

Moletomics™

Ein neuer, effektiver Weg
zu anschaulichen Molekülmodellen

**Hans-Jürgen
Quadbeck-Seeger**

GDCh

GESELLSCHAFT
DEUTSCHER CHEMIKER

**Beitrag zum
Jahr der Chemie 2011**



IYC 2011

International Year of
CHEMISTRY

GRUSSWORT

Ran an die Moleküle!

Warum Moletomics™? Die bestehenden Molekülbaukästen lassen doch keine Wünsche offen, oder?

Eine Suche im Internet zeigt, dass diese Unterrichtshilfen recht teuer sind. Der Preis wäre vielleicht hinnehmbar, wenn der Inhalt üppiger ausfiele. Für größere Moleküle erweist sich der Inhalt eines Kastens in der Regel als unzureichend. Nicht selten sind mehrere Kästen notwendig, um ein größeres Geschehen darzustellen. Sollen kompliziertere Moleküle oder Reaktionsabläufe nachgebildet werden, muss in der Regel zunächst auf- und anschließend abgebaut werden. Es sei nur an die Polymere erinnert. Außerdem können eindrucksvolle Beispiele oder „Lieblingmoleküle“ nicht aufbewahrt werden, denn solche Verluste plündern den Bausatz bis zur Unbrauchbarkeit.

So machte sich ein ehemaliger Präsident der Gesellschaft Deutscher Chemiker, früher auch Forschungsvorstand der BASF, nun aber im Ruhestand, auf die Suche nach Alternativen. Er fand ein neues Konzept, das von dem der Modell-Bausätze abweicht, die Elemente zu den gewünschten Verbindungen zusammenzustecken oder zusammenzudrücken. Bei seinem neuen Konzept verläuft der Weg genau umgekehrt. Aus dem Drahtgitter wird zunächst das Molekül-Skelett hergestellt. Anschließend werden die Atome hinzugefügt. Das Verfahren hat Professor Hans-Jürgen

Quadbeck-Seeger aus diesem Grund „Moletomics™“ genannt.

Die vorliegende Broschüre ist eine Art Bauanleitung, die wir aus den Beiträgen zusammengestellt haben, die Professor Quadbeck-Seeger 2010 und 2011 in der GDCh-Zeitschrift *Chemie in unserer Zeit* sowie in der ebenfalls im Verlag Wiley-VCH erscheinenden *Physik in unserer Zeit* publiziert hat. Das Internationale Jahr der Chemie 2011 ist Anlass für uns, eine solche Broschüre zu publizieren, vorgestellt erstmals auf dem Wissenschaftsforum Chemie im September in Bremen mit der integrierten Fortbildungs- und Vortragstagung „Chemieunterricht – innovativ, kreativ und effektiv“ der GDCh-Fachgruppe Chemieunterricht. Lehrer und Schüler sind es, die wir in erster Linie auf dieses neue Konzept aufmerksam machen wollen. Geplant ist auch ein Wettbewerb an Schulen um das schönste Moletomics™-Molekül.

Viel Spaß beim Basteln!



Professor Dr. Wolfram Koch
GDCh-Geschäftsführer

Wolfram Koch

MOLETOMICS™

Ein neuer, effektiver Weg zu anschaulichen Molekül-Modellen

Im 19. Jahrhundert konnten die Chemiker die Hypothese von Demokrit bestätigen: die Welt besteht aus Atomen. Diese kann man sich recht gut als Kugeln vorstellen. Die Atome verbinden sich nach festen Regeln zu Molekülen. Wie aber sehen diese aus? Sind es einfache Klumpen oder haben sie eine definierte Struktur? Was uns heute so plausibel erscheint, war als „Strukturaufklärung“ eine mühevoll arbeitende. Dabei spielten Modelle eine wesentliche Rolle. Forscher wie van 't Hoff, Stuart, Briegleb und Dreiding haben mit ihren Vorschlägen wesentliche Beiträge geliefert.

In den letzten Jahrzehnten ist die Entwicklung zweigleisig gelaufen. Molekülbaukästen aus Kunststoff sind verfügbar geworden. Zugleich wurden Programme entwickelt, die die Moleküle auf den Computerbildschirm zaubern, wo sie nach Belieben bewegt werden können. Damit scheint das Problem gelöst zu sein, oder? Es gibt ein paar Aspekte und Wünsche, die noch offen sind. Zunächst die didaktische Seite. Es ist ein großer Unterschied, ob ich ein Modell mit Phantasie selbst baue oder nur vorgefertigt zusammenstecke. Darüber hinaus bleibt jedem sein Modell erhalten. Diese zwei wichtigen Aspekte mögen hier genügen.

Weiterhin kommt ein wissenschaftlicher Gesichtspunkt hinzu. Stärkstes Interesse finden zunehmend die Phänomene der Selbstorganisation. Die Fähigkeit von Molekülen, sich durch Wechselwirkungen zu Strukturen mit besonderen Eigenschaften zu ordnen, stellt eine große Herausforderung an die Chemie dar. Dem liegt ein Paradigmenwechsel mit tiefgreifenden Folgen zu Grunde. Bisher stand die Frage im Mittelpunkt: Wie reagieren Moleküle miteinander? Heute interessiert mindestens genauso: Wie kooperieren Moleküle

miteinander und welche neuartigen Eigenschaften zeigen dann die durch Selbstorganisation entstandenen molekularen Anordnungen? Die Strukturen in lebenden Systemen zeigen eindrucksvoll, zu welchen ungewöhnlichen Eigenschaften und Fähigkeiten dieses Konzept führt. Vor allem die Schnelligkeit solcher Umordnungen ist eine Grundvoraussetzung für alles Leben. Komplexität und Präzision kommen hinzu, so dass größere Modelle unverzichtbar werden, um diese Phänomene „begreifbar“ zu machen.

Freiheit für den Kohlenstoff

Im Bemühen, einfachere und kostengünstige Alternativen für den Modellbau zu suchen, wurde ein einfaches Konzept erarbeitet. Zunächst galt es Abschied zu nehmen von einem Paradigma, das sich über die Jahrzehnte festgesetzt hatte. Die Moleküle werden bisher Atom für Atom aufgebaut. Wird die Reihenfolge umgekehrt und zuerst das Skelett des Moleküls erstellt, um dann die Atome hinzuzufügen, ergeben sich dadurch völlig neue Optionen. Diese neue Methode wurde „Moletomics“ genannt. Überraschenderweise zeigten sich quadratische Gitterdrähte als bisher nicht beachtete Quelle von Variationsmöglichkeiten. In den Augen des Chemikers stellt das Gitter ein zweidimensionales Gefängnis für Kohlenstoff-Atome dar, die auf ihre Befreiung warten. Geeignetes Durchtrennen und Biegen der Stege machen jeden Knotenpunkt zu einem C-Atom, das mit beliebig vielen anderen Artgenossen in Verbindung steht. Ein besonderer Trick lässt sogar reguläre Sechsecke für Aromaten und Heterocyclen entstehen. Auf diese Weise können selbst die anspruchsvollen Formen des elementaren Kohlenstoffs nachgebildet werden:

C_{60} , Diamant und Graphen. Das wird in den Veröffentlichungen beschrieben. Alle Kohlenstoff-Moleküle lassen sich auf diese Weise bauen, wobei die Vielzahl der verwendbaren Materialien (Kugeln und Perlen aller Art) und somit auch die Variation der Modelle beeindruckend sind.¹⁾ Die Kosten spielen praktisch keine Rolle, vielmehr ist Phantasie gefragt. Da auf Patentierung verzichtet wurde (nur der Name ist geschützt), bestehen auch in dieser Hinsicht keine Grenzen.

Für den Chemieunterricht ergibt sich die besondere Schwierigkeit, dass zwischen dem Geschehen auf dem Experimentier-Tisch und dem Erlernen nur die Formeln auf Tafel und Papier stehen. Den Schülern bleibt in der Regel nur das Zuschauen. Der Bau von Modellen bildet dagegen eine Brücke, die diese Lücke schließen kann. Das molekulare Geschehen lässt sich von jedem Lernenden modellhaft konkretisieren und prägt sich effektiver ein.

2011 ist von der UNO zum Jahr der Chemie ausgerufen worden. Das soll darauf verweisen, wie wichtig und unverzichtbar dieses Wissensgebiet ist, um die großen Probleme der wachsenden Menschheit zu lösen, und zwar durch neues Wissen und tiefere Erkenntnisse. Es genügt nicht, die Umwelt schützen zu wollen und die Natur zu lieben. Die Menschheit kann nicht darauf verzichten, die Natur zu nutzen. Um ihr nicht zu schaden oder sie gar zu zerstören, sind wir darauf angewiesen, ihre Komplexität noch viel besser zu verstehen. Die wichtigste Vorsorge in diesem Sinne besteht darin, in jungen, talentierten Menschen das Interesse an den Naturwissenschaften zu wecken und zu stärken. Die Entscheidung für den späteren Beruf fällt nicht selten in jungen Jahren, in denen Experimentier- und Bastelfreude ausgeprägt sind. Der anregende und phantasievolle Bau von eigenen Molekül-Modellen soll also nicht nur Spaß machen, sondern auch motivieren und Herzen gewinnen.

H.-J. Quadbeck-Seeger
September 2011

[1] Eine Vielzahl von Bildern und Beispielen unter www.quadbeck-seeger.de

MOLETOMICS™-MODELLE [1]

Ein neuartiges Konzept zum Bau von Molekül-Modellen

Die räumliche Struktur von Molekülen war und ist zunehmend wieder – insbesondere durch die Molekularbiologie [2] – eine große Herausforderung für die chemische Forschung. Im 19. Jahrhundert fehlten den Chemikern schlicht die Methoden, um direkte Einblicke in die Formenvielfalt der molekularen Strukturen zu gewinnen. Die berühmte Geschichte vom Tagtraum Kekulé's, in dem er sechs im Kreise tanzende Affen die Struktur eines Benzolkernes bilden sah, belegt: man war auf Phantasie und Intuition angewiesen. Heute besteht die Herausforderung darin, für bekannte Strukturen adäquate Modelle zu erstellen.

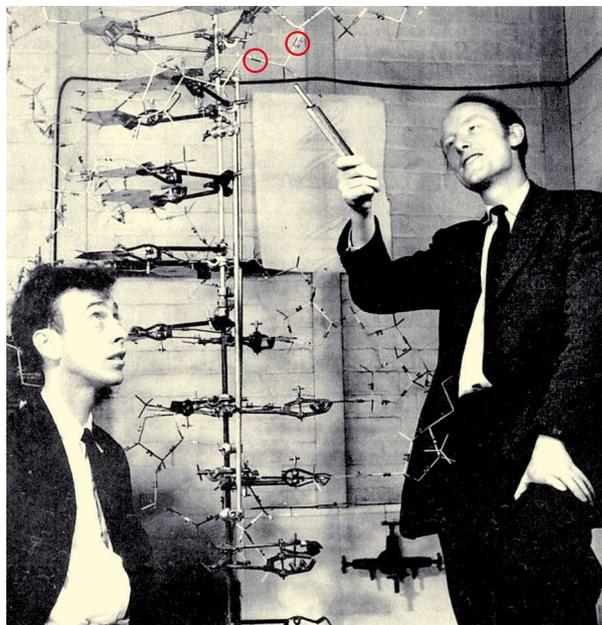


Abb. 1 Watson und Crick verwendeten Lüsterklemmen, um die Atome aus Draht zu verbinden (s. rote Markierungen).

1874 führte van't Hoff [3] das Tetraeder-Modell ein. Es bestand zunächst nur aus Pappe, war aber für die Konfiguration der Kohlenstoffverbindungen sehr anschaulich. So konnte das Phänomen der optischen Aktivität mancher Substanzen überzeugend erklärt werden. 1894 wies Emil Fischer mit seiner berühmten Schlüssel-Schloss-Metapher auf die große Bedeutung der räumlichen molekularen Passgenauigkeit in den Lebensprozessen hin. Seine Hypothese fand eine überwältigende Bestätigung. Noch heute nutzt die Wirkstoff-Forschung diese bildhafte Vorstellung.

Gutes räumliches Vorstellungsvermögen ist eine Gabe, die nur wenige besitzen. Deshalb lässt sich nachvollziehen, dass über den Bau von Modellen nachgedacht wurde. Insbesondere verfeinerten sich die Vorstellungen von den Molekülen, so dass die alten Modelle nicht mehr ausreichten. 1934 stellte der deutsche Physiker Herbert A. Stuart seine heute noch beliebten Kalotten-Modelle vor, die zunächst aus Holzkugeln und Druckknöpfen bestanden. Diese wurden 1950 von G. Briegleb verbessert. R. B. Corey, L. Pauling und W. L. Koltun passten die Modelle ihren gehobenen Ansprüchen weiter an (CPK-Modelle und -Farben). Mit Kunststoffen und deren Verarbeitung durch Spritzguss wurden die Modelle erschwinglich und fanden auch in der Didaktik weite Verbreitung. 1958 entwickelte schließlich der Schweizer Chemiker André Dreiding die nach ihm benannten Modelle. Die Atome werden mit ihren Bindungen winkel- und abstandsgenau aus dünnen Stahlstangen hergestellt. Über Hülsen können dann die Moleküle zusammengesteckt werden. Dabei wird auf die Raumerfüllung verzichtet, dafür wird das Skelett des Moleküls sichtbar.

In den sechziger und siebziger Jahren liefen dann zwei Entwicklungen parallel. Die fortgeschrittene Technologie des Spritzgusses von Kunststoffen erlaubte es, beliebige Formen kostengünstig herzustellen. So entstand eine Reihe von Modellsätzen aus Kügelchen und Stäbchen,

die sich entsprechend zusammenfügen lassen. Einige solcher Molekül-Baukästen sind immer noch auf dem Markt. Bei allen Bausätzen ist die Anzahl der Atome begrenzt, und einen weiteren Nachteil bilden die fixierten Bindungswinkel.

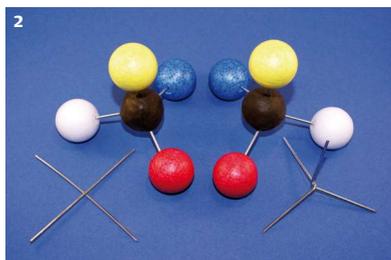
Die andere Entwicklungslinie entstand aus Fragestellungen der NMR-Spektroskopie. Diese lieferte Strukturinformationen von vorher unvorstellbarer Präzision. Das Gleiche galt für die Röntgenstrukturanalyse, die durch den Computer immer leistungsfähiger wurde. So lag es für die Chemiker nahe, den Computer auch zu nutzen, um dreidimensionale Abbildungen von Molekülen zu erstellen. Die Chemie wurde zum Impulsgeber für das, was man heute 3D-Animation nennt. Inzwischen hat die Unterhaltungsindustrie längst die Führungsrolle übernommen, und die Chemie profitiert ihrerseits von den entwickelten Programmen. Das hat dazu geführt, dass der Bau von Molekül-Modellen in den Hintergrund rückte. Der Computer liefert unübertroffene Bilder und Simulationen. Allerdings bleiben die Moleküle virtuell.

Um Interesse bei jungen Menschen zu wecken, ist der Bau von realen Modellen jedoch nicht zu unterschätzen. Eigenhändig ein Emantiomeren-Paar, die Aminosäuren oder gar ein DNA-Modell zu gestalten, kann zu einem besonderen Erlebnis werden. Jedoch sollten zwei wichtige Randbedingungen eingehalten werden:

1. Die Modelle müssen erschwinglich bleiben.
2. Der Bau darf nicht zu kompliziert und zeitaufwändig sein.

Quadratische Drahtgitter – ein ideales Material

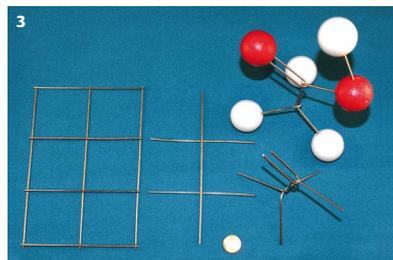
Bei den Versuchen des Autors, ein kostengünstiges DNA-Modell zu entwickeln, wurde neben vielen anderen Materialien zunächst auch mit Draht experimentiert. Das erwies sich als sehr aufwendig, weshalb zunächst auf andere Materialien zurückgegriffen wurde [4]. J. Watson



und F. Crick hatten 1953 [5] ihr berühmtes Modell, das ihnen sechs Jahre später den Nobelpreis einbrachte, ebenfalls aus Draht gebaut. Die Drahtstücke wurden, wie man auf dem Bild deutlich erkennt, mit Lusterklebmitteln zusammengehalten (Abbildung 1). Watson beschreibt eindrucksvoll, wie schwierig die „Bastelei“ war [6]. Vielleicht haben die beiden deswegen nicht weiter über das Konzept des Modellbaus nachgedacht, sondern ihr Interesse auf die Funktionen des eigenartigen Moleküls konzentriert.

Auf der Suche nach weiteren Vereinfachungen für DNA-Modelle wurde auch Draht nochmals überprüft. Überraschenderweise stellten sich quadratische Drahtgitter als geradezu ideale Ausgangsmaterialien heraus. Diese gibt es preiswert und in großer Auswahl vom sogenannten Hasendraht (Kantenlänge $k = 1$ cm) bis zum Armierungsgitter für Estrich ($k = 5$ cm) [7]. Für das Biegen von Modellen ist die Festigkeit der Kreuzungspunkte von entscheidender Bedeutung. Da es wowohl bei der Verzinkung als auch bei der Punktschweißung große Fortschritte gegeben hat, machen die Verbindungen zwischen den Drähten praktisch keine Probleme. Die quadratischen Drahtgitter bieten somit einen neuartigen und vielseitigen Zugang zu Molekülstrukturen.

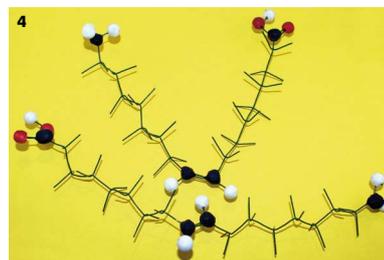
Mit den Augen eines Chemikers lassen sich quadratische Drahtgitter nunmehr ganz anders sehen. Von jedem Kreuzungspunkt gehen vier Stege gleicher Länge aus. Damit wird das Gitter quasi von virtuellen vierbindigen Kohlenstoffatomen gebildet, die auf eine „Befreiung aus dem Gefängnis der Zweidimensionalität“



warten. Schneidet man mit einer Zange ein Kreuz heraus, lassen sich die vier Drähte ohne Mühe so biegen, dass die Endpunkte eine Pyramide mit dreieckiger Grundfläche bilden. Der Winkel vom senkrechten Draht zu den drei übrigen Drähten beträgt $109,5^\circ$, die ihrerseits mit 120° voneinander getrennt sind. Kartonschablonen mit diesen Winkeln sind hilfreich. Ohne Mühe und Zeitaufwand ist in kürzester Zeit ein Kohlenstoffatom entstanden (Abbildung 2). Wie bei den Dreiding-Modellen fehlt allerdings die Elektronenhülle, was für die Darstellung des Molekülskeletts aber eher günstig ist.

Nun stellt sich die Frage, wie die Atome miteinander verbunden werden sollen: Mit Steckhülsen, wie Dreiding es tat, oder mit Lusterklebmitteln, wie Watson und Crick vorgingen? Es gibt einen überraschenden dritten Weg, der das Modell-System so attraktiv macht. Warum sollen die Atome herausgeschnitten werden, um sie anschließend wieder zusammenzufügen? Das neue Konzept besteht darin, zuerst das gesamte Skelett des Moleküls aus dem Drahtgitter herauszuschneiden und dann zurechtzubiegen. Das klingt zunächst verwegen, funktioniert jedoch ausgezeichnet. Man beginne mit Methan, Harnstoff, Essigsäure (Abbildung 3) und wage sich schließlich an immer kompliziertere Moleküle. Das Gefühl für die Winkel stellt sich bald ein, sodass die Modelle „freihändig“ gebogen werden können. Es ist überraschend, wie problemlos sich z. B. das Molekülgerüst von Vitamin C „biegen“ lässt.

Zur besseren Anschaulichkeit lassen sich dann – im Gegensatz zu



den bisherigen Modellen – die Atome **nachträglich** hinzufügen. Dazu sind Kugeln notwendig. Endständige Wasserstoffe können Bastelkugeln oder Kugeln aus Styropor bilden. Auch zweibindige Sauerstoffatome können aus Kugeln gefertigt werden. Eine Herausforderung stellen die Kohlenstoffatome dar. Hier zeigt sich der große Vorteil des Konzeptes. Während bei bisherigen Modellen die Atome die tragende Rolle übernehmen, sind sie bei Moletomics sozusagen ergänzendes Beiwerk, denn der Draht bildet das tragende Gerüst. Die Kohlenstoffatome lassen sich somit aus Knete, Ton (lufttrocknend) oder FIMO [9] bilden. Es ist nur darauf zu achten, dass die Kugeln in etwa die gleiche Größe haben. Für wissenschaftliche Zwecke lassen sich Größe und Winkel natürlich an die gemessenen realen Werte anpassen.

Die Auswahl von quadratischen Drahtgittern im Baustoffhandel ist groß. Für das jeweilige Vorhaben findet sich rasch das passende Material. Der Autor hat aus einem Zaungitter mit einer Maschenweite von 1 cm jeweils zwei Reihen aus 18 Knotenpunkten geschnitten. Daraus ließen sich einfach und schnell die cis- und trans-Ölsäuren biegen (Abbildung 4). Selbst wenn man schon entsprechende Formelbilder gesehen hat, überrascht doch die Unterschiedlichkeit der beiden Moleküle, wenn sie als Modelle nebeneinander liegen. Dann wird es im wahrsten Sinne des Wortes augenscheinlich und „begreifbar“, dass sich die Moleküle biologisch anders verhalten müssen.

Ein solcher direkter Vergleich von größeren Molekülen wäre mit den handelsüblichen Baukästen nicht

Die Abbildungen zeigen das neue Prinzip: Zuerst wird die Struktur des Moleküls erstellt, und dann werden die Atome hinzugefügt.

Abb. 2 Aus einem Kreuzungspunkt mit vier Stegen lässt sich leicht ein Kohlenstoffatom biegen. Die Atome können nachträglich hinzugefügt werden.

Abb. 3 Für erste Übungen eignen sich gut kleine Moleküle wie Essigsäure.

Abb. 4 cis- und trans-Ölsäure im direkten Vergleich. [alle Fotos: Dr. Claudia Quadbeck-Seeger]

möglich, da nicht genügend Kohlenstoffatome zur Verfügung stünden. Wie breit sich Drahtgitter einsetzen lassen, zeigt ein Artikel in der Ausgabe 1/2010 von „Biologie in unserer Zeit“, in dem der Bau von DNA-Modellen beschrieben wird. Auch die Herstellung von Modellen wichtiger biochemischer Verbindungen wird erläutert.

Als erste „Fingerübungen“ werden hier alle Molekülstrukturen abgebildet und zum Nachbau empfohlen, die aus zwei Kohlenstoffatomen bestehen. Die Reihe beginnt beim Ethan und seinen Derivaten und reicht über die Essigsäure bis zum Dicyan.

Fazit: Moletomics™ ist ein neues Konzept, auf kostengünstige und einfache Weise Molekülmodelle zu bauen. Die notwendigen Gitterdrähte sind in unterschiedlichen Größen kostengünstig erhältlich. Die Modelle können sowohl wissenschaftlichen Anforderungen genügen als auch für didaktische Zwecke eingesetzt werden. Ihre Vielseitigkeit macht sie zum idealen Lehrmittel, da jeder Interessierte seine eigenen Modelle bauen und aufbewahren kann. Der Bau von Molekülmodellen wird zu einem intellektuellen Spiel, das wenig Aufwand erfordert, das sich jeder leisten kann und das zugleich von hohem didaktischen Wert ist.

Der Name Moletomics® wurde abgeleitet aus „models by molecular structure and adding atoms“.

- [1] Der Name wurde aus den Worten molecular and atomic structures abgeleitet.
- [2] Der Nobelpreis für Chemie 2009 wurde an V. Ramakrishnan, T. Seitz und E. A. Yonath vergeben. Den Laureaten war die Struktur-Aufklärung der Ribosomen gelungen. Diese bilden wohl das größte molekulare Ensemble, bei dem tausende von Atomen einen genau definierten Platz einnehmen.
- [3] Der Holländer Jacobus Henricus van't Hoff erhielt den ersten Nobelpreis für Chemie in Würdigung seiner Arbeiten über chemische Dynamik und die Osmose. Die Idee des Tetraeder-Modells, die auch J. A. Le Bel bekommen war, wurde durch die praktische Nutzung gewürdigt.
- [4] H.-J. Quadbeck-Seeger, *Biol. Unserer Zeit* **2008**, 3, 150 sowie **2008**, 6, 365 und **2009**, 2, 79; als auch *Chem. Unserer Zeit* **2008**, 4, 292; und **2008**, 2, 433.
- [5] Watson, J. D. and Crick, F. H.; *Nature* **1953**, 171, Nr. 4356, S. 737 – 738.
- [6] J. D. Watson, *Die Doppel – Helix*, Rohwohlt, **1969**.
- [7] Beim Kauf der sehr kostengünstigen Armierungsgitter für Estrich ist auf gute Qualität zu achten. Es muss rostfrei sein, und die Kreuzungspunkte müssen gut verschweißt sein. Beim Biegen sind u. U. die Kreuzungspunkte mit zwei Flachzangen zu fixieren.
- [8] Auf der Homepage des Autors www.quadbeck-seeger.de finden sich eine Reihe von Beispielen und einige Tricks zur Anregung.
- [9] FIMO ist ein Knetmaterial, das bei 130 °C fest wird.

H. - J. Quadbeck-Seeger,
Bad Dürkheim

um sowie als Vorstandsvorsitzender der Knoll AG und damit Leiter des Unternehmensbereichs Pharma der BASF AG - wurde er 1989 Mitglied des Vorstands der BASF AG und war bis 1997 verantwortlich für die Forschung des Unternehmens.

Trotz seines großen beruflichen Engagements brachte sich Quadbeck-Seeger mit vielen neuen Ideen und großer Tatkraft auch in die Arbeit der GDCh ein. Seit 1961 Mitglied dieser wissenschaftlichen Gesellschaft, war er im Vorstand der GDCh von 1992 bis 1996 tätig, davon drei Jahre als stellvertretender Präsident und 1994/95 zwei Jahre als Präsident, die er unter das Motto „Chemie im Aufbruch“ stellte und in denen der Verhaltenskodex der GDCh verabschiedet wurde. Wegen seiner Verdienste um die Chemie und das Ansehen der Chemie in der Öffentlichkeit wurde Quadbeck-Seeger 2007 mit der Ehrenmitgliedschaft der Gesellschaft Deutscher Chemiker ausgezeichnet.

Besonders bemerkenswert waren und sind seine herausragenden Erfolge als „Öffentlichkeitsarbeiter“ für die Chemie nach Beendigung seiner beruflichen Laufbahn. So erschienen im Verlag Wiley-VCH zahlreiche populärwissenschaftliche Bücher von Quadbeck-Seeger. In all diesen Büchern kommen sein enorm breites Wissen und seine vielfältigen Interessen, die weit über die Chemie hinausgehen, zum Tragen.

Quadbeck-Seeger, der 1985 von der Universität Heidelberg zum Honorarprofessor berufen worden war, erhielt 1998 das Bundesverdienstkreuz Erster Klasse unter anderem für seine Mitwirkung in zwei Kommissionen zur Studienreform und in der Enquete-Kommission „Chancen und Risiken der Gentechnologie“ des Deutschen Bundestages. Von 1991 bis 1994 war er Mitglied des Senats der Deutschen Forschungsgemeinschaft, von 1996 bis 2000 Mitglied des Senats und Verwaltungsrats der Max-Planck-Gesellschaft.

Renate Hoer,
GDCh-Öffentlichkeitsarbeit,
Frankfurt am Main

ÜBER DEN AUTOR



Prof. Dr. Quadbeck-Seeger ist Chemiker. Er war Forschungsleiter bei der BASF AG und unter anderem auch Präsident der GDCh (Gesellschaft Deutscher Chemiker). In seinem Ruhestand betätigt er sich literarisch und befasst sich gern mit didaktischen Fragen.

Der 72jährige Chemiker, gebürtig in Insterburg (Ostpreußen), studierte in München Chemie, mit den Nebenfächern Physik und Anthropologie. Nach seiner Promotion in organischer Chemie begann er 1967 seine Industriekarriere im Farbenlaboratorium der BASF. Über zahlreiche Stationen in diesem Unternehmen - als Assistent des Forschungsleiters und des Vorstandsvorsitzenden, als Leiter des Zentralbereichs Hauptlaboratori-

ZUR WM: MOLEKULARE FUSSBÄLLE

Modelle für C_{60} -Fulleren

Eine besondere Herausforderung für den Molekülbau stellt das prominente C_{60} -Fulleren [4] dar. Dieses „Fußball-Molekül“, das wohl jeder schon als Abbildung gesehen hat, entspricht genau der Struktur des „runden Leders“, das die Menschen derzeit wieder weltweit so fasziniert.

Es galt zu klären, ob sich diese geometrische Struktur nach dem Moletomics-Konzept (s. Infokasten) bauen lässt. Der traditionelle Fußball wird aus Lederstücken zusammengenäht. Nötig sind 12 Fünfecke und 20 Sechsecke mit gleicher Kantenlänge. Es gibt eine Reihe von Vorschlägen für den Bau von Modellen aus Pappe oder auch aus Kunststoffteilen.

Für das Moletomics-Konzept auf Basis von quadratischen Drahtgittern führen überraschenderweise sogar zwei Wege zum Ziel. Das Molekül lässt sich entweder aus zwei oder drei Teilen zusammenbauen. Beide Wege beruhen darauf, dass die 20 Sechsringe zusammenhängen. Die isoliert gelegenen 12 Fünfringe ergeben sich durch das Verbinden der gebogenen Strukturen aus den Sechsringen.

Eine entscheidende Frage schien zu sein, wie man vom quadratischen Drahtgitter zu Sechsringen gelangt. Gerade dieses bereitet keinerlei Probleme. Bei zwei nebeneinander liegenden Quadraten wird der gemeinsame Mittelsteg mit einer Zange durchtrennt. Werden die gegenüberliegenden Kreuzungspunkte auseinandergezogen, entsteht ein gleichseitiges Sechseck (Abbildung 1). Nach gründlicher Überlegung lassen sich

dann quasi Schnittmuster erstellen (Abbildung 2).

Für das C_{60} -Fulleren sind je nach Methode zwei oder drei Teile getrennt zu fertigen. Diese werden dann je nach Material zusammengeklebt oder gelötet. Das Löten erfolgt einfach durch kurzes Erhitzen der Drahtstücke mit der Flamme eines

Sturmfeuerzeuges unter Berührung mit Lötendraht.

Um zum kugelförmigen Molekül zu gelangen, werden bei der Strategie A zunächst zwei gleiche Hälften (Abbildung 2) angefertigt, die dann zusammengefügt werden. Die Strategie B besteht darin, einen Mittelring aus 10 Sechsecken zu bilden. Von oben und unten werden zwei gleichartige „Deckel“ in Gestalt des Coronens eingepasst. Diese „Deckel“ bestehen aus einem zentralen Fünfeck und fünf anliegenden Sechsecken (Abbildungen 3 und 5). Diese beiden Konzepte sind ihrerseits sehr variabel.

Da die quadratischen Drahtgitter in unterschiedlichen Größen erhältlich sind, fallen die Fullerene ebenfalls mit unterschiedli-

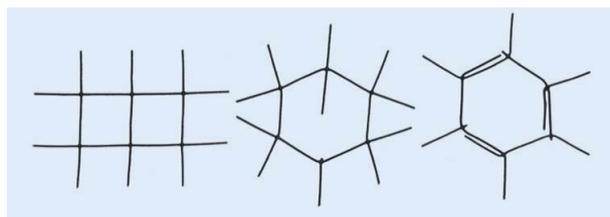


Abb. 1 Vom Quadratgitter zum Sechseck

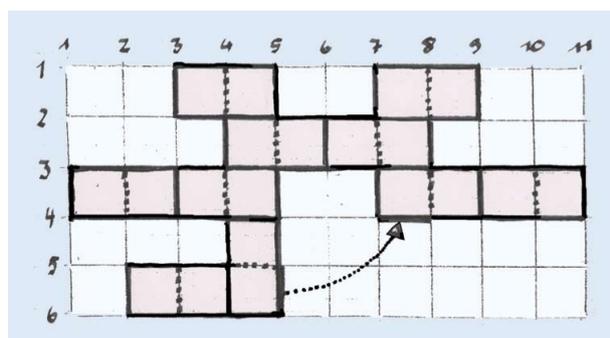


Abb. 2 Schnittmuster für 1/2 C_{60}

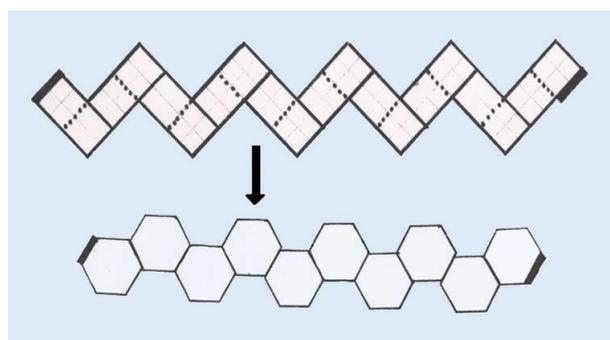


Abb. 3 Schnittmuster des C_{20} -Mittelstück

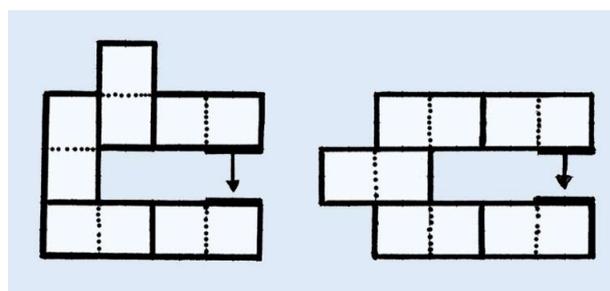


Abb. 4 Zwei Schnittmuster für Kronen

BAU VON MODELLEN

Bei der Entwicklung von Modellen für die Doppelhelix der DNA [1,2] zeigten quadratische Drahtgitter besonders günstige Eigenschaften. Dieses wohlfeile Material (aus Baumärkten und Gartencentern) erwies sich auch beim Bau von einfachen Molekülen als überraschend vielseitig [3]. Dem liegt allerdings ein Paradigmenwechsel zugrunde. Es wird nicht, wie üblich, von Atomen als Bausteine ausgegangen. Vielmehr werden zunächst die Strukturen der Moleküle erstellt, die Atome werden dann anschließend ergänzt. Diese Methode wurde Moletomics™ genannt. Diese Modelle können den Chemie-Unterricht anschaulich gestalten. Molekulare Ähnlichkeiten, Änderungen und Umwandlungen lassen sich eindrucksvoll demonstrieren. Jeder Student oder Schüler kann mit seinen eigenen Molekülen „experimentieren“.

chem Durchmesser an. So lassen sich kleinere Kugeln in größeren unterbringen, was sehr verblüffend aussieht. Als Faustregel gilt: Der Durchmesser der Kugel entspricht etwa dem Fünffachen der Kantenlänge des Quadrates des Gitterelementes.

Eine ansprechende Variante ergibt sich aus der Tatsache, dass die 60 Kohlenstoff-Atome im Fulleren in der sp^2 -Form vorliegen. Die quadratischen Gitter bieten jedoch den Kohlenstoff im sp^3 -Status an. Die überzählige „Valenz“, die beim Heraus schneiden erhalten werden muss, kann genutzt werden, um Kugeln oder Perlen zu befestigen. Das ist chemisch nicht ganz korrekt, da die „C-Atome“ auf der Kugel befestigt sind. Die Schnittmuster sind zwar etwas komplizierter, dafür sehen die Modelle aber ansprechend aus. Außerdem halten die Stege, die durch die Perlen gehen, das Molekül zusammen. Kleben oder Lötten entfallen.

Beim Bau der Modelle wird ersichtlich, dass sich die 12 Fünfringe aus der Anordnung der 20 Sechsringe ergeben. Sie müssen also gar nicht konzipiert werden. Warum sollte dann nicht gleich vom Sechseck-Geflecht (sog. Hasendraht) ausgegangen werden? Zunächst muss der Draht in die richtige Form gebracht werden, denn in der Regel sind die Sechsringe verzerrt. Dann erweist sich jedoch das Drahtgitter als besonders geeignet. Nach beiden vorgestellten Varianten lassen sich mit verhältnismäßig geringem Aufwand C_{60} -Fullerene erstellen. Allerdings fehlen die Stege zum Anbringen von

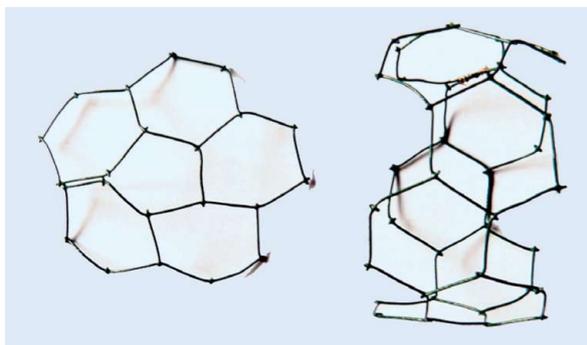


Abb. 5 Mittelstück und eine Krone

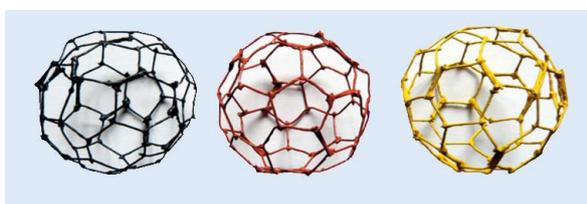


Abb. 6 „Buckyballs“ in schwarz, rot, gelb

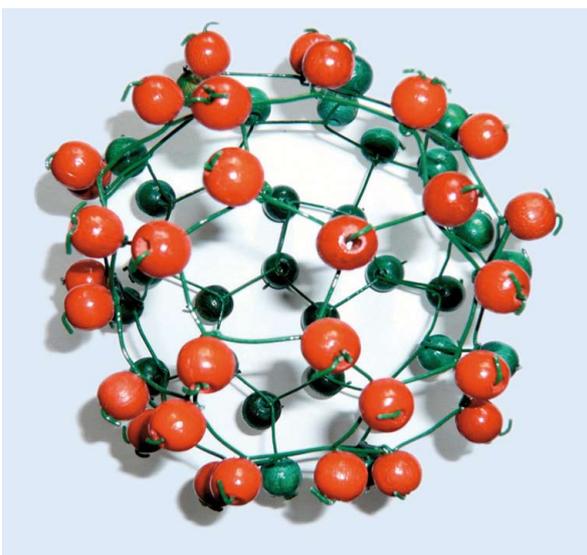


Abb. 7 C 60 aus zwei Teilen (rot/grün)

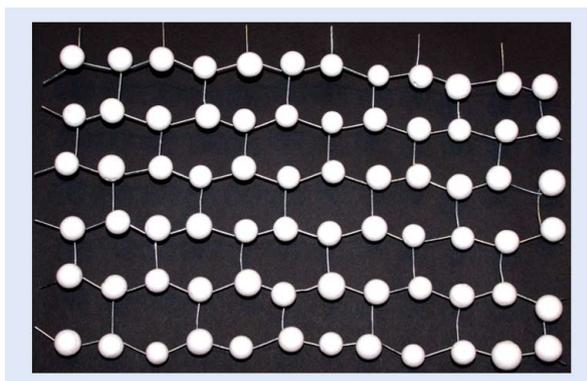


Abb. 8 Graphit-Modell aus quadr. Gitterdraht

Kugeln oder Perlen. Das Ergebnis sind die „nackten“ Molekülgerüste. Zum Bau aus einem Stück siehe [5].

Erwähnt sei noch, dass sich aus dem quadratischen Gitter problemlos ein Modell für Graphit bilden lässt. Auf die überzähligen Streben werden Styropor-Kugeln oder Perlen gesteckt. Die hexagonale Wabenstruktur gibt die Strukturmerkmale von Graphit eindrucksvoll wieder. Aus dem Sechseck-Geflecht lassen sich relativ einfach Modelle für C_{36} oder die Nanoröhren herstellen [5].

Zusammenfassung

Die Herstellung von Modellen für C_{60} -Fullerene war bisher keine triviale Aufgabe. Mit quadratischen Drahtgittern und Sechseckgeflechtes lassen sich eindrucksvolle Modelle mit geringem finanziellen Aufwand herstellen. Der didaktische Wert besteht neben der Herausforderung an Aufmerksamkeit und Geduld vor allem in der Einübung räumlichen Vorstellungsvermögens. Fußball-Freunde können sich ihre C_{60} -Fullerene in beliebigen Größen anfertigen. Die Modelle aus Drahtgittern lassen sich mit Farblacken in den gewünschten Farben gestalten.

Literatur

- [1] Quadbeck-Seeger, H.-J., *Biol. Unserer Zeit* **2008**, *3*, 150 sowie **2008**, *6*, 365 und **2009**, *2*, 79.
- [2] Quadbeck-Seeger, H.-J., *Chem. Unserer Zeit* **2008**, *4*, 292; und **2008**, *2*, 433.
- [3] Quadbeck-Seeger, H.-J., *Chem. Unserer Zeit* **2010**, *2*, 154
- [4] C_{60} -Fullerene wurde 1985 von R. Curl, H. Kroto und R. Smalley entdeckt, die 1996 dafür den Nobelpreis erhielten.
- [5] Informationen und Bilder www.quadbeck-seeger.de

MODELLE

Das Diamant-Gitter, Kristallstrukturen und Molekül-Modelle

Die Bemühungen, kostengünstige Molekül-Modelle für Schule und Studium zu entwerfen, haben zu ungewöhnlichen Ergebnissen geführt [1]. Das Ziel ist einfach und klar: Junge Menschen sollen sich eigene Modelle bauen können, die das räumliche Vorstellungsvermögen fördern und fordern. Die Wege von den anfänglichen DNA-Modellen zu einer Reihe von interessanten, jedermann zugänglichen Konzepten verliefen – und das ist charakteristisch für Innovationen – alles andere als geradlinig.

In dem vorgängigen Artikel [2] wurde das Moletomics™-Konzept vorgestellt. Dieses begann mit dem **Paradigmenwechsel**, den üblichen Aufbauweg zum Molekül von Atom zu Atom zu verlassen. Stattdessen wurde zunächst das „Skelett“ des Moleküls erstellt und die Atome nachträglich hinzugefügt. Dabei erwiesen sich quadratische Drahtgitter als günstige Ausgangsmaterialien. In den Knotenpunkten sitzt quasi jeweils ein Kohlenstoffatom gefangen in den zwei Ebenen und wartet auf die Befreiung in den Raum. Für Systeme mit Sechsecken erwies sich auch der sechseckige Gitterdraht (sog. Kaninchen-Draht) als hilfreich. Es konnte gezeigt werden, wie selbst das schwierige C60-Fulleren relativ einfach als Modell gebaut werden kann. Auch für die Struktur des Graphits aus quadratischem Gitterdraht wurde ein Beispiel gezeigt.

Das weckte den Wunsch, die „Königsstruktur“ des Diamanten aufzubauen (Abbildungen 1 und 2). Nachdem der Weg von den quadratischen Gittern zu Sechsecken schon beschrieben worden war, musste dieser nur konsequent weiterverfolgt werden. Auch hier bestand der Trick darin, große Teilbereiche in einem Stück zu fertigen, nämlich die Ebenen in der gewünschten Größe. Damit das Modell nicht zu mickrig aussieht, beginne man mit einem nicht zu kleinen Drahtstück (z.B. 7x6 Reihen (Abbildung 3)). Dabei ist so zu schneiden, dass alle „Kohlenstoff-Atome“ ihre vier Valenzen behalten. Die randständigen, überflüssigen Drahtstücke werden am Schluss abgeschnitten.

Zunächst müssen die Sechs-

ecke gebildet werden. Das ist, wie beschrieben [2], recht einfach. Jetzt aber folgt ein wichtiger Hinweis. Der Mittelsteg zwischen den angrenzenden Quadraten muss nach einem durchgängigen Muster durchtrennt werde, also in der ersten Reihe jeweils oben. Der lose Steg wird später senkrecht nach oben gebogen. In der zweiten, versetzten Reihe wieder oben schneiden und nach oben biegen. Auf diese Weise entstehen die Ebenen aus Sechsecken, bei denen jeweils in meta-Position die Stege nach oben weisen. Die zweite, dritte und weitere Ebenen werden auf die gleiche Weise hergestellt.

Bevor mit dem Löten begonnen wird, ist noch eine wichtige Frage zu klären. Wir wissen aus den Lehrbüchern, dass das Diamant-Gitter aus lauter Cyclohexan-Ringen in der Sessel-Form besteht. Ehrlich gesagt, das exakte Biegen in die Sesselform ist sehr, sehr mühsam. Also wurde versucht, auf dieses Detail weitgehend zu verzichten. Zur großen Überraschung lässt sich das Gitter auch ohne diese Feinheit herstellen. Ansatzweise ergeben sich beim Zusammenlöten angedeutete Strukturen in diese Richtung (Abbildung 4). Die intellektuelle Redlichkeit verlangt jedoch, darauf hinzuweisen, dass es sich um ein Modell und keine Nachbildung handelt. Die eindrucksvolle Schönheit, die vielfältigen Durchblicke und die überraschende Festigkeit zeugen dennoch von der Einmaligkeit dieser Struktur.

Noch ein Wort zum Löten. Zunächst ein struktureller Hinweis: Die Ebenen müssen versetzt zusammen-

gelötet werden. Als Zwischenhalterung hat sich ein Batzen Knetgummi für die ersten zwei bis drei Lötungen bewährt. Dann hält das Gitter fest genug für die weiteren Lötstellen. Der traditionelle LötKolben erwies sich als zu umständlich. Komfortabler ist die kleine spitze Flamme von Sturmfeuerzeugen oder von Flambier-Brennern.



Abb. 1 Ein Brillant ist ein geschliffener Diamant.

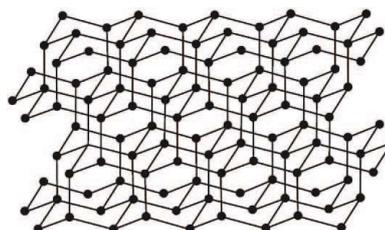


Abb. 2 Das Diamant-Gitter.

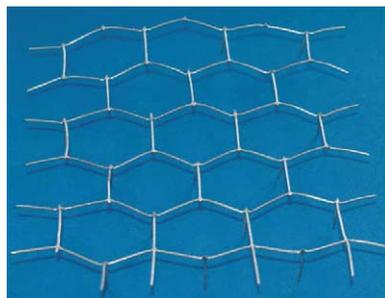


Abb. 3 Die erste Ebene des Diamant-Gitters.

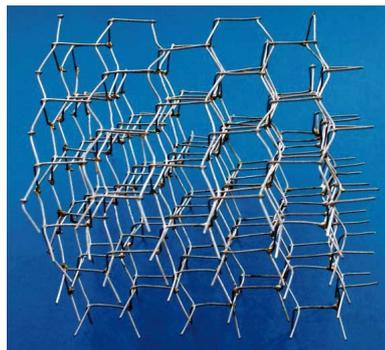


Abb. 4 Diamant-Gitter mit 6 Ebenen.

Diese sind derzeit „in“ und daher leicht erhältlich. Die Technik ist schnell erlernt. Der Berührungspunkt zwischen Steg und Gitter wird kurz (!) erhitzt, wobei der dünne Löt-Draht an diese Stelle gehalten wird. Das Löt-zinn verläuft sofort und ergibt nach kurzer Abkühlzeit eine feste Verbindung. Auch versehentlich falsch abgeschnittene Stege lassen sich auf diese Weise wieder fixieren.

Modelle ohne Löten und Kleben

Je nach Alter der Lernenden kann bei den Quadratgittern ein, wenn auch geringes, Risiko nicht ausgeschlossen werden. Mit den Drahtstiften kann man sich unter unglücklichen Umständen stechen. Dieses Problem besteht nicht bei den mit Kunststoff beschichteten Quadratgittern, da die Kunststoff-Umhüllung die Drahtenden stumpf macht. Solche Drähte lassen sich nicht löten, sondern nur kleben. Bei geschickter Vorarbeit kann sogar dieses vermieden werden.

Als Beispiel sei das Modell für ein quartäres Kohlenstoffatom (vier verschiedene Liganden) beschrieben. Es wird ein Stück mit drei mal drei Kreuzungspunkten ausgeschnitten (Abbildung 5). Der mittlere Knotenpunkt stellt das Kohlenstoff-Atom dar. Die vier Liganden werden an den daran hängenden Kreuzungspunkten befestigt. Der mittlere Draht wird durch die Perle geführt und umgebogen. Die beiden anderen Stege fixieren die Perle. Sie können so weit abgeschnitten werden, dass die Perle nicht über den Kreuzungspunkt rutschen kann. Das Modell der Essigsäure wurde auf die gleiche Weise hergestellt (Abbildung 6). Dort wo die OH-Gruppe sitzt, kam ein weiterer Knotenpunkt hinzu. Die Bohrung der roten Sauerstoff-Perle muss so groß sein, dass sie über den zusammengebogenen Knotenpunkt gesteckt werden kann. Da der Sauerstoff größer ist (Verhältnis etwa 1:2), gelingt das in der Regel. Auf diese Weise lassen sich viele Molekülmodelle ohne großen Aufwand herstellen. Allerdings erfordern die Schnittmuster Aufmerksamkeit und Sorgfalt.



Abb. 5 Chirales C-Atom ohne Hilfsmittel.

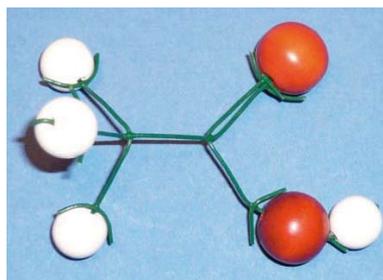


Abb. 6 Essigsäure-Modell.

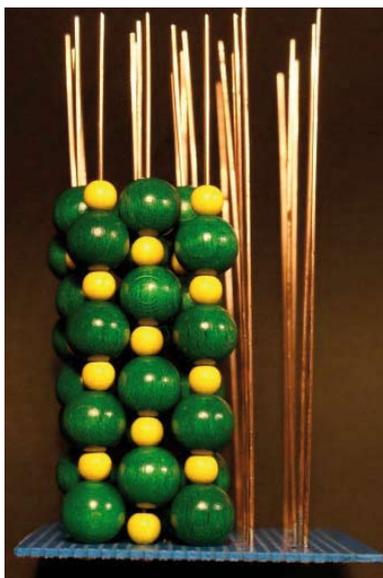


Abb. 7 Kubisch-flächenzentriertes Gitter im Entstehen.



Abb. 8 Kochsalz-Modell.

Das Platinen-Konzept für Kristall-Strukturen

Bei der Suche nach Materialien für Molekül-Modelle wurden auch Steck-Platinen geprüft. Diese werden in großem Umfang in der Elektronik eingesetzt. Sie bestehen aus einer dünnen, aber belastbaren Epoxyharz-Platte, die auf der einen Seite ver-kupfert ist. Die gängigen Platten sind in rechteckigem Muster mit kleinen Löchern versehen, durch die sogenannte Leitungsdraht hindurchpasst. Dieser lässt sich auf der ver-kupfer-ten Rückseite einfach anlöten. Der Abstand zwischen zwei Löchern beträgt standardisiert 2.54 mm, zwischen vier Löchern somit 1.016 cm. Daher eignen sich Perlen mit 1 cm Durchmesser. Der geringe Spielraum erleichtert den Bau der Modelle.

Nun gibt es im Bereich von einem Zentimeter eine Vielzahl von Perlen jeglicher Art. Als Material für Moleküle kommen die Platinen nur in Spezial-fällen in Betracht. Hervorragend geeignet sind sie jedoch für Kristall-Modelle; der Kochsalz-Kristall möge das zeigen. Die Platinen lassen sich durch kräftiges Anritzen mit einem scharfen Messer entlang der Bruch-linien zu passenden Stücken brechen. Dann werden die Drähte an einem Ende kurz rechtwinklig umgebogen und durch die Löcher geführt. Der Abstand beträgt jeweils 1 cm, also drei Löcher zwischen jedem Draht-stück. Rückseitig werden die Drähte mit der Kupferschicht verlötet. Wird der Draht zu einer U-Form gebogen, deren Basis 1 cm beträgt, lässt er sich durch die Platine drücken. Der Draht ist auf diese Weise so fixiert, dass er sich auch mit Heiß-Kleber endgültig befestigen lässt.

Dann werden Perlen mit einem Durchmesser von einem und 0.5 cm abwechselnd übereinander aufgezo-gen (Abbildung 7). Das Verhältnis von Na und Cl beträgt 200 pm zu 360 pm, also etwa 0.5 zu 1. So entsteht das kubische Ionengitter von Kochsalz als dichteste Kugelpackung (Abbil-dung 8). Magnesiumoxid hat die gleiche Gitterstruktur.

Elemente haben natürlich auch charakteristische Gitterstrukturen. So weisen z.B. Lithium, Natrium, Eisen, Chrom und Wolfram raumzentrierte Kugelpackungen (kubisch innenzentriert) auf. Kupfer, Silber und Gold sind kubisch flächenzentriert. Alle diese Strukturen lassen sich aus Platinen und Draht leicht nachbauen. Es ist dann eine persönliche Entscheidung, ob die Modelle oben offen bleiben (wobei man die Drähte durch Schaumstoff abdeckt) oder geschlossen werden. Dazu kann man wiederum Platinen verwenden.

Eine besondere Herausforderung sind hexagonale Strukturen. Platinen gibt es nur in quadratischen Mustern (Abbildung 9). Wie kommt man zu hexagonalen Anordnungen? Hierzu ist wieder ein Paradigmenwechsel notwendig. Die quadratische Vorgabe gilt nur für die zwei Dimensionen der Fläche. Die Modelle werden jedoch in den drei Dimensionen des Raumes erstellt. Somit kann die dritte Dimension genutzt werden, um dem System eine hexagonale Struktur aufzuprägen. Was heißt das? Ganz einfach: Nach dem Festlöten werden die senkrecht stehenden Drähte alle um 30° in die gleiche Richtung geneigt, sprich verbogen. Gegen die Ebene bilden sie einen Winkel von 60° . Werden dann Perlen von gleicher Größe aufgezogen, entstehen von selbst hexagonal dichteste Kugelpackungen (Abbildung 10). Magnesium und Zink kristallisieren in dieser Form. In anorganischen Lehrbüchern kann sich jeder Salze oder Elemente herausuchen und nach Maßgabe von Größe der Ionen und Art der Kristallgitter die entsprechenden Modelle bauen.

Das Platinen-Modell bietet den Vorteil, dass die Abstände relativ frei gewählt werden können. Weiterhin besteht die Möglichkeit, die Höhe der einzelnen Atome anzupassen. Allerdings müssen diese dann fixiert werden, wobei sich das Kleben besonders eignet. Kugeln aus gepresster Baumwolle halten auch ohne Kleber und sind zudem leicht einzufärben. Ein nicht zu unterschätzender Vorteil ist die Verfügbarkeit einer vielfältigen

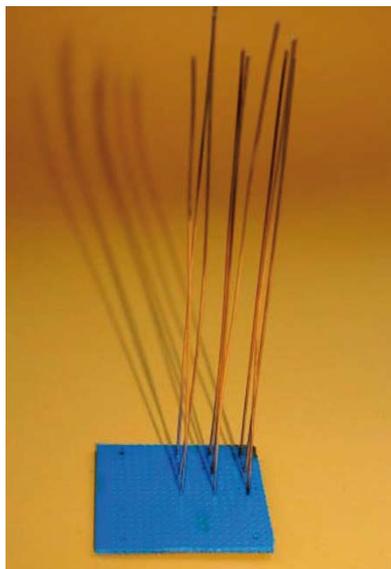


Abb. 9 Vorbereitete Platine.

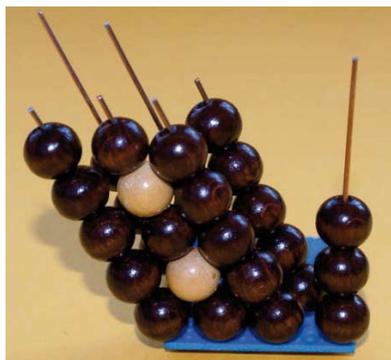


Abb. 10 Hexagonales Gitter durch Biegen der Führungsdrähte um 30° .

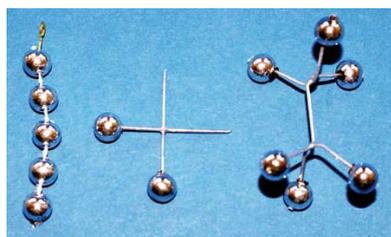


Abb. 11 Von der einfachen Perlenkette zu stabilen Molekülmodellen.

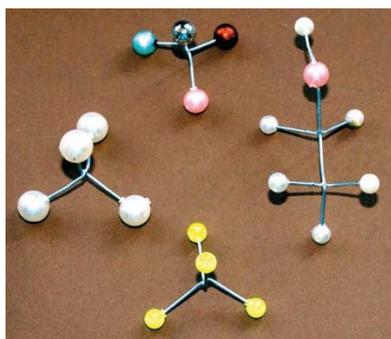


Abb. 12 Es eignen sich vielerlei Perlen.

Auswahl an Größe und Farbe von Perlen. Eine Sammlung unterschiedlicher Kristallgitter in ansprechenden Farben bildet einen Blickfang für jede naturwissenschaftliche Sammlung.

Die einfachste Methode – mit Modeschmuck zur Wissenschaft

Als Modeschmuck erfreuen sich Ketten und Armbänder aus Kunststoff-Perlen großer Beliebtheit. Diese Perlen gibt es in unzähligen Farben und Formen. Die Herstellung erfolgt durch Spritzguss der Perlen um einen Faden herum. Wenn der Faden einmal reißt, rollen die Perlen nicht davon. Einzelne Perlen lassen sich mit einiger Kraft vom Faden abreißen; dann verbleibt in der Perle ein dünner Kanal. Man kann die Perle jedoch auch mit einer Schere herausschneiden; der Kanal enthält dann noch das Reststück des Fadens. Was hat das mit Molekül-Modellen zu tun?

Nun, überraschenderweise eignen sich diese Perlen sehr gut für das Moletoomics™-Konzept (Abbildungen 11 und 12). Natürlich passt kein Draht durch die Quasi-Bohrung. Da die Perlen jedoch aus schmelzbarem Kunststoff bestehen, bahnt sich jeder heiße Draht seinen Weg in die Perle. Ja, mehr noch, es lässt sich leicht bestimmen, wie tief der Draht hineingeführt werden soll. Beim Abkühlen, was relativ rasch erfolgt, härtet der Kunststoff wieder, und der Draht bleibt eingeschmolzen. Auf diese Weise werden an allen Enden der Draht-Modelle ganz einfach die Wasserstoffatome angebracht. Eindrucksvoll einfach entsteht z. B. auch ein Enantiomeren-Paar aus Perlen in vier verschiedenen Farben (Liganden). Eine Angelegenheit von wenigen Minuten.

Die Frage des Erhitzens muss noch geklärt werden. Es gilt, nur die freie Spitze des Drahtes möglichst hoch zu erhitzen. Mit einem Feuerzeug oder den beliebten Flambier-Brennern ist das kein Problem (Abbildung 13). Es geht allerdings auch viel einfacher: mit Kerzen und Teelichtern (Abbildung 14). Wer Wert auf Schönheit legt, muss jedoch die direkte Flamme meiden, weil der Draht dort

Ruß ansetzt. Das schadet nicht, sieht aber, insbesondere bei weißen Perlen, nicht optimal aus. Also den Draht direkt über und nicht in die Flamme halten. Stellt sich heraus, dass der Draht nicht heiß genug war, schnell wieder herausziehen, bevor der Kunststoff wieder hart wird. Ist das mal passiert, den Draht dicht an der Kunststoff-Perle mit spitzer Flamme erwärmen. Die Wärme überträgt sich, und der Draht kann wieder herausgezogen werden.

Es gibt auch das umgekehrte Problem, wenn nämlich die Bohrung der Kunststoff-Perle größer ist als der Durchmesser des Drahtes. Dann muss das Ende des Drahtes dicker gestaltet werden. Als einfache Lösung bietet sich an, am Ende ein kleines Stück mit der Zange einfach umzubiegen. Auch eine kleine Öse eignet sich. Das so präparierte Ende wird gut erhitzt und in die Öffnung der Perle gedrückt. Wenn die gewünschte Tiefe erreicht ist, wird der Draht festgehalten und die Perle ein wenig gedreht. Dadurch verankert sich das Drahtende in dem fest werdenden Kunststoff. Diese Methode hat einen enormen Spielraum. Zunächst gibt es diese Perlen in fast beliebiger Vielzahl von Formen, Größen und Farben. Die Kosten für eine ausreichende Zahl von „Wasserstoffatomen“ liegen im Euro-Bereich. Zu Weihnachten und anderen Festen sind zusätzlich besondere Ketten erhältlich. Der Phantasie sind also fast keine Grenzen gesetzt (Abbildung 15).

Für den Bau von Molekül-Modellen stehen die praktischen Vorteile im Vordergrund. Die auf diese Weise befestigten Atome halten belastbar, die Modelle sind somit robust. An den größeren Sauerstoff- oder Stickstoffatomen lassen sich mit entsprechenden Drahtstegen noch die Wasserstoffatome im richtigen Winkel einschmelzen. Schließlich eignet sich die Methode, um Metallspitzen aller Art zu verzieren oder die Verletzungsgefahr zu vermeiden. Die Vielzahl von Ideen geht über den Bau von Molekül-Modellen hinaus. So können zum Beispiel langweilige Stecknadeln in-



Abb. 13 Erhitzen des Drahtendes mit einem Flambier-Brenner.

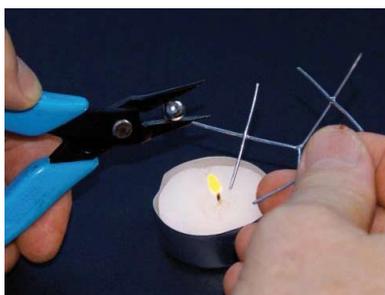


Abb. 14 Erhitzen des Drahtendes mit einem Teelicht und Fixierung der Kunststoff-Perle.

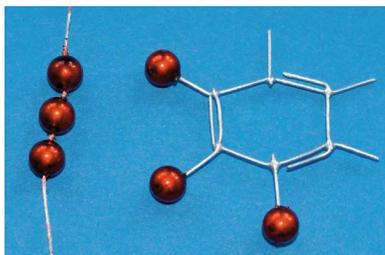


Abb. 15 Kunststoff-Perlen jeder Art lassen der Phantasie viel Spielraum (individuelles Benzol-Modell im Entstehen).

teressant gestaltet werden, indem die Nadelköpfe in ansprechende Kunststoff-Perlen eingeschmolzen werden. Diese Nadeln eignen sich wiederum für Modelle aus Styropor-Kugeln.

Bei Wattekugeln (gepresste Baumwolle) mit Vertiefungen und Perlen mit weiten Bohrungen werden diese mit Heißkleber gefüllt. Ist dieser erkaltet, werden Drahtenden von oder für die Substituenten (Atome) an der Spitze erhitzt. Dann lassen sie sich in der Heißklebmasse winkeltgerecht fixieren. Diese Methode ist breit anwendbar.

Fazit

Hier endet (vorerst?) das Projekt „Molekül-Modelle“. Entstanden ist ein

anschauliches Beispiel für ein Phänomen, das Innovation genannt wird. Am Anfang einer Innovation steht meist eine Invention, also eine Erfindung. Die Innovation ist der Prozess, der daraus eine Problemlösung entstehen lässt. Bei Innovationen können jedoch nicht nur Erfindungen, sondern auch Fragen den Prozess anstoßen. So war es hier der Fall. Warum hat die DNA noch eine Überstruktur in Form der großen und der kleinen Furchen? Gab es einfache Modelle, die dieses Verhalten zeigten? Die hohen Kosten für gute Modelle forderten heraus, erschwingliche Lösungen zu suchen. Beim Testen zahlreicher Materialien zeigten quadratische Drahtgitter besondere Vorteile. Ein Paradigmenwechsel, nämlich das Konzept des Aufbaus von Molekülen über Atom zu Atom zu verlassen, brachte den Durchbruch. „Gestalte zuerst das Skelett des Moleküls und füge später die Atome hinzu“, stellte sich als neue Herausforderung. Die „Befreiung“ des Kohlenstoffatoms aus dem zweidimensionalen Gefängnis der quadratischen Drahtgitter erwies sich dabei als Patentrezept. Das berührt eine weitere Frage: die der Patentierung. Da es darum geht, die Chemie anschaulicher und modellhaft erfahrbarer zu machen, sollte jeder, der Freude daran hat, frei und bedingungslos „experimentieren“ können. Daher wurde, bis auf den Namensschutz für „Moletoomics“, auf jegliche Patentierung verzichtet. Was zählen soll, sind Freude und Spaß an der Chemie auf der Ebene der Molekül-Modelle.

*Hans-Jürgen Quadbeck-Seeger,
Bad Dürkheim*

Literatur

- [1] H.-J. Quadbeck-Seeger, *Biol. Unserer Zeit* **2008**, *3*, 150 sowie **2008**, *6*, 365 und **2009**, *2*, 79; als auch *Chem. Unserer Zeit* **2008**, *4*, 292; und **2008**, *2*, 433.
- [2] H.-J. Quadbeck-Seeger, *Chem. Unserer Zeit* **2010**, *3*, 230.
- [3] weitere Beispiele und Hinweise unter www.quadbeck-seeger.de/bilder/moletoomics

NACH DEM MOLETOMICS™-KONZEPT

Nanoröhren-Modelle

Nach der Entdeckung des C_{60} -Fullerens und dessen langgestreckten Verwandten war es nur ein folgerichtiger Schritt bis zur Entdeckung der Nanoröhren aus Kohlenstoffatomen. Diese Nanoröhren (engl. Nanotubes) bilden sich aus monomolekularen Schichten des Graphits, also dem Graphen. Die Entdecker der ungewöhnlichen Eigenschaften des Graphens wurden 2010 mit dem Nobelpreis ausgezeichnet [1]. Auch die Nanoröhren besitzen überraschende Eigenschaften, die Gegenstand einer zunehmenden Zahl von Forschungsarbeiten sind.

Die Nanoröhren, von denen es eindrucksvolle Computerbilder gibt, erwecken den Eindruck, als seien sie einfach aufgerollte Graphene. Diese Vorstellung ist zwar nicht falsch, reicht aber nicht aus, weil es drei Möglichkeiten gibt, wie sich die Rolle bilden kann (Abbildung 1).

Das ist nicht nur topologisch interessant, sondern von entscheidender Bedeutung für die physikalischen Eigenschaften.

Je nach Anordnung des Wabennetzes sind die Nanoröhren nämlich metallisch leitend oder Halbleiter. Die Unterschiede entstehen dadurch, auf welche Weise sich die ideal hexagonale Struktur des Graphens zu einer Röhre rollt. Die von Computern generierten Bilder in Büchern, Veröffentlichungen und bei Google sehen zwar beeindruckend aus, es fällt jedoch nicht leicht, sich die Unterschiede zwischen ihnen konkret vorzustellen. Erst anhand von Modellen werden die besonderen strukturellen Unterschiede nachvollziehbar deutlich.

Mit dem MOLETOMICS™-Konzept [2] auf Basis von quadratischen Gitterdrähten ließen sich bisher alle denkbaren Moleküle als Modell darstellen [3]. Sowohl das C_{60} -Fulleren [4] als auch das Graphen [5] zeigten die besondere Vielfältigkeit des neuen Modell-Systems. Sind auch Modelle für die verschiedenen Nanoröhren zugänglich? Überraschenderweise lassen sich diese molekularen Gebilde mit ihren speziellen Eigenschaften so-

gar ohne große Schwierigkeiten nachbauen.

Zunächst muss entschieden werden, ob und wie die Kohlenstoffatome in Form von schwarzen Kunststoffperlen angebracht werden sollen. In der letzten Veröffentlichung über Graphen [5] wurde zunächst das Gitter mit den Doppelbindungen einer mesomeren Grenzform erstellt. Die „Kohlenstoffatome“ kommen anschließend hinzu. Nach Erhitzen der Knotenpunkte wurden die Kunststoffperlen in den heißen Draht gedrückt, wo sie einschmolzen und nach dem Erkalten fest verankert waren.

Deshalb soll bei den Nanoröhren die andere Variante angewandt werden. Nach der Bildung des Wabengitters bleibt an jedem C-Atom (Knotenpunkt) eine „halbe“ Valenz in Form eines halben Drahtsteiges frei, wenn der Mittelsteg halbiert wird. Diese Stücke werden nach oben gebogen und dienen später der Befestigung der schwarzen Kunststoffperle. Dabei wird der Knotenpunkt vorher eben-

falls erhitzt und die Kugel einschmelzend hineingedrückt. Nach wenigen Vorübungen gelingt der Vorgang nahezu spielerisch. Umso überraschender sind die Ergebnisse. Je nachdem, wie das ebene Graphen zu einer Röhre gerollt wird, ergeben sich die drei Arten von Nanoröhren. Beginnt man so, dass die sechseckigen Waben der aufrecht stehenden Röhre auf der Spitze der sechseckigen Waben stehen, ergibt sich die sogenannte „Zickzack“- (zigzag)-Variante. Zur Charakterisierung wird die Röhre quer betrachtet. Dabei bilden die Kohlenstoffatome eine Zick-Zack-Linie. In der Längssicht liegen die Kugeln dagegen in parallelen Reihen.

Wird das Gitter vor dem Biegen zu einer Röhre in der alternativen Weise geschnitten, steht diese auf der Linie von C-C-Bindungen. Bei der Quer-Betrachtung bilden die Kohlenstoffatome dieser Nanoröhre eine Reihe, die an einen Stuhl oder Sessel mit Armlehne erinnert. Diese Form wird daher als „Sessel“- (armchair)-Variante bezeichnet. In Längsrichtung

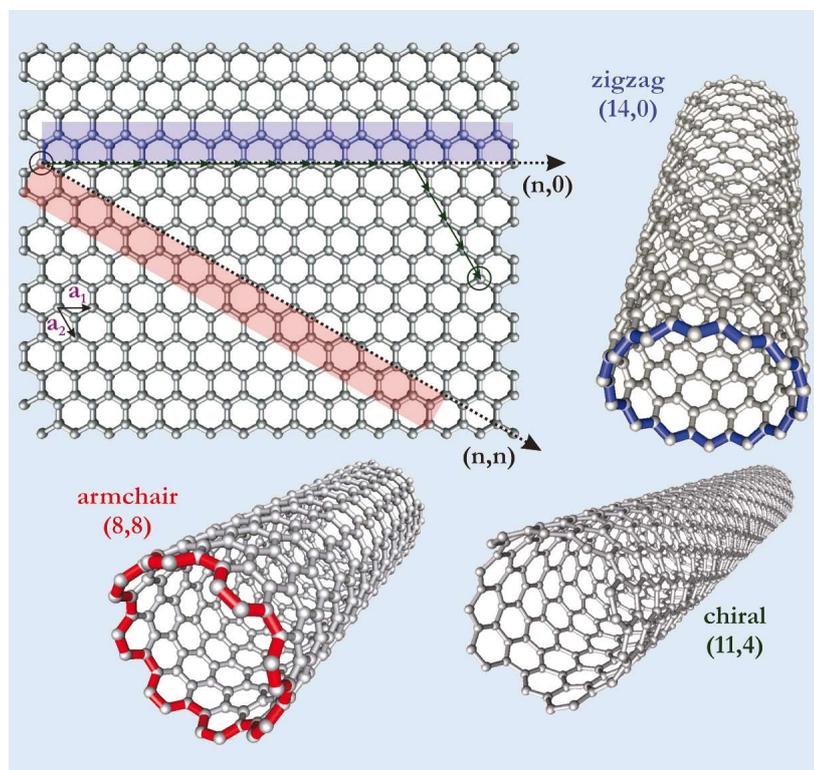


Abb. 1 Durch unterschiedliches Aufrollen einer Graphitebene lassen sich drei Arten von Nanoröhren konstruieren. [6].

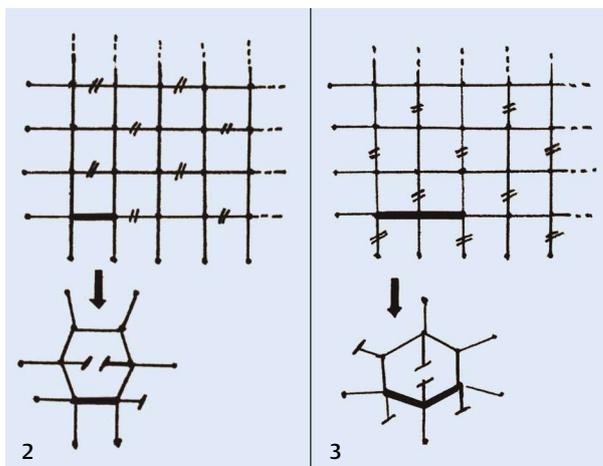


Abb. 2 Schneide-Skizze für Sessel-Röhren

Abb. 3 Schneide-Skizze für Zickzack-Röhren

bilden die C-Atome eine Reihe mit wechselnder Verschiebung nach links und rechts.

Die dritte Variante der Röhrenbildung entsteht dadurch, dass der Ringschluss nicht parallel, sondern unter vertikaler Verschiebung stattfindet. Dabei werden die Enden um jeweils einen Sechsring gegeneinander versetzt. Da diese Verschiebung nach oben oder nach unten erfolgen kann, ergibt sich eine helikale Chiralität, wie sie von der DNA bekannt ist. Daher heißt diese Variante „chirale“ Nanoröhren.

Nun zum Bau der Modelle. Für die Zickzack- und die Sessel-Nanoröhren werden aus Drahtgitter (19,7 mm Kantenlänge der Gitter – die handelsübliche Größe) Stücke mit jeweils 12×6 Knotenpunkten ausgeschnitten.

Die Stege der äußeren Knoten bleiben dabei stehen. Dann entscheidet das Schnittmuster, welche Form entstehen soll. Die Stege werden

jeweils mittig getrennt und später nach oben gebogen. Werden die nebeneinander liegenden Quadrate zu sechseckigen Waben auseinandergezogen, entstehen die Sessel- oder die Zickzack-Variante automatisch. Wer sich das einfache Lötten zutraut, lötet bei der Sessel-Variante drei waagerechte Drahtstege zusammen. Die Stege werden dazu parallel positioniert, mit spitzer Flamme erhitzt und mit dünnem Lötendraht berührt. Das Lötzinn verbindet die Stege augenblicklich.

Bei der Zickzack-Form müssen sechs schräg stehende Stege zusammengelötet werden. Ein Zusammenhalt ohne Lötten ist ebenfalls möglich. Dazu werden die Stege korrekt positioniert. Dann werden die jeweiligen Knotenpunkte gut erhitzt und die Kunststoff-Perle tief in die zu vereinigenden Teile eingedrückt. Um den Zusammenhalt zu gewährleisten, löst man die Fixierung erst, wenn der Kunststoff erhärtet ist. Es ist ratsam, diese Schritte an kleinen Stücken vorher einzuüben.

Die chirale Form der Nanotubes erfordert ein größeres Stück Draht, damit die Versetzung der Enden um eine Wabe gelingt. Als kleinste Variante erwies sich ein Quadrat aus 12×9 Knotenpunkten. Die äußeren Stege bleiben ebenfalls erhalten. Geschnitten wird nach dem Sessel-Muster. Dann erfolgt die Zusammenfügung der Enden zu einer Röhre, wobei das Modell mit etwas Kraft vertikal versetzt wird. Die Fixierung kann wiederum durch Lötten oder durch tieferes Einschmelzen der Stege in die

Kunststoffperle erfolgen. Die spiralförmige Struktur lässt sich bereits an dem kleinen Stück erkennen und so die Zuordnung treffen, ob die Spirale links oder rechts drehend ist.

Werden die drei Formen verglichen, lassen sich überraschende Unterschiede erkennen. Aus gleichgroßen Draht-Rechtecken entstehen nach der Sessel-Methode Nanoröhren, die breiter und gedrungener sind. Die Nanoröhren nach der Zickzack-Methode sind schmaler und höher. Bei dem beschriebenen Muster passt die Zickzack-Röhre in die Sessel-Röhre. Den Modellen ist natürlich nicht anzusehen, welche Form halbleitend oder metallisch leitend ist. Um das zu erklären, ist ein vertieftes Studium der Eigenschaften notwendig. Hier ist nur anzumerken, dass die Sessel-Gruppe grundsätzlich metallisch leitend ist.

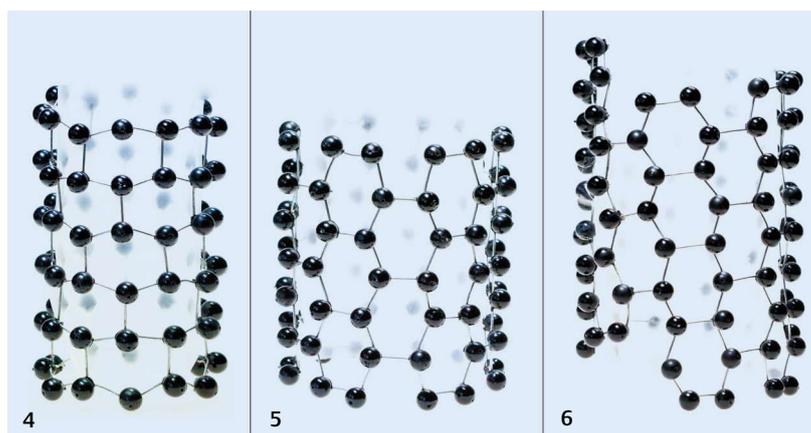
Es ist jetzt schon abzusehen, dass die Nanoröhren, von denen hier nur die Kohlenstoff-Familie betrachtet wurde, die Wissenschaft noch lange herausfordernd beschäftigen werden [6]. Einmal gefertigte Modelle, deren Bau nicht schwierig ist, können die Anschauung und das Verständnis für diese faszinierende Form von Materie erleichtern und fördern.

*Hans-Jürgen Quadbeck-Seeger,
Bad Dürkheim*

Abb. 4 Das Zickzack (zigzag)-Modell

Abb. 5 Das Sessel (armchair)-Modell

Abb. 6 Das chirale Modell



Literatur

- [1] R. Harrer, Chem. Unserer Zeit **2010**, *44*, 380-381
 - [2] H.-J. Quadbeck-Seeger, Chem. Unserer Zeit, **2010**, *44*, 154-157
 - [3] H.-J. Quadbeck-Seeger, Chem. Unserer Zeit, **2011**, *45*, 60-63
 - [4] H.-J. Quadbeck-Seeger, Chem. Unserer Zeit, **2010**, *44*, 230-231
 - [5] H.-J. Quadbeck-Seeger, Phys. Unserer Zeit, **2011**, *42*, 46
 - [6] K. Balasubramanian, M. Burghard, Chem. Unserer Zeit **2005**, *39*, 16-25
- Unter www.quadbeck-seeger.de/moletomics finden sich weitere Hinweise und Bilder von Molekülen.

MOLEKÜLBAUSYSTEM

Modelle für Graphen – einfach und dennoch eindrucksvoll

Am 10. Dezember erhielten Andre Geim und Konstantin Novoselov den Physik-Nobelpreis 2010 für ihre Arbeiten zum Graphen [1]. Lässt sich diese interessante, monomolekulare Schicht des Graphits auch mit herkömmlichen Molekülbausätzen als Modell nachbilden? Im Prinzip ja, praktisch gibt es jedoch eine triviale Grenze: die unzureichende Zahl an C-Atomen in der sp^2 -Struktur. Mit dem System Moletomics™ tritt dieses Problem erst gar nicht auf. Beliebig große Modellflächen lassen sich einfach und preiswert herstellen [2].

Dem neuartigen System liegt ein Paradigmenwechsel zugrunde, denn anders als üblich erfolgt der Aufbau von Molekülmodellen nicht dadurch, dass Atom an Atom gehängt wird. Der Weg ist genau umgekehrt. Zunächst wird aus geeigneten Drahtgittern das „Skelett“ des vollständigen Moleküls gebogen, dann erst werden die Atome auf geeignete Weise befestigt.

Zur Erinnerung: Beim Kohlenstoffatom verschmelzen s- und p- Orbitale zur pyramidalen sp^3 -Konfiguration. Bei dreibändigem C-Atom, das heißt wenn eine C-Doppelbindung vorliegt (beispielsweise C=C oder C=O), kommt es zur Ausbildung von sp^2 -Hybrid-Orbitalen. Diese liegen in einer Ebene. Im Graphit besitzen alle C-Atome diese Konfiguration, wodurch es zur Ausbildung der bekannten Schichtstruktur kommt. Die C-Atome einer Schicht liegen dabei in einer hexagonal strukturierten Ebene mit der bekannten Wabenstruktur. Eine solche monomolekulare Grundstruktur wird als Graphen bezeichnet. Der stete Wechsel von Einzel- und Doppelbindung macht die Struktur elektronenreich. Die ungestörte Ebenheit verleiht den Elektronen eine hohe Beweglichkeit. So lassen sich – etwas vereinfacht – die ungewöhnlichen Eigenschaften des Graphens erklären. Die Grundstruktur ist das Sechseck, das schon dem Benzol besondere Eigenschaften verleiht. Das entscheidende Problem stellt sich in der Bildung gleichmäßiger, zusammenhängender Sechsecke.

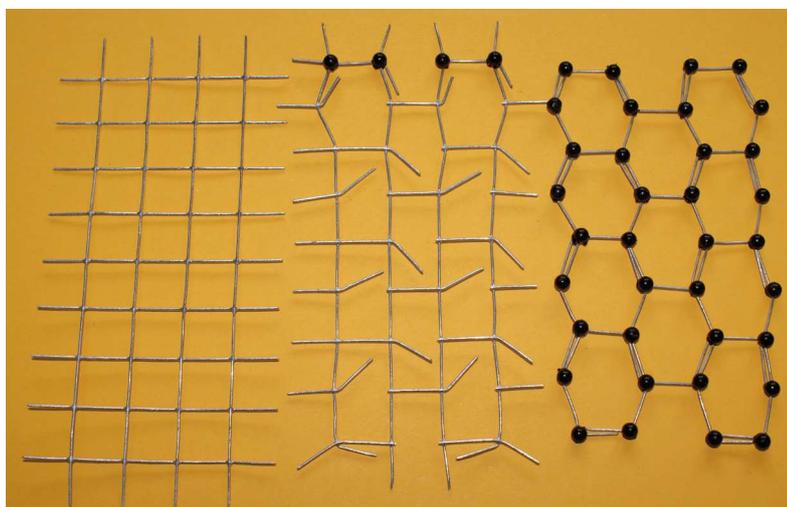
Kann dies mit dem System Moletomics™ erreicht werden?

Ausgehend von überall in Baumärkten erhältlichem quadratischem Gitterdraht (Abbildung 1 links) lassen sich durch planvolles Durchtrennen von Stegen und anschließendem Biegen und Dehnen sechseckige molekulare Gerüste überraschend einfach darstellen. Der entscheidende Trick besteht darin, den Steg, den jeweils zwei Quadrate gemeinsam haben, an einem der beiden Knotenpunkte zu durchtrennen. Der nunmehr freie Steg wird zur „Doppelbindung“ in den durch Zug entstehenden Sechsring umgebogen. Bei Einhaltung des richtigen Musters entsteht ein System aus Sechsringen, bei dem jeder Knotenpunkt über einen freien Steg (wie eine Valenz) zur Bildung einer Doppelbindung verfügt.

Nach dem Auseinanderziehen der Rechtecke zu Sechsecken müssen die freien Stege in der richtigen Weise umgebogen werden (Abbildung 1 Mitte) [3]. Auf diese Weise lässt sich eine der vielen nackten (mesomeren) Strukturen mit den Doppelbindungen darstellen.

Mit dem nachträglichen Hinzufü-

gen von „Atomen“ wird das Modell noch anschaulicher und attraktiver. Hierfür eignen sich schwarze Kunststoffperlen (billiger Modeschmuck) am besten. Dazu wird der Knotenpunkt, an dem das Atom angebracht werden soll, mit einer spitzen Flamme (Sturmfeuerzeug, Flambierbrenner) kurz erhitzt und auf die Perle gedrückt. Das sp^2 -Zentrum aus Draht schmilzt in die Perle ein, wobei Draht und Perle sich gegenseitig fixieren. (Zwei kleine Tipps: Die Perle sollte auf einer Unterlage mit einer leichten Vertiefung am Wegrollen gehindert werden. Wer auf die Doppelbindung



gen verzichten will, kann die freien Stege auch nutzen, um Perlen als Atome daran zu befestigen.)

Abbildung 1 rechts zeigt ein derart gefertigtes Modell. Nach diesem Konzept lassen sich praktisch alle organischen Moleküle, wie alle Aminosäuren, das Benzol, das „Fußballmolekül“ C_{60} und sogar das Diamantgitter, darstellen [4].

Literatur

- [1] U. Zeitler, Phys. Unserer Zeit 2010, 41 (6), 272.
- [2] H.-J. Quadbeck-Seeger, Biol. Unserer Zeit 2009, 39 (2), 79.
- [3] H.-J. Quadbeck-Seeger, Chem. Unserer Zeit 2010, 44 (3), 230.
- [4] www.quadbeck-seeger.de/bilder/moletomics

Hans-Jürgen Quadbeck-Seeger,
Bad Dürkheim

Abb. 1 In einfachem Gitterdraht (links) durchtrennt man die jeweils unteren Stege eines Quadrats und biegt sie zur „Doppelbindung“ um. Dann zieht man die entstandenen Rechtecke zu Sechsecken auseinander (Mitte oben). Anschließend bringt man in den Knotenpunkten schwarze Kunststoffperlen (die Kohlenstoffatome) an. Vergrößerungsfaktor 1:10⁹.



Gesellschaft Deutscher Chemiker e. V.
Varrentrappstraße 40-42
60486 Frankfurt am Main
www.gdch.de