aktuellen Studie untersuchte ein Team der Arbeitsgruppe um den Nachwuchsforscher Eduardo Carrascosa nun organische Verbindungen, an deren zentralem Kohlenstoffatom mehrere Methylgruppen gebunden sind. In einer Vakuumkammer brachten die Forscher diese Moleküle mit geladenen Teilchen aus der chemischen Gruppe der Halogene, wie Fluor, Iod oder Chlor, zur Kollision. „Das Spannende an diesem Experiment ist, dass nicht vorhersehbar ist, welche von zwei chemischen Reaktionen dabei stattfinden wird“, sagt Roland Wester. Entweder das Ion bindet an das Molekül und dieses stößt das bisher gebundene Halogenatom ab (nukleophile Substitutionsreaktion) oder das Ion schlägt ein Wasserstoffatom aus der Methylgruppe und fliegt damit davon (Eliminierungsreaktion). „Die beiden Reaktionen sind im Wettstreit“, erklärt der Physiker. Bei der Synthese von chemischen Verbindungen kommt diese Eigenschaft ungelegen, will man doch das Ergebnis einer Reaktion meistens sehr genau kontrollieren.

### Erstmals Daten aus direkter Beobachtung

Mit der Apparatur von Roland Wester kann sehr genau beobachtet werden, welche Reaktion bei einer Kollision abgelaufen ist. Die Physiker erfassen dazu den Winkel und die Geschwindigkeit, mit der die Ionen auf einem Detektor auftreffen. „Wir können schon in den Rohdaten sehen, wie die beiden Reaktionstypen über eine Vielzahl von Messungen verteilt sind“, erzählt Eduardo Carrascosa. Dabei zeigt sich, dass bei größeren Molekülen die Eliminierungsreaktion die Überhand gewinnt und die Substitutionsreaktion

### Rückfragehinweis:

Univ.-Prof. Dr. Roland Wester  
Institut für Ionenphysik und  
Angewandte Physik  
Universität Innsbruck  
Telefon: +43 512 507-52620  
E-Mail: roland.wester@uibk.ac.at

Dr. Christian Flatz  
Büro für Öffentlichkeitsarbeit  
Universität Innsbruck  
Telefon: +43 512 507 32022  
E-Mail: christian.flatz@uibk.ac.at



irgendwann verschwindet. Während bisher nur indirekte Antworten auf diese Fragestellung möglich waren, präsentieren die Innsbrucker Physiker in der aktuellen Arbeit in der Fachzeitschrift Nature Communications erstmals Daten aus direkten Beobachtungen. „Möglich war dieses Experiment, weil wir unsere Methode laufend verfeinert haben und so über viele Wochen stabile Messungen durchführen können“, sagt die beteiligte Forscherin Jennifer Meyer.

Die Forscher um ERC-Preisträger Roland Wester können mit ihrer Methode die chemischen Beziehungsspiele auf atomarer Ebene sehr genau verfolgen. Sie wollen als Nächstes untersuchen, ob der Wettstreit zwischen den beiden Reaktionstypen durch die Anregung einzelner Atome am Molekül beeinflusst werden kann. „Wir wollen mögliche Wege aufzeigen, wie dieser Prozess gezielt gesteuert werden kann“, sagt Roland Wester. „Dies könnte für die chemische Synthese äußerst hilfreich sein.“

Die aktuelle Studie wurde vom österreichischen Wissenschaftsfonds FWF und der österreichischen Akademie der Wissenschaften ÖAW finanziell unterstützt. Theoretische Beiträge steuert ein Team um William L. Hase von der Texas Tech University in den USA bei.

**Publikation:** Imaging dynamic fingerprints of competing E2 and S<sub>N</sub>2 reactions. Eduardo Carrasco, Jennifer Meyer, Jiaxu Zhang, Martin Stei, Tim Michaelson, William L. Hase, Li Yang, and Roland Wester. Nature Communications 2017 DOI: s41467-017-00065-x (<https://www.nature.com/articles/s41467-017-00065-x>)

#### Links:

- Arbeitsgruppe Molekulare Systeme am Institut für Ionenphysik und Angewandte Physik

Eine Medieninformation des Büros für Öffentlichkeitsarbeit der Universität Innsbruck (Anschrift: Christoph-Probst-Platz, Innrain 52, A-6020 Innsbruck, Tel.: +43 512 507 32000, E-Mail: [presse@uibk.ac.at](mailto:presse@uibk.ac.at))