

Einstein und die Chemie Von schweren Elementen und schnellen Elektronen



$$E_{kin} + E_{pot} = konst.$$

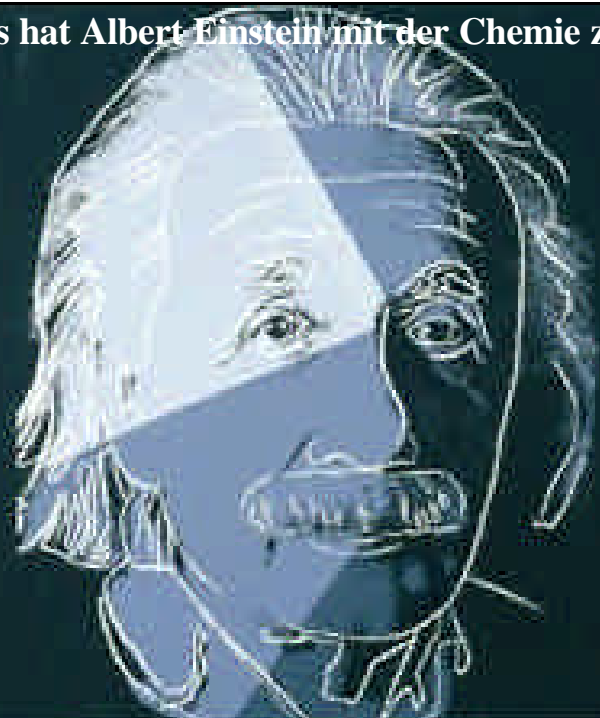


$$M_{Addukt} = M_{Produkt}$$



$$E = mc^2$$

Was hat Albert Einstein mit der Chemie zu tun?



Einstein und
die Chemie

Teil 1

$E=mc^2$

Der Massenerhaltungssatz - Ein fundamentales Gesetz der Chemie



Antoine Lavoisier (1743-1794)



Michail W. Lomonossow
(1711-1765)

Lomonossow-Lavoisier Gesetz der Erhaltung der Masse:

"Die Masse der Produkte ist nach einer chemischen Reaktion genauso groß wie die Masse der Ausgangsstoffe."

Materie als ganzes kann nicht erzeugt oder zerstört werden

Der Energieerhaltungssatz - Ein fundamentales Gesetz der Physik



Gottfried Wilhelm Leibniz
(1646 –1716)
 $\sum_i m_i v_i^2 = konst.$



Sir Isaac Newton
(1643-1727)
 $\sum_i m_i v_i = konst.$

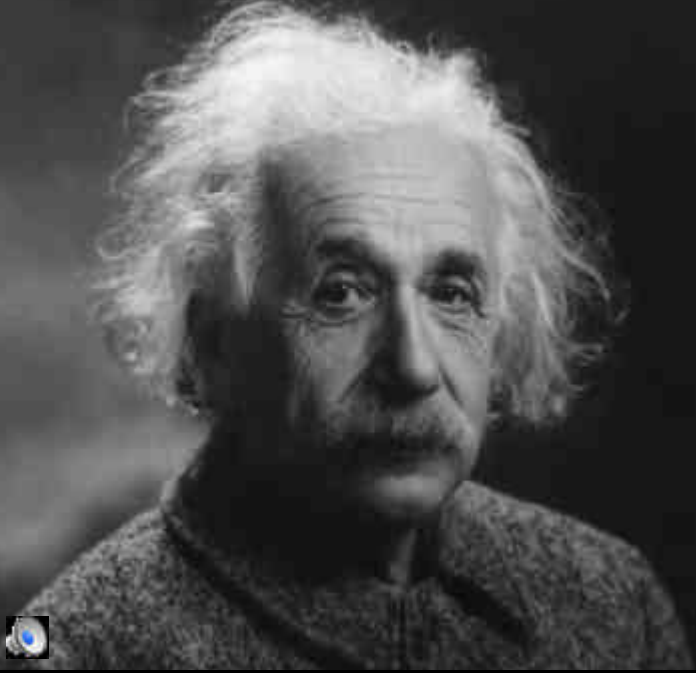


Julius Robert von Mayer
(1814-1878)
 $\sum_i m_i v_i^2 + V = konst.$

Energie als ganzes kann nicht erzeugt oder zerstört werden

Das Leibniz'sche Gesetz "vis viva" (lebende Kraft) ist ein Spezialfall des Energieerhaltungssatz und war Teil einer Auseinandersetzung mit Newton und Descartes, die beide den Impulserhaltungssatz favorisierten.

Energie=Materie kann nicht erzeugt oder zerstört werden



$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

A. Einstein (1905)

+

$$F = \frac{dp}{dt}$$

I. Newton (1687)



$$E = mc^2$$

A. Einstein (1905)

 **Der Massenerhaltungssatz in der Chemie** 

$E=mc^2 \rightarrow 1\text{kg} = 89\,875\,517\,873\,681\,764\text{ J} \sim 25\text{ GW-Std.}$

$2\text{ C}_7\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_6 \rightarrow 3\text{ N}_2 + 5\text{ H}_2\text{O} + 7\text{ CO} + 7\text{ C}$

$DE=4,25\text{ MJ/kg} = 47\text{ng/kg TNT Massenverlust}$



Können solche kleinen Massenverluste gemessen werden?

7,5 m

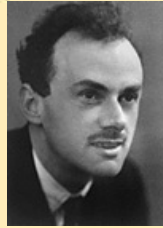
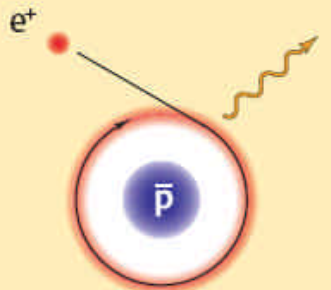


Penning-Falle mit Silizium Detektoren

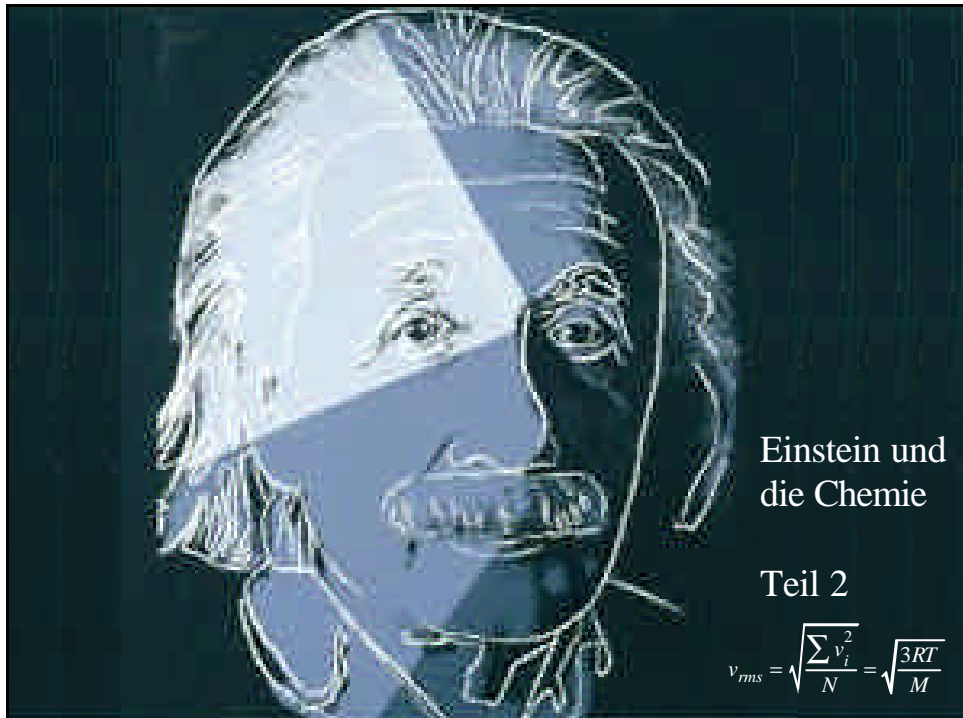
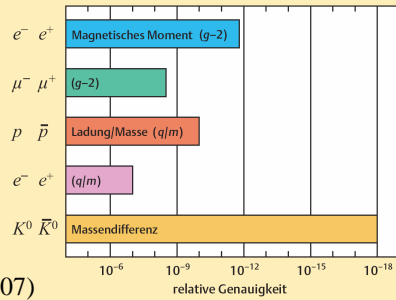
Antiwasserstoff-Experiment Athena in CERN



Positronenquelle



A. Kellerbauer, *Physik in unserer Zeit* **38**, 168 (2007)



Einstein und die Chemie

Teil 2

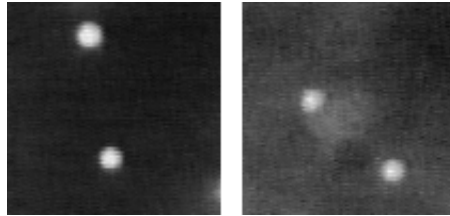
$$v_{rms} = \sqrt{\frac{\sum v_i^2}{N}} = \sqrt{\frac{3RT}{M}}$$

Die Brownsche Bewegung von Molekülen



Robert Brown (1773–1858)

Robert Brown war Botaniker und hat 1827 Bewegungen kleiner Partikel (Blütenstaubkörner and Sporen) in wässriger Lösung unter einem Mikroskop untersucht. Er stellte dabei fest, dass sich diese Partikel kontinuierlich und chaotisch bewegen.

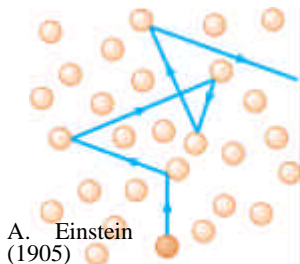
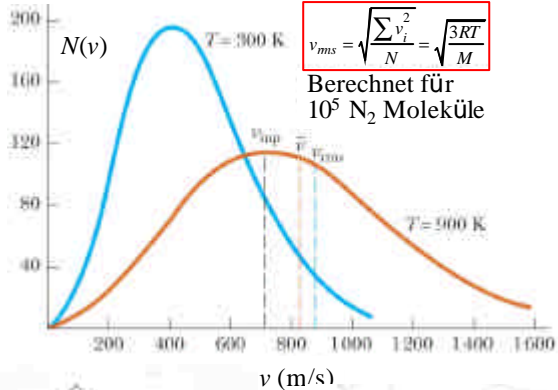


Einstein hat 1905 dazu die Theorie dazu geliefert!

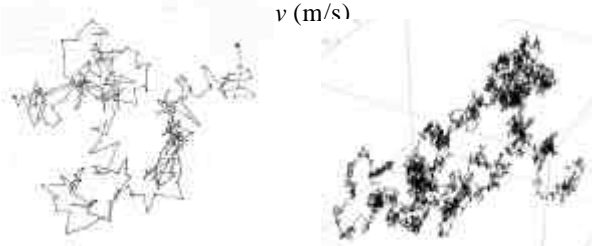
Die kinetische Energie von Molekülen



Ludwig E. Boltzmann (1844–1906)



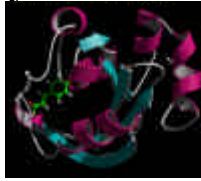
A. Einstein (1905)



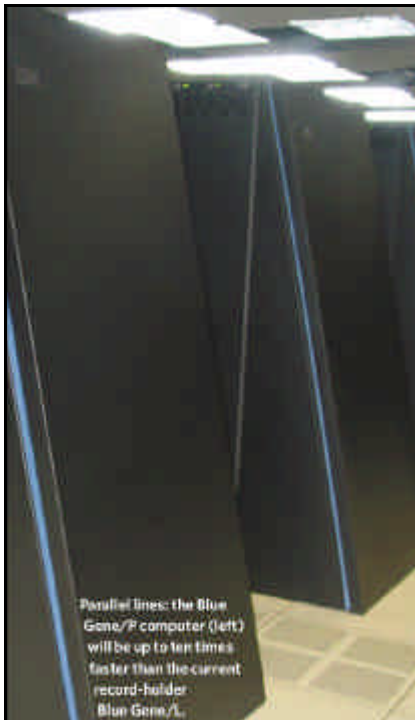
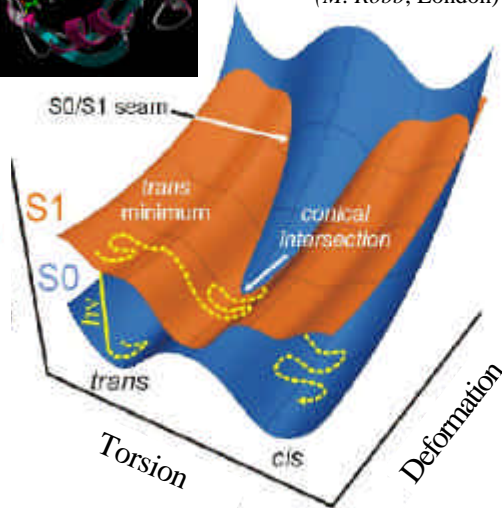
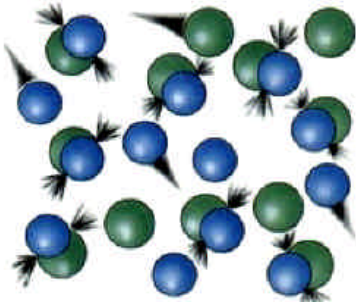
Ahmed Zewail
(Nobelpreis 1999)



Die Dynamik chemischer Reaktionen



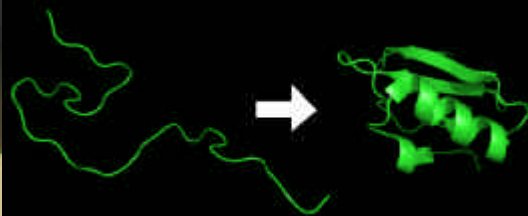
cis-trans photochemische
Umwandlung in einer Seiten-
kette des Arg52 Proteins
(M. Robb, London)



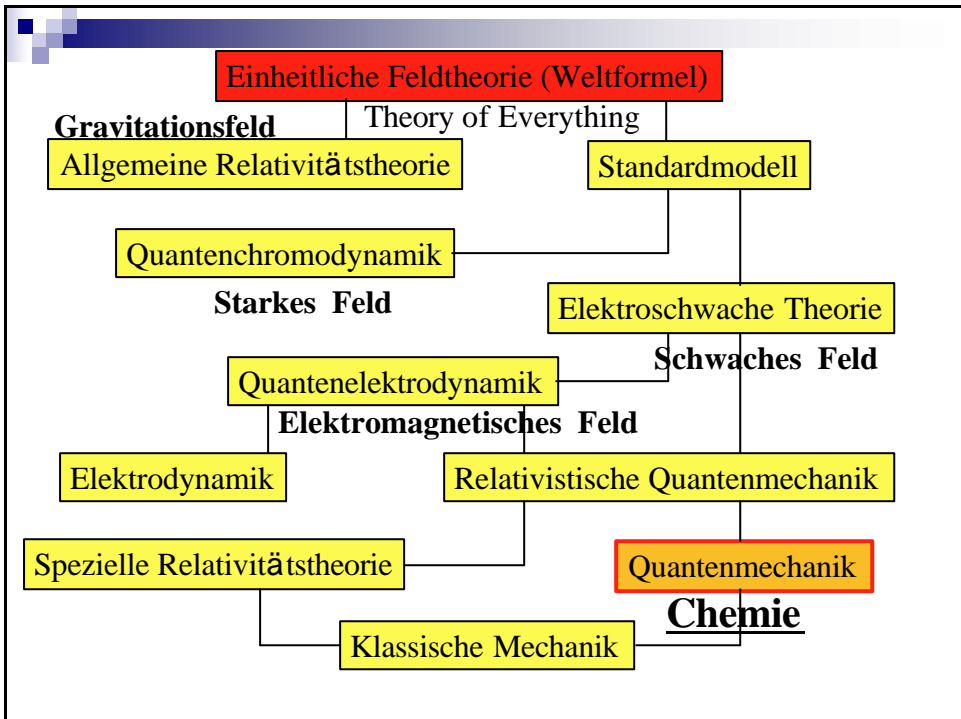
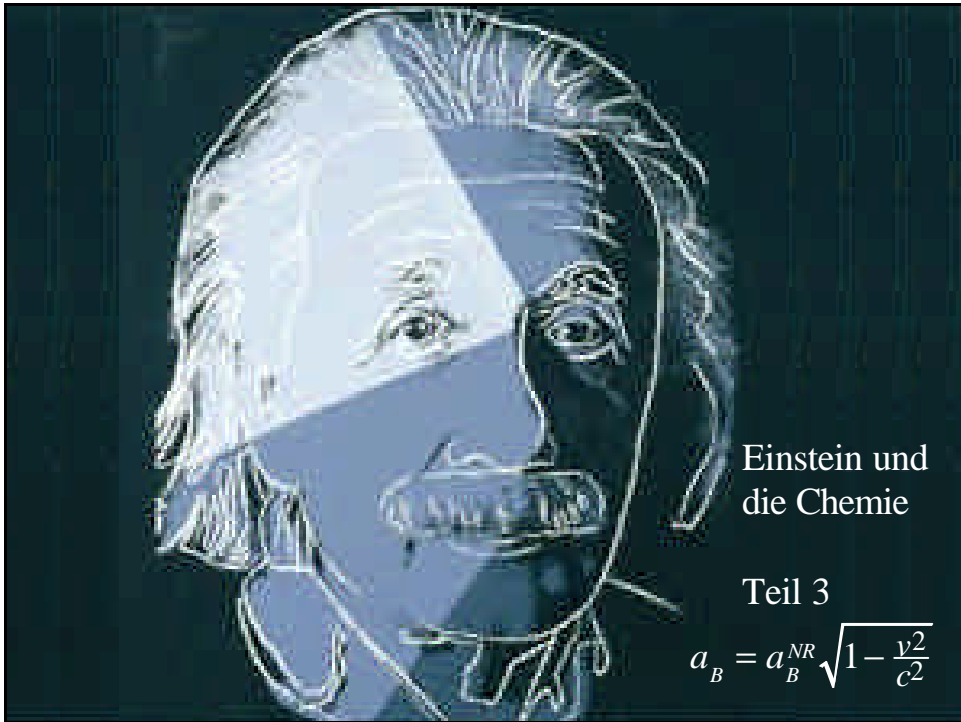
Parallel lines: the Blue Gene/P computer (left) will be up to ten times faster than the current record-holder Blue Gene/L.



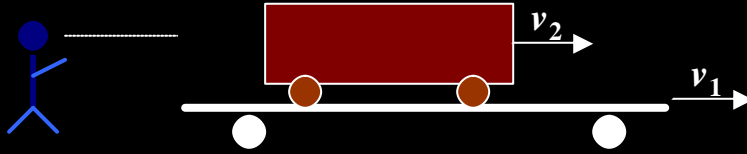
Proteinfaltung im *ms* Bereich



Blue-Gen/P startbereit in 2008 mit einer 3 petaflop Leistung von 884,736 Prozessoren (850 MHz)



Spezielle Relativitätstheorie



Klassische Physik

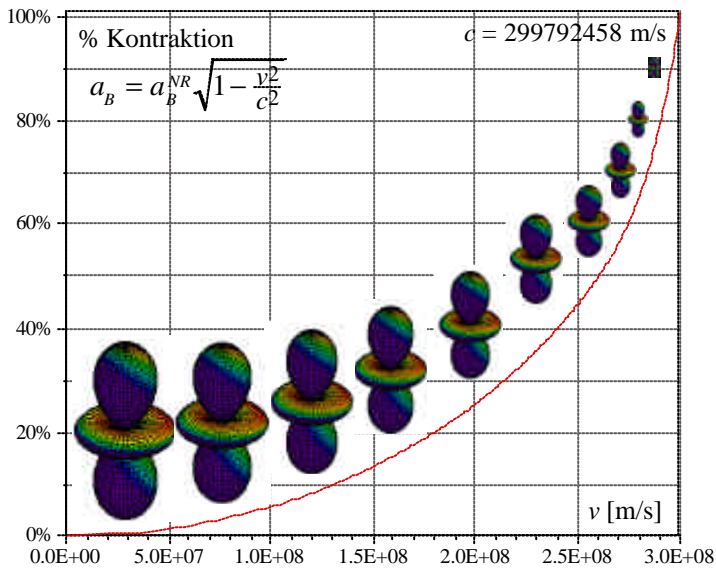
$$\begin{aligned} v_T &= v_1 + v_2 \\ m &= m_0 \\ l &= l_0 \end{aligned}$$

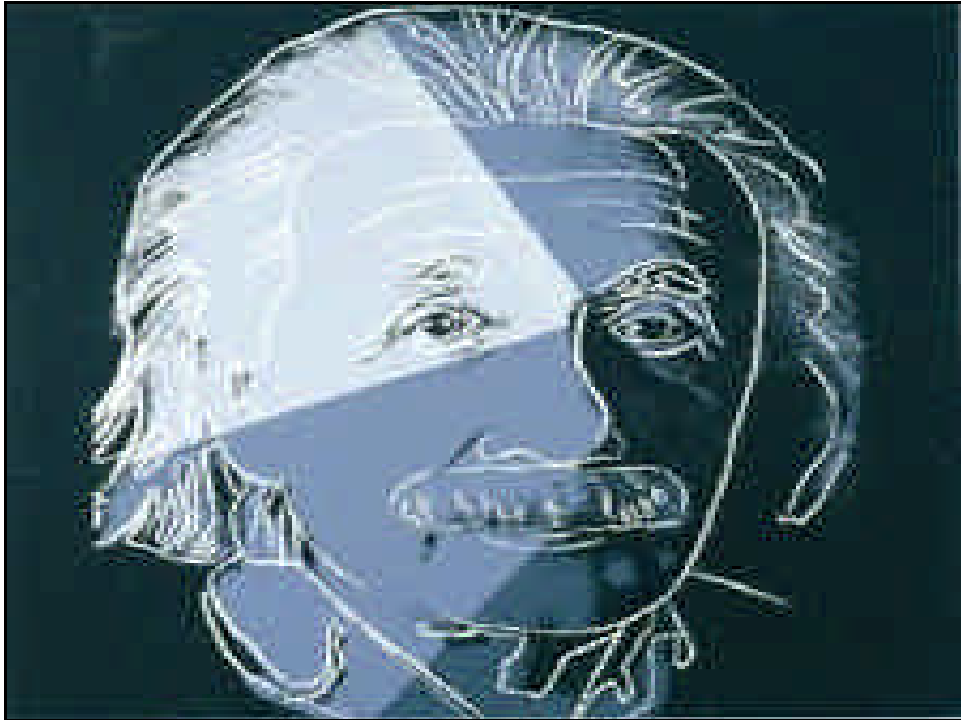
$\leftarrow \rightleftarrows \rightarrow \infty$
c

Spezielle Relativitätstheorie




$$\begin{aligned} v_T &= \frac{v_1 + v_2}{1 + \frac{v_1 v_2}{c^2}} \\ m &= m_0 / \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \\ l &= l_0 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \end{aligned}$$

Erreichen Valenzelektronen so hohe Geschwindigkeiten?





Anomalien in den Eigenschaften des Goldes

Eigenschaft	Cu	Ag	Au
Farbe			
Spezifische Leitfähigkeit ($10^{-8} \Omega m$)	1.72	1.62	2.4
Thermische Leitfähigkeit ($J cm^{-1} s^{-1} K^{-1}$)	3.85	4.18	3.1
Elektronische Wärmekapazität ($10^{-4} Jk^{-1}mol^{-1}$)	6.926	6.411	6.918
Schmelzpunkt ($^{\circ}C$)	1083	961	1064
Siedepunkt ($^{\circ}C$)	2567	2212	3080
Atomvolumen ($cm^3 mol^{-1}$)	7.12	10.28	10.21
Elektronegativität	1.9	1.9	2.4
Kohäsionsenergie (kJ/mol)	330	280	370
Chemisorptionsenergie von O_2 (eV)	5.4	6.0	3.6
Desorptionstemperatur von CO (K)	190-210	40-80	170-180
Oxidationstufen	I,II	I	I,III
Gruppe 11 M(I) Fluoride (fest)	unbekannt	AgF	unbekannt
Supraleiter	viele	selten	selten



GOLD – das unzerstörbare Metall. Aber warum ist es unzerstörbar?

Dänische Physiker haben es jetzt enträtselt: um den Cocktail der vielen Atome, die Gold seine „Schwere“ verleihen, schwimmt ein besonderer Stoff – das „d-orbital“.

So einfach geht es

Es wirkt wie Schmierseife und eine Gummihaut in einem.

So können andere Elemente sich nicht mit Gold mischen, es bleibt ewig rein

und klar. Den Oberflächen-Effekt von „d-orbital“ schaffen Physiker auch mit anderen Stoffen. Ideal: Mischung aus 3 Teilen Kupfer mit einem Teil Platin.



Dies soll das Ersatzgold der Zukunft werden – jedenfalls für industrielle Zwecke.

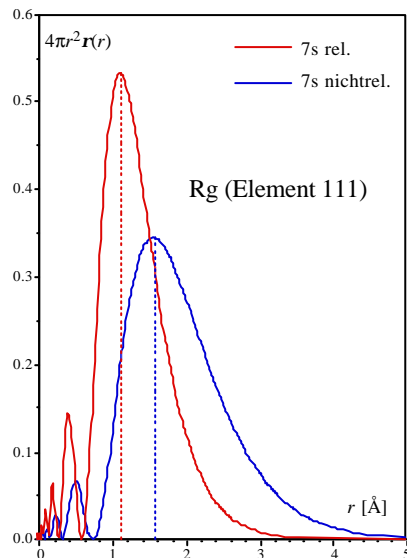
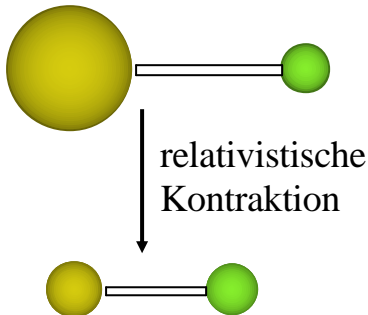
Übrigens: Gold und Platin sind fast gleich teuer (18 000 Mark/Kilo). Kupfer kostet da: 4 Mark...



Pekka Pyykkö (Helsinki)

Jean-Paul Desclaux (Grenoble)

Ian Grant (Cambridge)



Relativistische Effekte

M. Kaupp, Spektrum der Wissenschaften, 2005

$a_B = a_B^{NR} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$

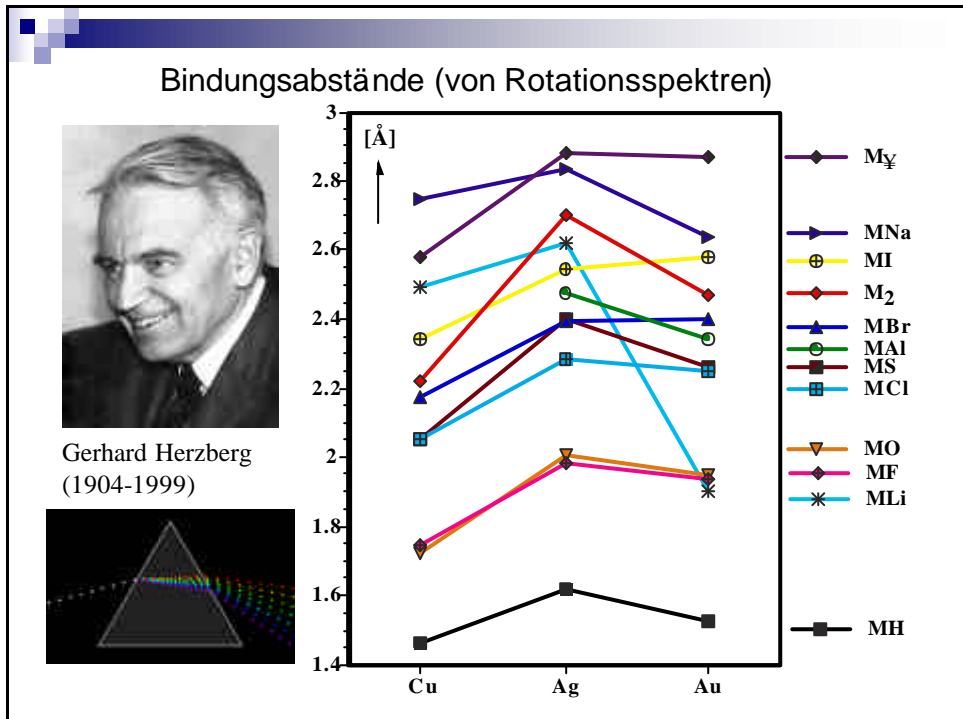
P.A.M. Dirac

**direkter Effekt
(Kontraktion)**

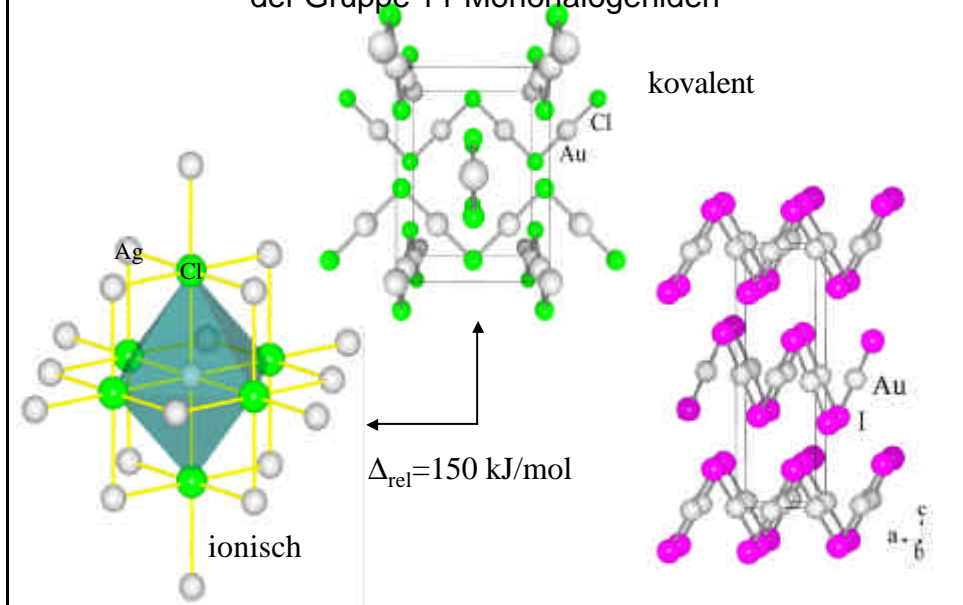
**indirekter Effekt
(Expansion)**

mit relativistischen Massen-
Geschwindigkeits-Effekten

nichtrelativistisch

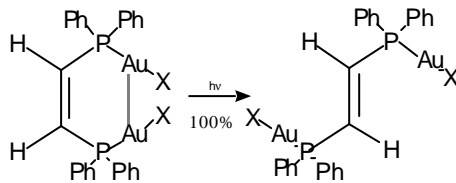


Die aussergewöhnlichen zick-zack Strukturen der Gruppe 11 Monohalogeniden

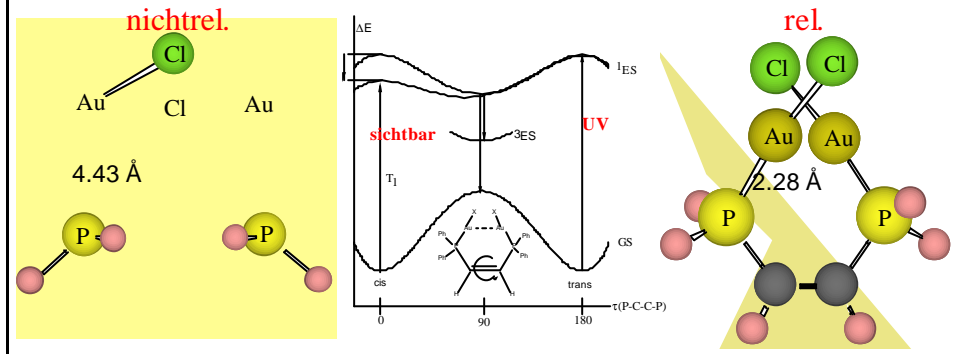


Die Photochemie von $\text{Au}_2\text{X}_2(\text{dppee})$

J.B.Foley, A.E.Bruce, M.R.M.Bruce, *J. Am. Chem. Soc.* **117**, 9596 (1996)

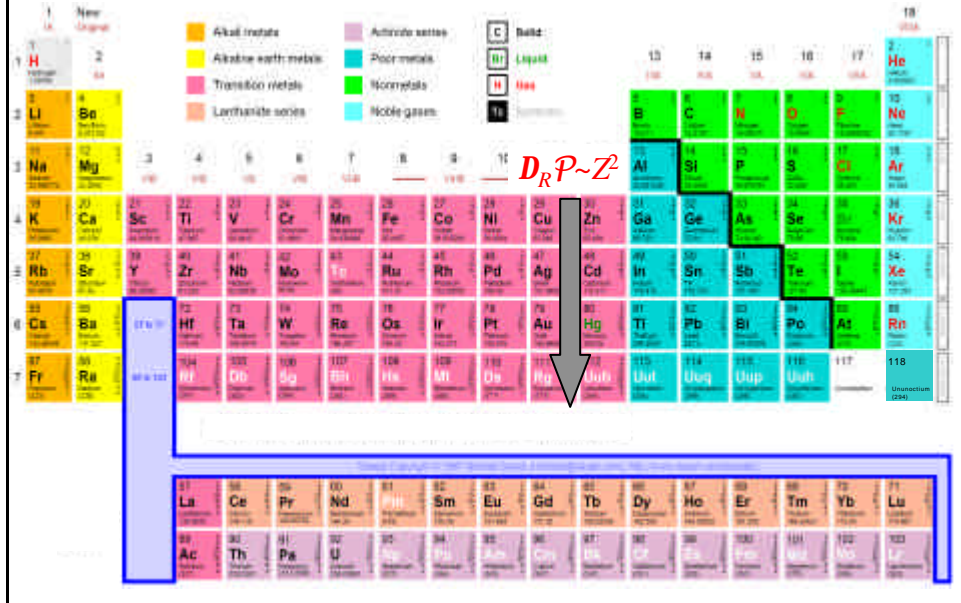


Ist das *trans*-Produkt thermodynamisch stabiler?

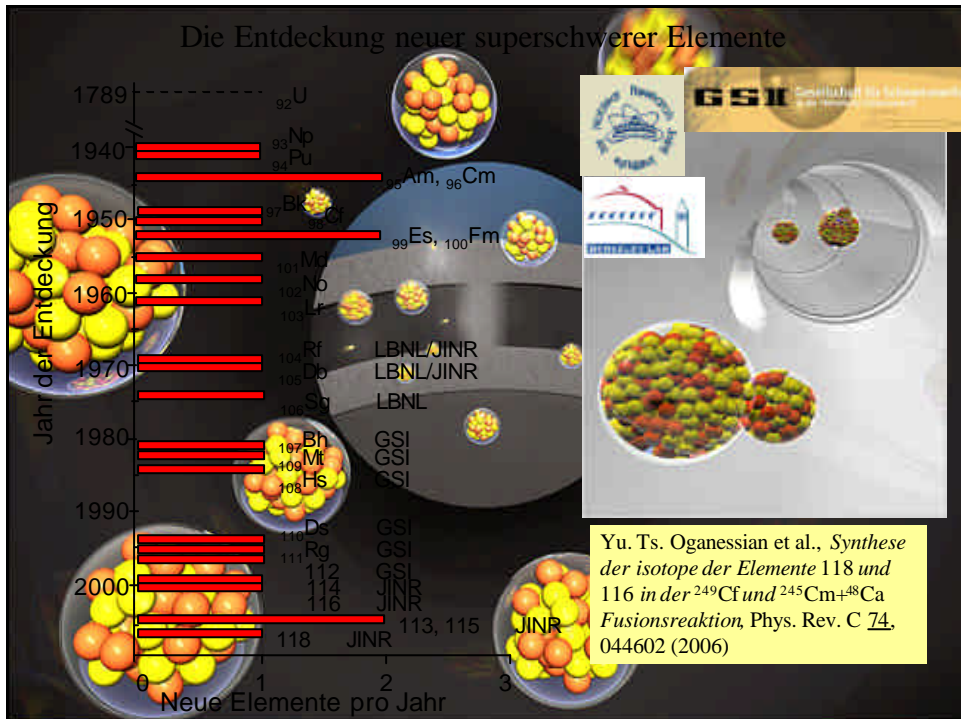


Periodensystem der Elemente

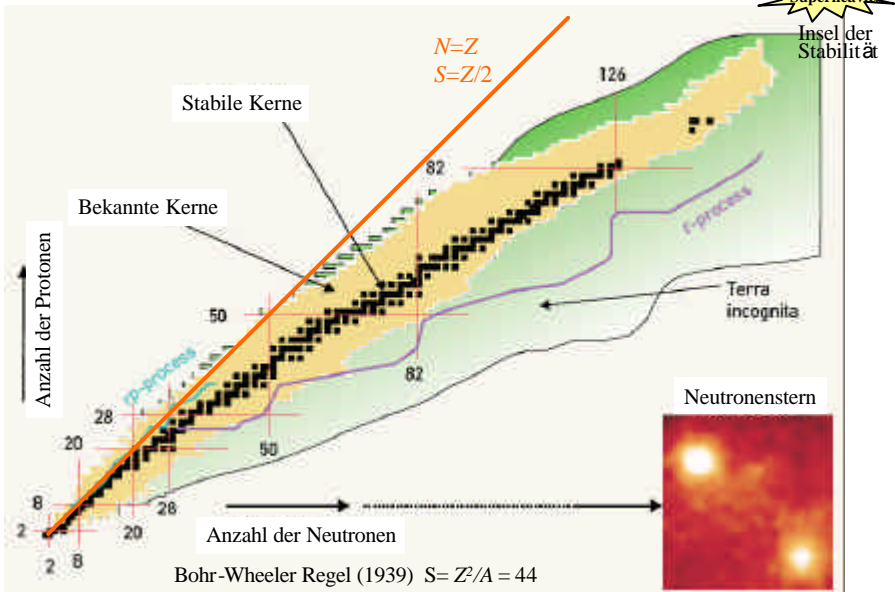
IUPAC Namen



Die Entdeckung neuer superschwerer Elemente



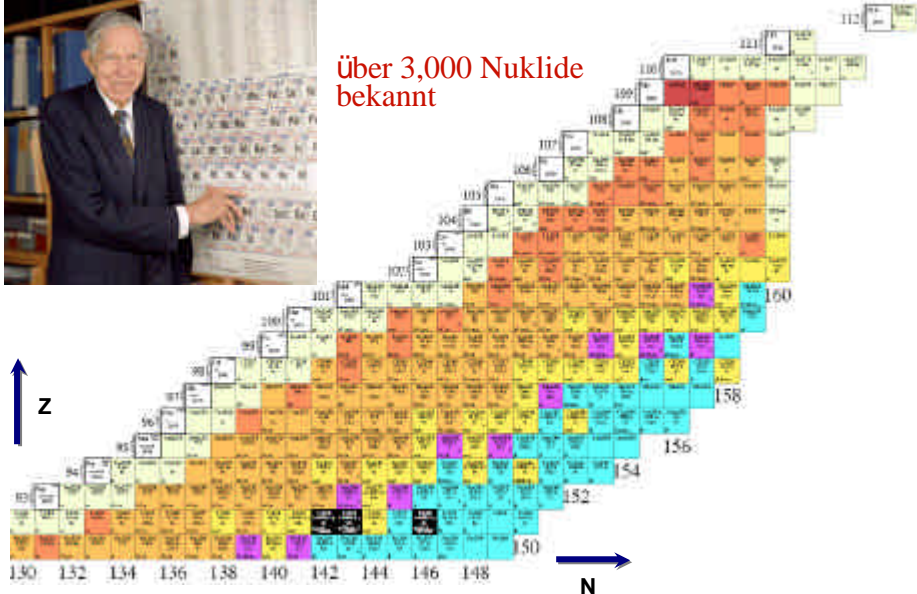
Das Problem der Synthese neutronreicher Kerne



Transaktinid-Nuklide



über 3,000 Nuklide bekannt

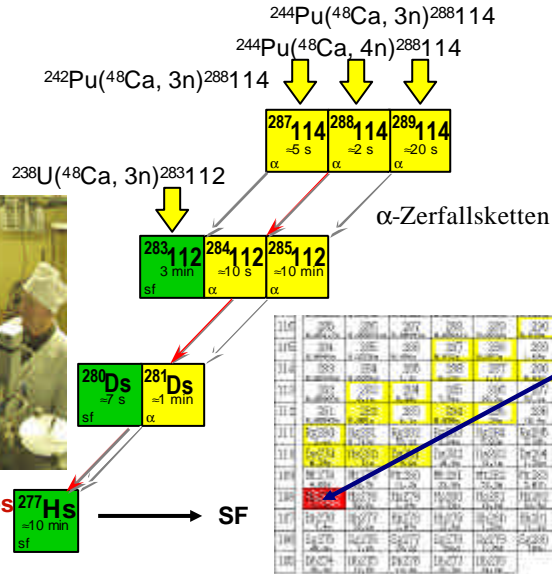


Das SHE Identifizierungsproblem

a oder andere Zerfallseigenschaften

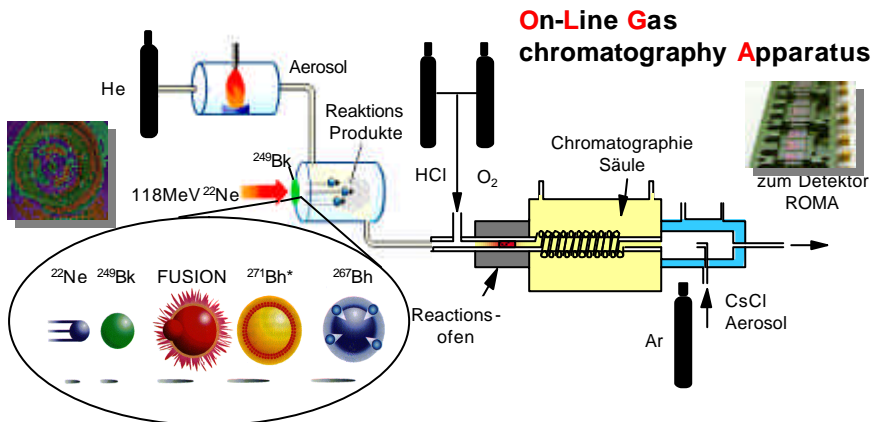


Kein bekanntes Isotop!



Atom-at-a-time Chemie

Kontinuierliche On-Line Chemie mit OLGA



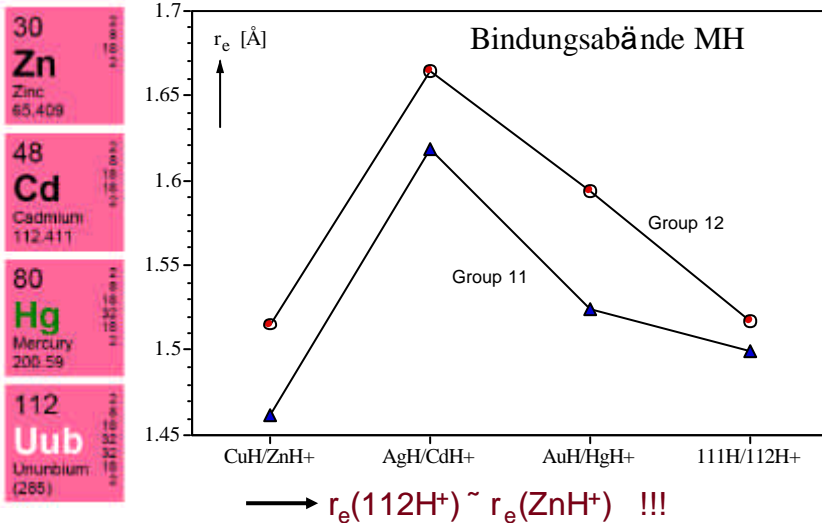
Transaktinidverbindungen



	<i>Transaktinidelemente</i>									
	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	112/114	
elementare Form								X	X	
Chloride	X	X					X	X		
Oxochloride	(X)	X	X	X						
Oxide					X	X	X			
Hydroxide			X	X		X				

Problem: Indirekte Methode der Identifizierung
 Antwort: Spektroskopie einzelner Moleküle?

Element 112 (Eka-Hg)



M.Seth, P.Schwerdtfeger, M.Dolg, *J. Chem. Phys.* **106**, 3623 (1997)
 Y.J. Yu, J.G. Li, C.Z. Dong, X.B. Ding, S. Fritzsche, B. Fricke, *Eur. Phys. J. D* **44**, 51 (2007)
 E. Eliav et al., Uzi Kaldor, and Yasuyuki Ishikawa, *Phys. Rev. A* **52**, 2765 (1995)

Gibt es die Oxidationsstufe +4 in der Gruppe 12?

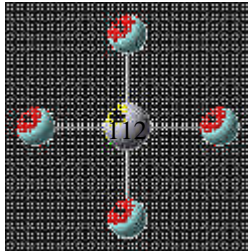
M.Kaupp (1993): $\text{HgF}_4 \rightarrow \text{HgF}_2 + \text{F}_2 + 19 \text{ kJ/mol}$ (-86 kJ/mol NR)

Seppelt (exp.): Kein Anzeichen von HgF_4 .

Aber:



L. Andrews *et al.*

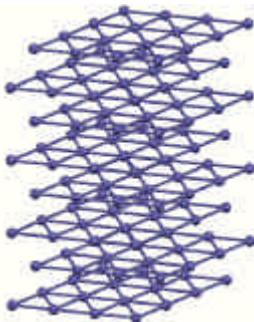


CCSD(T)+SO: $(112)\text{F}_4 \rightarrow (112)\text{F}_2 + \text{F}_2 + 60 \text{ kJ/mol}$

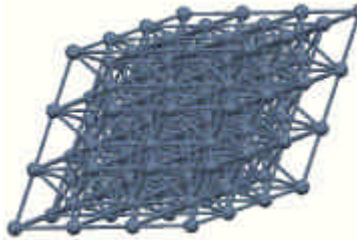
$(112)\text{F}_2 \rightarrow 112 + \text{F}_2 + 206 \text{ kJ/mol}$ (489 kJ/mol NR)
 $\rightarrow 112\text{F}_4$ ist nicht stabil auf nichtrelativistischem Niveau

M.Seth, P.Schwerdtfeger, M.Dolg, *J. Chem. Phys.* **106**, 3623 (1997)

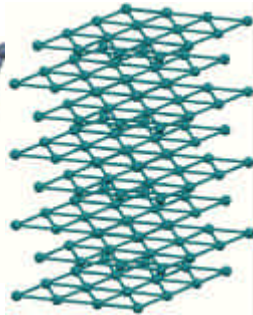
Ist Eka-Hg (Element 112) ein Gruppe 12 Metal?



Zn, Cd (*hcp*, $P63/mmc$)

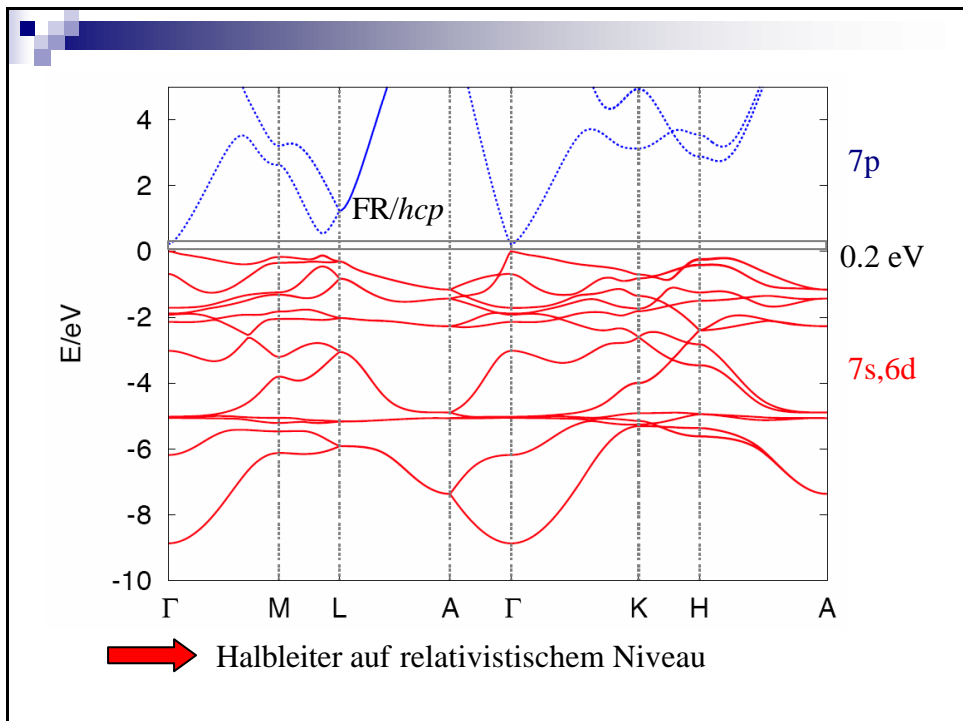
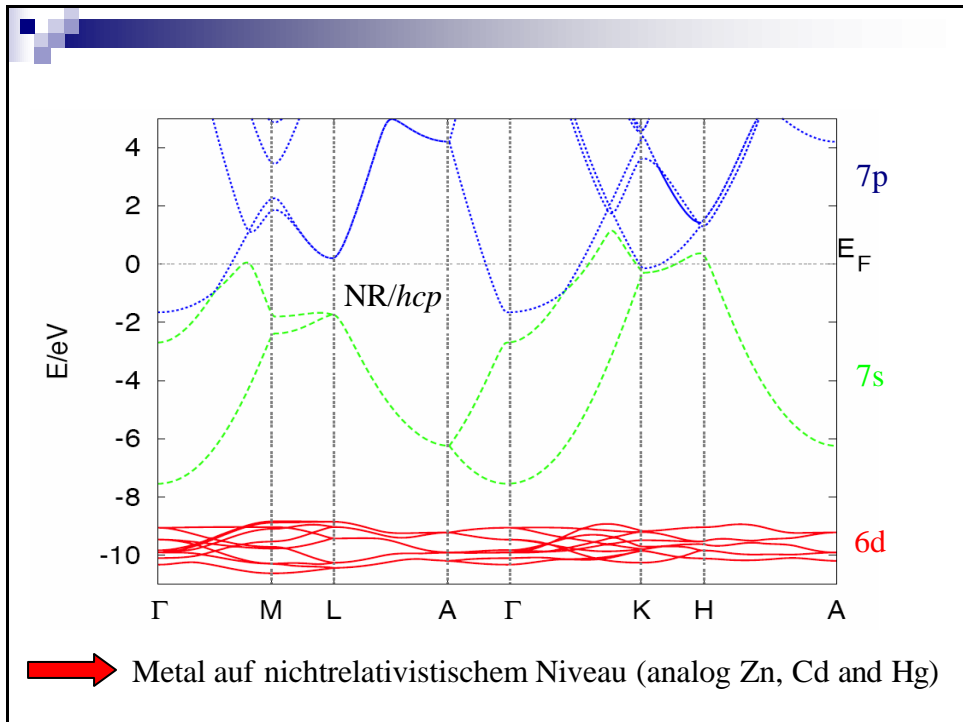


Hg (*rhom.*, $R-3m\bar{r}$)



112 (*hcp*, $P63/mmc$)





Zusammenfassung







War Albert Einstein auch ein Chemiker?

- Albert Einsteins Artikel über die spezielle Relativitätstheorie, den photoelektrischen Effekt und die Brownsche Bewegung wurden vor über 100 Jahren publiziert, in dem Jahr, das als sein „annus mirabilis“ bezeichnet wird.
- Obwohl Einstein Physiker ist, haben seine Theorien einen enormen Einfluss auf die Chemie, speziell auf dem Gebiet der Atom- und Molekültheorie.

Danksagung

Reuben Brown, Patricia Hunt, Holger Hermann,
Tilo Söhnel (Auckland)

AURC, HPCF (Auckland), FRG/NZ ISAT, Marsden (Wellington),
ESF, DFG, Alexander von Humboldt Foundation (Bonn),
Dr. John Hood (VC Auckland University)



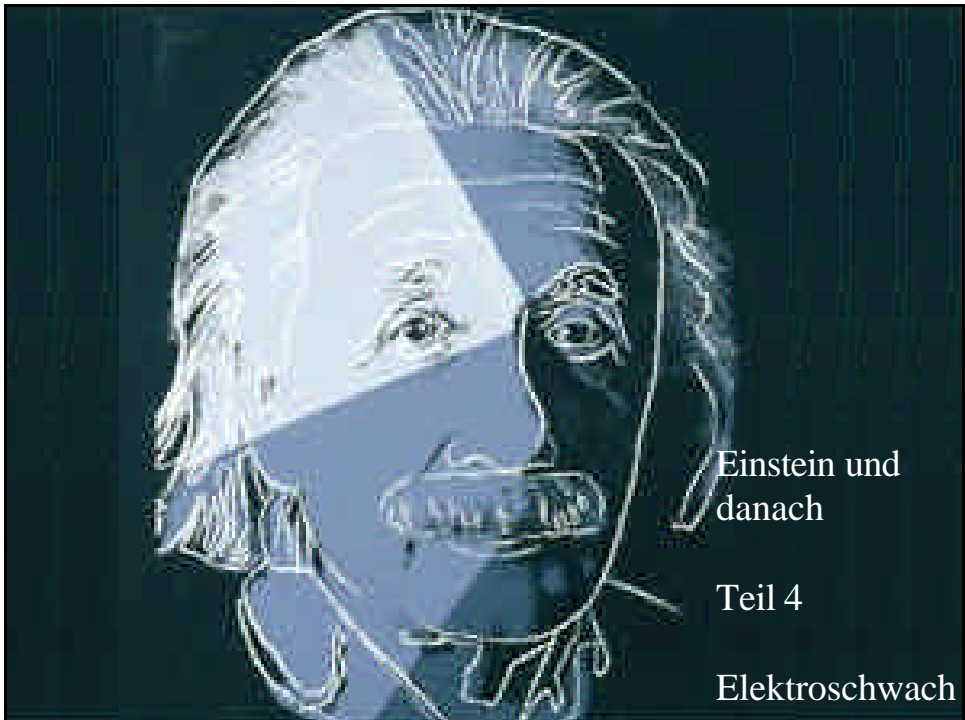


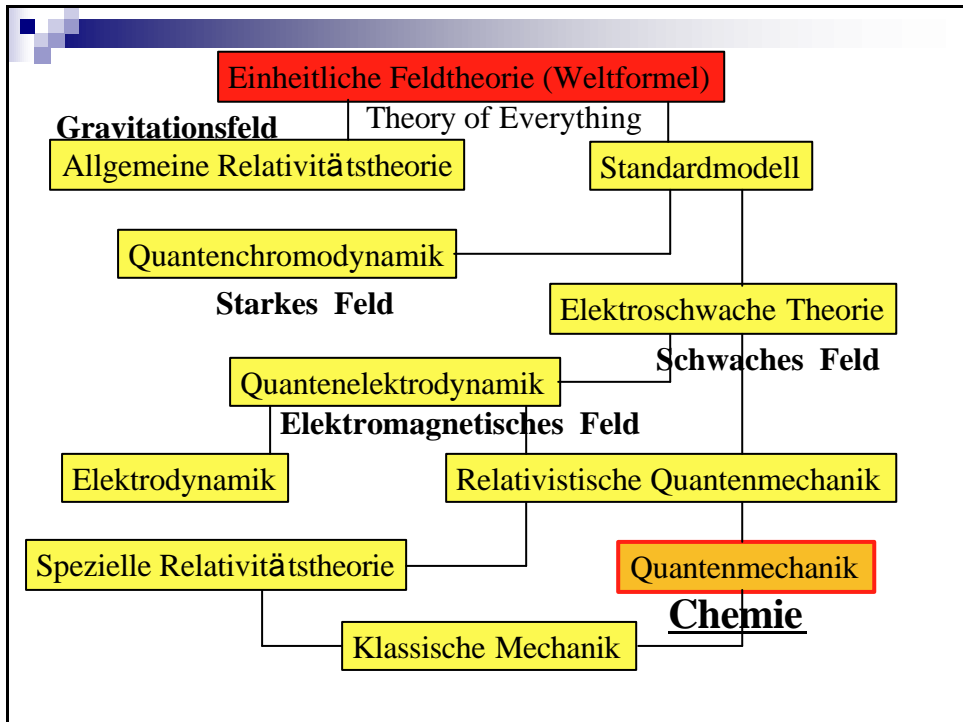
Massey University in Auckland



Neuseeland ist ein Traumland












Das Brechen der Spiegelbildsymmetrie

Mikroskopischer Bereich

QED

GSW


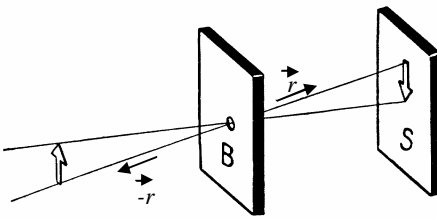

➔ Paritätsverletzung








Lee
Yang
Weinberg
Salam
Glashow

Prinzip der Paritätserhaltung

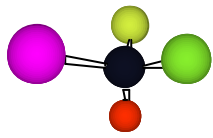
E. Wigner, Z. Phys. **43**, 624 (1927)

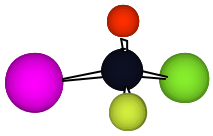


$$\vec{r} = (x, y, z) \xrightarrow{P} -\vec{r} = (-x, -y, -z)$$

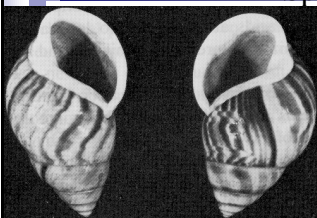
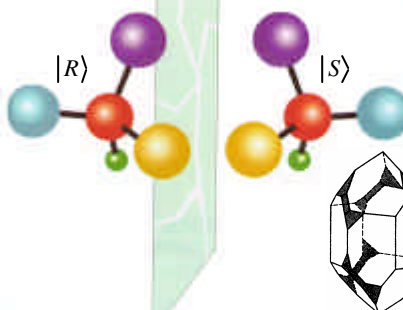
$$s(y, z) \rightarrow (-x, y, z) \quad j_x(180^\circ)$$





Inversion in 3D



Spiegelbildsymmetrie und Chiralität

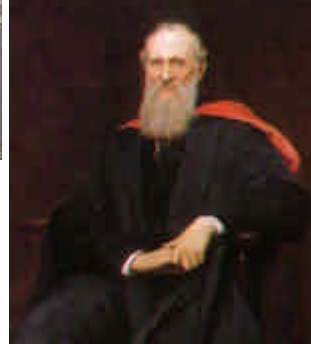
Enantiomere

„Was kann wohl meiner Hand oder meinem Ohr ähnlicher, und in allen Rücken gleicher sein, als ihr Bild im Spiegel? Und dennoch kann ich eine solche Hand, als im Spiegel gesehen wird, nicht an die Stelle ihres Urbildes setzen ...“

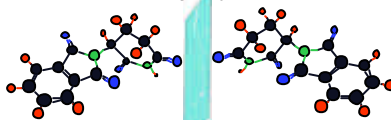
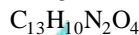
Immanuel Kant (1783)

Ich nenne jede geometrische Figur oder Gruppe von Punkten chiral, und nenne es Chiralität, wenn ihr realisiertes Bild in einem Spiegel nicht mit ihrer ursprünglichen Form zur Deckung gebracht werden kann.
 Lord William Thomson Kelvin, *Baltimore Lectures on Molecular Dynamics and the Wave Theory of Light*, C. J. Clay, London, 1904.

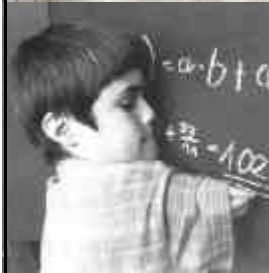
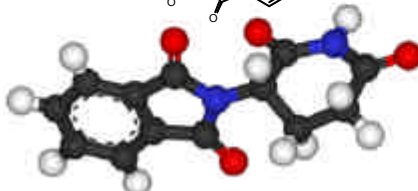
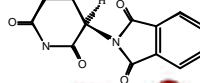


Der Thalidomide Fall

Contergan, Distaval, Talimol, Nibrol, Sedimide, Quietoplex, Neurosedyn, Softenon, Asmaval, Tensival, Valgis, Valgraine, Imidan, Kevadon



(S)-thalidomide (schlafinduzierend) ↔ (R)-thalidomide (teratogenisch = dysmorphisch)



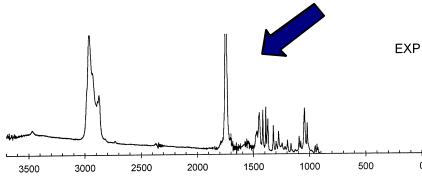
Campher $C_{10}H_{16}O$ Cinnamomum camphora



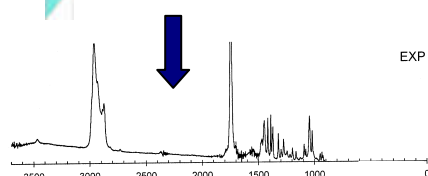
d-Campher



l-Campher



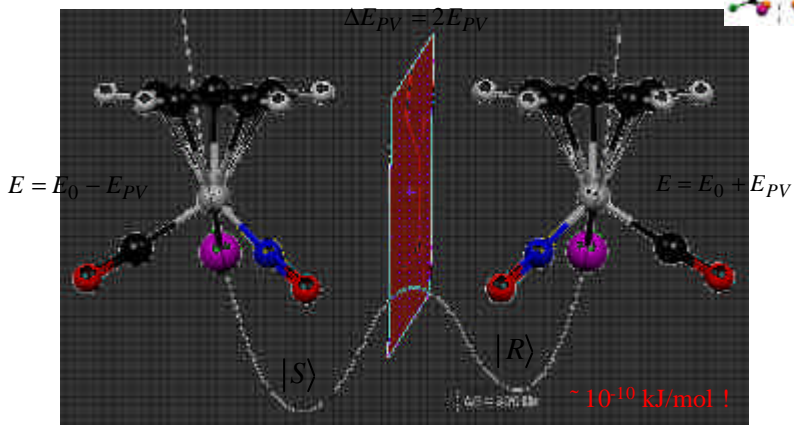
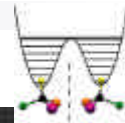
EXP



EXP

➔ Siegelbildsymmetrie ist absolut perfekt ➔ identische IR Spektren
➔ Dieselben spektroskopischen Eigenschaften für *l* und *d*

Paritätsverletzung in Chiralen Molekülen



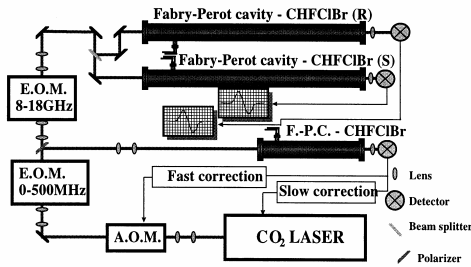
Noch nicht entdeckt !!!

- | | |
|----------------------------------------|----------------------------------------------|
| Vib-Rot Spectroscopy: | Ch.Chardonnet, Ch.J.Bordé, C. Daussy (Paris) |
| Mössbauer Spectroscopy: | R.N.Compton (Tennessee) |
| Dynamics in excited electronic states: | M.Quack (Zürich) |
| NMR Spectroscopy: | R.N.Compton (Tennessee) |

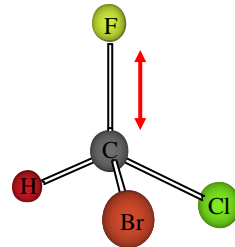
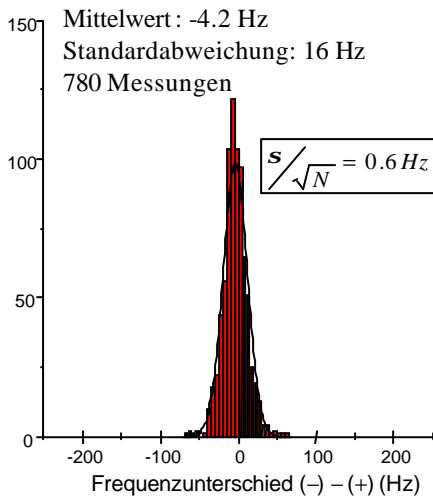
Nichtlineare Laserspektroskopie von Vibrationsanregungen in CHFCIBr and CHFCII - Das Paris Experiment

Vorgeschlagen 1975 von V. Letokhov: *Phys. Lett.* **53A**, 275 (1975); O.N.Kompanets et al, *Opt. Commun.* **19**, 414 (1976); Erstes Experiment an Kampfer: Arimondo et al *Opt. Commun.* **23**, 369 (1977);
Derzeitige Experimente: Ch.Daussy et al., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1554 (1999); M. Ziskind et al., *Eur. J. Phys. D* **20**, 219 (2002).

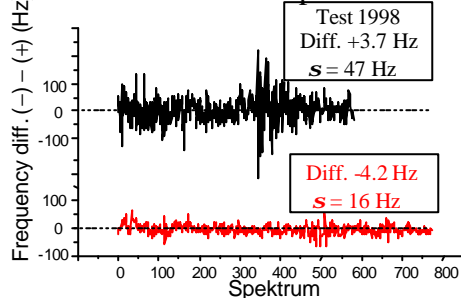
Ch. Chardonnet and co-workers



Histogram (Test 2000)



Nach Fehlerkompensation



C. Daussy et al., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1554-1557 (1999)
M. Ziskind et al., *Euro. Phys. J. D* **20**, 219-225 (2002)

PEANUTS® SNOOPY LEARNS STEREOCHEMISTRY



© 1985 United Feature Syndicate, Inc.

7-14

Spiegel