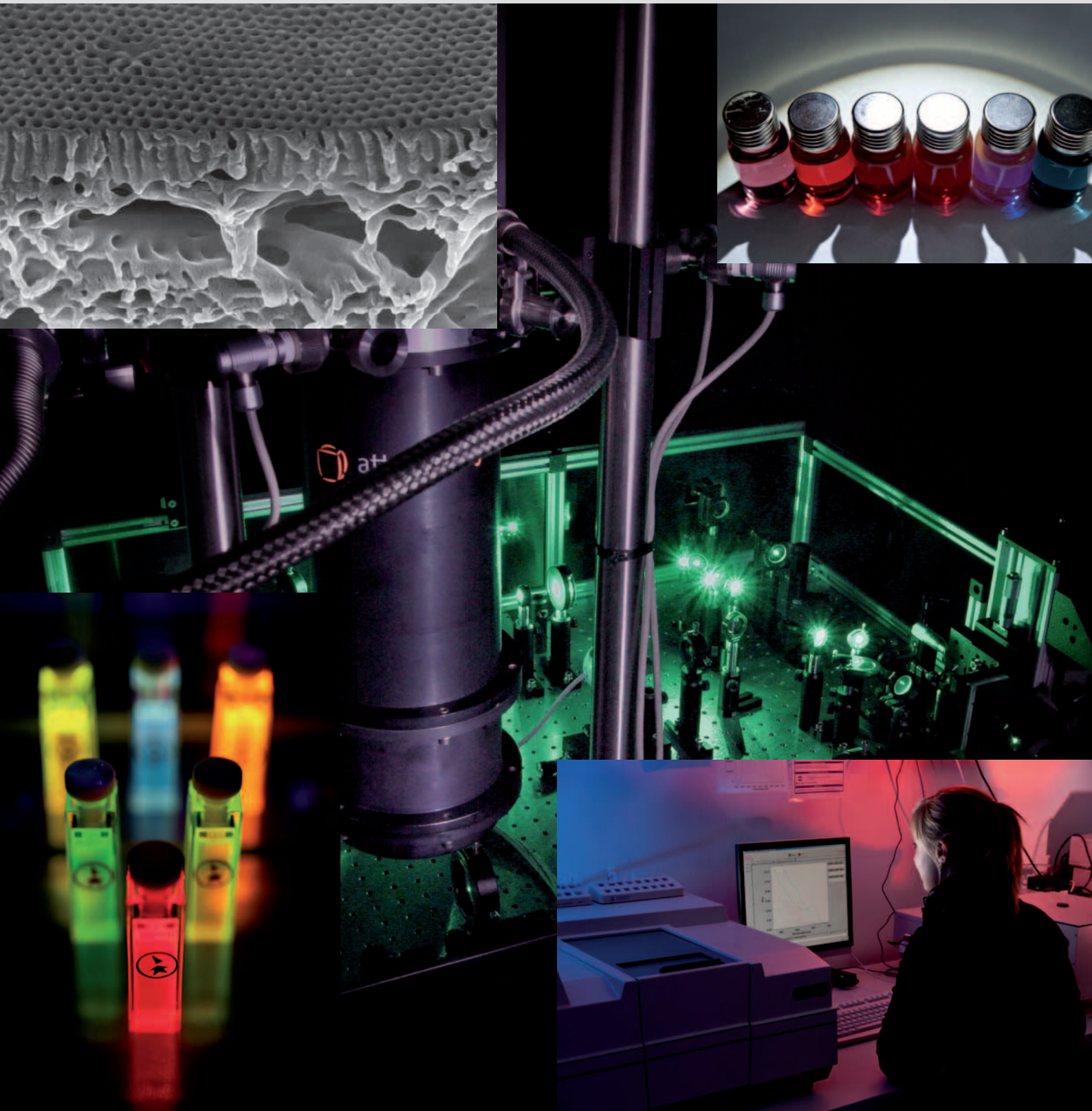




Institut für Physikalische Chemie
Universität Hamburg

PHYSIKALISCHE CHEMIE IN HAMBURG



we make processes work



When you see a baby crawling off on its next big adventure, dry and happy, you often have us to thank. That's because Schenck Process systems handle the super-absorbent polymers that absorb moisture in nappies. But this isn't the only application for our technology. It is also used to put the right number of gherkins in a jar, to generate energy in a highly efficient and environmentally friendly way or to mix the right material for a complex bridge construction.

Schenck Process employs 3,400 members of staff at 34 locations and has been a world leader in measuring and process technology, industrial weighing, feeding, screening and automation for more than 125 years. www.schenckprocess.com

Vorwort

Die diesjährige Bunsentagung ist ein willkommener Anlass, die Geschichte der Physikalischen Chemie in Hamburg aufzuarbeiten. Zahlreiche Aktive und Ehemalige hatten schon im Vorfeld hervorragende Arbeit geleistet und so freuen wir uns, das umfangreiche Material von teilweise historischer und teilweise zukunftsweisender Bedeutung unseren Kollegen und einer breiten Öffentlichkeit vorstellen zu können. Der Anlass ist für Physikochemiker natürlich trefflich und fällt zudem mit dem kürzlichen Jubiläum „400 Jahre Chemie in Hamburg“ zusammen. Außerdem trifft es uns in einer Phase, in der die Physikalische Chemie in Hamburg deutlich erstarkt ist. Durch die maßgebliche Beteiligung am Bundesexzellenzcluster „The Hamburg Centre for Ultrafast Imaging (CUI)“ konnte zu den bereits bestehenden drei C4/W3 Professuren und den zwei W1 je eine neue Professur eingerichtet werden, wodurch die PC nun die meisten Lehrstühle innerhalb der ansonsten auch nicht kleinen Hamburger Chemie hat. Forschungsthematisch hat sich das Institut in den letzten Jahren stark fokussiert und zu einem international hoch angesehenen Nanowissenschaftszentrum entwickelt: Alle Arbeitsgruppen untersuchen nanostrukturierte Systeme, wobei die Leiter der Gruppen jeweils gänzlich unterschiedliche Hintergründe haben und damit ein breites Fachwissen repräsentieren. Wir freuen uns auch über die gelungene Ausweitung der physikalisch-chemischen Forschungsaktivitäten auf dem Bahrenfeld-Campus. Hier ist in den letzten Jahren in Hamburg kluge Forschungspolitik betrieben worden. Parallel zum Bau der modernsten Röntgenlichtquellen PETRA III, FLASH, FLASH II und dem Europäischen Röntgenlaser XFEL wurden renommierte Wissenschaftler aus der ganzen Welt

nach Hamburg berufen und finden in der Universität, dem DESY, dem Center for Free-Electron Laser Research (CFEL) und dem neu gegründeten Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie ihr neues Zuhause. Physiker, Chemiker und Biologen arbeiten hier in bester physikochemischer Tradition zusammen.

Dieses kleine Buch beschreibt zunächst die Anfänge der Physikalischen Chemie in Hamburg noch bevor es ein eigenes Institut gab und dann in chronologischer Abfolge die Entwicklung der PC bis heute. Danach stellen sich die derzeit aktiven physikochemisch orientierten Arbeitsgruppen in alphabetischer Abfolge der Gruppenleiter vor.

Ein besonderer Raum wurde dem prominentesten Hamburger Wissenschaftler Otto Stern gewidmet, mit dessen Berufung die Physikalische Chemie zu einem eigenständigen Institut wurde und dessen bahnbrechende Entdeckungen ihm 1943 den Nobelpreis bescherten. Horst Förster hat hier viel historisches Material zusammengetragen und zu einer gelungenen kurzen Biographie aufgearbeitet.

Ich möchte an dieser Stelle allen danken, die zum Gelingen dieses Buches beigetragen haben, der Bunsen-Gesellschaft für die Finanzierung und dem Verlag für die professionelle Umsetzung.

Und Ihnen, verehrte Leserinnen und Leser, wünsche ich viel Vergnügen bei der Lektüre.

Horst Weller

Hamburg, im Mai 2014



Inhaltsverzeichnis

- | | | | | | |
|----|--|----|--|----|--|
| 1 | Vorwort
Prof. Dr. Horst Weller | 20 | Prof. Dr. Jochen Küpper
Arbeitskreis Controlled Molecule Imaging (CMI), Center for Free-Electron Laser Science (CFEL), DESY und Universität Hamburg | 34 | Prof. Dr. Robin Santra
CFEL Theory Division, Center for Free-Electron Laser Science, DESY |
| 3 | Volkmar Vill
Die Vorgeschichte der Physikalischen Chemie in Hamburg | 23 | PD. Dr. Tim Laarmann
Arbeitskreis Röntgen-Femtochemie, Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY | 36 | Dr. Melanie Schnell
Arbeitskreis Struktur und Dynamik kalter Moleküle, Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie am Center for Free-Electron Laser Science |
| 4 | Bertel Kastening
Die Geschichte der Physikalischen Chemie in Hamburg | 24 | Prof. Dr. Holger Lange
Arbeitskreis: Dynamik in Nanostrukturen | 38 | Prof. Dr. Tobias Schwabe
Arbeitskreis Theoretische und Computergestützte Chemie, Institut für Physikalische Chemie und Zentrum für Bioinformatik |
| 15 | Prof. Dr. Volker Abetz
Arbeitskreis Polymere, Institut für Physikalische Chemie | 26 | Prof. Dr. Alf Mews und PD Dr. Tobias Kipp
Arbeitskreis Nanooptik, Institut für Physikalische Chemie | 40 | Prof. Dr. Horst Weller
Arbeitskreis Nanochemie, Institut für Physikalische Chemie |
| 16 | Prof. Dr. Gabriel Bester
Arbeitskreis Theorie Nanoskopischer Systeme, Institut für Physikalische Chemie | 29 | R. J. Dwayne Miller, FRSC, FCIC
Femtosekunden-Atomebeobachtung: Das Gedankenexperiment des Chemikers wird Wirklichkeit | 43 | Horst Förster
OTTO STERN - Nobelpreis 1943 für seine Forschung als Professor für Physikalische Chemie in Hamburg |
| 19 | PD Dr. Christian Klinken
Arbeitskreis: Chemische Nanoelektronik | 32 | UHH-Max-Planck-Forschungsgruppe Ultraschnelle Moleküldynamik | | |

Impressum

Herausgeber:

Institut für Physikalische Chemie
Universität Hamburg und
Centrum für Angewandte Nanotechnologie
Grindelallee 117
20146 Hamburg

Redaktion:

Prof. Dr. Horst Weller

Satz/Anzeigenverwaltung:

VMK-Verlag GmbH, 67590 Monsheim
www.vmk-verlag.de

Druck:

VMK Druckerei GmbH, 67590 Monsheim
www.vmk-druckerei.de

Die Vorgeschichte der Physikalischen Chemie in Hamburg

Volkmar Vill

Das heutige Institut für Physikalische Chemie ist aus einer kontinuierlichen über 400jährigen akademischen Entwicklung entstanden. Das mag zunächst verwunderlich erscheinen, denn die Universität Hamburg ist noch nicht einmal 100 Jahre alt. Aber es gab Vorgängerinstitutionen - und lange vorher auch schon Bedarf an Chemischer und Physikalischer Forschung, Lehre und Dienstleistung in Hamburg.

1613 wurde in Hamburg das **Akademische Gymnasium** gegründet. Es entsprang einer protestantischen Bildungsvorstellung und stellte eine Brücke zwischen der Schule und der Universität dar. Es war quasi ein einjähriger Vorkurs für die Universität. Zu Beginn konnte das Gymnasium sogar mit den Universitäten wissenschaftlich konkurrieren, da es hochkarätige Professoren berufen konnte, denn Hamburg war von den Kriegshandlungen des 30jährigen Krieges verschont geblieben und bot so Schutz für die Wissenschaftler. Zunächst war eine von fünf Professuren dem Bereich der Mathematik und Naturwissenschaften gewidmet. Die Abfolge der Professoren beginnt hier mit Peter Lauremberg (Professor in Hamburg 1614-1624) und endet mit **Karl Wiebel** (Professor in Hamburg 1837-1881). Schon bald nach der Gründung wurde ein zweiter Lehrstuhl für die Naturwissenschaften eingerichtet, beginnend mit **Joachim Jungius** (Professor in Hamburg 1629-1657) bis Heinrich Gustav Reichenbach (Professor in Hamburg 1863-1883). Jungius hatte sich sogar sehr konkret mit chemischen Fragen beschäftigt und nach heutiger Klassifikation sogar mit Fragen der Physikalischen Chemie. Er beschäftigte sich mit der Atomistik und trug damit zur Begründung der Chemie als Naturwissenschaft bei. In seiner Dissertation "Doxoscopiae Physicae Minores" verwarf er die vier Elemente des Altertums (Feuer, Erde, Luft und Wasser) und die drei der Alchemie (Quecksilber, Schwefel, Salz) und definierte chemische Elemente als einheitliche, nicht weiter zerlegbare Stoffe. Damit widersprach er auch der Idee der Alchemisten, Gold durch Umwandlung anderer Metalle zu gewinnen.

Naturwissenschaftliche Instrumente waren zunächst ein Teil der Bibliothek und unterlagen Fluktuationen, die man heute nicht mehr genau rekonstruieren kann. **1837** wurde Karl Wiebel als Professor für

Mathematik, Physik und Chemie berufen, der zu Beginn seiner Arbeiten das Vorhandene bilanzierte. Zur Physik gab es eine ansehnliche Sammlung (das "Physikalische Kabinet"), zur Chemie war praktisch nichts vorhanden. Er gründete ein "Chemisches Laboratorium", das **1841** eröffnet wurde und neben den Lehraufgaben des Gymnasiums auch der öffentlichen Bildung diente und zunehmend auch Dienstleistungen für Behörden und Gerichte übernahm. Nun gab es immer weniger Studierende des Gymnasiums, aber immer mehr Nutzer der Laboratorien. Das Gymnasium wurde also aufgelöst und die Laboratorien in Staatsinstitute überführt. Zunächst wurde die Chemie selbstständig. **1878** wurde Ferdinand Wibel, der Sohn von Karl Wiebel, Direktor des neuen **Chemischen Staatslaboratoriums**. **1883** wurde das Akademische Gymnasium aufgelöst und August Voller, Lehrer des Johanneums, übernahm die unentgeltliche Betreuung des Physikalischen Kabinetts. **1888** wurde er dann Direktor des neu-gegründeten Physikalischen Staatsinstituts. Später bekamen beide Institute Seite-an-Seite Neubauten in der Jungiusstraße. Als **1919** die **Universität** gegründet wurde, wurden beide Institutionen Teil dieser Alma Mater. Bis zur Gründung der Universität hatten die beiden Staatsinstitute überwiegend Dienstleistungsaufgaben, z.B. Überwachung der Nahrungsmittel, des Trinkwassers und des Petroleums, Gutachten und Analysen für Gerichte, elektrisches Prüfam, Betrieb der Erdbebenstation etc. Durch die Lehr- und Forschungsaufgaben der Universität konnten nun neue Ziele gesetzt werden. Schon **1920** konnte eine Abteilung für Physikalische Chemie mit **Max Volmer** eingerichtet werden. Vorteilhaft war hier, dass beide Staatsinstitute direkt aneinander gebaut waren. So hatte Volmer seine Büroräume (und organisatorische Zuordnung) im Chemischen Staatslaboratorium, aber seine Labore im Physikalischen Staatslaboratorium. Als er schon **1922** einen Ruf nach Berlin annahm, wurde beschlossen, der Physikalischen Chemie eine noch größere Bedeutung zu geben. Statt einer apl. Professur wurde ein Ordinariat für Physikalische Chemie geschaffen und damit auch ein eigenständiges Institut. Als Direktor wurde **Otto Stern** berufen, der sich mehr als würdig für diese Stelle erwies. Er etablierte die Molekularstrahl-Forschung in Hamburg und bekam später für seine Arbeiten den **Physik-Nobelpreis** des Jahres

1943. Damit war Otto Stern möglicherweise der bedeutendste Forscher Hamburgs - aber der Rassenwahn der Nationalsozialisten beendete diese Forschungen in Hamburg. Otto Stern und 3 seiner 4 Assistenten wurden **1933** vertrieben. Damit war das Institut praktisch verwaist. Das Institut konnte aber wissenschaftliches Gewicht wiedererlangen. **1934** wurde **Paul Harteck** berufen. Über die oben genannten Wissenschaftler (Jungius, Wiebel, Stern, Harteck) wurden und werden viele Biographien geschrieben, so dass für weitere Details darauf verwiesen werden soll.



Das Institut für Physikalische Chemie, ca. 1930, Bild: Fritz Thieme

Auch außerhalb der akademischen Institutionen machte die Chemie in Hamburg Fortschritte. Noch heute bedeutsam sind die elektrolytischen Verfahren zur Scheidung von Buntmetallen von **Emil Wohlwill** (1835-1912). Er führte für die Norddeutsche Affinerie (heute Aurubis) die erste dauerhaft arbeitende **Kupferelektrolyse** ein. Weltweit bekannt ist auch die **Nivea-Creme**, die **Oscar Tropolowitz** für Beiersdorf entwickelte. Besonders zu erwähnen sind auch zwei Zeitgenossen von Jungius. Der Alchimist **Hennig Brand** entdeckte das chemische **Element Phosphor** beim Versuch, aus Silber Gold zu machen. Und der Hamburger Arzt **Andreas Cassius** wurde berühmt für seine Erfindung des **Cassius'schen Goldpurpur** im Jahr **1687**, eine der ersten nano-technologischen Produkte. Da nun die Nano-Forschung wieder zentrales Forschungsgebiet geworden ist, schließt die Gegenwart geradezu perfekt an die Vergangenheit an.

Die Geschichte der Physikalischen Chemie in Hamburg

Bertel Kastening

In der zweiten Hälfte des 19. Jahrhunderts etablierte sich ein neues Wissenschaftsgebiet, die Physikalische Chemie. Während die bisherigen Zweige, die Anorganische und Organische Chemie, analytisch, präparativ-synthetisch und die Eigenschaften beschreibend orientiert waren, wollten Physikochemiker Hintergründe und Ursachen des Verhaltens und der Eigenschaften erfassen und dies mit den von der Physik her vertrauten Methoden und Gesetzmäßigkeiten. Kernbereiche der Physikalischen Chemie wurden die Chemische Thermodynamik und die Chemische Kinetik, weitere Teilgebiete die Elektrochemie und die Spektroskopie. Die Physikalische Chemie ist damit ein Fach, das zwischen Chemie und Physik die Brücke schlägt. Im Jahre 1887 erschien die „Zeitschrift für Physikalische Chemie, Stöchiometrie und Verwandtschaftslehre“, später einfach „Zeitschrift für Physikalische Chemie“. Im Jahre 1894 wurde die „Deutsche Elektrochemische Gesellschaft“ gegründet, die ab 1902 „Deutsche Bunsen-Gesellschaft für angewandte physikalische Chemie“ hieß; später wurde auch das „angewandte“ aus dem Titel gestrichen, obwohl die Gesellschaft bis heute auch die Begegnung von Wissenschaftlern aus der industriellen Praxis mit denen aus den Hochschul- und Forschungsinstituten pflegt.

Traditionell ist die Physikalische Chemie eines der drei Haupt-Prüfungsfächer des Chemiestudiums, während sie im Physikstudium ein Wahlfach darstellt. Diesem Umstand ist es zuzuschreiben, dass im Falle organisatorischer Zuordnung das Fach eher der Chemie als der Physik zugeordnet wird (so 1969 an der Universität Hamburg bei der Auflösung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät dem Fachbereich Chemie und nicht dem Fachbereich Physik). Bei den Professoren und weiteren Wissenschaftlern des Faches, durch die die Forschungsgebiete bestimmt werden, und ebenso bei den Doktoranden, die am Institut für Physikalische Chemie ihre Dissertation anfertigen, halten sich Chemiker und Physiker in etwa die Waage. Weiterhin ist die Physikalische Chemie Teil Hamburger Forschungszentren, die formal eher der Physik angegliedert sind. Dies beinhaltet

insbesondere den Bundesexzellenzcluster *The Hamburg Centre for Ultrafast Imaging (CUI)*, das *Center for Free-Electron Laser Science (CFEL)*, einer Kooperation zwischen DESY, der Max-Planck-Gesellschaft und der Universität Hamburg, und Arbeitsgruppen am Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie und dem Helmholtz-Zentrum DESY.

In den Jahren 1871/1872 wurden in Leipzig bzw. Wien erste Lehrstühle für Physikalische Chemie eingerichtet, und um die Jahrhundertwende folgten viele deutsche Universitäten nach. Als im Vorfeld der Gründung der Universität Hamburg vom Hamburgischen Senat 1912 bei der Bürgererschaft der „Ausbau des Kolonialinstituts und des allgemeinen Vorlesungswesens“ beantragt wurde, war bereits die Physikalische Chemie als Abteilung des Chemischen Staatsinstituts vorgesehen, und ihr wurden später Räume im Physikalischen Staatsinstitut zugewiesen. Bei Gründung der Universität 1919 wurde dann **Max Volmer** aus Leipzig als Leiter der Abteilung auf eine außerordentliche Professur berufen, die er 1920 antrat.

Max Volmer wurde am 3. Mai 1885 in Hilden geboren. Er studierte Chemie in Marburg und Leipzig und promovierte 1910 in Leipzig bei **Karl Schaum**. Dort habilitierte er sich 1913 als Privatdozent. Ab 1916 war er am Physikalisch-Chemischen Institut der Friedrich-Wilhelm-Universität Berlin mit militärisch-bestimmten Gegenständen beschäftigt. In diese Zeit fällt auch seine Zusammenarbeit mit **Otto Stern**, mit dem ihn eine offenbar lebenslange Freundschaft verband. (Es heißt, dass Otto Stern nach seiner Emigration 1933 nie wieder deutschen Boden betreten wollte, dass er aber in den 60er Jahren seinen schwer kranken Freund Volmer in Berlin besucht hat.) Aus dieser Zusammenarbeit resultierten die Stern-Volmer-Beziehung für die Abklingzeit der Fluoreszenz sowie Arbeiten über die Deutung der Nicht-Ganzzahligkeit der Atomgewichte mit der Isotopie. In den Jahren 1918-1920 nahm Volmer eine Industrietätigkeit bei der Auer-Gesellschaft, Berlin, wahr und wurde dann auf die a.o. Professur in Hamburg berufen. Bereits im

Jahre 1922 folgte er einem Ruf auf eine ordentliche Professur an der Technischen Hochschule Berlin, wo er vorwiegend an Kristallwachstum arbeitete. Von 1945-1955 musste er in der UdSSR in der Gruppe mit Gustav Hertz am sowjetischen Atomprojekt arbeiten. Ab 1955 war er ordentlicher Professor an der Humboldt-Universität in Berlin, war in der DDR sehr angesehen und wurde Präsident der Deutschen Akademie der Wissenschaften. Er starb am 3. Juni 1965 in Potsdam.

Volmers Hamburger Arbeiten betrafen die Abscheidung von Molekülen auf Kristallen, z.T. gemeinsam mit **Immanuel Estermann** (geb. 1900 in Berlin, 1921 bei Volmer promoviert, mit Stern in Rostock und dann 1922 in Hamburg wiss. Hilfsarbeiter, 1929 Habilitation/Privatdozent, 1933 entlassen, mit Stern am Carnegie Institute of Technology, Pittsburgh/USA, während des 2. Weltkriegs Radar-Forschung, dann „Manhattan-Projekt“, nach Kriegsende „Professor Emeritus“ der Universität Hamburg, 1950-1964 Office of Naval Research, London, gest. 1973 in Haifa/Israel). Volmer befasste sich auch mit der Theorie des latenten photographischen Bildes sowie technischen Verbesserungen der Hochvakuum-Methoden, für die er verschiedene Patente erwarb.

Noch von Volmer beantragt, wurde die Professur 1923 in eine ordentliche Professur umgewandelt. Auf sie wurde dann auf Betreiben des theoretischen Physikers **Wilhelm Lenz** der in Rostock als Extraordinarius für Theoretische Physik tätige **Otto Stern** berufen.

Otto Stern wurde am 17. Februar 1888 in Sohrau (Oberschlesien) geboren. Er studierte in Freiburg, München und Breslau Chemie mit dem Schwerpunkt Physikalische Chemie; dabei widmete er sich auch besonders Vorlesungen und Schriften der Physik. Er promovierte 1912 bei **Otto Sackur** in Breslau und wurde danach Mitarbeiter von **Albert Einstein**, der an der Deutschen Universität in Prag Ordinarius für theoretische Physik war. Er folgte Einstein 1913 an die ETH Zürich und erhielt dort mit der Habilitation die *venia legendi* als

Privatdozent für Physikalische Chemie. Als Einstein nach Berlin berufen wurde, erhielt Stern 1915 die Zulassung zur Umhabilitation als Privatdozent für Theoretische Physik an der Universität Frankfurt am Main. Nach Ausbruch des Krieges meldete er sich zum Wehrdienst, wurde Wetterbeobachter nahe der russischen Grenze und wurde schließlich Unteroffizier. Er wurde zu kriegswichtigen Forschungsarbeiten abkommandiert an das Institut für Physikalische Chemie der Friedrich-Wilhelm Universität Berlin, wo **Walther Nernst** Ordinarius war. Nach Entlassung aus dem Militärdienst kehrte er nach Frankfurt zurück, wo er zu dem von **Max Born** geleiteten Institut für Theoretische Physik gehörte. Hier entwickelte er mit **Walther Gerlach** zusammen die Atomstrahl- (allgemein: Molekülstrahl-) Methode, woraus sich der Stern-Gerlach-Versuch über das magnetische Moment des Silberatoms und, allgemeiner, die Richtungsquantelung im magnetischen Feld ergab. Im Jahre 1921 wurde Stern als Extraordinarius für Theoretische Physik an die Universität Rostock berufen, von wo er die von Gerlach in Frankfurt durchgeführten Versuche weiter begleitete. Schließlich erfolgte nach der Wegberufung Volmers aus Hamburg die Berufung als Ordinarius an das nunmehr selbständige Institut für Physikalische Chemie der Universität Hamburg. Als Stern 1929 einen Ruf auf ein Ordinariat in Frankfurt am Main erhielt, konnte er durchsetzen, dass in den Jahren 1929/1931 für das Institut an der Jungiusstraße ein eigenes Gebäude als Anbau an das Physikalische Staatsinstitut errichtet wurde; dies diente als Institutsgebäude bis 1970, als ein Neubau im Bereich der Chemie-Institute errichtet wurde. Das Gebäude an der Jungiusstraße gehörte danach zu den im ehemaligen Physikalischen Staatsinstitut untergebrachten Physikinstiuten und beherbergt(e) Physik-Praktika und Teile der Laser-Physik. An diesem Gebäude wurde anlässlich der Feier zum 100. Geburtstag Otto Sterns eine Tafel angebracht, die auf sein Wirken und seine Vertreibung 1933 hinweist. In den Jahren 1930/1931 war Stern Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät. Nach der Machtergreifung durch die Nationalsozialisten 1933 wurden jüdische Wissenschaftler aus den Universitätsinstituten konsequent entlassen. Stern blieb zunächst unbelästigt, weil er im 1. Weltkrieg als Unteroffizier gedient hatte. Dennoch wurde für Stern der Verbleib am Institut unerträglich: Seine engeren Mitarbeiter,

Immanuel Estermann (siehe bei Volmer) und **Otto Robert Frisch** (geb. 1904 in Wien, Promotion 1926 bei K. Przibram in Wien, 1927/30 Phys.-Tech. Reichsanstalt Berlin, 1930/33 Assistent bei Stern, 1933 entlassen, 1934/39 Tätigkeit bei Nils Bohr in Kopenhagen, 1939/40 Assistent bei M. Oliphant in Birmingham, 1940/43 in Liverpool, 1943/46 Mitarbeit am Manhattan-Projekt in Los Alamos/USA, 1947/72 Professor am Trinity College in Cambridge/England, gest. 1979 in Cambridge) und Robert Schnurmann wurden entlassen, obgleich Stern sich für sie einsetzte; kennzeichnend für die Atmosphäre war auch die Anordnung, das Foto Albert Einsteins aus seinem Dienstzimmer zu entfernen. Er beantragte daher seine Entlassung und emigrierte in die USA, wo er am Carnegie-Institut in Pittsburgh eine Forschungsprofessur bekam; auch Estermann emigrierte und wurde am Carnegie-Institut Associate Professor. In den Jahren nach der Emigration sind nur noch relativ wenige Publikationen Sterns verzeichnet. Der wissenschaftliche Elan der vorherigen Zeit hat ihn offenbar verlassen; die de-facto-Vertreibung führte wohl zu einer tiefen Resignation. Im Jahre 1943 wurde ihm der Nobelpreis für Physik verliehen, wobei die in Hamburg erzielten Erfolge, insbesondere die Bestimmung des magnetischen Moments des Protons, von besonderer Bedeutung waren. Stern wurde 1945 Mitglied der National Academy of Sciences. Im Jahre 1946 übersiedelte er nach Berkeley, wo er am 17. August 1969 gestorben ist.

Die zehn Hamburger Jahre Otto Sterns waren in jeder Beziehung ertragreich, sowohl was seine eigenen Forschungsergebnisse als auch was seinen Einfluss auf die wissenschaftliche Atmosphäre in der Fakultät angeht. Seine Weiterentwicklung der Molekülstrahlmethode gemeinsam mit Estermann und Frisch wurde durch die Bestimmung des magnetischen Moments des Protons gekrönt (spätere Nobelpreis-Verleihung). Ganz aus der Reihe der übrigen Arbeiten schlägt eine Publikation elektrochemischen Gegenstands, die auf einem Vortrag Sterns auf der Bunsentagung 1924: „Zur Theorie der elektrolytischen Doppelschicht“ beruht und in der er das Modell eines starren Kondensators von H. Helmholtz und die „diffuse Doppelschicht“ von D. Gouy und D.L. Chapman zu einem konsistenten Modell vereinte, angeregt durch Arbeiten von Peter Debye über die Elektrolyt-Theorie und vielleicht auch durch

seinen Freund und Vorgänger Max Volmer, der auf elektrochemischem Gebiet tätig war. Er unterhielt eine intensive Beziehung insbesondere zu den wichtigsten Physikern der ganzen Welt, zunächst zu den Hamburger Theoretikern **Wilhelm Lenz** und dessen Assistent **Wolfgang Pauli**, aber auch zu seinem Freund **Albert Einstein**, zu **Niels Bohr**, **Isidor Isaac Rabi**, **Emilio Gino Segrè** und manchen anderen, von denen viele zu Besuch oder auch zu Forschungsaufenthalten nach Hamburg kamen. Zu den wissenschaftlichen Mitarbeitern des Instituts (verwaltungstechnisch als „Wissenschaftliche Hilfsarbeiter“ bezeichnet) zählte auch **Friedrich Knauer**, dessen Habilitation gerade zu Sterns Ausscheiden anstand und von ihm unterstützt wurde (geb. 1897 in Göttingen, 1923 Promotion bei W. Kohlrausch in Hannover, 1923/24 Assistent von R.W. Pohl in Göttingen, 1924 wiss. Hilfsarbeiter bzw. Assistent bzw. Angestellter am Hamburger Institut, 1934 Habilitation, 1939 apl. Professor, gest. 1979); während Sterns Zeit, aber auch später widmete er sich der Molekülstrahl-Technik.

Nach Sterns Entlassung wurde sofort das Verfahren für seine Nachfolge eingeleitet. Zum Berufungsausschuss gehörten Paul Rabe, Direktor des Chemischen Staatsinstituts, und Wilhelm Lenz, Ordinarius für Theoretische Physik. Zwischen beiden entstand ein Streit über die Ausrichtung des zu Berufenden; Rabe hätte hierbei eine Stärkung von Organischer und Biochemie gewünscht, Lenz trat für einen Physik-orientierten Nachfolger Sterns ein. Zunächst aber wurde **Carl Wagner** (1901-1977) zum Wintersemester 1933/34 mit der Vertretung der vakanten Professur beauftragt. Wagner hatte sich 1928 in Jena für Physikalische Chemie habilitiert; 1934 wurde er Professor in Darmstadt. Der Berufungsvorschlag sah dann Wagner auf dem ersten, den Österreicher **Paul Harteck** auf dem zweiten Platz vor, womit Lenz aber nicht einverstanden war, da er Harteck an erster Stelle sah. Nach einigem Hin und Her und nachdem Harteck zunächst für das Sommersemester 1934 mit der Vertretung der Professur betraut war, wurde er schließlich berufen und zum 1. November 1934 eingestellt.

Paul Harteck wurde am 20. Juli 1902 in Wien geboren. Er studierte Chemie, zunächst in Wien, danach an der Friedrich-Wilhelm-Universität Berlin. Im Jahre 1926 promovierte er bei Max Bodenstein und war danach 1926/1927 Assistent bei

Arnold Eucken an der Technischen Hochschule Breslau. Schon 1927 kehrte er aber nach Berlin zurück und wurde Assistent in dem von Fritz Haber geleiteten Kaiser-Wilhelm-Institut für Physikalische Chemie und Elektrochemie. Hier befreundete er sich mit dem fast gleichaltrigen **Karl-Friedrich Bonhoeffer**, der sich gerade habilitierte und Extraordinarius für Physikalische Chemie wurde, und mit dem ungarischen Kollegen **Ladislav Farkas**. Gemeinsam mit Bonhoeffer entdeckte er 1928 die von Theoretikern schon vorausgesagte Existenz der zwei Modifikationen von molekularem Wasserstoff: Ortho- und Parawasserstoff, mit parallelen bzw. antiparallelen Kernspins. Im Jahre 1931 habilitierte sich Harteck mit einer Arbeit über atomaren Sauerstoff. Nach einem Besuch Ernest Rutherfords in Berlin hatte Harteck das Bedürfnis, sich auf kernphysikalischem Gebiet weiter zu bilden, und Haber erwirkte von Rutherford die Aufnahme Hartecks 1933/34 am Cavendish-Laboratorium der Universität in Cambridge. Gemeinsam mit Ladislav und Adalbert Farkas entdeckte Harteck die Ortho-/Para-Modifikation auch von schwerem Wasserstoff und gemeinsam mit Mark Oliphant und Rutherford das Tritium. Der Rückkehr nach Berlin im April 1934 stand im Wege, dass dort keine Stelle mehr für Harteck frei war. Aber nun erreichte ihn der Ruf zur zunächst vertretungsweisen und schließlich endgültigen Übernahme der ordentlichen Professur in Hamburg. Über die Arbeiten in Hamburg, insbesondere die Teilnahme am deutschen Uranprojekt („Uranverein“) wird weiter unten berichtet. Nach Kriegsende wurde Harteck in den Jahren 1945/46 zusammen mit einer Reihe anderer auf dem deutschen Kernenergie-Projekt tätigen bedeutenden Forschern im britischen Farm-Hall interniert (Erich Bagge, Kurt Diebner, Walther Gerlach, Otto Hahn, Werner Heisenberg, Horst Korschning, Max von Laue, Carl Friedrich von Weizsäcker, Karl Wirtz). Während Hartecks Abwesenheit wurde 1946 der Assistent **Klaus Alber Suhr** kommissarischer Institutsleiter (geb. 1912 in Warstade, Chemiestudium in Hamburg und München, ab 1939 Mitarbeiter bei Harteck in Hamburg, 1943 Promotion bei Harteck, bis 1951 Assistent, 1944/45 Mitarbeit am Uran-Projekt, später Forschungsleiter bei einer Erdölfirma (Mobil) in Hamburg, gest. 2005). Nach sechs Monaten kamen die Internierten zurück, und Harteck nahm Ende Januar 1946 die Institutsgeschäfte wieder auf. Er war 1946/47 Dekan der Mathematisch-

Naturwissenschaftlichen Fakultät, 1947/49 Vizepräsident der Joachim-Jungius-Gesellschaft der Wissenschaften zu Hamburg und 1948/50 Rektor der Universität. Ab 1951 trug er sich mit der Absicht, in die USA auszuwandern, wegen der zunächst ungünstigen Bedingungen zur Forschung in Deutschland, insbesondere auf kernphysikalischem Gebiet. Er hielt sich jeweils längere Zeit am Rensselaer Polytechnic Institute in Troy/New York auf, bis er endgültig zum 30. September 1952 die Hamburger Professur aufgab und in Troy „Distinguished Research Professor“ wurde. In den USA arbeitete er zunächst an kerntechnischen Entwicklungen, dann interessierten ihn zunächst die Erd-, später die Venus- und die Mars-Atmosphäre und schließlich der „Rote Fleck“ auf der Jupiter-Oberfläche. Mit 70 Jahren zog er sich schließlich in ein Haus in Santa Barbara/Kalifornien zurück. In den USA ebenso wie in Europa wurde er durch zahlreiche Preise und Ernennungen geehrt. Am 21. Januar 1985 ist er in Santa Barbara gestorben.

Harteck widmete sich in Hamburg vor dem Krieg u.a. der Reaktivität von Wasserstoff- und Sauerstoffatomen, photochemischen Aspekten, den Eigenschaften von künstlich erzeugtem radio-aktiven Arsen (u.a. dies mit Friedrich Knauer, s. unter Stern) und erstmals auch der Isotopentrennung in einem Trennrohr bzw. in einer Gleichstrom-Glimmentladung, gemeinsam mit dem wissenschaftlichen Assistenten **Wilhelm Groth** (geb. 1904, Promotion 1927 bei Walther Gerlach in Tübingen, ab 1932 wiss. Assistent in Hamburg, dort 1938 Habilitation/Privatdozent für Physikalische Chemie, 1945 apl. Professor, 1948 a.o. Professor, 1950-1972 Ordinarius für Physikalische Chemie an der Universität Bonn, 1956 Gründungsmitglied und erster Vorsitzender des wiss. Beirats der Kernforschungsanlage Jülich, gest. 1977). Groth war zunächst der Photochemie verhaftet (z.T. mit Suess) und widmete sich später sehr der Gaszentrifuge.

Harteck führte ein kleines Privatseminar über neueste Entwicklungen der Kernphysik durch, u.a. mit Groth, **J. Hans D. Jensen** (1907-1973, Physik-Assistent bzw. Dozent in Hamburg, ab 1949 ord. Professor für Physik in Heidelberg, 1963 Nobelpreis für Physik) und **Hans E. Suess** (geb. 1909 in Wien, Promotion bei Philipp Gross in Wien, 1938-50 Mitarbeiter am Institut für Physikalische Chemie in Hamburg, 1940 Habilitation in Physikalischer Chemie, 1939-45 Mitarbeit

am Uranprojekt, ab 1950 in den USA, 1958-77 Professor für Geochemie, University of California, San Diego, gest. 1993). Im Anschluss an die künstliche Kernspaltung durch Hahn, Strassmann und Meitner hatten Frédéric Joliot und Mitarbeiter im April 1939 pro Urankernspaltung eine durchschnittliche Zahl von 3,5 Neutronen festgestellt. Hieraus ergab sich die Möglichkeit einer Kettenreaktion mit gewaltiger Energie-Freisetzung. In einem Brief an das Heereswaffenamt wiesen Harteck und Groth auf die möglichen militärischen und politischen Konsequenzen hin. Zugleich hatten sich in dieser Sache die Göttinger Physiker Wilhelm Hanle und Georg Joos an das Reichserziehungsministerium gewandt. Sogleich gründete der Leiter der Fachsparte Physik des Reichsforschungsrates, **Abraham Esau**, den sogenannten „Uranverein“, formal „Arbeitsgemeinschaft für Kernphysik“ bezeichnet, einen losen Zusammenschluss deutscher Kernphysiker mit dem Ziel einer eventuellen technischen Nutzung der Kernenergie. Die Leitung des Projekts wurde dann („Zweiter Uranverein“) vom Heereswaffenamt übernommen und **Kurt Diebner** (1905-1964, Promotion in Physik 1931, ab 1934 in der Forschungsabteilung des Heereswaffenamts tätig) übertragen. Auch in den USA (Brief Albert Einsteins an den Präsidenten) und in der Sowjetunion erkannte man die Bedeutung der Angelegenheit, und entsprechende Entwicklungen wurden initiiert.

Harteck und seine Mitarbeiter (besonders Groth, Suess, Suhr, Knauer und als Kooperator auch Jensen) machten sich sogleich an die Konstruktion einer Uranmaschine. Für eine kontrollierte Kettenreaktion in einer „Uranmaschine“ (heute „Atomreaktor“ oder „Kernreaktor“) war eine gewisse Mindestmenge an Uran(oxid) erforderlich, wobei günstigere Aussichten bestanden, wenn das vorliegende Material an dem eigentlich spaltbaren Isotop ^{235}U angereichert war (natürliches Material enthält nur 0,711 % davon). Zur Thermalisierung der beim Zerfall entstehenden hochenergetischen Neutronen war ein Moderator erforderlich, der Atome niedrigen Atomgewichts enthielt. Hierfür kamen Wasser, schweres Wasser (D_2O), reiner Kohlenstoff oder auch festes Kohlendioxid („Trockeneis“) in Frage. Harteck erhielt von verschiedenen Quellen 185 kg Uranoxid und 15 t Trockeneis. Im Gegensatz zu anderen Vorstellungen, nach denen Uranverbindung und Moderator ein Mischsystem

(Lösung) darstellen sollten, fand Harteck eine geometrisch optimierte, getrennte Anhäufung beider Massen zweckmäßiger. Uranoxid und Trockeneis wurden in eine geeignete Holzkiste (2mX2mX2m) an der Außenwand des Institutsgebäudes (wegen der Giftigkeit des CO₂-Gases) gefüllt und die Neutronenzahl gemessen. Die erwartete Vermehrung um 25 %, die eine Kettenreaktion ermöglicht hätte, fand nicht statt; d.h. der Reaktor wurde nicht kritisch. Die sich hieraus ergebende Korrektur hinsichtlich der Bremslänge der Neutronen sowie die Realisierung einer Schichten-Anordnung von Brennstoff und Moderator waren die wichtigsten Erkenntnisse dieses Versuchs.

Neben dem Reaktorbau wurden auch andere Untersuchungen im Rahmen des Gesamtprojekts durchgeführt, insbesondere Uran-Isotopen-Trenn- bzw. Anreicherungsversuche ²³⁵U/²³⁸U. Für die Isotopentrennung wurden zunächst Versuche mit dem Clusius-Dickelschen Trennrohr vorgenommen. Mehr Effizienz erwartete man sich bei Verwendung mechanisch beweglicher Flächen. Durch einen Besuch von **Hans Martin** (1908-1979, 1933 in Heidelberg promoviert, 1933-36 Assistent in Karlsruhe, 1941 Habilitation in Kiel, 1947 apl. Professor, 1949 a.o. Professor und Direktor des Physikalisch-Chemischen Instituts der Universität Kiel, 1957 ord. Professor, 1974 emeritiert) im Sommer 1941 am Hamburger Institut wurden Harteck und Groth auf dessen Ultrazentrifugen aufmerksam. Eine entsprechende Zentrifuge ließ Harteck von der Firma Anschütz (Kreiselkompass) bauen, wichtigster Beteiligter von dort war der Ingenieur Dr. Konrad Beyerle. Die Arbeiten (auch mit Beteiligung von Suhr) wurden nach der schweren Bombardierung Hamburgs nach Freiburg und von dort schließlich in einen Industriebetrieb in Celle ausgelagert. Nach dem Kriege wurden sie von Groth in Bonn und in Hamburg von dem Assistenten **Hermann Gerhard Hertz** fortgeführt (geb. 1922 in Hamburg, Promotion 1952 bei Paul Harteck, 1952-1959 Wiss. Assistent am Hamburger Institut für Physikalische Chemie, 1960-64 Assistent am Institut für Physikalische Chemie der Universität Münster bei Ewald Wicke, dort 1960 Habilitation, 1964 a.o. Professor, 1965 Berufung auf die ordentliche Professur für Physikalische Chemie der Technischen Hochschule (später: Techn. Universität) Karlsruhe, 1990 emeritiert, gest. 1999 in Karlsruhe).

Wegen der geringen Aussicht, in absehbarer Zeit die Uran-Isotopen-Anreicherung in technischem Umfang realisieren zu können, wurde im Hinblick auf die „Uranmaschine“ die Anwendung von Natur-Uran(oxid) und dann aber schwerem Wasser als Moderator ins Auge gefasst. Die Herstellung von schwerem Wasser durch fortgesetzte Elektrolyse (wobei kathodisch die Entwicklung von leichtem Wasserstoff bevorzugt ist, sodass sich Deuterium in der wässrigen Phase anreichert) erfordert hohe Energiemengen. Sie wurde z.B. in Norwegen von der Firma Norsk Hydro durchgeführt, und nach der im Laufe des Krieges erfolgten Besetzung Norwegens war hier prinzipiell ein Zugriff möglich. Ein von Harteck und Suess gefundenes Verfahren erst brachte die hinreichende Effizienz. Dabei wird das nach fortgesetzter Elektrolyse auch angereicherte Kathodengas nicht verbrannt, sondern durch Wasser geleitet; der im Wasser verbleibende molekulare Wasserstoff enthält dann im Gleichgewicht dreimal so viel Deuterium wie derjenige in der Gasphase. Aber auch die Norsk Hydro wurde 1943 schwer durch Bombardierung geschädigt, sodass auch diese Richtung aufgegeben werden musste.

Andere Arbeiten der Harteck-Mitarbeiter betrafen verschiedene Aspekte der Kernchemie (Altersbestimmung mit ⁴⁰K, durch Kernreaktionen ausgelöste chemische Prozesse bei Brom, Alter und Entstehung der Elemente, Planeten- und Meteoriten-Entstehung, alles Suess), „magische Nucleonenzahl“ (Suess mit Jensen) und eine Diffusions-Nebekammer (Hertz). Über die Ad-/Desorption der Wasserstoff-Isotope arbeitete **G. Arthur Melkonian** (geb. 1916 in Rostow/Don, Chemiestudium in Hamburg, 1941 Promotion bei Heinz Ohle in Berlin, 1942-44 Mitarbeiter am Institut für Chemische Technologie der Tech. Hochschule Braunschweig, 1944-1958 Mitarbeiter am Institut für Physikalische Chemie der Universität Hamburg, 1958-81 leitende Funktionen bei der GKSS/Ges. f. Kernenergieverwertg. in Schiffbau u. Schifffahrt, Lehrbeauftragter 1968-81 Univ. Hamburg und 1974-81 Univ. Münster, 1980 Akadem. Bezeichng. Professor durch den Senat der Freien u. Hansestadt Hamburg, gest. 1981 in Hamburg).

Als Harteck ab 1951 zunächst zeitweise und 1952 schließlich endgültig in die USA auswanderte, wurde die Vertretung der Professur zunächst **Günther Briegleb** (geb.

1905 in Wilhelmshaven, Promotion 1929 bei Gerhard Preuner in Kiel, 1929-1936 Assistent bei Georg Bredig bzw. Ludwig Ebert in Karlsruhe, dort 1936 Habilitation, 1937-45 a.o. Professor für Physikalische Chemie, Universität Würzburg, 1945-51 Industrietätigkeit, 1951/53 Vertretungsprofessur in Hamburg, 1953-73 ord. Professor für Physikalische Chemie Universität Würzburg, gest. 1991) und danach **Ludwig Holleck** übertragen (geb. 1904 in Wien, 1930 Promotion bei Wolf Johannes Müller in Wien, 1934/35 Mitarbeiter an der Physikalisch-Technischen Reichsanstalt in Berlin (Isotopentrennung), 1935-37 Assistent bei Walter Noddack, Institut für Physikalische Chemie Universität Freiburg, 1937 Habilitation in Freiburg, 1937-41 Privatdozent in Freiburg, 1941-43 apl. Professor und 1941-45 a.o. Professor und Leiter der Elektrochemie-Abteilung des Instituts für Physikalische Chemie der „Reichsuniversität Straßburg“, 1945-49 freiberuflicher Autor, 1949-55 apl. Professor für Physikalische Chemie Universität Freiburg, 1952/54 Lehrstuhlvertretung in Hamburg, 1955-61 apl. Professor am Institut für Physikalische Chemie Universität Hamburg, 1961-72 ord. Professor für Chemie, Institut für Chemie der Philosophisch-Theologischen Hochschule Bamberg, 1965/67 Rektor der Hochschule, gestorben 1976 in Konstanz). Diese Vakanz zwischen Harteck und seinem Nachfolger Wicke war eine sehr ruhige Periode für das Institut. Holleck brachte aus Freiburg zwei Doktoranden mit (Hermann Schmidt und Lothar Plümer), dazu gesellten sich Knauers zwei Doktoranden (Walter Kühl und Hans Gienapp), aus der Harteck-Zeit verblieb noch Gerhard Hertz, 1954 kam noch zunächst als Diplomand, danach als Doktorand Bertel Kastening (siehe später) zur Holleck-Gruppe. Zusammen mit der Sekretärin Frau Elisabeth Holstein und dem Feinmechaniker Karl Reiser (ca. 1931 von Stern ans Institut geholt und bei allen Direktoren bis Knappwost in den 60er Jahren als ideenreicher, zuverlässiger Mitarbeiter geschätzt) ergab sich eine mittägliche Teerunde als Institution. Als Hartecks Nachfolger wurde zum Wintersemester 1954/55 Ewald Wicke berufen.

Ewald Wicke wurde am 17. August 1914 in Wuppertal-Elberfeld geboren. Er studierte 1933-38 in Köln und Göttingen Chemie, Physik und Physikalische Chemie und promovierte 1938 bei Arnold Eucken in Göttingen. 1938-44 Assistent bei Eucken. 1944 habilitierte er sich und war Privat-

dozent und 1949-54 apl. Professor für Physikalische Chemie in Göttingen. Nach Euckens Tod 1950 war Wicke bis 1953 mit der kommissarischen Leitung des Instituts betraut. Im Jahre 1954 wurde er auf den Lehrstuhl für Physikalische Chemie in Hamburg berufen. Da das Institutsgebäude an der Jungiusstraße relativ klein war und er eine größere Zahl von Mitarbeitern an sich zog, erwirkte er einen Anbau, der das Physikalisch-Chemische Praktikum aufnahm. Trotzdem war die räumliche Enge spürbar, obgleich Räume im Dachboden und insbesondere im Keller als Labor mitgenutzt wurden. Wicke hatte bewirkt, dass Ludwig Holleck eine dauerhafte Stelle als Diäten-dozent in Hamburg bekam; er wollte ihm nun zwei, drei Laborräume verschaffen und beantragte daher einen kleinen Aufbau am Institut (Größenordnung damals 30.000 DM). Nachdem ihm dies abgelehnt wurde, nahm er im Jahre 1959 den an ihn ergangenen Ruf auf den entsprechenden Lehrstuhl an der Universität Münster an, den er bis zur Emeritierung 1982 innehatte. Er war 1975/76 Erster Vorsitzender der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie. Am 7. März 2000 ist Wicke gestorben.

Wickes Interessen reichten von den absoluten Grundlagen der Physikalischen Chemie bis zur technischen Anwendung. Dies spiegelt sich in den Teilgebieten seiner Assistenten und Doktoranden, von denen eine ganze Reihe ihrerseits später wieder Professoren waren. Dem aus der Hardeck-Zeit verbliebenen H.G. Hertz (siehe oben) wurde von Wicke empfohlen, sich die noch sehr junge Methode der Kernmagnetischen Resonanz (NMR) anzueignen, um Strukturen wässriger Lösungen zu studieren. Hertz begab sich für einige Monate nach Urbana/Illinois (USA) zu H. G. Gutowsky, einem der Pioniere der Methode, und baute anschließend mit der Feinmechanischen Werkstatt (Hans Reiser, s.o.) in Hamburg ein NMR-Spektrometer; das große Permanentmagnet-Joch wurde bei der Hamburger Hochbahn magnetisiert, die allein die erforderlichen hohen Gleichströme bereitstellen konnte. Wicke brachte zwei Assistenten mit aus Göttingen: **Fritz Fetting** (geb. 1926 in Itzehoe, Promotion 1955 in Göttingen bei E. Wicke, Dissertation über Gas-Wirbelschichten, 1955/56 Assistent am Hamburger Institut, 1957-66 Oberingenieur bei G. Schiemann am Institut für Technische Chemie, Tech. Hochschule Hannover, 1961 Habilitation in Hannover,

1966-91 Professor an der Techn. Universität Darmstadt) und **Kurt Hedden** (geb. 1927, Promotion 1954 bei E. Wicke in Göttingen, Dissertation über Kohle-Verbrennung und -Vergasung, 1955-59 Assistent am Hamburger Institut, 1959 mit E. Wicke an die Univ. Münster, dort 1961 Habilitation, 1964-72 Fa. Printsch Bamag AG, dort auch Geschäftsführer. 1966-72 Professor Tech. Hochschule Darmstadt, 1972-92 ordentl. Professor am Engler-Bunte-Institut der Universität Karlsruhe, 1981-83 Dekan der Fakultät für Chemieingenieurwesen und Verfahrenstechnik, 1992 emeritiert, gest. 2010). Von den Hamburger Doktoranden seien genannt **Theodor Ackermann** (geb. 1925 in Rostock, 1956 Promotion, Dissertation über Hydratation der OH⁻-Ionen aus spezifischen Wärmemessungen, 1954-59 Assistent in Hamburg, 1959-70 Assistent bei Wicke bzw. Dozent an der Univ. Münster, dort 1965 Habilitation, 1970-93 ord. Professor am Institut für Physikalische Chemie der Universität Freiburg, 1993 emeritiert, gest. 2004), **Wolfhart Seidel** (geb. 1929, Chemiestudium in Kiel, Würzburg, Hamburg, Promotion 1959, Dissertation über Siliciumabscheidung aus SiCl₃H/H₂-Gemischen bei hohen Temperaturen, 1959-66 Wiss. Assistent bei Hans Martin in Kiel, 1966 Habilitation/venia legendi für Physikalische Chemie, 1968 Professor in Kiel, 1970 Berufung auf den Lehrstuhl für Physikalische Chemie, Universität Gießen, 1997 emer.), **Jürgen Franck** (geb. 1930, Promotion 1959, Dissertation über spezifische Wärme von Titanhydrid, 1963-1995 Professor für Physik an der University of Alberta, Edmonton/Canada, gest. 2004), **Peter Hugo** (geb. 1930, Physik-Studium Univ. Hamburg, 1960 Promotion, Dissertation über Isotopenaustausch im Diffusionsgegenstrom, 1960-69 Wiss. Assistent bei Ewald Wicke in Münster, dort 1968 Habilitation, vena legendi für Physikalische Chemie, 1969-73 Ltd. Chemiker in Oelfabrik DEOGRANGEL, Hamburg, 1971 Habilitation im Fachgebiet Technische Chemie an der Univ. Hamburg, 1973 Berufung auf den Lehrstuhl für Technische Chemie an der Technischen Universität Berlin, 1996 emeritiert), **Dieter Vortmeyer** (geb. 1932, Promotion 1958, Dissertation über Zündzonen heterogener Reaktionen in gasdurchströmten Körperschichten, 1959-62 Postdoc am Imperial College, London, 1962-66 im Fach Maschinenwesen, Technische Thermodynamik der TU Stuttgart, dort 1966 Habilitation; 1968 Berufung als ord. Professor für Chemische Verfahrenstechnik, Thermodynamik,

Technische Universität München, emer. 1998), **Hans-Harald Kopper** (geb. 1930, Promotion 1958, Dissertation über Wirkung halogenhaltiger Gaszusätze auf die CO₂-Vergasung von Kohle), **Felix Schreiner** (Promotion 1959, Dissertation über Einfluss aliphatischer Substituenten auf partielle Molwärmern in Wasser gelöster Stoffe, später Wissenschaftler am Argonne National Institute, Argonne/Illinois/USA), **Klaus Otto** (geb. 1929, Promotion 1959, Dissertation über Hydrierung des Urans und Struktur des Uranhydrids, später Wissenschaftler bei FORD, Detroit/USA), **Albrecht Küssner** (Promotion 1959, Dissertation über Metallartige Hydride als Wasserstoffüberträger, später Wissenschaftler bei BASF), **Gero Lüth** (Promotion 1959, Dissertation über Reduktion von Eisenerzen mit CO über abgeschiedenen Spaltungskohlenstoff als Zwischenstufe), **Jürgen Freundlich** (Mechanismus der Boudouardreaktion/ Adsorptionsverhältnisse und ¹⁴C-Isotopenaustausch).

In der Ära Ewald Wicke setzte sich die mittägliche Teerunde fort; einige der älteren Teilnehmer pflegten am Rosenmontag nach Köln zu pilgern, um den „Zug“ zu sehen. Dies gab wohl den Anstoß dafür, dass nunmehr jährlich in allen Räumen des Instituts ein Karnevals-/Faschingsfest gefeiert wurde, wobei alle Institutsmitglieder verkleidet waren und auch – um ein ausgewogenes Geschlechterverhältnis herzustellen – vornehmlich weibliche Gäste mitgebracht wurden. Auch Ewald Wicke trat verkleidet auf; zwar war er etwas steif, aber seine temperamentvolle Frau bewirkte eine gelöste Atmosphäre.

Nach dem Weggang Wickes waren die noch zu beendenden Doktorarbeiten bald abgeschlossen. Es folgte wieder eine etwas ruhigere Phase. Schon in der Wicke-Ära oder danach promovierten auch mehrere Schüler von Ludwig Holleck: Herrmann Schmidt (1954, Reduktions-Mechanismus der isomeren Dinitrobenzole), Lothar Plümer (1956, Kathodische Reduktion aromatischer Nitroverbindungen), Bertel Kastening (1958, Kinetik der Elektrodenprozesse bei Carbonyl- und Nitrogruppen-Reduktion an Quecksilberelektroden und Einfluss von Inhibitoren), Brahmajirao Sukuru (1960, Konstitutions-Einfluss auf die Ester-Verseifung mit der polarographischen Methode), Ottokar Lehmann (1960, Polarographisches Verhalten des Ninhydrins und ähnlicher Dicarbonylverbindungen), Hans Gartmann (1963, Die Rolle der Adsorption bei der

Kinetik organischer Elektrodenprozesse durch Messungen der Faraday-Impedanz). Neben den Professoren Holleck und Knauer waren noch die Assistenten Hertz (vorübergehend) und Kastening am Institut. Da man Ludwig Holleck die kommissarische Institutsleitung nicht übertragen wollte, sondern hiermit Hugo Neuert vom Physikalischen Staatsinstitut beauftragte, übernahm Holleck nun auch nicht die Grund-Vorlesungen, die zeitweise von Hans Martin aus Kiel bzw. Ernst Ulrich Franck aus Göttingen gehalten wurden.

Als Nachfolger Wickes erfolgte zu Anfang 1960 die Berufung von **Adolf Knappwost** (geb. 29. April 1913 in Hannover, Promotion 1940 bei Hans Nowotny in Karlsruhe, 1942-56 Mitarbeit am Kaiser-Wilhelm-Institut für Metallforschung in Stuttgart, 1943 Habilitation in Karlsruhe, 1945-48 Mitarbeit am Institut des Recherches Scientifiques in Tettang, 1948-60 Leitung der Abteilung Physikalische Chemie und Werkstoffkunde des Zahnärztlichen Instituts der Universität Tübingen, 1952 apl. Professor in Tübingen, zeitweise Mitglied des Wissenschaftlichen Rats der Kernforschungsanlage Jülich, 1960-81 ord. Professor für Physikalische Chemie an der Universität Hamburg [1960-69 Direktor des Instituts, 1969-77 geschäftsführender Direktor, 1977 zurückgetreten], 1981 emeritiert, 1981-2007 Wissenschaftlicher Berater der Firma Humanchemie GmbH in Alfeld, 1984 Dr. med. dent. h.c. der Universität Tübingen, gest. 1. Juni 2007 in Alfeld).

Knappwost brachte aus Tübingen mit den bereits promovierten **Walter Gunßer** (geb. 1927 in Oberreutingen, Studium der Physik in Tübingen und Stuttgart, Promotion 1958 bei Adolf Knappwost in Tübingen, 1958-60 Mitarbeiter der Arbeitsgruppe Institut für Physikalische Chemie der Transurane der KFA Jülich, 1961-68 Wiss. Mitarbeiter am Hamburger Institut, 1968 Habilitation/venia legendi für Physikalische Chemie, 1968-72 Wiss. Rat/Oberrat u. Professor, 1972 Univ.-Professor, 1982-83 Sprecher des Fachbereichs Chemie, Univ. Hamburg, gest. 2012) und den Doktoranden **Fritz Thieme** (geb. 1925 in Eisa-Gröba, 1955-61 Wiss. Mitarbeiter der Planungsgruppe Tübingen der KFA Jülich, 1961 Wiss. Mitarbeiter bei Prof. Knappwost in Hamburg, 1963 Promotion bei Adolf Knappwost in Tübingen, 1963-70 Wiss. Rat/Oberrat und Professor am Hamburger Institut, 1969 Habilitation, 1970 Univ.-Professor, 1973-1981 Sprecher

des Fachbereichs Chemie d. Univ. Hamburg, 1994-97 Mitglied des Kuratoriums und 1997 Ehrengast der Universität Chemnitz, gest. 2013). Als weiterer Oberrat und dann Professor stieß 1970 dazu **Friedrich Steinbach** (geb. 1937 in Neuwied, Promotion 1963 bei Georg-Maria Schwab, Institut für Physikalische Chemie der Universität München, 1967 Tätigkeit am Laboratory for Research on the Structure of Matter, University of Pennsylvania, Pittsburgh/USA, 1968 Habilitation/venia legendi für Physikalische Chemie an der Universität München, 1970-72 Wiss. Oberrat am Institut für Physikalische Chemie Universität Hamburg, 1972-2002 Univ.-Professor am Hamburger Institut).

Knappwosts Forschung betraf vor allem folgende drei Gebiete: Magnetische Eigenschaften, Tribologie und physikalisch-chemische Aspekte der Zahnmedizin. Auf dem Gebiet *Magnetismus* sind die magnetischen Eigenschaften vieler Feststoffe von Interesse, besonders das kollektiv-paramagnetische Verhalten. Bei der *Tribologie* stehen Molybdänsulfid, Festschmierstoffe (z.B. Erdalkalihydroxide) und Seifenschmierfette im Vordergrund; reibungsbedingte Reaktionen und Abtragung z.B. bei Fe-Gleitlagern und Graphit-/Kohlelagern. Auf *zahnmedizinischem* Gebiet sind viele grundlegende Untersuchungen und eine Reihe von Patenten zu nennen. Einige Stichworte seien genannt: Legierungen, Zemente, Füllungen, Plaque, Karies, Remineralisation; Wirkung von Fluorid, Antibiotika, Diffusion von Cationen in Polymethacrylat. Letzteres steht in Zusammenhang mit dem von Knappwost entwickelten Verfahren der Depotphorese zur Wurzelkanalbehandlung, die zwar umstritten ist, aber von manchen Zahnärzten sehr positiv beurteilt wird.

Durch die wachsende Zahl der Mitarbeiter (Diplomanden, Doktoranden, Postdocs, Assistenten, Gäste) wurde im Laufe der 60er Jahre das Raumproblem zunehmend prekär und konnte auch durch die Übernahme von Räumen im kleinen Extragebäude, das vormals die Chemie-Bibliothek beherbergte, nicht befriedigend gelöst werden. Es musste daher ein neues Institutsgebäude geplant und gebaut werden, und zwar wurde das Gebäude zwischen Bundesstraße und Laufgraben errichtet. Die Planung und Bau-Überwachung seitens des Instituts übernahm Fritz Thieme (s.oben). Das neue Gebäude wurde 1970 bezogen und bot reichlich Platz.

Um diese Zeit setzte das neue Hochschulgesetz u.a. solche Reformen in Kraft, die der stark zunehmenden Zahl von Studenten gerecht werden sollten. Dazu gehörte eine deutliche Vermehrung von Stellen im „Mittelbau“ (Assistenten, Wiss. Räte/Oberräte u. Professoren). Besonders für die Überwachung der Studenten-Praktika wurden mehr „Halbstellen“ für Doktoranden geschaffen. Sofern Promovierte länger als zwei Jahre nach der Promotion beschäftigt waren, wurden sie als „Dozenten“ geführt. Die Personalpolitik des Instituts war in dieser Zeit nicht sehr glücklich: Es wurden zu viele Promovierte in Dauerstellen übernommen, wodurch die Zahl der „Halbstellen“ stark beschnitten wurde, während zugleich ein Überhang von Personen mit Lehrverpflichtung (mit der Folge eines Übermaßes an Vorlesungsangebot) entstand. Die verminderte Halbstellenzahl konnte nur durch vermehrte Einwerbung von Drittmitteln mit Doktorandenvergütung und durch Übernahme von Praktika-Überwachung durch Lehrpersonen ausgeglichen werden.

Zu den Dauerstellen-Inhabern gehörten neben den bereits erwähnten (Gunßer, Thieme, Steinbach) auch **Hans Lechert** (Habilitation 1973), **Klaus Nagorny** (Habilitation 1977, geschäftsführ. Direktor des Instituts 1983-91 und 1993-99), **Horst Förster** (1991-93 geschäftsführ. Direktor des Instituts, 1996 Dr.h.c. Univ. Szeged/Ungarn), **Carsten Benndorf** (Habilitation 1982), **Wolfgang Metz** (Habilitation 1984), **Peter Grunwald**, **Wolf Basler**, **Wolfgang Kirstein**, **Georg Job** und **Klaus Zietlow**. Daneben waren noch Wissenschaftliche Assistenten tätig: **Klaus Dräger** (Habilitation 1979), **Friedrich Schmidt** (Habilitation 1981), **Horst Wochnowski** (Habilitation 1985), deren zeitlich begrenzte Stellen z.T. zeitlich erweitert oder sogar zu Dauerstellen wurden. Die meisten der Vorgenannten (außer Kirstein, Job, Zietlow und Wochnowski) haben eigene Arbeitsgruppen aufgebaut und wurden im Laufe der Zeit über die Position als Wissenschaftl. Rat und Professor oder durch die sogenannte „Überleitung“ (nach Habilitation oder durch sonstige Qualifikation) oder durch Verleihung der akademischen Bezeichnung mit dem Professorentitel versehen.

Die genannten Wissenschaftler (zumeist Knappwost-Schüler) wandten sich folgenden Gebieten zu: **Gunßer** (magnetische Eigenschaften verschiedener Festkörper-

Systeme, besonders mittels Elektronenspinresonanz; Festkörper-Elektrochemie); **Thieme** (Ad-/Desorptionsvorgänge von Gasen wie H_2 , O_2 , CO an Metalloberflächen; Tunnel-Effekte; Austrittsarbeiten); **Steinbach** (Homogene und heterogene Katalysatoren insbesondere Metall-Phthalocyanine, z.B. für Fischer-Tropsch-Synthesen und Schadstoffminderung bei Motorabgasen; u.a. Anwendung gekreuzter Molekularstrahlen); **Lechert** (Eigenschaften und Synthese von Zeolithen und ähnlichen Systemen sowie Biopolymeren; Diels-Alder-Katalyse, Teilchen-Beweglichkeit im Porensystem; u.a. mittels Kernmagnetischer Resonanz); **Metz** (Struktur, Dynamik und katalytische Verwendung von Graphit-Einlagerungs-Verbindungen, insbesondere mit Röntgen-Methoden); **Nagorny** (Strukturelle u. magnetische Eigenschaften v. Eisen-Legierungen u. -verbindungen, vorwiegend mittels Mößbauer-Spektroskopie und Röntgen-CT; Transportverhalten von radioaktivem Cs aus UO_2 -Kernbrennstoff, z.B. in Böden Schleswig-Holsteins); Förster (Adsorption und Hydrolyse, Verbrennung, Oxidation, Umlagerung von CO, Alkanen, o/p- H_2 und D_2 , N_2 , CO_2 , N_2O Butadien, Benzol an Trägerkatalysatoren, Zeolithen u. ähnlichen Stoffen; insbesondere mittels IR- und Röntgenabsorption); **Grunwald** (Immobilisierung von Enzymen an Festkörpern, Einfluss von Metallionen und organ. Lösungsmitteln; Anwendung; Einführung der Biokatalyse ins Grundstudium); **Basler** (Wasser und verschiedene Ionen in den Porensystemen von Zeolithen und anderen Stoffen z.B. Stärke; Austauschkinetik, Diffusion; mittels NMR); **Benndorf** (Adsorption verschiedener Moleküle und Atome aus der Gas- bzw. Plasmaphase auf Metall-Einkristall-Oberflächen, Diamantschicht-Abscheidung durch CVD; Anwendung von Elektronen-Spektroskopie); **Job** (Neudarstellung der Wärmelehre; die Entropie als Wärme; Chemisches Potential: Antrieb; Didaktik der Thermodynamik); **Zietlow** (Neutronenaktivierungs-Analyse); **Wochnowski** (Tribologie: Seifenschmierfett, Schmieröle, Modellsysteme; Viskosität v. Aromaten im hyperkritischen Gebiet; Polyurethan-Trennmittel); **Dräger** (Nahordnung in magnetisch verdünnten bzw. dichten Strukturen; Korngrößeeinfluss auf magnetische Wechselwirkung; Antiferromagnetisches CrN ; Einfluss von Spin-Kopplung und magnet. Dotierung auf ESR-Linienbreite; Modell magnet. Nahbereichskopplung; vorwiegend mittels ESR); **Schmidt** (Ferromagnetische Metallkristalle in Zeolithen;

Antiferromagnetische Ordnung von superparamagnetischen Momenten; Hydrogenierung von Benzol auf Zeolithen).

Während Adolf Knappwost anfangs noch Freizeiten mit seinen Mitarbeitern in Jugoslawien und am Lago Maggiore durchführte, ging der Zusammenhalt des Gesamtinstituts mehr und mehr verloren, auch wenn jährlich ein gemeinsamer Ausflug und eine Weihnachtsfeier stattfanden. Dies war z.T. wohl der Größe des Instituts und der Aufspaltung in viele eigenständige Gruppen zuzuschreiben, aber z.T. auch einer gewissen Polarisierung zwischen „Reformierten“ und „der akademischen Tradition“ Zugewandten, wie sie sich in den akademischen Gremien, auch dem Institutsrat, ergab.

Wie in den anderen Instituten des Fachbereichs wurde 1973 auch in der Physikalischen Chemie ein Parallel-Lehrstuhl geschaffen, der die Bezeichnung „ord. Professur für Elektrochemie“ erhielt. Dies war auch im Sinne der anderen Chemiefächer, z.B. wegen der Bedeutung der Elektrochemie bei der organischen Elektrosynthese und wegen der Bedeutung in der Analytik (auch im Bereich der Pharmazie). Der Lehrstuhl wurde vor der Durchführung des Berufungsverfahrens vertretungsweise 1973/74 und nach Durchführung des regulären Berufungsverfahrens endgültig mit Bertel Kastening besetzt.

Bertel Kastening wurde am 5. März 1929 in Hamburg geboren. Nach dem Studium der Chemie in Kiel, Würzburg, Münster und Hamburg 1958 Promotion bei Ludwig Holleck am Institut für Physikalische Chemie in Hamburg. Dort 1958-62 Wissenschaftlicher Mitarbeiter, 1962-66 Wissenschaftl. Assistent bei Ludwig Holleck am Chemischen Institut der Philosophisch-Theologischen Hochschule Bamberg. Wegen dort fehlenden Habilitationsrechts 1966 Habilitation und Privatdozent für Physikalische Chemie in der Mathematisch-Naturwiss. Fakultät der Universität Hamburg. 1966-69 Dozent in Bamberg. 1969 Berufung auf eine Abteilungsleiter-Stelle an der Kernforschungsanlage Jülich mit der Aufgabe, eine eigenständige Abteilung für Angewandte Elektrochemie aufzubauen und zu leiten. 1969-74 Abteilungsleiter in Jülich. 1973 Verleihung der Akademischen Bezeichnung „Professor“ durch den Senat der Stadt Hamburg, 1973/74 vertretungsweise Wahrnehmung des Lehrstuhls für Elektrochemie in Hamburg. Zum 1. Oktober

1974 Berufung auf diesen Lehrstuhl. 1977-83 geschäftsführender Direktor des Instituts für Physikalische Chemie, 1985-87 Sprecher des Fachbereichs Chemie, 1990-92 Mitglied des Universitätskonzeils, 1993/94 Mitglied des Akademischen Senats, 1994 emeritiert.

Kastening brachte aus Jülich als Assistenten **Dierk Knittel** mit (geb. 1942 in Graz, Promotion 1969 am Institut für Organische Chemie und organisch-chemische Technologie der Technischen Hochschule Graz bei Helfried Hemetsberger, 1970-74 Wiss. Mitarbeiter der Abt. Angewandte Elektrochemie der Kernforschungsanlage Jülich, 1975-86 Wiss. Mitarbeiter bzw. Assistent am Institut für Physikalische Chemie der Universität Hamburg, 1985 Habilitation, Privatdozent für Physikalische Chemie, 1989-2007 Deutsches Textilforschungszentrum Nord-West in Krefeld). Nachfolgende Assistenten waren **Dieter Meissner** (geb. 1954, 1986 Promotion bei Rüdiger Memming und Bertel Kastening in Hamburg, dort 1986-88 Wiss. Assistent am Institut für Physikalische Chemie, 1988-95 Abteilungsleiter am Institut für Solarenergie-Forschung Hannover, 1995-99 Abteilungsleiter am Institut für Energiesystem-Technik, Forschungszentrum Jülich, 1999-2001 Univ.-Professor für Physikalische Chemie an der Universität Linz, 2002 Professor an der Fachhochschule Wels/Österreich, 2007 Professor an der Tallinn University of Technology, Tallinn/Estland) und **Regina Ruffler** (geb. 1957 in Saarbrücken, 1991 Promotion bei Ulrich Gonser, Universität Saarbrücken, 1989-95 Hochschulassistentin am Institut für Physikalische Chemie Universität Hamburg, 1996 Wiss. Mitarbeiterin an der Univ. Hamburg bzw. Univ. Saarbrücken, seit 2002 Wiss. Mitarbeiterin der Eduard-Job-Stiftung und hier Zusammenarbeit mit weiter oben angeführtem Georg Job mit den bei ihm aufgeführten Gegenständen).

Als externer Kooperator trat dem Arbeitskreis Kastening **Rüdiger Memming** bei (geb. 1931 in Emden, 1958 Promotion bei Theodor Förster an der Technischen Hochschule Stuttgart, 1958-60 Postdoc bei Robert Livingston, School of Chemistry, University of Minnesota in Minneapolis/USA, 1960-87 Wissenschaftler am Philips Forschungslaboratorium Hamburg, 1974 Habilitation im Fachbereich Chemie der Universität Hamburg/Privatdozent für Physikalische Chemie, 1985 Verleihung der akadem. Bezeichnung „Professor“ durch

den Senat der Stadt Hamburg, 1987-94 Leitung des Instituts für Solarenergieforschung Hannover, 1994 Ruhestand).

In Kastening's Abteilung in Jülich waren vorwiegend stark anwendungsbezogene Projekte bearbeitet worden. Dazu zählte die Verwendung von Aktivkohle als Elektrodenmaterial, einerseits als stationäre Elektrode nach Art von Brennstoffzellen-Elektroden, jedoch für die Herstellung von Wasserstoffperoxid bzw. Alkalihydroperoxid, andererseits in Form von Teilchen-Suspensionen zur Ladungsübertragung von stationären Elektroden auf die Oberfläche zu oxidierender oder zu reduzierender Matrices; letzteres hatte zur Gründung einer Gesellschaft mit einem mittelständischen Unternehmer geführt, wo Apparate zum Ätzen von Leiterplatten mit dieser Methode gebaut und vertrieben wurden. Ein weiteres Projekt betraf die Elektrosynthese von Sulfonen. Zur Fortführung dieser Projekte in Hamburg wären ein Technikum und die Verfügbarkeit geeigneter Mitarbeiter (Ingenieure, Laboranten) erforderlich gewesen; dies war in der Situation des Jahres 1974, als die Ausstattung neuberufener Lehrstuhlinhaber sehr eingeschränkt war, nicht möglich. Kastening beschränkte sich daher auf Grundlagen-Untersuchungen. Bei den Suspenselektroden betrafen sie die Ladungsübertragung beim Stoß des Einzelteilchens mit der stationären Elektrode bzw. der zu bearbeitenden Matrix, die Kinetik der Ausbreitung der Ladung im Teilchen, die Ladungsspeicherung in der elektrochemischen Doppelschicht, die Beweglichkeit von Ionen in den engen Poren (≤ 1 nm) und den Einfluss der Vorbehandlung. Bei der Sulfonsynthese wurde – gemeinsam mit Dierk Knittel – der Mechanismus der Teilprozesse im Einzelnen geklärt. Als weiterer Schwerpunkt ergab sich in der Zusammenarbeit mit Rüdiger Memming die Photoelektrochemie von Halbleiterelektroden, wobei die Nutzung von Solarenergie ein wichtiger Aspekt war: Es wurden photoelektrochemische Vorgänge an CdS, GaAs, WSe₂, SiC, TiO₂ untersucht.

Nach der Emeritierung Knapwosts 1981 wurden nacheinander zwei Berufungsverfahren mit jeweils Dreierlisten zur Wiederbesetzung des Lehrstuhls ohne Erfolg durchgeführt. Die bereits erwähnte begrenzte Ausstattung, auch durch die große Anzahl eigenständiger Arbeitsgruppen im Institut bedingt, war ein wesentlicher Grund für das Scheitern; im Falle

des zuletzt berufenen Kandidaten waren – unter Einschaltung der Behörde – große Anstrengungen unternommen worden und konnten alle Ausstattungswünsche realisiert werden, der Kandidat hatte jedoch offenbar gar nicht die Absicht gehabt, den Ruf anzunehmen, den er nur zur Verbesserung an anderer Stelle benutzte.

Dadurch war für mehr als ein Jahrzehnt wiederum nur ein Lehrstuhl besetzt. Nach der Emeritierung Kastening's 1994 konnte dann der Elektrochemie-Lehrstuhl noch im selben Jahr wieder besetzt werden, auch weil die Ausstattung nun etwas leichter geregelt werden konnte. Schon der zuerst Berufene, Horst Weller vom Hahn-Meitner-Institut Berlin, konnte gewonnen werden.

Horst Weller wurde am 21. Oktober 1954 in Siegen geboren. Er studierte Chemie in Göttingen. 1982 Promotion bei Albert Weller am Institut für Biophysikalische Chemie, Universität Göttingen, 1982-94 Wissenschaftl. Mitarbeiter und stellv. Abteilungsleiter am Hahn-Meitner-Institut Berlin, 1992 Habilitation an der Technischen Hochschule Berlin, 1994 Berufung auf den Lehrstuhl für Elektrochemie, Institut für Physikalische Chemie, Universität Hamburg. Seit 1999 geschäftsführ. Direktor des Instituts. Aus Berlin brachte Weller die Assistenten **Alexander Eychmüller** (geb. 1958 in Stuttgart, Promotion 1987 bei Albert Weller in Stuttgart, 1987/88 mit DFG-Stipendium bei M. A. El-Sayed an der Univ. of California Los Angeles, 1988-94 Wissenschaftl. Mitarbeiter am Hahn-Meitner-Institut in Berlin, ab 1994 am Hamburger Institut, 1999 Habilitation in Hamburg, ab 2005 Professor für Physikalische Chemie/Elektrochemie an der Technischen Hochschule Dresden) und **Markus Haase** mit (geb. 1961 in Berlin, 1989 Promotion an der Techn. Hochschule Berlin, 1994-2005 Wiss. Mitarbeiter am Hamburger Institut, 2001 Habilitation in Hamburg, 2005 Ruf auf eine Professur für Physikalische Chemie, Universität Osnabrück).

Bei der Forschung Wellers stehen Nanokristalle und Nanopartikel im Vordergrund. Einige hierbei besonders wichtige Aspekte sind: Synthese, Struktur, Dynamik, optische, magnetische und elektrochemische Eigenschaften, Ladungsträgertransport, Selbstorganisation, Wechselwirkung und Aggregationsverhalten geladener Teilchen, Überstrukturen, biologische und medizinische Wirkung und Anwendung in der

elektrochemischen Katalyse, C-Nanoröhren.

Alexander Eychmüller's Forschung betraf Struktur, Synthese (auch elektrochemisch), Photophysik (Lumineszenz, Lichtemission), Ladungstransport in Halbleiter-Nanokristallen, u.a. solche vom II/VI-Typ (z.B. CdTe); auch im Hinblick auf optoelektronische und photonische Anwendungen.

Markus Haase's Forschung betraf die Synthese nanokristalliner Festkörper (Isolatoren, Halbleiter, Metalle), Bildung nanoporöser Schichten, optische Spektroskopie an dotierten Nanokristallen und Energie-Übertragungsprozesse.

Nachdem vor längerer Zeit seitens der zuständigen Behörde eine Grundsanierung und damit Entasbestierung und danach eine andere Nutzung des Gebäudes vorgesehen war, wurde in den zurückliegenden zwei Jahrzehnten eine künftige Unterkunft des Instituts diskutiert. Zeitweise waren für alle Institutsmitglieder bereits Räume im ehemaligen Forschungslaboratorium der Firma Philips (Stellingen) zugeordnet. Schließlich wurde aber beschlossen, einige Stockwerke des sogenannten Verfügungsgebäudes II in der Grindelallee geeignet herzurichten, wobei neben der Grundsanierung auch eine verstärkte Belastbarkeit der Böden vonnöten war, um schwere Geräte, insbesondere Magneten, aufstellen zu können. Im Jahre 2004 erfolgte dann der Umzug in dieses Gebäude, in dem in den obersten Etagen das Institut für Lebensmittelchemie verblieb. Die Gesamtfläche war anfangs etwas kleiner als im alten Gebäude, konnte aber durch die Ausweitung von **INCH**, dem Interdisziplinären Nanowissenschafts-Centrum Hamburg und **CAN**, dem Centrum für Angewandte Nanotechnologie stark zulegen.

Im Jahre 2000 wurde ein fachübergreifender Lehrstuhl geschaffen, dessen Gegenstände zugleich der Technischen und Makromolekularen und der Physikalischen Chemie zuzuordnen sind. Auf ihn wurde Stefan Förster berufen und an das Institut für Physikalische Chemie gebunden. Später wurde dieser Lehrstuhl ganz der PC zugeordnet.

Stephan Förster wurde 1963 in Mainz geboren, Promotion 1992 bei Manfred Schmidt in Mainz, 1992/93 Postdoc bei Frank S. Bates, University of Minnesota, Minneapolis/USA, 1993-99 Wiss. Mitarbeiter am Max-Planck-Institut für Kolloid- und

Grenzflächenforschung in Golm, 1999 Habilitation an der Universität Potsdam, 2000 Berufung auf den zweiten Lehrstuhl am Institut für Physikalische Chemie in Hamburg, 2010 Wegberufung auf eine Professur an der Universität Bayreuth.

Stephan Försters Forschung betraf Entstehen und Synthese von Strukturen mit nano- und meso-Abmessungen, deren Einbeziehung in Systeme mit besonderen Funktionen; Block(co)polymere Membranen, Mizellen und Monolayer; Selbstorganisation von Polymeren; Polyelektrolyte, polymeres TiO₂ und Silicafilme.

Die Professur wurde 2013 mit Volker Abetz wieder besetzt.

Das Freiwerden von Stellen durch Pensionierung ermöglichte 2008 die Einrichtung eines dritten Lehrstuhls. Er wurde besetzt mit

Alf Mews geb. 1964 in Zülpich, Studium von Chemie-Ingenieurtechnik und Chemie an der FH Aachen bzw. der Universität Siegen, dann Mitarbeiter am Hahn-Meitner-Institut Berlin, 1994 Promotion bei Horst Weller, Techn. Univ. Berlin, 1995 mit DFG-Stipendium bei Paul Alivisatos an der University of California, Berkeley, 1996 Mitarbeiter von Christian Bräuchle, Physikalische Chemie, Universität München, 1997 Mitarbeiter von Thomas Basche, Institut für Physikalische Chemie, Universität Mainz, dort 2003 Habilitation, 2004 Professor für Physikalische Chemie, Universität Siegen. 2008 Berufung auf die neue Professur für Physikalische Chemie in Hamburg.

Alf Mews' Forschung betrifft die Synthese nanoskopischer Modellstrukturen zur Erforschung ihrer fundamentalen optischen, strukturellen und elektronischen Eigenschaften, auch zwecks potentieller Anwendung. Die Strukturen sind Halbleiter-Nanodrähte und -Nanokristalle, Kohlenstoff-Nanoröhren und Metall-Nanokristalle. Diese Strukturen werden hergestellt und chemisch modifiziert mittels nass-chemischer Methoden, auch zur Bildung komplexer Nanostrukturen. Detaillierte Eigenschaften werden mittels verschiedener mikroskopischer Methoden untersucht.

Zur Gruppe Mews gehört **Tobias Kipp** (geb. 1974, Physik-Studium in Köln und Hamburg, 2004 Promotion bei Detlef

Heitmann, Institut für Angewandte Physik d. Univ. Hamburg, 2004-10 Leiter der Arbeitsgruppe Optische Spektroskopie von Quanten-Strukturen, seit 2009 Assistent bei Alf Mews, 2011 Habilitation/ Privatdozent für Experimentalphysik. Seine Forschung betrifft optische Mikroröhren-Ringresonatoren, Spektroskopie von chemisch synthetisierten Nanodrähten, von Halbleiter-Nanokristallen, von Hybrid-Metall-Halbleiter-Nanostrukturen, Raman- und Lumineszenz-Spektroskopie von Quanten-Strukturen.

Zum Lehrkörper gehört außerdem der Junior-Professor **Christian Klinke** (geb. 1971, Studium der Physik in Karlsruhe, 2000-03 Mitarbeiter bei Klaus Kern am Institut für Experimentalphysik der ETH Lausanne; dort 2002 Promotion, 2003-06 Postdoc bei Phaedon Avouris am IBM Watson Research Centre, Yorktown Heights/USA, 2006 Mitarbeiter bei Horst Weller am Institut für Physikalische Chemie in Hamburg, dort seit 2007 JProfessor, 2012 ERC Starting Grant für die Synthese und elektrischen Eigenschaften zwei-dimensionaler Nanostrukturen).

Klinkes Forschung betrifft die bei der Bildung neuartiger Festkörpermaterialien mit Dimensionen im Nanometerbereich auftretenden Phänomene; diese Materialien werden durch kolloidale Synthese, CVD (chemical vapor deposition) und Elektronenstrahl-Lithographie erzeugt. Sie werden durch Messung des elektrischen Transports, spektroskopische Methoden und Elektronen-Mikroskopie charakterisiert. Besonderes Interesse finden elektrische Eigenschaften anorganischer Nanopartikel, C-Nanoröhren und Verbundwerkstoffe.

Eine Gruppe „Nanostrukturierte Oberflächen und Selbstorganisation“ leitet **Andreas Meyer** (geb. 1966, Chemiestudium in Hamburg, Promotion 1998, Betreuer: Hans Gerhard Zachmann), 1998-2003 Mitarbeiter am DESY, am MPI Polymerforschung Mainz, am MPI Kolloidforschung Golm, st. 2003 Wissenschaftl. Mitarbeiter am Institut für Physikalische Chemie in Hamburg. Die Forschungsrichtung ergibt sich aus dem Gruppentitel. Wichtige Methode ist GISAXS (Grazing Incidence Small Angle X-ray Scattering).

In der Lehre vermitteln Hochschullehrer und Mitarbeiter des Instituts wie früher im Diplom-Studiengang Chemie so nun im

entsprechenden Bachelor-/Master-Studiengang das Fach Physikalische Chemie in Vorlesungen, Praktika, Übungen, Seminaren, ebenso im Fach Chemie des Lehrer-Studiengangs und als Pflicht-, Wahl- oder Wahlpflichtfach anderer Studiengänge (Physik, Biologie, Lebensmittelchemie und andere). Außerdem wird durch Institutsmitarbeiter traditionsgemäß die Mathematik für Chemiker bereitgestellt. Dazu ergaben sich aus praktischen Gründen Angebote für andere Fächer, u.a. Physik für Pharmazeuten, Physikalische Chemie für Holzwirte.

Mit den Arbeitskreisen Weller, Mews und Klinke ist das Institut beteiligt am INCH Interdisziplinäres Nanowissenschafts-Centrum Hamburg, dem auch Wissenschaftler des Instituts für Angewandte Physik (Kordinator: **Roland Wiesendanger**) angehören.

Am 2007 gegründeten *Center for Free-Electron Laser Science* (CFEL) auf dem Campus Hamburg-Bahrenfeld gibt es verschiedene Forschungsgruppen mit physikalisch-chemischen Forschungsschwerpunkten, insbesondere die Divisionen Theorie unter der Leitung von Robin Santra und „Dynamik in Atomarer Auflösung“ unter der Leitung von Dwayne Miller, die Forschungsgruppe *Controlled Molecule Imaging* von Jochen Küpper sowie die unabhängige Nachwuchsgruppe „Struktur und Dynamik kalter und kontrollierter Moleküle“ von Melanie Schnell.

CFEL ist eine Kooperation von DESY, der Max-Planck-Gesellschaft und der Universität Hamburg, die zur Entwicklung neuartiger Experimente zur Nutzung der Röntgenlaser, wie dem europäischen XFEL in Hamburg, geschlossen wurde. 2008 wurden als Gründungsdirektoren die Physiker Henry Chapman und Andrea Cavalleri berufen, wenig später folgten die Direktoren Dwayne Miller und Robin Santra. Jochen Küpper wurde 2010 als Leiter einer unabhängigen Forschungsgruppe berufen. Weiterhin gibt es seit 2010 die unabhängigen Nachwuchsgruppen Schnell und Rohringer.

The Hamburg Centre for Ultrafast Imaging (CUI) ist ein Bundesexzellenzcluster, an dem die Arbeitsgruppen des Europäischen Röntgenlasers XFEL (Bressler), sowie Arbeitsgruppen der Physik und Chemie an der Universität Hamburg, CFELs und DESYs beteiligt sind. Das wissenschaftliche Ziel des CUI ist die Beobachtung von Atomen und

Molekülen in Echtzeit – angefangen bei elementaren Prozessen der Elektronenanregung und -übertragung und der Solvatation über die Untersuchung definierter Vielteilchensysteme in wohldefinierten Quantenzuständen sowie der Aufklärung von Proteinstrukturen bis hin zur Ordnungsbildung in Wasser, in Nanopartikeln und magnetischen Domänen. Mit den besten Röntgenquellen und Elektronenbeschleunigern sowie international ausgewiesenen Experten auf den jeweiligen Forschungsgebieten bietet der Campus Bahrenfeld ein ideales Umfeld für die zukunftsweisende Forschung in den drei Bereichen: Beobachtung und Kontrolle von Quantensystemen; atomar aufgelöste strukturelle Dynamik; Dynamik von Ordnungsprozessen auf der Nanoskala. CUI ist seit 2012 als weiteres Hamburger Kompetenzzentrum an der Schnittstelle von Physik, Chemie und Biologie unter Beteiligung der Gruppen Bressler, Küpper, Laarmann, Mews, Miller, Santra, Schnell, Vendrell, Weller aktiv.

Zudem befinden sich auf dem Campus Bahrenfeld noch die PC-Arbeitsgruppen des Forschungszentrums DESY unter der

Leitung von Andreas Stierle und Simone Techert. Hier folgen kurze Beschreibungen der entsprechenden und noch nicht oben aufgeführten Leiter physikochemischer Arbeitsgruppen:

Jochen Küpper, FRSC, ist Professor für Experimentalphysik an der Universität Hamburg und Forschungsgruppenleiter bei DESY; geb. 1971, 1991–1996 Studium der Chemie an der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf und der University of Pittsburgh, 2000 Promotion in Physikalischer Chemie an der Heinrich-Heine-Universität, 2001–2002 mit Humboldt-Stipendium bei Roger E. Miller an der University of North Carolina, Chapel Hill, NC, USA, 2003 PostDoc bei Gerard Meijer am FOM Institut „Rijnhuizen“, 2003–2010 Arbeitsgruppenleiter „Große kalte Moleküle“ am Fritz-Haber-Institut der MPG in Berlin, 2009 Habilitation in Experimentalphysik an der Freien Universität Berlin, seit 2010 in Hamburg am CFEL (gemeinsame Berufung Universität Hamburg und DESY); 2014 *ERC Consolidator Grant* zur Entwicklung von Manipulationsmethoden für große Moleküle, biologische Systeme, und Mikropartikel.

Jochen Küpper's Forschung betrifft die Kontrolle der Bewegung komplexer Moleküle in der Gasphase zur detaillierten Untersuchung chemischer Eigenschaften wohldefinierter Systeme und zur Kontrolle chemischer Prozesse. Entwicklung neuartiger experimenteller Methoden. Darstellung von quantenzustands-, konformations- und gröbenselektierten Molekülproben, Ausrichtung und Orientierung auch komplexer Moleküle, Manipulation nanoskopischer/biologischer Systeme im Vakuum. Aufnahme von Beugungsbildern der elektronischen und atomaren Struktur von Molekülen.

Tim Laarmann studierte Physik an der Universität Hamburg und promovierte dort 2001 zum Thema Clusterphysik. Nachdem er als Postdoktorand eine maßgebliche Rolle bei Pionierexperimenten am Freielektronen Laser FLASH in der Arbeitsgruppe von Thomas Möller bei DESY spielte, war er für mehrere Jahre am Max-Born-Institut für nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie bei Ingolf V. Hertel in Berlin tätig. Mit seinen Arbeiten zur „Physik komplexer Systeme in starken Laserfeldern“ habilitierte

Fluorescence Lifetimes and Absolute PL Quantum Yields

Quantaurus series of compact instruments; the quick and easy way to measure the properties of photoluminescent materials.

Quantum Yield Measurement



- Space-saving compact design
- For liquid and solid samples
- Fully software controlled

■ **Solutions, thin films and powders can be analysed**

Fluorescence Lifetime Measurement



- Fluorescence lifetimes down to 100 ps
- Integrated LEDs for excitation
- Fully automated measurements
- Lifetime analysis of up to 5 exponentials

HAMAMATSU
PHOTON IS OUR BUSINESS

Hamamatsu Photonics Deutschland GmbH, Arzbergerstr. 10, D-82211 Herrsching,
www.hamamatsu.com Tel: +49 8152 375 203 Email: dialog@hamamatsu.de

er sich 2009 an der Freien Universität Berlin.

Seit 2008 leitet Tim Laarmann den Arbeitskreis Röntgen-Femtochemie im Bereich Forschung mit Photonen am DESY. Sein Forschungsschwerpunkt ist die Analyse und Kontrolle molekularer Prozesse mit Laserlicht im Grenzbereich von Physik, Chemie und Biologie. Tim Laarmann ist seit 2009 Privatdozent für Experimentalphysik am Fachbereich Physik der Universität Hamburg.

Robin Santra ist Professor der Theoretischen Physik; geb. 1971, Studium der Physik in Heidelberg, 1998-2002 Mitarbeiter bei Lorenz Cederbaum am Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Uni Heidelberg; dort 2001 Promotion, 2002-2004 Postdoc bei Chris Greene an der University of Colorado in Boulder, 2004-2005 Postdoc am Institute for Theoretical Atomic, Molecular and Optical Physics des Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, 2005-2010 Staff Scientist am Argonne National Laboratory, 2008-2010 Associate Professor Part-time im Department of Physics der University of Chicago, seit 2010 in Hamburg, gemeinsam berufen durch das DESY und die Universität Hamburg).

Robin Santra ist der Leiter der *CFEL Theory Division* am Center for Free-Electron Laser Science (CFEL), das von DESY, der Max-Planck-Gesellschaft und der Universität Hamburg gemeinsam betrieben wird. Seine Forschung ist der Theoretischen Atom-, Molekül- und optischen Physik bzw. der Theoretischen Chemischen Physik gewidmet. Dabei liegen seine Schwerpunkte bei den folgenden Themen: Ionisierungsdynamik und Innerschalenphysik von Atomen, Molekülen und Clustern; Multiphotonen- und Elektronenkorrelationseffekte im EUV und Röntgenbereich; Anwendungen von Röntgen-Freie-Elektronen-Laser; ultraschnelle, lichtinduzierte Phänomene; elektronische Vielteilchentheorie.

Sang-Kil Son studierte Chemie (B.S. 1997, M.S. 1999, Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST)) und promovierte im Department of Chemistry,

University of Kansas, USA 2009 mit Shih-I Chu. 2010 PostDoc bei Robin Santra, CFEL, DESY. 2014 Wissenschaftler, CFEL, DESY. Seine Forschungsinteressen umfassen theoretische Atom- und Molekülphysik, Röntgenphysik und Quantenchemie.

Oriol Vendrell, geb. 1978, 1996-2000 Studium der Chemie in Barcelona, dort 2001-05 Promotion in der Theoretischen Chemie bei J.M. Lluch, 6 Monate bei S. Hammes-Schiffer, Pennsylvania State University, 2005-10 Postdoc bei H.-D. Meyer, Theoretische Chemie in Heidelberg, dort 2005-07 Alexander von Humboldt Stipendiat und 2007-2009 Marie Curie EIF Stipendiat, Juli 2010 Gruppenleiter Chemische Dynamik am CFEL/DESY Theorie-Abteilung von R. Santra. Vendrells Arbeit konzentriert sich auf theoretische Untersuchungen durch kurze und intensive Lichtpulse getriebener ultraschneller Elektron- und Kerndynamik in molekularen Systemen.

R. J. Dwayne Miller, FSRC, FCIC, Professor für Experimentalphysik an der Universität Hamburg und Leiter der Abteilung Dynamik in Atomarer Auflösung am Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie innerhalb des CFEL. 1978 B.Sc, Manitoba, Kanada, 1983 Ph.D. Stanford, CA, USA, 1984 Professor für Chemie, Rochester, USA, seit 1995 Professor für Physik und Chemie, Universität Toronto, Kanada, 1998 Fellow of the Royal Society of Canada, 2005 Direktor des Institutes für Optische Wissenschaften, Toronto, Kanada; 2007 Universitätsprofessor Universität Toronto, 2009 Chemical Institute of Canada (CIC) Medal, seit 2010 in Hamburg (Universität und CFEL/Max-Planck-Gesellschaft), 2012 ERC Advanced Grant für Minimalinvasive Chirurgie und Biodiagnostik. 2012 Gründungsdirektor CUI. 2013 Direktor am neuen Max-Planck Institut für Struktur und Dynamik der Materie.

Dwayne Millers Forschungsschwerpunkt ist die Entwicklung neuer Lasertechnologie und ultraschneller Spektroskopie, die darauf ausgerichtet sind, eine experimentelle Beschreibung der primären Ereignisse der Struktur-Funktions-Beziehung der Biologie

zu erhalten. Diese Arbeit gipfelte in der Entwicklung von neuen Elektronenquellen, die die ersten Bilder von Atombewegungen mit genügend zeitlicher und räumlicher Auflösung zur Verfügung stellten, um die primären Ereignisse in strukturellen Veränderungen zu beobachten.

Nils Huse ist Professor für Experimentalphysik an der Universität Hamburg und Forschungsgruppenleiter am Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie; er studierte Physik an den Universitäten Freiburg, Paris und Heidelberg. 2006 Promotion an der Humboldt Universität zu Berlin. 2007 Postdoktorand am Lawrence Berkeley National Lab, USA, 2010 dort Projektleiter. Seit 2011 in Hamburg am CFEL (gemeinsame Berufung Max-Planck-Forschungsgruppe und Universität Hamburg). Seine Interessengebiete liegen im Bereich der Moleküldynamik in kondensierter Phase und der Entwicklung ultraschneller Spektroskopiemethoden vom THz- bis zum Röntgenbereich.

Die Physikochemikerin Melanie Schnell (geb. 1978) studierte Chemie in Hannover und Bonn. 2004 Promotion in Hannover, PostDoc-Aufenthalte 2004/2005 am NIST in Gaithersburg, USA, mit Dr. Jon T. Hougen und 2005/2006 am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft in Berlin mit Gerard Meijer. 2006 wurde sie dort Gruppenleiterin. Seit 2010 leitet Melanie Schnell eine unabhängige Forschungsgruppe am Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie und am Center for Free-Electron Laser Science auf dem Wissenschaftscampus in Bahrenfeld.

Melanie Schnell beschäftigt sich mit der Struktur, Chiralität und Dynamik polarer Moleküle in der Gasphase und verwendet dafür vor allem Methoden der hochauflösenden Spektroskopie. Ein Schwerpunkt liegt auf instrumentellen Weiterentwicklungen der neuartigen Breitband-Rotations-spektroskopie zur Unterscheidung der Enantiomere chiraler Moleküle.

Arbeitskreis Polymere, Institut für Physikalische Chemie

Leiter: Prof. Dr. Volker Abetz

Der Arbeitskreis umfasst ca. 15 Mitarbeiter und beschäftigt sich mit der Selbstorganisation von Blockcopolymeren. Die Herstellung der Blockcopolymere erfolgt mit Hilfe von kontrollierten Polymerisationsverfahren. Die Struktur und Dynamik dieser Systeme werden mit Hilfe von Mikroskopie, Streuung sowie Rheologie charakterisiert. Die Kontrolle der physikalisch-chemischen Eigenschaften dieser Materialien ist wesentlich für deren Einsatz in verschiedenen Gebieten der Nanotechnologie.

Maßgeschneiderte Membranen aus Blockcopolymeren

Blockcopolymere sind Makromoleküle, welche aus mindestens zwei verschiedenen Polymeren (d.h. Kettenmolekülen, die aus gleichartigen Wiederholungseinheiten aufgebaut sind) zusammengesetzt sind. Aufgrund der Tatsache, dass verschiedenartig aufgebaute Polymere sich in den meisten Fällen nicht miteinander mischen lassen, kommt es zu Phasentrennung, so wie man das im Alltag z.B. von Wasser und Öl kennt. Wenn verschiedenartige Polymere miteinander zu einem Blockcopolymer verbunden sind, so tritt diese Phasentrennung nur auf einer mikroskopischen Längenskala auf, weil eine makroskopische Entmischung durch die Verbindung beider Polymerblöcke verhindert wird. Diese sogenannte Mikrophasenseparation führt zu verschiedenen Morphologien, welche von der chemischen Zusammensetzung der Polymerblöcke, der Zahl der Blöcke, deren relativem Volumenverhältnis und deren Topologie (linear, verzweigt, zyklisch,...) abhängt. Weiterhin spielt die Herstellung aus der Schmelze bzw. aus Lösung eine große Rolle auf die Morphologie, die insbesondere bei hochmolekularen Systemen oft nicht dem thermodynamischen Gleichgewicht (d.h. dem Zustand mit niedrigster Freier Energie) entspricht.

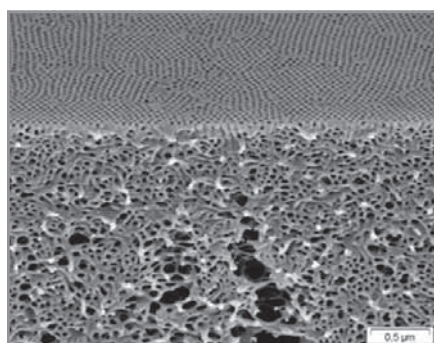


Abbildung 1: Rasterelektronische Aufnahme des Querbruchs einer Blockcopolymermembran

Durch ein Wechselspiel zwischen thermodynamischer Triebkraft und kinetischen Eigenschaften des Systems können verschiedene Strukturen erzeugt werden, wenn man beispielsweise einen Film aus einer Blockcopolymerlösung in ein Fällbad taucht. Bei geschickter Wahl der Parameter (und deren gibt es viele!) kann ein poröser Film erhalten werden, der einen Gradienten der Porosität entlang der Filmdicke aufweist. Die Oberseite dieses Films kann eine regelmäßige Porenstruktur aufweisen, welche solchen Filmen ein großes Potenzial als Mikro- oder Ultrafiltrationsmembranen zukommen lässt. Solche Membranen wurden erstmalig im Helmholtz-Zentrum Geesthacht entwickelt. Solche Membranen können kleine Partikel, Viren oder Bakterien aus wässrigen Lösungen abtrennen, aber es ist auch möglich, solche Membranen zur Trennung von Proteinen und anderen biologischen Makromolekülen zu optimieren. Ziel des Arbeitskreises Polymere ist es, Blockcopolymere zu entwickeln, welche zu Membranen mit funktionellen Poren führen. Die Funktionalitäten reichen dabei von temperaturschaltbarer Durchlässigkeit bis hin zur selektiven Erkennung von Molekülen und Ionen. Ein wesentliches Ziel dieser Arbeiten ist es, die Strukturbildung solcher Membranen besser zu verstehen. Dazu werden Blockcopolymerlösungen mit Hilfe von Kleinwinkelröntgenstreuung (SAXS) und elektronenmikroskopischen Verfahren (insbesondere Cryo-Transmissions- und Elektronenmikroskopie) untersucht, um die Einflüsse von Konzentration und Zusammensetzung der Lösung auf den Strukturbildungsprozess zu bestimmen.

Nanopartikel mit ungewöhnlichen Formen

Ein weiteres Arbeitsgebiet befasst sich mit der Entwicklung von mikrophasenseparierten Blockcopolymeren, welche als Template (Masken) zur Herstellung von anorganischen Nanopartikeln verwendet werden können. Die Herstellung von geometrisch

einfachen nanoskaligen Teilchen wie Kügelchen, Stäbchen und auch Scheibchen sind bereits lange bekannt. Mit Hilfe von Dreiblockcopolymeren können auch ungewöhnliche Morphologien erzeugt werden, wie zum Beispiel

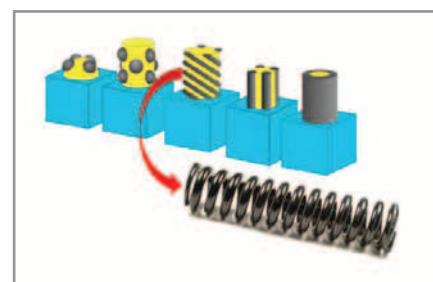


Abbildung 2: Schema von asymmetrisch zusammengesetzten linearen Dreiblockcopolymeren. Die Matrix-bildende Komponente ist blau dargestellt. Die graue Komponente soll durch andere Materialien ersetzt werden und führt z.B. zu metallischen Nanospulen

Morphologien, bei welchen helikale oder ringförmige Mikrophasen auftreten. Durch spezifisches Ersetzen der Polymerblöcke in diesen Mikrophasen durch Salze von Übergangsmetallen wie z.B. Gold sollen entsprechende anorganische Nanostrukturen erzeugt werden, welche nicht oder nur sehr schwierig mit anderen Methoden hergestellt werden können. Solche Teilchen könnten Potenzial beispielsweise zur Abschirmung hochfrequenter elektromagnetischer Strahlung haben, oder für spezielle optische Eigenschaften genutzt werden.

Hierarchisch organisierte Hybridmaterialien

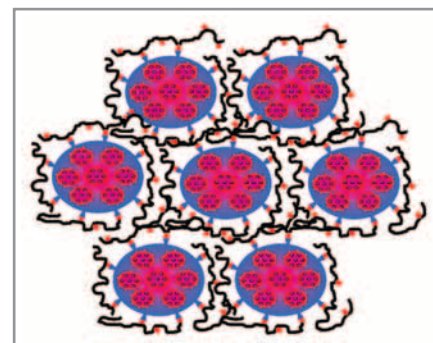


Abbildung 3: Schema des Aufbaus eines hierarchisch organisierten Materials, in welchem verschiedene Hierarchieebenen durch spezifisch wechselwirkende Funktionalitäten verknüpft sind

Mikrophasenseparierte Blockcopolymerer zeigen auch sehr interessante mechanische Eigenschaften. Thermoplastische Elastomere, welche aus Triblockcopolymeren aufgebaut sind, deren Endblöcke eine harte Komponente darstellen, während der Mittelblock gummielastisch ist, sind ein bekanntes Beispiel. Auch die Natur zeigt das Potenzial solcher Strukturen, wie z.B. beim Aufbau von Zahnschmelz oder Perl-

mutt, welche auf einer mikroskopischen Längenskala aus harten keramischen Partikeln und weichen Biopolymeren aufgebaut sind. Der Arbeitskreis entwickelt Polymere, welche über funktionelle Gruppen an Nanopartikeln bzw. an bereits mit Polymeren beschichteten Nanopartikeln anhaften können. Ziel ist es, dabei hierarchische Materialien aufzubauen, deren thermo-mechanische Eigenschaften sich über die

Eigenschaften der Nanopartikel, der Polymere und der Haftstellen maßschneidern lassen. Diese Arbeiten finden im Rahmen eines von der Deutschen Forschungsgemeinschaft finanzierten Sonderforschungsbereiches (SFB 986, M3) in Kooperation mit der Technischen Universität Hamburg-Harburg und dem Helmholtz-Zentrum Geesthacht statt.

Arbeitskreis Theorie Nanoskopischer Systeme, Institut für Physikalische Chemie

Leiter: Prof. Dr. Gabriel Bester

Der Arbeitskreis (AK) wurde im Februar 2014 etabliert und beschäftigt sich mit der Modellierung nanoskopischer Systeme. Zielsetzung des AK ist die Ausarbeitung von Konzepten und deren Implementierung in Computerprogramme, um fundamentale Eigenschaften von Materie mit nanoskopischer Längenskala zu verstehen und vorherzusagen. Hierbei spielen quantenmechanische Effekte eine entscheidende und wesentliche Rolle. Das Forschungsgebiet reicht von Nanostrukturen, bestehend aus wenigen Atomen, die dem Gebiet der Quantenchemie zugeordnet werden, bis hin zu künstlich strukturierter Materie, die aus der Festkörperphysik entstanden ist. Unsere Forschung erfolgt in engem Austausch mit Experimentatoren. So können ermittelte Vorhersagen überprüft bzw. experimentell gemessene Daten anhand quantenchemischer Berechnungen erklärt werden.

Nanoskopische Systeme

Nanostrukturen werden üblicherweise als Objekte definiert, die mindestens entlang einer Raumrichtung eine Ausdehnung von

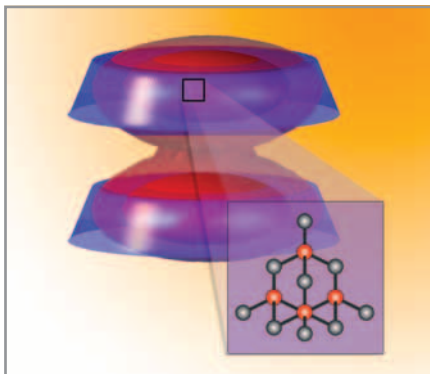


Abbildung 1: Nanostruktur aus Indiumarsenid Halbleitermaterial (blaue Kegelstümpfe; die als Quantenpunkte bezeichnet werden) eingebettet in Galliumarsenid (nicht dargestellt). Die elektronische Wellenfunktion des bindenden Zustandes dieses Quantenpunkt-Moleküls ist rot dargestellt. Jeder der Quantenpunkte besteht aus etwa dreißigtausend Atomen. Die zugrundeliegende atomare Struktur der Quantenpunkte ist schematisch im Vordergrund vergrößert dargestellt.

1-100 Nanometer besitzen (ein Beispiel dafür zeigt Abbildung 1). Mit dieser Definition sind Systeme aus Nanostrukturen nicht nur in der Natur sondern auch in einer Vielzahl von technischen Anwendungen weit verbreitet. Viele Chemiker arbeiten an Molekülen, deren Dimension dieser Definition entspricht. Forschung an Nanoskopischen Systemen beinhaltet Nanophysik und Nanochemie. Unter diesen Begriffen verbirgt sich jedoch mehr als nur eine Charakterisierung bezüglich der Objektgröße. Unter „Nano“ versteht man die Skala, bei der die Materialeigenschaften erheblich von den Volumeneigenschaften des Festkörpers abweichen. Dabei verschwinden die Grenzen zwischen Materialwissenschaften, Physik und Chemie. Hierbei finden Annäherungen an historisch getrennte Gebiete, wie der Molekularbiologie (manchmal als Nanowissenschaft der lebendigen Organismen bezeichnet), statt.

Die neuen Phänomene, die aufgrund einer Reduzierung der Atomanzahl beobachtet werden, lassen sich in zwei Kategorien einteilen: die Veränderung bekannter und das Auftreten neuer Eigenschaften.

Bei der Veränderung der bekannten Eigenschaften, wie z. B. plastische Verformbarkeit des Werkstoffes, können drastische Abweichungen vorkommen. Diese werden als qualitative Veränderung bezeichnet, wie beispielsweise die Reorganisation der Atome zu einer neuen Kristallstruktur bei Verringern der Ausdehnung in eine Raumrichtung.

Die fundamental neuen Eigenschaften treten aufgrund quantenmechanischer Effekte (wie z. B. das Tunneln von Ladungsträgern) auf, werden in der Regel bei sehr kleinen Längenskalen relevant und können die Eigenschaften des Materials dominieren.

Einer der aktivsten Bereiche in der heutigen Forschung beschäftigt sich mit dem Verständnis der physikalischen und chemischen Prozesse von Nanoobjekten. Dafür gibt es zweierlei Gründe. Einerseits erlauben neue Zugänge zu diesen Größenskalen einen Einblick in neue Phänomene von fundamentaler wissenschaftlicher Bedeutung. Andererseits ist die technologische Relevanz der gewonnenen Erkenntnisse enorm und oft besitzt sie direkte Auswirkungen auf industriennahe Forschung.

Eine Herausforderung für die Theorie

Das Gebiet der Nanophysik und Nanochemie ist für die Theorie sehr attraktiv, da man dort an der Grenze unseres Verständnisses forscht. Jedoch ist der Nanometerbereich, welcher zwischen der Welt der Moleküle und der des Festkörpers liegt, nur schwer zugänglich. Während es für Materialeigenschaften von Molekülen und Festkörpern akkurate Lösungsansätze gibt,

sind Lösungen für Systeme mit Größenordnungen zwischen beiden eine Herausforderung. Die Strukturen sind in einer Dimension oft nicht größer als wenige Atomlagen. Hier ist eine atomistische Behandlung wünschenswert. In ihrer Gesamtheit beinhalten sie aber meist tausende bis hunderttausende Atome, die eine atomistische Betrachtung als problematisch erscheinen lässt. Weiterhin stellen viele experimentell relevante Größen, wie optische Eigenschaften und Transport, sogenannte Anregungen dar. Diese Anregungen sind für eine große Anzahl an Atomen äußerst schwierig zu berechnen, wie im Folgenden erläutert wird.

Methodenentwicklung

Die Berechnung der quantenmechanischen Eigenschaften von Festkörpern und Molekülen ist mit der Entwicklung der Dichtefunktionaltheorie (DFT) in den letzten Jahrzehnten erheblich vereinfacht worden. Der dabei entstehende numerische Aufwand bleibt jedoch sehr groß. Heutzutage können auf massiv-parallelen Rechnerarchitekturen mit hunderttausend und mehr Rechenkernen (und damit hunderttausend und mehr parallel laufende Prozesse; siehe Abbildung 2) Atomzahlen im vierstelligen Bereich behandelt werden. Obwohl diese Methode oft als *ab initio* bezeichnet wird, was bedeutet, dass lediglich die Kernladungszahl und die Masse der Atome als Eingabeparameter notwendig sind, beruht sie auf einer Näherung für die Elektronenkorrelation. Diese Approximation ist in vielen Fällen zufriedenstellend, vor allem

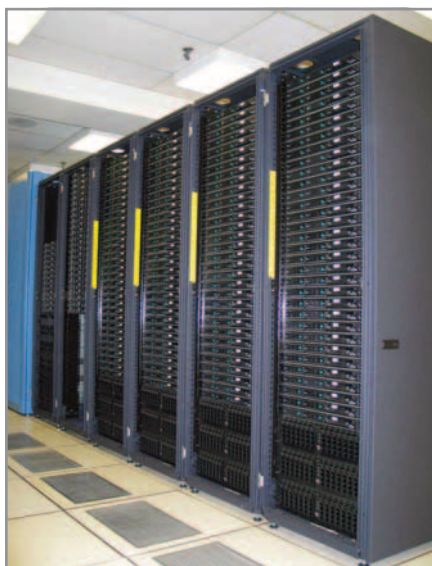


Abbildung 2: Computercluster bestehend aus mehreren hundert Rechenkernen, die durch eine schnelle Netzwerkkonfiguration miteinander verbunden sind.

bei der Betrachtung der Grundzustandseigenschaften, wie die atomare Struktur von Molekülen oder Festkörpern.

Mit der DFT stoßen wir auf folgende Probleme: Die Behandlung von einer großen Atomzahl ist nicht zu bewältigen und die Berechnung relevanter Eigenschaften (angeregter Zustände) kann nicht akkurat behandelt werden. Aus dieser Problematik heraus entwickelt unser Arbeitskreis numerische Methoden, die beide Probleme angehen und lösen.

Um die Einschränkung durch die Atomzahl zu erweitern, entwickeln wir Pseudopotenziale, die *ab initio* bleiben und numerisch deutlich weniger aufwendig als DFT sind. Wir verzichten dabei auf eine selbstkonsistente Lösung und berechnen gezielt Zustände in dem energetisch interessanten Bereich um die Bandlücke. Dies können wir heutzutage für Strukturen mit mehr als einer Million Atomen durchführen.

Um dem zweiten Problem, der Berechnung angeregter Zustände, zu begegnen, arbeiten wir an zwei Teilaspekten:

Zum einen an den sogenannten **Quasiteilchen-Effekten**, die in prominenter Weise bei der Photoemission zu beobachten sind. Dabei werden ein Festkörper oder ein Molekül mit Licht bestrahlt und die dabei freierwerden Elektronen untersucht. Folglich werden Übergänge von Systemen mit N Elektronen zu Systemen mit $N-1$ Elektronen betrachtet. Die Energie eines sogenannten Quasiteilchens entspricht genau der Energiedifferenz der beiden Systeme. Um diesen Prozess zu beschreiben, muss eine aufwendige Vielteilchentheorie verwendet werden, bei der die Pole der Greenschen Funktion gerade diese Übergänge wiedergeben.

Zum anderen an Effekten, die mit der **Wechselwirkung zwischen diesen Quasiteilchen** zu tun haben. Wenn ein Elektron durch eine optische Anregung (Absorbieren eines Photons) vom Valenzband in das Leitungsband übergeht, wechselwirkt es mit dem verbleibenden Loch im Valenzband. Dieses fehlende Elektron, oder Loch, ist positiv geladen, während das Elektron negativ geladen ist und die Wechselwirkung ist attraktiv. In ausgedehnten Halbleitern ist dieser Effekt oft vernachlässigbar, da die Wechselwirkung energetisch im Milielektronenvolt-Bereich liegt. Sie ist weitaus kleiner als die Photonenenergie,

die sich im Elektronenvolt-Bereich befindet. Bei Nanostrukturen oder Molekülen kann diese Wechselwirkungsenergie jedoch sehr groß werden, da die Wellenfunktionen von Elektron und Loch auf einem engen Raumbereich lokalisiert sind und dementsprechend stark überlappen. Die theoretischen Lösungsansätze dieser Probleme sind einerseits die Bethe-Salpeter-Methode und andererseits quantenchemische Verfahren, wie die Interaktion der Konfigurationen, die wir im Arbeitskreis vorantreiben.

Berechnung optischer Eigenschaften nanoskopischer Systeme

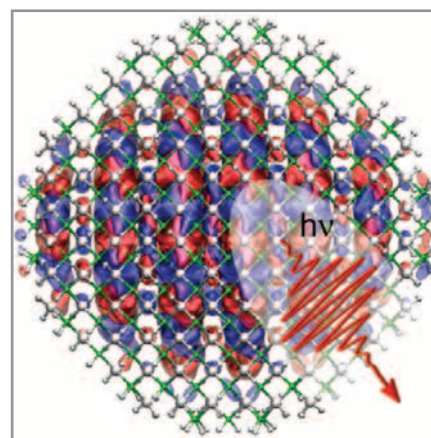


Abbildung 3: Kolloidales Halbleiternanopartikel aus Cadmiumselenid. Die Atome sind als weiße und grüne Kugeln dargestellt und die Wellenfunktion des höchsten besetzten Orbitals als rote (positive Phase) und blaue (negative Phase) Flächen dargestellt.

Die optischen Eigenschaften von Nanostrukturen stehen im Fokus verschiedener, neu etablierter Forschungsfelder, wie z.B. der Quanteninformation, bei der einzelne Lichtquanten (Photonen) die Information speichern oder übertragen sollen. Bei der Erzeugung dieser einzelnen Lichtquanten spielen Nanosysteme eine zunehmend wichtige Rolle. Des Weiteren stehen Nanostrukturen in anderen wichtigen Forschungsfeldern, wie der Photovoltaik, der Medizin oder der Sensorik im Blickpunkt, wobei ebenfalls optische Eigenschaften der Nanomaterialien entscheidend sind. Andererseits möchte man aus den gemessenen optischen Eigenschaften Informationen über die elektronische Struktur, das Vorhandensein interner elektrischer Felder, magnetischer Momente, bis hin zur Morphologie und Zusammensetzung der Strukturen erfahren. Um solch ein Verständnis zu erlangen, bedarf es einer detaillierten und akkuraten theoretischen Unterstützung.

Historisch gesehen, wurden zunächst Methoden aus der theoretischen Physik, die den Festkörper als ein Kontinuum beschreiben (die Methode der effektiven Masse, oder K.p-Methode), herangezogen und auf kleine, nanoskopische Systeme angewandt. Obwohl formal dabei keine Probleme entstehen, werden die Ergebnisse unzuverlässig, sobald atomare Effekte relevant werden, was zwangsläufig bei kleiner werdenden Strukturen passiert.

In den letzten etwa zehn Jahren haben sich die *ab-initio*-Methoden, bei denen die Nanostruktur nicht als effektives Medium einer gewissen Größe, sondern als eine Anordnung verschiedener Atome beschrieben wird, rasant entwickelt. Dabei unterscheiden wir drei verschiedene Ansätze. Zum einen Methoden, die auf Greenschen Funktionen und dem Bethe-Salpeter Ansatz basieren, zum anderen Methoden, die auf die zeitabhängige Dichtefunktionaltheorie zurückgreifen, und letztlich Methoden, die den quantenchemischen Ansatz des Quasiteilchen Konzepts verfolgen. Unser AK entwickelt und verwendet den letzten Ansatz. Abbildung 3 zeigt einen kolloidalen Halbleiternanopartikel aus Cadmiumselenid. Dabei werden die Atome als weiße und grüne Kugeln gezeigt und eine ausgewählte Wellenfunktion als rote und blaue Flächen dargestellt. Für solche Strukturen haben wir Methoden entwickelt, die es erlauben, die Emissionswellenlänge hochpräzise auszurechnen. Insbesondere können wir die sogenannte Feinstruktur aufspaltung des Exzitons berechnen, die energetisch im Mikroelektronenvoltbereich liegt, und die z. B. in der Quantenoptik von großem Interesse ist.

Dynamik von angeregten Zuständen

Der oben beschriebene Ansatz berücksichtigt jedoch nicht das dynamische Verhalten der untersuchten Systeme. Unsere Aussagen über die Zerfallsraten entnehmen wir lediglich einer Wahrscheinlichkeitsrechnung. Es gibt aber Situationen, bei denen diese Dynamik bedeutend zum

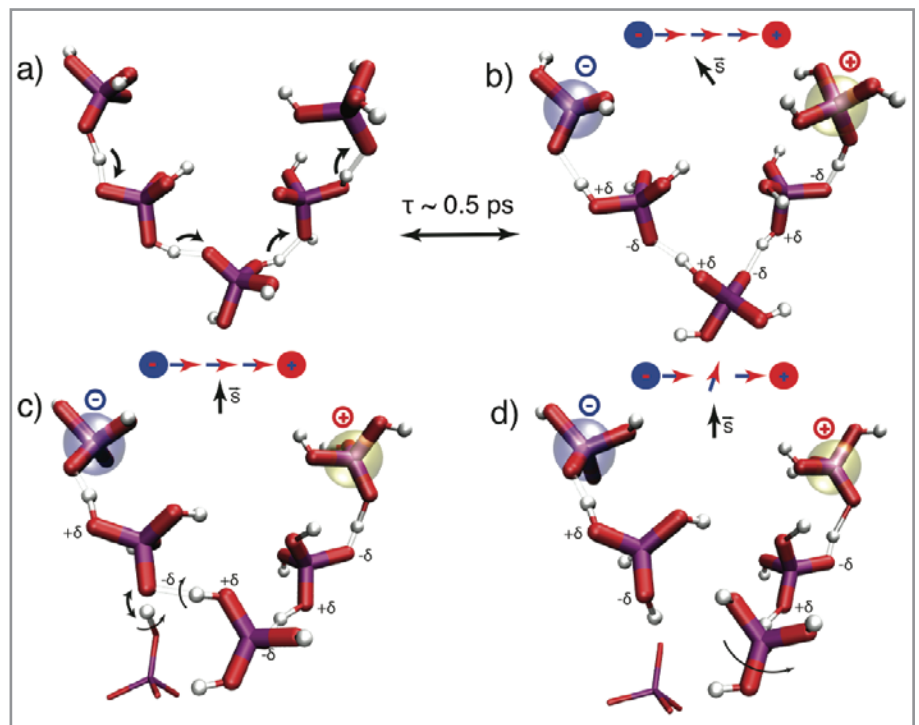


Abbildung 4: Mikroskopischer Mechanismus des Protonen-Transports in Phosphorsäure aus *ab-initio*-Molekulardynamik-Simulationen. Man beobachtet starke, polarisierbare Wasserstoffbrücken und eine gekoppelte Protonenbewegung sowie eine ausgeprägte protonische dielektrische Antwort des Mediums. Dieses Zusammenspiel erlaubt die Bildung ausgedehnter, polarisierter Wasserstoffbrücken gebundener (Grotthuss-) Ketten.

Vorschein kommt und die Zeitabhängigkeit explizit berechnet werden muss. Dazu gehören Diffusionsprozesse in Flüssigkeiten, wie z.B. die Migration von Protonen in Phosphorsäure (siehe Abbildung 4). Die Berechnung der atomaren Bewegung bei einer eingestellten Temperatur von 400 Kelvin für etwa 50 Picosekunden erlaubt es, den atomaren Diffusionsmechanismus aufzuzeigen und die Diffusionskonstante zu berechnen. Dabei handelt es sich bei den Berechnungen um die Zeitabhängigkeit der Entwicklung des Grundzustandes, bei dem die Elektronen mühelos der Bewegung der Kerne folgen. Diese Simulationen sind sehr aufwendig, können aber mittels Standardmethoden der *ab-initio*-Molekulardynamik durchgeführt werden.

Wenn Nanostrukturen, wie in Hamburg am CUI, durch intensive und kohärente Lichtimpulse in einen angeregten Zustand

gebracht werden, relaxiert dieser nach einer systemspezifischen Zeit wieder in den Grundzustand. Die existierenden theoretischen Ansätze, um solche Prozesse zu beschreiben, beruhen auf verschiedenen Näherungen, die unter den neuartigen experimentellen Bedingungen nicht mehr gerechtfertigt und tragbar sind. Das Ziel des Arbeitskreises ist die Erarbeitung von analytischen Ansätzen und numerischen Methoden, um die zeitliche Entwicklung von angeregten Zuständen für Systeme mit großer Atomanzahl zu berechnen. Die Genauigkeit unserer Berechnungen wird einerseits mit quantenchemischen Verfahren, die zuverlässige Ergebnisse für sehr kleine Modellsysteme liefern und andererseits in direkter Zusammenarbeit mit führenden experimentellen Gruppen in Hamburg mit experimentellen Daten verglichen.

Arbeitskreis: Chemische Nanoelektronik

Leiter: PD Dr. Christian Klinke

Der von PD Dr. Christian Klinke geleitete Arbeitskreis „Chemische Nanoelektronik“ beschäftigt sich mit der Synthese und Charakterisierung von Nanokristallen, insbesondere in Hinblick auf ihre elektronischen Eigenschaften. Kristalline Strukturen mit Ausmaßen von wenigen Nanometern können einstellbare Eigenschaften haben, die man von herkömmlichen Materialien nicht kennt. Ziel ist es, preiswerte Materialien für die Anwendung als Transistoren und Solarzellen zu entwickeln

Synthesemechanismen und neue Nanostrukturen

Um Nanomaterialien mit neuen Eigenschaften gezielt herstellen zu können, ist es notwendig, die Mechanismen, die zu ihrer Entstehung in der chemischen Synthese führen, genau zu verstehen. Dafür werden die Synthesen mit chemischen und physikalischen Methoden untersucht. Hierdurch wird es möglich, Nanostrukturen mit nahezu atomarer Präzision herzustellen. Diese können nicht nur kugel- und stäbchenförmig sein, es lassen sich auch pyramidale und flächige Strukturen erzeugen. Auch die Form hat Auswirkungen auf ihre Eigenschaften und damit auch auf ihre Funktion.

Elektronische Anwendungen

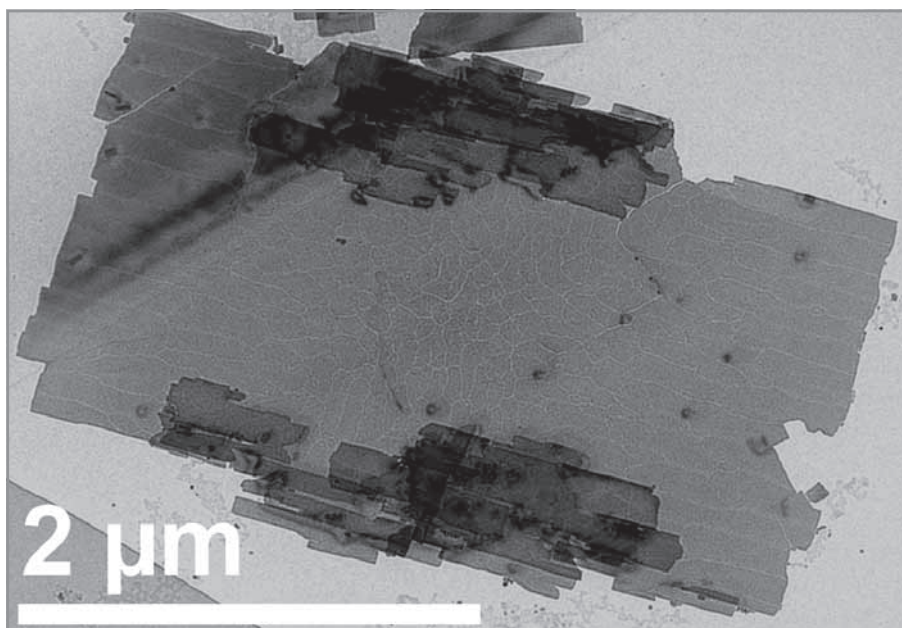
Im Vordergrund stehen im Arbeitskreis die physikalischen Anwendungen als Transistoren, Photodetektoren und Solarzellen. Die grundlegenden Eigenschaften der Nanostrukturen, die als aktive Elemente der Anwendungen fungieren sollen, werden dadurch charakterisiert, dass zunächst einzelne Objekte mit Elektroden kontaktiert werden und ihre elektrischen Eigenschaften präzise als Funktion der angelegten Spannungen und der Temperatur vermessen werden. So ist es gelungen, aus einzelnen Indiumphosphit-Nanonadeln Schottky-Dioden und -Transistoren herzustellen. Der Vorteil dieser Strukturen ist es, dass die Elemente schon in der Synthese ihre Funktionseigenschaften erhalten und so nur noch Kontakte angebracht werden müssen, um das Bauteil fertigzustellen. Die verwendete Synthese-Methode, die Kolloid-Chemie von Nanopartikeln, ist sehr flexibel und erlaubt es, große Mengen gleicher,

komplexer Nanostrukturen herzustellen, sodass ihre Produkte zu preisgünstigen Anwendungen führen können.

Eine Möglichkeit, weitere Nanostrukturen herzustellen, besteht darin, Moleküle mit in die Synthese einzubringen, die in den Verlauf der Reaktion eingreifen, aber nicht in das Endprodukt mit eingebaut werden. Diese stellen einen neuen Freiheitsgrad in der Synthese dar. So ist es zum Beispiel gelungen, durch Zugabe von chlorierten Kohlenwasserstoffen flächige, halbleitende Bleisulfid-Materialien herzustellen. Diese Nanoplättchen haben Ausmaße von mehreren Mikrometern in der Fläche und von nur wenigen Nanometern in der Höhe, wobei die Letztere einstellbar ist. Die geringen vertikalen Ausmaße der Strukturen führen dazu, dass die Ladungsträger, die durch Licht in dem Material erzeugt werden, quantenmechanischen Effekten unterworfen sind. Diese Effekte machen sich umso mehr bemerkbar, je dünner die Plättchen sind. Neben der Verwendung als Transistoren sind sie vor allem für effiziente und gleichzeitig preiswerte Solarzellen von großem Interesse, nicht zuletzt aufgrund der CO₂-Problematik. Im Hinblick darauf sind die Halbleiter-Nanoplättchen sehr vielversprechend: Dadurch, dass sich ihre Höhe mit den Synthesebedingungen einstellen

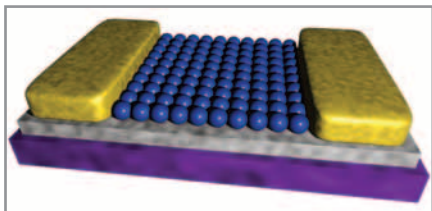
lässt, lassen sich auch die Absorptionseigenschaften gezielt auf die Anwendung als Solarzellen hin optimieren. Im Arbeitskreis werden diese Nanoplättchen als einzelne Objekte auf ihre optoelektronischen Eigenschaften hin untersucht.

Des Weiteren beschäftigt sich die Gruppe mit dem elektronischen Transport durch metallische Nanokristall-Filme. Durch die Langmuir-Blodgett-Technik können hoch-geordnete Lagen von Nanokristallen, bestehend aus einer einzelnen Schicht, hergestellt und auf Elektroden aufgebracht werden. Die Wanderung der Elektronen durch diese Schichten wird durch sogenannte Tunnelbarrieren bestimmt. Für gewöhnlich werden diese Hürden als ungünstig betrachtet, da sie den Widerstand der Bauteile erhöhen. Die vom Arbeitskreis untersuchten Filme bestehen aus Nanokristallen, die von gerade diesen Tunnelbarrieren definiert werden und sie somit genutzt werden. Bei der detaillierten Erforschung stellt sich heraus, dass sich für Elektronen bei tiefen Temperaturen Energielücken bemerkbar machen und das Material sich in der sogenannten Coulomb-Blockade befindet. Dieser Zustand kann durch ein äußeres elektrisches Feld beeinflusst werden, so dass sich eine ähnliche Funktion ergibt wie in Halbleiter-Feldeffekt-Transistoren:



Elektronenmikroskopische Aufnahme eines Bleisulfid-Nano-Plättchens mit einer Höhe von nur wenigen Nanometern.

die Stromstärke kann durch die Stärke des äußeren Feldes manipuliert werden. Solche Filme aus metallischen Nanokristallen können nicht nur als neuartige Transistoren eingesetzt werden, sondern auch als sehr empfindliche, preiswerte chemische Sensoren fungieren.

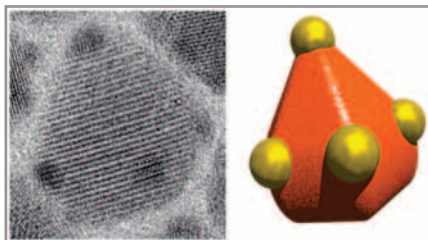


Modell einer Monolage von metallischen Nanopartikeln auf Gold-Elektroden.

Komposite

Die kolloidale Synthese von Nanokristallen erlaubt es, auch komplexere Strukturen zu

erzeugen. So lassen sich halbleitende Nanopyramiden herstellen, die sich auf Grund der Kristallstruktur des Materials ergeben. Auf diese Pyramiden können dann kleinste Mengen Gold aufgewachsen werden, die sich auf den reaktivsten Stellen, den Ecken der Pyramide, abscheiden. Die Gold-Cluster bestehen nur aus ungefähr 50 Atomen. Solche hybriden Strukturen, die aus zwei oder mehr Materialien zusammengesetzt sind,



Cadmiumselenid-Nanopyramiden bestückt mit kleinen Gold-Clustern (rechts: Modell der Struktur).

können in der Photo-Katalyse und Wasserspaltung eingesetzt werden.

Weiterhin können kolloidale Nanokristalle auch auf anderen Materialien wie röhrenförmigen, rein aus Kohlenstoff bestehenden Nanotubes aufwachsen. Im Falle von halbleitenden Nanokristallen erlauben solche Komposit-Strukturen, durch Licht in den Nanokristallen erzeugte Ladungsträger selektiv entweder an die Nanotubes oder an die Umgebung abzugeben. Dieser Effekt kann in elektronischen Sensoren eingesetzt werden, die auf Lichteinfall oder die chemische Umgebung empfindlich sind. Komposite mit metallischen Nanokristallen können auch in der Katalyse eingesetzt werden.

Arbeitskreis Controlled Molecule Imaging (CMI), Center for Free-Electron Laser Science (CFEL), DESY und Universität Hamburg

Leiter: Prof. Dr. Jochen Küpper

Der Arbeitskreis umfasst zur Zeit etwa 15 Mitarbeiter. Die Forschung des Arbeitskreises beinhaltet die Kontrolle komplexer Moleküle, die Sortierung von Molekülen und Molekülaggregaten nach Masse, Struktur (Isomerie), und Quantenzustand, die Fixierung von Molekülen im Raum, die Abbildung ultraschneller molekularer Prozesse, sowie die Untersuchung der Beziehung von Struktur und Funktion in chemischen Reaktionen.

Neben der direkten Untersuchung dieser wissenschaftlichen Fragestellungen investieren wir stark in die Entwicklung innovativer experimenteller Methoden und den Aufbau entsprechender Experimente. Das Verständnis und die Steuerung chemischer Reaktionsdynamik ist ein anspruchsvoller Forschungsbereich. In den letzten Jahrzehnten wurden verschiedene Instrumente entwickelt um festzustellen, welche spezifischen Bewegungen unter den unzähligen Möglichkeiten ein Reaktionssystem zum Produkt der Reaktion führen. Dies ist das Wunder chemischer Reaktionen: Aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit von der Energetik auf komplexen Potenti-



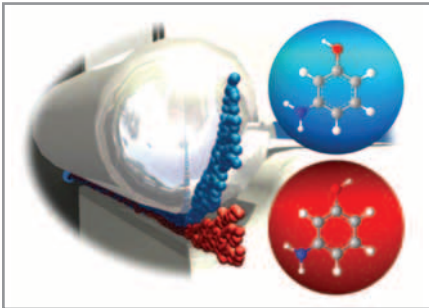
alenergieflächen gibt es in der Regel nur wenige Moden, welche die Reaktion leiten. Bis auf wenige einfache Moleküle haben wir nur sehr niedrigauflösende Messungen dieser Energieflächen. Trotzdem nutzen Chemiker diese Kraft chemischer Potentiale routinemäßig, ohne genaue Kenntnis des Prozesses.

Wir entwickeln neue Methoden und Wege, der chemischen Reaktionsdynamik zu folgen. Dazu entwickeln wir fortgeschrittene,

auf elektromagnetischen Feldern basierende, Steuerungsmethoden, um saubere Proben einzelner Molekülspezies darzustellen, basierend auf der räumlichen Trennung von molekularen Quantenzuständen, Strukturisomeren und Clustergrößen. Diese Proben identischer Moleküle werden im Raum fixiert, d.h. ausgerichtet und orientiert. Solche kontrollierten Ensembles sind ideale Proben für die Untersuchung der molekularen Struktur und Dynamik in neuartigen Experimenten zur Aufnahme molekularer

Fotos und Filme. Manipulation der Bewegung komplexer Moleküle.

Selektion von Strukturisomeren und Quantenzuständen



Elektrischer Deflektor zur Konformereseperation

Ausgehend von den wegbereitenden Arbeiten Otto Sterns und Walter Gerlachs wurden einzelne Quantenzustände von Atomen und kleineren Molekülen mittels inhomogener magnetischer und elektrischer Felder separiert. Wir haben diese Methoden erweitert und mit modernen Techniken auf komplexe Moleküle angewandt. Dies hat uns die erstmalige Separation einzelner Konformere und spezifischer Molekülcluster in kalten Überschallstrahlen ermöglicht. Für kleinere Moleküle erlaubt der elektrische Deflektor die Erzeugung von Proben von Molekülen, die alle im gleichen internen Quantenzustand sind, was viele neuartige Kontrollexperimente und Untersuchungen ermöglicht.



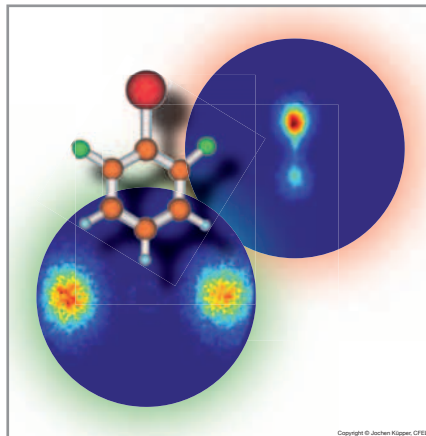
Elektrischer dynamischer Fokussierer zur Separation einzelner Quantenzustände großer Moleküle.

Mittels dynamischer Fokussierung können wir auch Proben einzelner Quantenzustände größerer Moleküle erzeugen, wie z.B. Proben von Benzonnitril, in denen alle Moleküle im absoluten rovibronischen Grundzustand sind. Die Erweiterung der Methode zum Neutrale-Moleküle-Äquivalent des Linearbeschleunigers hat es uns ermöglicht, sogar die Geschwindigkeit sol-

cher Moleküle zu manipulieren, was das Feld der ultrakalten Chemie im Quantenregime auch für solche komplexen Systeme eröffnen kann.

Ausrichtung und Orientierung komplexer Moleküle

Quantenzustandsselektierte kalte Proben ermöglichen die Laserausrichtung und Mischfeldorientierung auch komplexer Moleküle. In Zusammenarbeit mit den Arbeitsgruppen Stapelfeldt in Aarhus, Dänemark, und González Férez in Granada, Spanien, haben wir die Mischfeldorientierung anhand prototypischer großer Moleküle entwickelt. Wir haben demonstriert, unter welchen Bedingungen Moleküle ein- und dreidimensional orientiert werden können.



Ionenabbildungen als Nachweis der dreidimensionalen Fixierung der Difluoriodbenzen-Moleküle im Raum. Oben rechts ist eine Seitenansicht für Iodatome gezeigt, unten links eine Obenansicht der Fluoratome.

Mittels eines neuartigen Experiments in Hamburg haben wir die verschiedenen Ansätze der Laserausrichtung und -orientierung von Molekülproben in einem einzigen, reinen Quantenzustand analysiert. Dabei haben wir detaillierte interessante Erkenntnisse über die Quantenbewegung und -kontrolle der Rotationsfreiheitsgrade der Moleküle erhalten. Dies umfasst zum Beispiel die Erzeugung eines Wellenpakets von Pendelzuständen, dem quantenmechanischen Äquivalent des klassischen gebundenen Pendels, die Messung der Quantisierungsquantenzahl m_l von Molekülen im feldfreien Raum, und die kohärente Kontrolle der Molekülrotation mittels eines einfachen Laserpulses. In einer Kollaboration im Rahmen des *Centre for Ultrafast Imaging* entwickeln wir Laser und Experimente, um diese Kontrolle zukünftig bei beliebigen

Wiederholraten bis zum kontinuierlichen Betrieb zu betreiben.

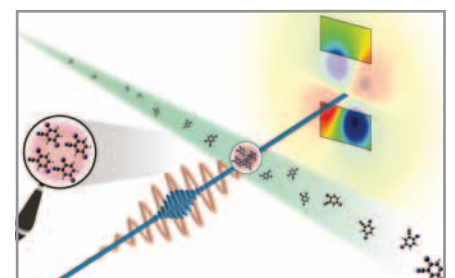
Ultraschnelle Abbildungsmethoden

Ionen- und Photoelektronenabbildungen ultraschneller Prozesse

Die selektierten und im Raum fixierten Proben sind einzigartig geeignet, um die Struktur und ihre Änderungen der Moleküle in Ionen- und Photoelektronenabbildungsmessungen im Molekülkoordinatensystem durchzuführen. Mit diesen Methoden haben wir z.B. die Rotationsdynamik von Molekülen in elektrischen Feldern analysiert, die Symmetrie und Knotenebene der höchsten Molekülorbitale von Benzonnitril direkt auf unseren Detektorschirm abgebildet, und den Elektronentransfer in hochangeregten Molekülionen nach Röntgenionisation zeitaufgelöst. Mittels Pump-Probe-Experimenten erlauben diese Methoden die direkte Verfolgung von chemischen Prozessen wie Isomerisierungen und das Umklappen molekularer Schalter.

Femtosekunden-Röntgenbeugung von Gasphasenmolekülen

Neue Strahlungsquellen wie die kürzlich entwickelten Freie-Elektronen Laser für ultrakurze intensive Röntgenpulse eröffnen völlig neue experimentelle Ansätze. Unter Anwendung der oben beschriebenen Techniken wie Quantenzustandselektion und Laser-Ausrichtung von Molekülen haben wir erstmals Röntgenbeugungsdaten von ausgerichteten, isolierten Molekülen in der Gasphase in einem Experiment am Freie-Elektronen Laser LCLS, USA, gemessen. Dies stellt die Grundlage für die zukünftige Beobachtung ultraschneller dynamischer Prozesse mit atomarer räumlicher und zeitlicher Auflösung dar. Parallel entwickeln wir Laborexperimente zur pikosekundenaufgelösten Elektronenbeugung, die es erlauben, jederzeit Strukturen mit atomarer Auflösung in unserem

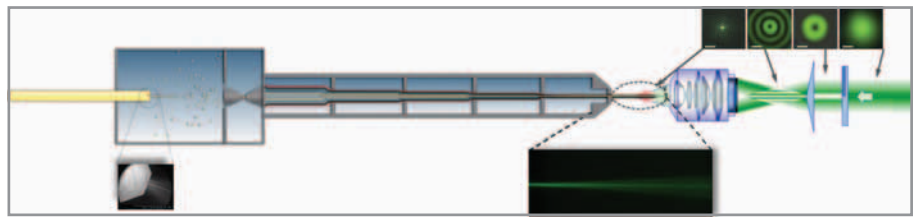


Schema des Messaufbaus zur Gasphasenröntgenbeugung kontrollierter Moleküle am Röntgenlaser LCLS.

Labor aufzunehmen, wobei die ps-Zeitauf-
 lösung hinreichend für die Dynamik vieler
 großer Moleküle ist und z.B. eine direkte
 Verfolgung von Faltungsbewegungen er-
 laubt. Im Zusammenhang mit der Selekti-
 on von Strukturen und der Ausrichtung im
 Raum können so klare Bilder hoher Auflö-
 sung erhalten werden.

Konformerenspezifische chemische Reaktionen

Wir haben die Beziehung von Struktur
 und Funktion der Konformere ausgewähl-
 ter komplexer Moleküle untersucht. In
 Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe
 Willitsch an der Universität Basel, Schweiz,
 haben wir zukunftsweisende Benchmark-
 Experimente durchgeführt, um die struk-
 turabhängige chemische Reaktivität zu
 untersuchen. Dabei haben wir die konfor-
 merspezifischen Geschwindigkeitskonstan-
 ten für die Reaktionen von *cis*- und *trans*-
 3-Aminophenol mit lasergekühlten und



Optische Pipeline zum Transport und zur Fokussierung sehr großer Moleküle, wie Zellen, Viren, oder Proteinkomplexen im dunklen Kern des hohlen Laserstrahls.

gefangenen Ca^+ Ionen bestimmt. Es ergibt
 sich, dass die Reaktion von *cis*-3-Aminophe-
 nol + Ca^+ doppelt so schnell abläuft wie die
 entsprechende Reaktion des *trans*-3-Ami-
 nophenols.

Zur Kontrolle biologischer Systeme

Eine optische Pipeline für mikroskopische Teilchen

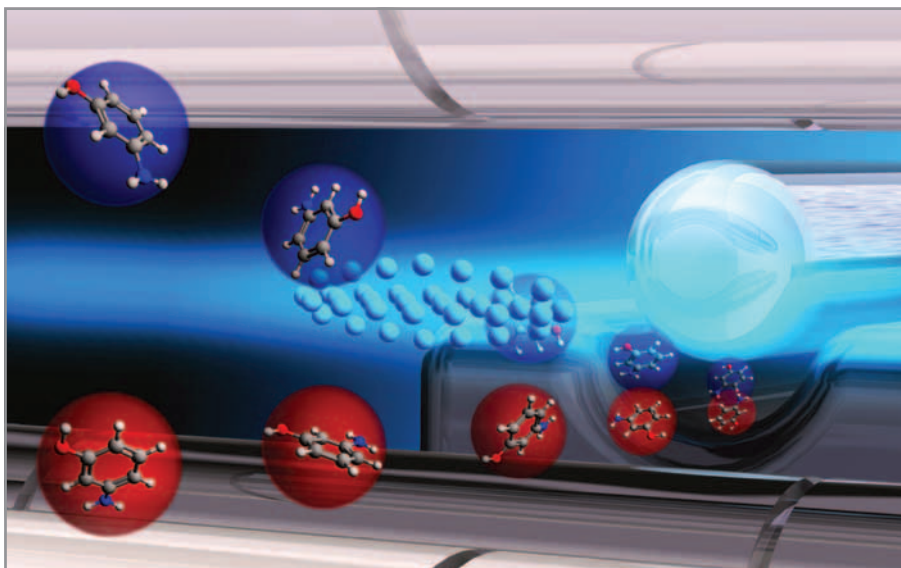
In Zusammenarbeit mit der CFEL Arbeits-
 gruppe von Henry Chapman entwickeln
 wir Methoden, um sehr große biologische

Objekte mittels spezieller Laserstrahlen zu
 manipulieren. Dazu erzeugen wir hohle,
 sogenannte Quasi-Bessel-Laserstrahlen, die
 es erlauben, die Teilchen durch Photonend-
 ruck und Photophorese im dunklen Kern
 des Laserstrahls zu fangen und so gezielt zu
 transportieren.

Im Rahmen eines neu anlaufenden Projekts
 des Europäischen Forschungsrats werden
 wir diese Kontrollexperimente erweitern,
 um die Sortierung der Teilchen nach Grö-
 ße und Aussehen sowie die Ausrichtung
 der komplexen Moleküle im Raum mittels
 weiterer elektromagnetischer Felder zu im-
 plementieren. Die erhaltenen kontrollierten
 Proben dieser biologischen Mikropartikel
 können dann mittels der oben beschriebe-
 nen Abbildungsexperimenten in höchster
 Auflösung während chemischer Reaktionen
 untersucht werden.

Weitere Informationen:

<http://desy.cfel.de/cid/cmi>



Konformerenspezifische Reaktionen zwischen den räumlich separierten Konformeren von 3-Aminophenol und lasergekühlten gefangenen Calciumionen.

Arbeitskreis Röntgen-Femtochemie, Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY

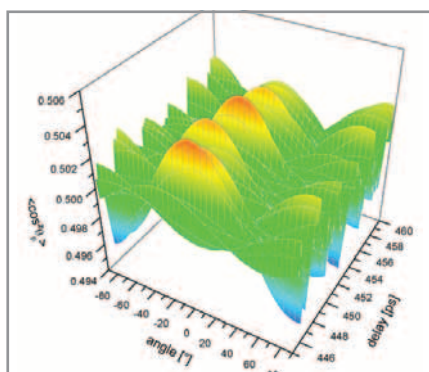
Leiter: PD. Dr. Tim Laarmann

Das zentrale Thema unserer Forschung ist die Untersuchung lichtinduzierter Strukturänderungen in molekularen Systemen und Clustern. Von besonderem Interesse sind dynamische Studien, in denen das Zusammenspiel zwischen elektronischer Bewegung und deren Kopplung an die Kernfreiheitsgrade die Funktion des Systems auf molekularen Längen- und ultraschnellen Zeitskalen bestimmt.

Unser Ziel ist es, den Elektronen und Atomen direkt bei der Bildung und Umorientierung von Orbitalen, molekularen Bindungen, der Kerndynamik oder bei Bandstrukturänderungen unter natürlichen und extremen Bedingungen zuzuschauen, sie zu manipulieren und falls möglich Kontrolle auszuüben (siehe Abbildung). Zu diesem Zweck nutzen wir sowohl brillante Lichtquellen wie Freie-Elektronen Laser (FEL) und Synchrotrons als auch optische Femtosekunden-Kurzpuls laser.

In der Vergangenheit haben wir eine Vielzahl prototypischer Studien an C_{60} Fullerenen, Wasserstoff-, Helium- und Edelgas-

mischclustern durchgeführt, wobei sich in zunehmendem Maße der Fokus auf die Untersuchung polyatomarer Bausteine biologisch relevanter Systeme richtet. Zu



Ein optischer Laserpuls induziert die Rotation eines Moleküls, welches nachfolgend vom intensiven Röntgenpuls als Funktion der Zeitverzögerung dissoziiert wird. Die Anisotropie der Fragmentation liefert Information zur Bewegung des quantenmechanischen Rotors in Echtzeit. Mit dieser Methode lassen sich in Zukunft minimale inter- und intramolekulare Kopplungen während einer chemischen Reaktion mit höchster Auflösung sichtbar machen.

nennen sind hier beispielsweise unsere Arbeiten an geschützten Aminosäuren, kleinen Peptiden und eingelagerten Molekülen oder Clustern mit definierten Solvatationschalen, insbesondere Wasser. Die Studien in der Gasphase erlauben die Kontrolle der lokalen geometrischen Struktur in der Nähe der lichtinduzierten Dynamik. Mikrosolvatation simuliert so Reaktionen in natürlicher Umgebung und schlägt damit die Brücke zu Untersuchungen in Lösung.

Neben diesen Forschungsfeldern der physikalischen Chemie bzw. chemischen Physik liegt ein weiteres Interesse in der Methodenentwicklung für nichtlineare Spektroskopie im Röntgenbereich. Der Transfer von modernen optischen Techniken wie beispielsweise Pulsformung und Frequenzmischung in den Röntgenbereich eröffnet hier ganz neue Perspektiven für elementenspezifische Analyse und Kontrolle in der Femtochemie. Nicht zuletzt konzentrieren sich unsere Aktivitäten auch auf die stetige Verbesserung der FEL-Pulseigenschaften in Bezug auf kürzeste Pulsdauern, höchste Stabilität und vollständige Kohärenz.

Arbeitskreis: Dynamik in Nanostrukturen

Leiter: Prof. Dr. Holger Lange

Der AK Lange ist eine neue, sich im Aufbau befindende Nachwuchsgruppe an der Universität Hamburg und dem Hamburg Centre for Ultrafast Imaging (CUI).

Forschungsschwerpunkt der Arbeitsgruppe soll die Untersuchung der Dynamik angeregter nanoskaliger Systeme mit ultraschnellen optischen Verfahren sein. Zur Zeit wird mit zeitaufgelöster Spektroskopie an Kombinationen aus Graphen und Halbleiternanokristallen im Kontext der Photovoltaik gearbeitet, zusätzlich an weiteren Halbleiter-Kohlenstoff Kombinationen, wie z.B. Halbleiternanokristalle an Kohlenstoffnanoröhren. Es werden auch verknüpfte Metall- und Halbleiternanokristalle untersucht, deren Dynamik sich fundamental von der der Einzelkomponenten unterscheidet. Das Verständnis der zugrundeliegenden Prozesse kann die Steuerung der optischen Eigenschaften neuartiger Materialien für optoelektronische Anwendungen erlauben. Die zurzeit genutzten Verfahren an der Physikalischen Chemie der Universität Hamburg sind die zeitaufgelöste Photolumineszenzspektroskopie mit Einzelphotonenzählen (*time-correlated single photon counting*) und die Spektroskopie mit einer *Streak*-Kamera. Beide Verfahren verfolgen zeitaufgelöst die strahlende Rekombination angeregter Ladungsträger. Auf nichtstrahlende Prozesse wie Ladungsträgertransfer, resonanter Energietransfer und Rekombination an Störstellen lässt sich indirekt aus der Änderung der Dynamik bei geänderten Systemparametern schließen. Ein direkter Zugang und eine Differenzierung sind nicht möglich. Die zeitaufgelöste Photolumineszenz liefert dafür Indizien, jedoch lässt sich z.B. der Ladungsträgertransfer nicht von konkurrierenden nicht-strahlenden Prozessen entkoppeln. Hier helfen sogenannte *pump-probe* Experimente, die die Beobachtung der Ladungsträger vor der Rekombination, also im angeregten Zustand, erlauben. In der AG Lange sollen diese, zur Photolumineszenz komplementären, Verfahren entwickelt und angewendet werden, um ein besseres Verständnis der Dynamik in immer komplexer werdenden Nanostrukturen zu erhalten.

Strukturen, welche die Kontrolle von Licht-Materiewechselwirkungen erlauben, erregen in der aktuellen Forschung ein ho-

hes Interesse. Kann man kontrollieren, wie Licht absorbiert wird, wie die absorbierte Energie durch das Material transportiert und abgegeben wird, ergeben sich viele Möglichkeiten, optoelektronische oder z.B. photovoltaische Anwendungen zu verbessern oder neu zu kreieren. Prinzipiell ist es von hohem Interesse zu verstehen, wie z.B. optisch oder elektrisch angeregte Ladungsträger von einer Nanostruktur zu einer anderen wechseln, welchen Einfluss erzeugte Quasiteilchen, wie zum Beispiel Plasmonen in Metallen, auf Strukturen in der Umgebung haben. Die Zeitskalen der beteiligten Prozesse sind typischerweise sehr kurz, im Picosekunden-, Femtosekundenbereich. Es werden daher Verfahren benötigt, die die Dynamik auf solchen Zeitskalen untersuchen können. Dies sind ausschließlich optische Verfahren.

Die Methoden müssen Zugang zu den Mechanismen der Anregung, wie auch der nachfolgenden Relaxation, schaffen und die Eigenschaften der angeregten Ladungsträger aufklären. In Abbildung 1 ist exem-

plarisch eine Kombination aus Halbleiternanokristallen und Graphen dargestellt.

Dabei möchte man verstehen, ob und wie optisch angeregte Ladungsträger in den Nanokristallen in das Graphen wechseln, welches als Elektrodenmaterial für eine Solarzelle dienen könnte. Die Änderung der Lumineszenz der Nanokristalle auf Graphen ist ein Indiz für einen Energie- oder Ladungsträgertransfer. Exemplarische zeitaufgelöste Experimente sind in Abbildung 2 dargestellt. Die Lumineszenz der regulären Bandkantenrekombination, welche bei den verwendeten PbS Nanokristallen eine Lebensdauer von Nanosekunden hat, ist auf dem Graphen sichtbar unterdrückt.

Dazu gibt es eine schnelle Komponente im Picosekundenbereich, welche auf einen schnellen Wechsel der Ladungsträger von den Nanokristallen zum Graphen schließen lässt.

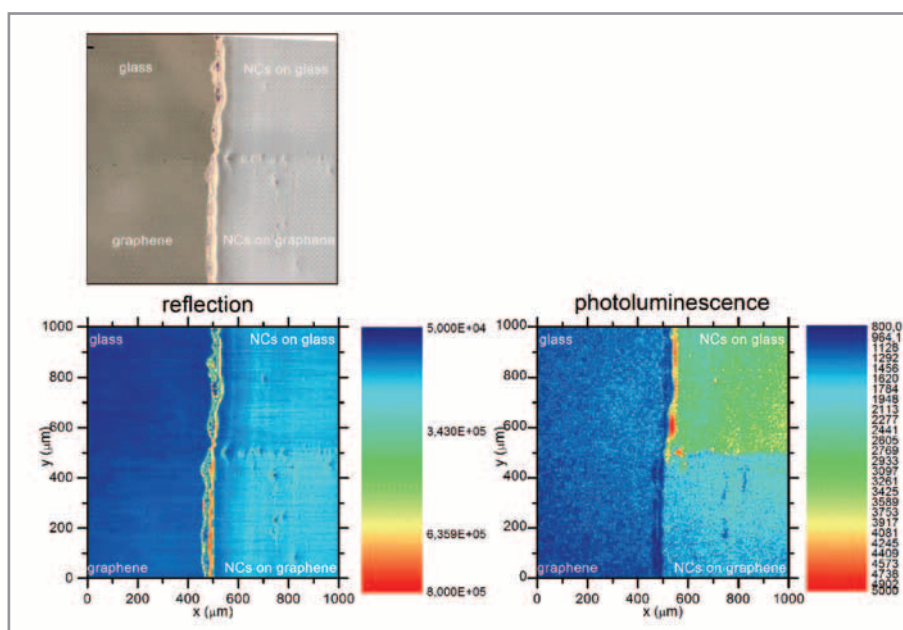


Abbildung 1: Spektroskopie an Halbleiternanokristallen auf Graphen. Oben links: Überblick über die Probengeometrie. Unten links: Reflektiertes Anregungslicht. Das Graphen durch die konstante Absorption von ca. 2% klar zu erkennen. Unten rechts: Photolumineszenzintensität. Die strahlende Rekombination der Nanokristalle auf Graphen wird unterdrückt.

See like you have
never seen before



Eine differenzierte Analyse dieses Prozesses ist mit Photolumineszenz nicht möglich. Auf vergleichbare Probleme stößt man

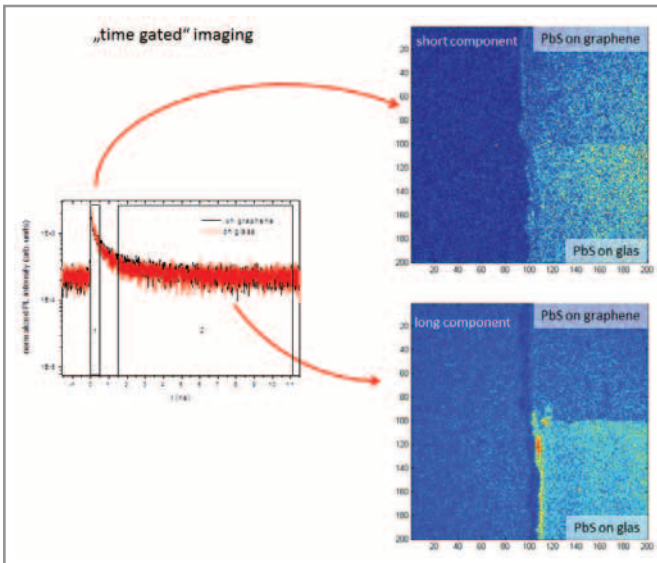
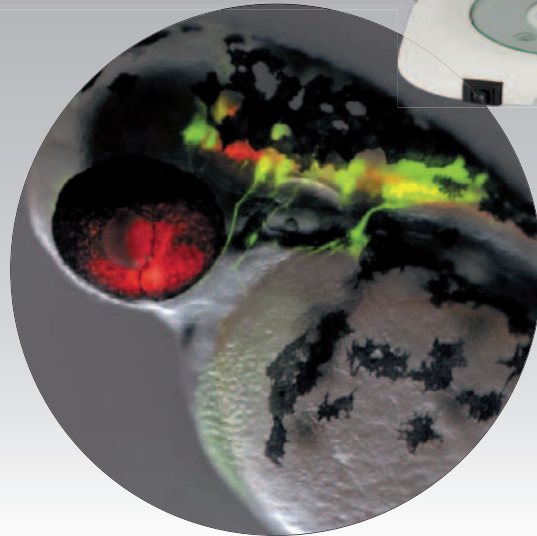


Abbildung 2: Zeitaufgelöste Photolumineszenz von Halbleiternanokristallen auf Graphen. Links: Zerfall der Photolumineszenz. Oben rechts: Schnelle Komponente des Zerfalls. Unten rechts: Lange Komponente des Zerfalls.

bei vielen anderen Materialien und Kombinationen, in denen die strahlende Rekombination mit mehreren möglichen nichtstrahlenden Prozessen konkurriert. Hier soll mit *pump-probe* Experimenten angesetzt werden. Hierbei macht man sich zu Nutze, dass sich die Absorption nach optischer Anregung ändert. Wenn die angeregten Ladungsträger in ihre Grundzustände zurückkehren, geht diese Änderung zurück. Dies kann man mit aufeinanderfolgenden *pump-* und *probe-*Pulsen zeitaufgelöst verfolgen und bekommt, da der Mechanismus der Relaxation auch nichtstrahlend sein darf, Zugang zu der Dynamik solcher Prozesse. Besonders vielseitig ist hier die *transient absorption* Spektroskopie. Dabei wird die zeitliche Änderung des gesamten Absorptionsspektrums verfolgt und man kann z.B. Relaxationen in Zwischenniveaus verfolgen. Es gibt aktuell eine Vielzahl an Fragestellungen mit ‚hybriden‘ (kombinierten) Materialien aus den Arbeitsgruppen Weller, Klinke und Mews. So fehlt z.B. der aktuell beforschten Kopplung von Anregungen in Halbleiternanokristallen an Goldnanokristalle, Exzitonen an Plasmonen, noch der Zugang zur Plasmondynamik. Für physikalische Grundlagenforschung wäre auch die Möglichkeit interessant, zeitaufgelöste Spektroskopie an einem System in einem angeregten Zustand durchzuführen. Ein geeigneter *pump-probe* Aufbau kann um einen Strahlengang erweitert werden, womit man z.B. Plasmonen anregen kann, worauf dann nach einer definierten Verzögerung das *pump-probe* Experiment erfolgt. In diese Richtung muss noch grundlegende Methodenentwicklung betrieben werden.



SMZ25

- Zoomweltmeister 25:1
- Sensationelle Auflösung: 1100 LP/mm
- Vollständige Ergonomie
- Stark verbesserte Fluoreszenz
- Hellere Bilder und höherer Kontrast

Arbeitskreis Nanooptik, Institut für Physikalische Chemie

Prof. Dr. Alf Mews und PD Dr. Tobias Kipp

Im Arbeitskreis Mews/Kipp beschäftigen sich etwa 20 Wissenschaftler mit der grundlegenden Untersuchung der elektrischen und optischen Eigenschaften von Nanostrukturen, die sich durch Variation von Strukturelementen wie Größe und Form ergeben. Dazu werden einzelne nanoskopische Objekte mit speziellen, im Eigenbau erstellten, optischen Mikroskopen untersucht.

Struktur und Fluoreszenz einzelner Halbleiternanopartikel

Da es selbst mit den besten derzeit bekannten Synthesemethoden nicht möglich ist, vollkommen einheitliche Nanostrukturen herzustellen, können detaillierte Struktur-Eigenschaftsbeziehungen nur durch Untersuchungen an einzelnen Objekten erforscht werden.

Prinzipiell kann mit der Methode der Einzelteilchenspektroskopie jeglicher Einfluss von Probeninhomogenität, die sich beispielsweise aus leicht unterschiedlicher Teilchengröße, unterschiedlicher Orientierung oder variierender Oberflächenbeschaffenheit ergibt, ausgeschlossen werden. Besonders groß sind diese Inhomogenitäten bei nanoskopischen Hybridstrukturen, z.B. bei Komplexen aus metallischen und halbleitenden

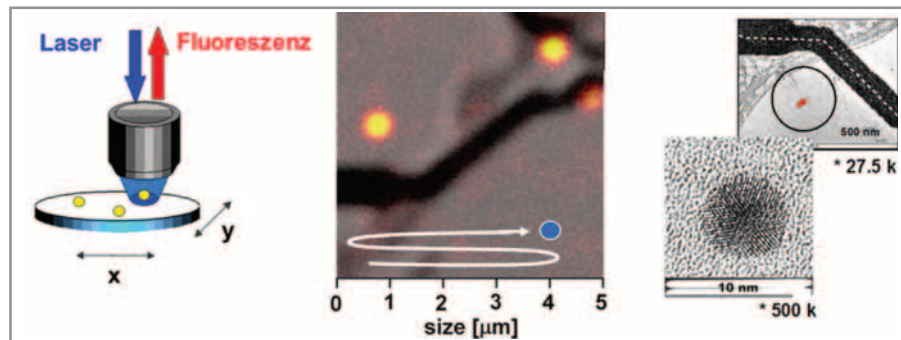


Abbildung 1: Fluoreszenz und Struktur identischer Nanokristalle

Abbildung 1 zeigt die Ergebnisse von Experimenten, bei denen identische Nanokristalle zunächst mit der Methode der konfokalen optischen Mikroskopie und danach mit der hochauflösenden Elektronenmikroskopie untersucht wurden. Bei der konfokalen Mikroskopie werden die Nanokristalle in hoch verdünnter Form auf ein Substrat aufgebracht, welches mit speziellen Stellelementen mit hoher räumlicher Präzision durch den Fokus eines Lasermikroskops bewegt wird (links). Befindet sich ein fluoreszierender Nanokristall im Fokus des Mikroskops, so kann die Position des Partikels anhand der Fluoreszenzintensität ermittelt werden (Mitte). Ist das Substrat zusätzlich mit Markierungen versehen, so kann derselbe Nanokristall in einem hochauflösenden Transmissionselektronenmikroskop (TEM) aufgefunden und analysiert werden (rechts). Diese Kombination von Methoden erlaubt es beispielsweise, die Größe der Teilchen mit deren Fluoreszenzwellenlänge oder die Kristallinität der Teilchen mit der Fluoreszenzintensität in Verbindung zu bringen.

tenden Nanokristallen. Hier können sowohl die halbleitenden, als auch die metallischen Teilchen eine unterschiedliche Größe aufweisen und zusätzlich kann deren Abstand variieren. Allerdings sind solche Hybridstrukturen von hohem wissenschaftlichem und auch technischem Interesse, da sich die Fluoreszenzeigenschaften der Halbleiterteilchen wesentlich durch die Anwesenheit von Metallteilchen beeinflussen lassen.

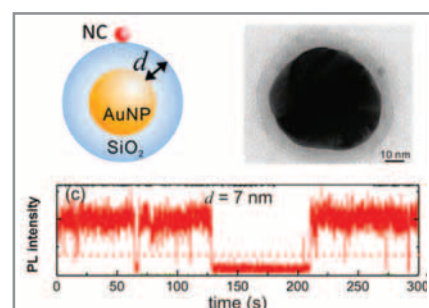


Abbildung 2: Fluoreszenz eines Halbleiterteilchens (NC) angebunden an ein SiO_2 beschichtetes Goldteilchen (AuNP)

Abbildung 2 zeigt im linken oberen Bereich eine Schemazeichnung eines mit SiO_2 ummantelten Goldteilchens (AuNP), auf das ein Halbleiterpartikel (NC) chemisch angebunden wurde. Im rechten oberen Bereich ist ein TEM-Bild einer entsprechenden realen Hybridstruktur abgebildet. Da das Goldteilchen eine Antennenfunktion für das vom Halbleiterteilchen absorbierte und ausgestrahlte Licht übernimmt, wird die Fluoreszenzintensität des Halbleiterpartikels deutlich verändert, was für einzelne Emittoren zum Beispiel anhand einer im unteren Bereich der Abbildung gezeigten transienten Fluoreszenzintensität erkennbar ist.

Elektrische und optische Eigenschaften einzelner Halbleiternanodrähte

Neben Halbleiter- und Metallnanokristallen werden in unserer Gruppe auch Halbleiternanodrähte synthetisiert und optisch sowie elektronisch charakterisiert.

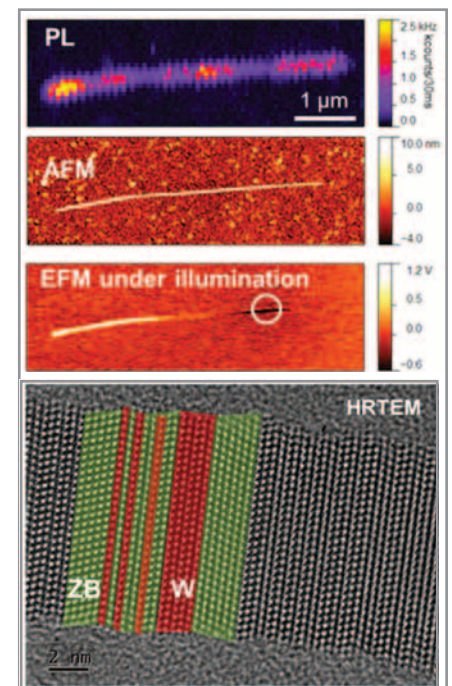


Abbildung 3: Kombination verschiedener mikroskopischer Techniken zur Charakterisierung von Halbleiternanodrähten basierend auf Fluoreszenz- (PL), Kraft- (AFM), elektrischer Ladung (EFM) oder Kontrast bei Durchstrahlung mit Elektronen (HRTEM)

Auch hier bedienen wir uns nass-chemischer Syntheserouten, bei denen unter Verwendung von Bismuth-Nanokatalysatoren Drähte mit Längen von mehreren Mikrometern erreicht werden, wobei deren Dicke weniger als 10 nm betragen kann. Derartige Strukturen zeichnen sich dadurch aus, dass sie aufgrund ihres geringen Durchmessers Änderungen der elektrischen und optischen Eigenschaften zeigen, die denen der Nanokristalle durchaus ähnlich sind. Zusätzlich weisen sie aber makroskopische Längen auf und sind daher elektrisch kontaktierbar, was besonders für elektrooptische Bauteile von großer Bedeutung sein kann.

Wiederum ist die direkte Korrelation der optischen Eigenschaften mit den Strukturmerkmalen von großer Bedeutung. In Abbildung 3 sind Ergebnisse verschiedener Mikroskopietechniken vergleichend dargestellt. Während ähnlich wie bei Halbleiternanokristallen die Fluoreszenz einzelner Nanodrähte direkt mit der Dicke und Kristallstruktur aus TEM-Messungen verglichen werden kann, ist es zusätzlich auf Grund der makroskopischen Länge der Nanodrähte möglich, zum Beispiel die Ladungsverteilung unter lokaler Beleuchtung mit Rastersondenmethoden zu untersuchen.

Um Nanodrähte direkt auf elektrisch leitfähigen Substraten zu erzeugen, bedienen wir uns verschiedener elektrochemischer Methoden.

Wie schematisch und anhand von AFM-Aufnahmen in Abbildung 4 gezeigt, lassen sich Bi-Katalysatorpartikel durch geschickte Wahl der elektrochemischen Parameter

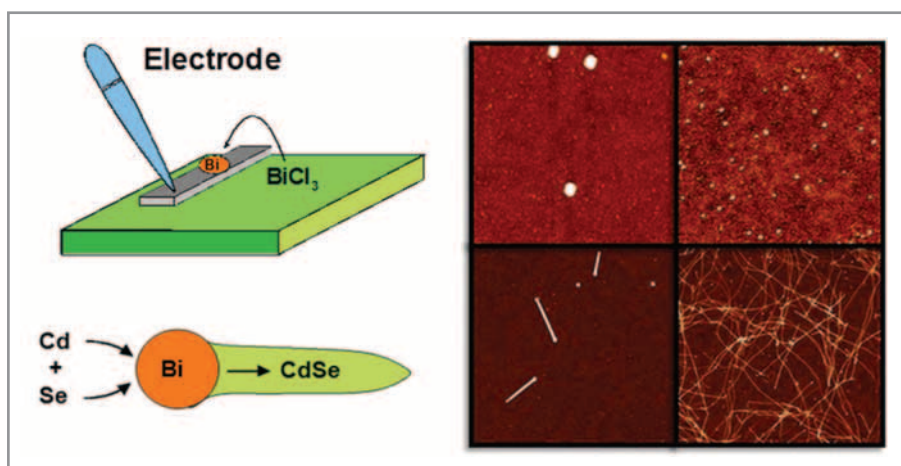


Abbildung 4: Direkte Synthese von Halbleiternanodrähten durch elektrochemische Abscheidung von Katalysatorpartikeln und anschließende Synthese in Lösung.

in unterschiedlicher Größe und Belegungsdichte abscheiden. Anschließend werden die mit Katalysatorpartikeln belegten Substrate der Reaktionslösung mit Cadmium- und Selen-Edukten ausgesetzt. Diese Präkursoren lösen sich zunächst in den Bi-Teilchen, bevor sie nach Übersättigung als CdSe-Nanodraht aus diesen herauswachsen. Es lassen sich so funktionale Flächenarrays herstellen, deren Potential für elektrooptische Anwendungen in Sensoren oder Solarzellen derzeit untersucht werden.

Hybridstrukturen aus Kohlenstoff- und Metallnanostrukturen

Schließlich werden elektrochemische Methoden auch genutzt, um funktionelle Hybridstrukturen auf der Basis sogenannter Kohlenstoffnanosheets herzustellen.

Die in Abbildung 5 gezeigten blattartigen Strukturen bestehen aus nur wenigen Schichten Graphen und wurden mithilfe der plasmaunterstützten chemischen Gasphasenabscheidung (PECVD) direkt auf leitfähigen Substraten erzeugt. Das im rechten Bereich gezeigte Ramanspektrum gibt Auskunft über mögliche Defektstrukturen und die Dicke der Graphenschichten. Zusätzlich können über elektrochemische Abscheidung Palladium-Nanopartikel direkt auf den Kohlenstoffnanosheets erzeugt werden. Das Potential solcher Hybridstrukturen aus Kohlenstoffnanowänden und Palladiumpartikeln für die mögliche Anwendung als Elektrode in Brennstoffzellen stellt einen weiteren Bereich der Forschungsaktivitäten dar.

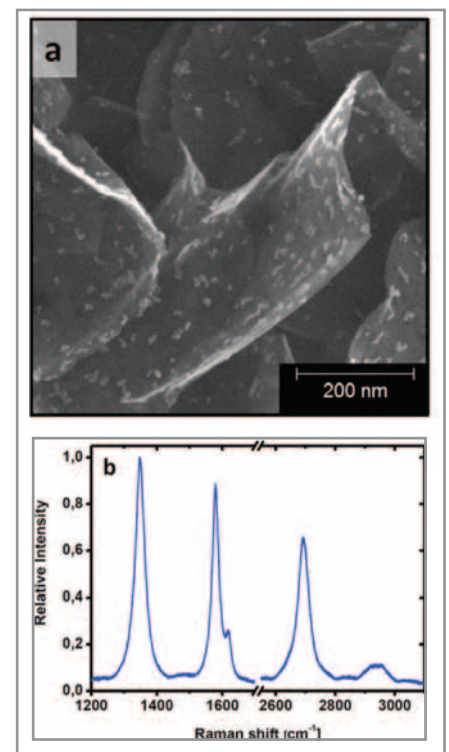


Abbildung 5: a) SEM Bild von Kohlenstoffnanowänden, die elektrochemisch mit Palladium Nanopartikeln belegt wurden. b) Ramanspektrum, aus dem die Qualität der Graphenwände abgeleitet werden kann

Optische Mikroröllchenresonatoren

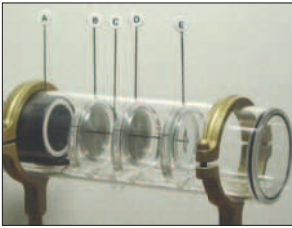
In einem weiteren Projekt werden nass-chemisch synthetisierte Halbleiternanokristalle mit optischen Mikroresonatoren verkoppelt. Bei den Resonatoren handelt es sich um Mikroröllchen, die mittels lithographischer Techniken durch das Ablösen von verspannten Halbleiterschichten von ihren Substraten hergestellt werden. Sie weisen typischerweise Durchmesser im Bereich weniger Mikrometer und Wanddicken von nur 50 bis 200 nm auf. Die Röllchenwand dient als Wellenleiter (siehe Abbildung 6a), so dass sich durch konstruktive Interferenz von azimuthal geführtem Licht optische Resonanzmoden ausbilden können.

Abbildung 6b zeigt eine Lichtmikroskopaufnahme eines Mikroröllchens. Die Fluoreszenzemission der in das Mikroröllchen eingefüllten CdSe-Nanokristalllösung ist in Abb. 6c gezeigt. Nanokristalle in unmittelbarer Nähe der Röllchenwand können an die optischen Moden koppeln. Im Fluoreszenzspektrum (Abb. 6d) drückt sich dies in der regelmäßigen Sequenz von resonanten Peaks aus, die das Emissionsspektrum des Nanokristallensembles überlagern.

Weiter auf Seite 30 →



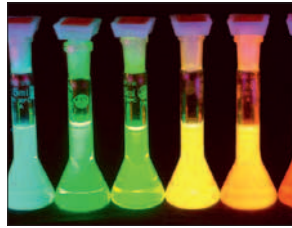
Das Institut für Phys



Otto Stern bekam 1943 für seine Molekularstrahlversuche in Hamburg einen Nobelpreis.



Weltweit erster Prototyp eines Nuklearreaktors 1940 von Paul Harteck.



„Die Hamburger Flaschen“ Nanotechnologie Heute.



H. Weller



A. Mews



V. Abetz



C

- Die Direktoren der Physikalischen Chemie
- W3 / C4 Professoren
- W1-W2 / C2-C3 / §17



1910 - 1918: Der 1. Weltkrieg.

1919: Gründung der Universität Hamburg.

1930: Bau des Instituts für Physikalische Chemie in der Jungiusstraße.

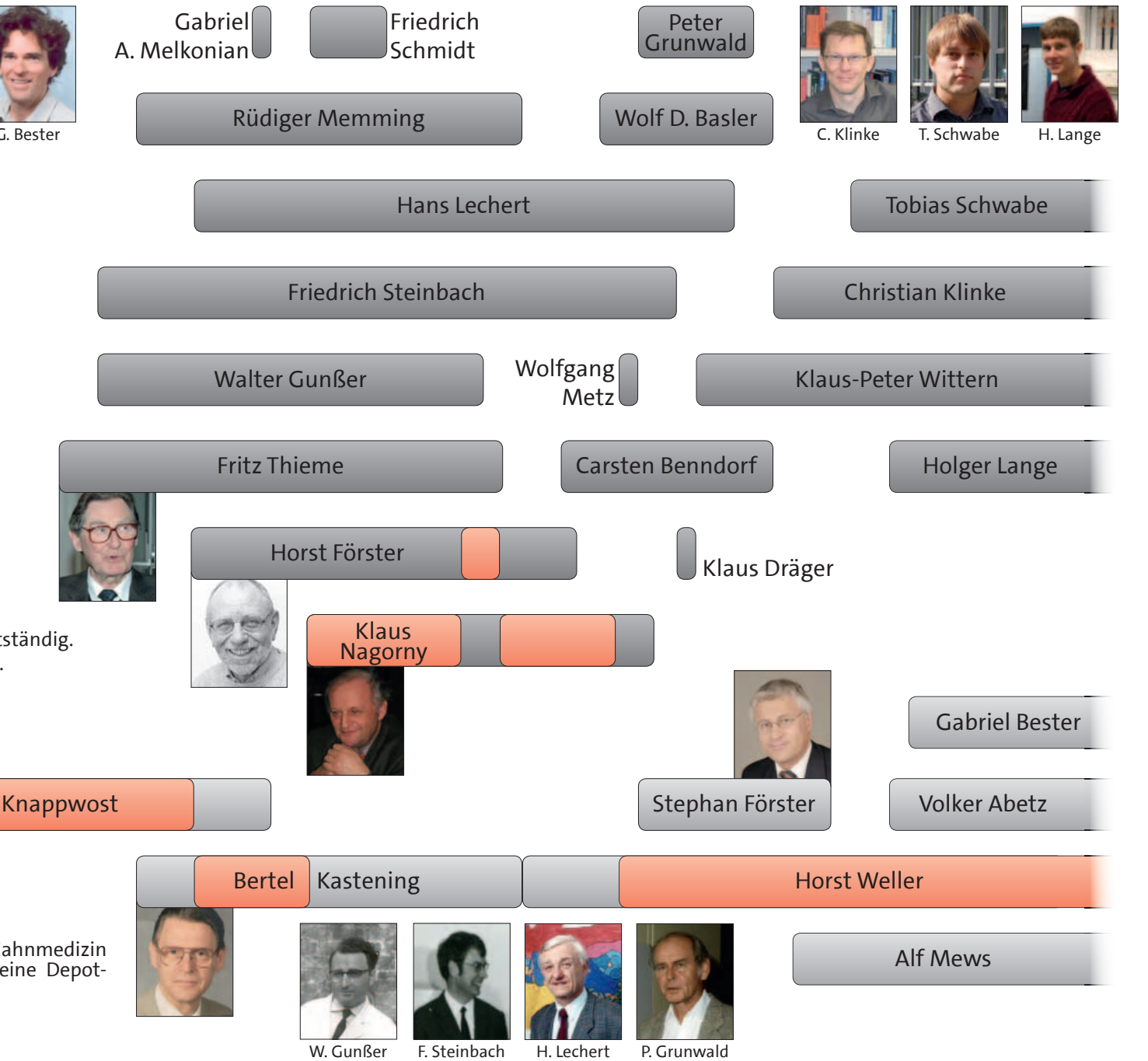
1933 - 1945: Der Nationalsozialismus vertrieb bedeutende Wissenschaftler wie **Otto Stern** oder **Immanuel Estermann**. Der zweite Weltkrieg hinterließ Hamburg in Trümmern. Auch die Chemie war auf Notunterkünfte wie Tannhöft angewiesen.

1962: Die große Flut.

1968: Universitätsreform. Das Chemische S... Physikalische Che...



Historische Chemie in Hamburg



1970 1980 1990 2000 2010 2020

Hansjörg Sinn war von 1978 bis 1985 parteiloser Hamburger Senator für Wissenschaft und leitete die Gründung der TU Harburg ein.

2005
Universitätsreform:
Neubildung der
Fakultäten.

2007
Gründung des CFEL.

2013
400 Jahre Chemie in
Hamburg.

2012
Der Exzellenzcluster CUI
wird gegründet unter
Beteiligung der PC.

2005
Gründung des Interdisziplinären Nano-
wissenschafts-Centrum Hamburg (INCH)
und des Centrum für Angewandte Nano-
technologie (CAN).

can INCH

can

Unsere Forschungen zielen auf die Untersuchung der Licht-Materie-Wechselwirkung

für Nanokristalle, auf die Herstellung neuartiger Nanokristall-Mikrolaser sowie

auf die Einbettung von Mikroröllchen-Resonatoren in Lab-on-Chip-Bauteilen.

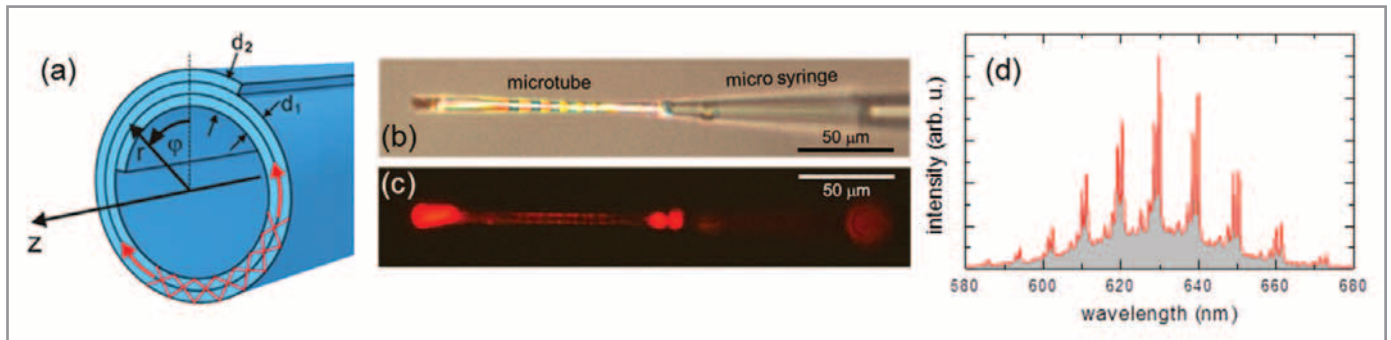


Abbildung 6: (a) Schema eines Mikroröllchenresonators (b) Lichtmikroskop- und (c) Fluoreszenzmikroskopaufnahme eines mit CdSe-Nanokristallen gefüllten Mikroröllchens. (d) Fluoreszenzspektrum eines optischen Mikroröllchenresonators mit CdSe-Nanokristallen als aktivem Emitter.

Die Bunsen-Gesellschaft

Ihr
NETZWERK

der
PHYSIKALISCHEN
CHEMIE



Die Bunsen-Gesellschaft verbindet seit mehr als 110 Jahren Hochschul- und Industrieforscher aus der physikalischen Chemie in ihrem Netzwerk. Mit mehr als 1200 Mitgliedern fördert die Bunsen-Gesellschaft den Nachwuchs, organisiert Veranstaltungen und engagiert sich in der Forschung.

www.bunsen.de



Deutsche Bunsen-Gesellschaft
für Physikalische Chemie e. V.

Femtosekunden-Atombeobachtung: Das Gedankenexperiment des Chemikers wird Wirklichkeit

R. J. Dwayne Miller, FRSC, FCIC

Direktor der Abteilung für atomar aufgelöste Dynamik, Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie, Co-Direktor des Hamburg Centre for Ultrafast Imaging, Abteilung für atomar-aufgelöste Dynamik

Die Forschungsaktivitäten konzentrieren sich auf Experimente, die neuste Fortschritte der Miller-Gruppe auf dem Gebiet ultraheller Elektronenquellen nutzen. Diese erlauben es buchstäblich, atomare Bewegung in den ersten Momenten einer chemischen Reaktion zu erhellen. Dies bringt das klassische Gedankenexperiment der Chemie in die Wirklichkeit: die Verfolgung atomarer Bewegungen, während ein Molekül Reaktionsbarrieren überwindet. Diese neuartigen Messungen können mit der Struktur des sogenannten Übergangszustandes verknüpft werden; letzterer existiert am Scheitelpunkt der multidimensionalen Potentialfläche, die das chemische System definiert. Diese Information ist wesentlich zur rationalen Entwicklung von Mitteln, mit denen Potentialbarrieren - und somit die betrachtete Chemie - gesteuert werden können.

Um atomare Bewegungen erfassen zu können, werden eine Zeitauflösung von etwa 100 Femtosekunden und eine gleichzeitige räumliche Auflösung unterhalb von Angström benötigt. Zusätzlich bedarf es einer sehr hellen Quelle, ein häufig übersehener Faktor, denn im Allgemeinen führen chemische Prozesse zu unumkehrbaren Veränderungen in der untersuchten Probe. Insbesondere das Auslösen der betrachteten Chemie selbst führt zu unumkehrbaren Zuständen. Daher bedarf es vieler Sonden gleichzeitig (also vieler Elektronen oder Photonen), um kurzlebige und unwiederbringliche Zustände einer Probe zu erfassen. All diese Bedingungen werden durch neuste Fortschritte in der Helligkeit der von uns entwickelten Elektronenquellen erfüllt. Dabei wurden neue Wege zur Erhaltung der Raum-Zeit-Korrelation in Femtosekunden-Elektronenpulsen entdeckt (durch eine vollständige Beschreibung der Coulomb-Wechselwirkungen bzw. Raumladungseffekte in intensiven Elektronenpulsen, s. Siwick et al. JAP 2002).

Die ersten atomar aufgelösten Filme struktureller Dynamik, die mit Femtosekunden-Elektronenbeugung aufgenommen wurden, konzentrierten sich auf strukturelle Übergänge in Festkörpern mit relativ kleiner Einheitszelle (Siwick et al. Science 2003, Ernstorfer et al. Science 2009, Harb et al. PRL 2008, Eichberger et al. Nature 2010). Die Quellenhelligkeit wurde kürzlich weiter erhöht und erlaubt nun auch die Untersuchung schwach streuender organischer Systeme. Diese Arbeiten erlaubten es, die enorme Reduzierung der atomaren Bewe-

gungen auf wenige Dimensionen während der Überwindung einer Potentialbarriere zu beobachten: die vorhergesagten 200 Freiheitsgrade während des Ladungstransferprozesses in $(\text{EDO-TTF})_2(\text{PF}_6)_n$ ließen sich durch Bewegungen entlang nur dreier Koordinaten beschreiben (Gao et al Nature 2013). Erste Studien an Zyklisierungsreaktionen haben eine ähnliche Reduzierung auf wenige Schlüsselmoden gefunden. Jedes Molekül hat seine eigene ausgeprägte Struktur und ein damit verknüpftes Vielkörper-Potential. Falls nun die Gleichgewichtsfluktuationen die relevanten Bewegungen darstellten, wäre jedes Molekül ein neues Abenteuer. Es ist jedoch die enorme Reduzierung auf wenige Reaktionskoordinaten, die die Übertragung von Konzepten innerhalb der Chemie erlaubt. Das Phänomen der Reduzierung ist verknüpft mit der Kopplung stark anharmonischer Moden. Diese Kopplung entsteht wie entfernt von Gleichgewichtsfluktuationen und führt so zur Chemie. Mit den entwickelten Instrumenten können wir nun die Bewegungen weit entfernt vom Gleichgewicht während der stofflichen Umwandlung beobachten und daraus die Region um den Übergangszustand rekonstruieren. Diese Informationen werden als neue Grundlage zur Verbesserung theoretischer Modelle in der Chemie dienen und können eine neue Grundlage in der Diskussion chemischer Reaktionsmechanismen liefern.

Parallel hat die Miller-Gruppe Photonecho-Methoden basierend auf Beugungsoptiken entwickelt, die häufig in der kohärenten multidimensionalen Spektroskopie

eingesetzt werden. Diese Methode wurde verallgemeinert, um optische Pulsformung und kohärente Kontrolle von Quantenzuständen zur Beeinflussung elektronischer Kohärenzen zu ermöglichen, analog zur Beeinflussung der Spin-Kohärenzen in der Kernspin-Magnetresonanzspektroskopie (Miller et al. Acc. Chem Res 2011). Solche Experimente liefern Informationen über Dynamik elektronischer Zustände, die wiederum über Kopplungen zwischen einem Molekül und seiner Umgebung Aufschluss geben.

Mit den obigen experimentellen Ansätzen ist es nun möglich, sowohl Kern- als auch elektronische Freiheitsgrade zu charakterisieren und ein vollständiges Bild der zeitabhängigen Wellengleichung zu erstellen. Mittels der neuentwickelten Werkzeuge hat sich die Forschung der Gruppe auf wohldefinierte Systeme mit zunehmender Komplexität konzentriert mit dem Ziel, die Beziehung zwischen Struktur und Funktion biologischer Systeme zu lösen, d.h. die topologischen Schlüsselmerkmale in der Struktur von Eiweißen zu bestimmen, die während der Umwandlung chemischer Energie in Arbeit die Funktion erzeugen.

Die einzelnen Forschungsprogramme und Instrumente seien im Folgenden beschrieben.

REGAE - Relativistische Elektronenkanone für atomare Erkundungen (Relativistic Electron Gun for Atomic Exploration)

REGAE ist ein gemeinsames Vorhaben der Miller- und der DESY-Beschleunigergruppe zur Entwicklung neuer Konzepte, um mittels relativistischer Elektronen direkt atomare Bewegungen zu beobachten. REGAE ist eine einzigartige Maschine, die unter Ausnutzung einer Rekomprimierungseinheit die kürzest möglichen Elektronenpulse an die Probe liefert und für diese Bauart die hellste Quelle ihrer Art darstellt. Das derzeitige Design ermöglicht 7 Femtosekunden-kurze Elektronenpulse (RMS) mit bis zu 10^7 Elektronen pro Puls und einer

räumlichen Kohärenz oberhalb von 30 nm. Man stelle sich einen Röntgenlaser im Labormaßstab vor: REGAE liefert Mittel für eine solche Vision.

Isolierte Quantensysteme – Gasphasen-Reaktionsdynamik mit atomarer Auflösung

Dieses Forschungsprojekt widmet sich der Erkundung molekularer Reaktionsdynamik und Fotophysik unter isolierten Bedingungen, wie sie in der Gasphase anzutreffen sind. Das übergeordnete Ziel ist es, bei wohldefinierten kleinen Molekülsystemen zu beginnen und bis hin zu biologischen Systemen unter kollisionsfreien Bedingungen zu kommen. So kann das Verhalten isolierter und von einem Bad umgebener Systeme kontrastiert werden, um die Effekte der Umgebung auf das Viel-Körper-Potential zu verstehen, das die chemischen und biologischen Prozesse bestimmt. Schlüsselprobleme der derzeitigen Forschung sind klassische chemische Reaktionen von der Bindungsbrechung, Ringöffnung und Isomerisierung hin zu Ladungstransfer-Prozessen, bei denen die gleiche molekulare Einheit in der Gasphase und in Lösung untersucht wird. Dabei ermöglichen neuste Entwicklungen in der Nanofluidik die Nutzung von Elektronen als Sonden in Flüssigkeiten. Der Vergleich desselben Systems mit und ohne Lösungsmittel wird Einsichten über Effekte der Solvatationsdynamik auf Reaktionskoordinaten auf atomarer Ebene ermöglichen – eines der Hauptziele der physikalischen Chemie.

Dynamisches TEM für kondensierte Phasen/Kohärente Elektronen-Bildgebung und Quellenentwicklung

Dieses Forschungsprojekt zielt auf *in-situ*-Beobachtungen der Struktur und Dynamik von chemischen Reaktionen in Lösungen ab. Die meiste Chemie und Biologie vollzieht sich in Flüssigkeiten, und diese scheinen auf den ersten Blick außerhalb der Reichweite von Elektronen als Sonden für Struktur und Dynamik zu liegen. Um diese Problematik zu lösen, erfolgten wesentliche Entwicklungen auf dem Gebiet der Nanofluidik (s. Mueller, J. Phys. Chem. Lett. 2013). Insbesondere wurde entdeckt, dass die flüssige Probendicke durch dynamische Stabilisierung (ähnlich einem rotierenden Teller auf einem Stock) auf wenige Angström stabilisiert werden kann. Direkte Bildgebung einzelner Nanoparti-

kel während Brownscher Bewegung und selbst einzelne biologische Makromoleküle wurden so mit einer Auflösung unterhalb eines Nanometers abgebildet. Diese Entwicklung eröffnet neue Möglichkeiten zur *in-situ*-Beobachtung struktureller Dynamik in Flüssigkeiten mit Elektronen. Konkrete Forschungsthemen umfassen die Entwicklung kohärenter Elektronenquellen für kohärente Bildgebung, Dynamik klassischer photochemischer Reaktionen in Lösung sowie *in-situ*-Studien der Funktionsmechanismen biologischer Systeme auf allen relevanten Zeit- und Längenskalen.

Forschung an zweidimensionalen Systemen und Oberflächen

Die Miller-Gruppe erweitert zur Zeit die Anwendung ultraheller hoch-kohärenter Elektronenquellen auf Reaktionsdynamik an Oberflächen. Mehrere Methoden zur Herstellung von Schichtsystemen mit Hilfe von Robotern werden zur Zeit verfolgt, um eine Art Filmträger zur Aufnahme atomarer Bewegung lichtinduzierter struktureller Dynamik zu schaffen. Von größtem Interesse dieses neuen Ansatzes ist die Erforschung von Oberflächenkatalyse, wobei die Fotokatalyse von herausragender Wichtigkeit ist. Eine derartige Herangehensweise erlaubt die Herstellung wohldefinierter Materialien zur Erforschung grundsätzlicher Fragestellungen. Die Gruppe ist darüber hinaus auch eingebunden in Entwicklungen von Nanospitzen-basierten Elektronenquellen zur Erzeugung vollständig kohärenter Elektronenstrahlen, die zur holographischen Rekonstruktion von Reaktionsintermediaten und der Verfolgung von Reaktionspfaden unter wohldefinierten Bedingungen genutzt werden können.

Dieser Forschungsbereich wird die Erforschung ‚dimensionaler Einschränkung‘ molekularer Dynamik ermöglichen sowie der Erforschung von Reaktionen dienen, in denen die Kontrollmöglichkeiten sich auf die Ebene eines einzelnen Atoms bzw. einer molekularen Schicht hinbewegen.

Kohärente multidimensionale Spektroskopie: Quantenzustandsdynamik

Diese Fragestellung der Gruppe adressiert primär die Natur der Quantenkohärenz in biologischen Systemen und wie es in solch komplexen Strukturen möglich ist, die stochastischen Fluktuationen entlang von der Evolution optimierten Reaktionskoordinaten

ten zu lenken. Die Miller-Gruppe entwickelte dabei multidimensionale Spektroskopie in Kombination mit kohärenter Kontrolle als Methode zur Entschlüsselung komplexer Dynamik. Selbst wenn man sich anstrengt, wohnt einem die natürliche Tendenz inne, sich Kernbewegungen anhand von ‚Kugeln an Federn‘ vorzustellen. Die obige neue Form der Spektroskopie in Kombination mit Femtosekunden-Elektronenbeugung wird eine unauslöschliche Verbindung zur Wellennatur der Kernbewegungen schaffen.

Theorie : Zeitabhängige Ab-Initio-Methoden für Reaktionsdynamik und kohärente Spektroskopie

Diese Untergruppe arbeitet an neuen Ansätzen zur Implementierung zeitabhängiger *ab-initio*-Methoden, um theoretische Modelle zum Verständnis atomar aufgelöster struktureller Dynamik zu erarbeiten. Die Theorie ist ein wesentlicher Teil der Forschung für die Verfeinerung struktureller Modelle. Sie bietet jedoch auch Einsicht in die beteiligten Kräfte. Diese Methodenentwicklung hat auch zum Ziel, mögliche Experimente mittels Modellierung lichtinduzierter Chemie unter barrierelosen Bedingungen zu identifizieren, die wesentlich zur Beobachtung korrelierter atomarer Bewegungen während des Durchlaufens reaktiver Kreuzungspunkte sind. Einher mit diesen Methoden geht in natürlicher Weise die Berechnung hochverfeinerter Potentialflächen, die zur Berechnung der Erwartungswerte der experimentellen Observablen multidimensionaler Spektroskopie genutzt werden können, insbesondere zum Verständnis des Einflusses der Umgebung auf die Dynamik des untersuchten Systems.

Fundamentale Grenzen minimal-invasiver Chirurgie und Biodiagnostik

Diese Untergruppe nutzt das neue Verständnis stark getriebener Phasenübergänge, basierend auf den ersten molekularen Filmen, in denen relative atomare Bewegung festgehalten wurde, die schneller als diffusive Stoßprozesse waren (Siwick et al Science 2003). Ein speziell entwickeltes Lasersystem zur Ausnutzung dieser Erkenntnisse nennen wir den Pikosekunden-Infrarot-Laser- oder kurz PIRL-Skalpell. Kurz gesagt, wurden die Pulsparameter des Lasers derart entwickelt, dass sie der impulsiven Antwort von Wasser unter genügend starkem Supraheizen angepasst sind, d.h.

es wurde sichergestellt, dass der Laser-getriebene Phasenübergang (flüssig zu gasförmig) und die daraus resultierenden Abtragungskräfte auf nur 5-10 Wassermoleküle wirken. Diese Art der Abtragung umgeht vollständig das Problem der Kavitation und daraus resultierenden Schockwellenschäden im umgebenden Gewebe bzw. Material. Dieses neue Laserkonzept ist die erste Methode, die das Schneiden von Gewebe ohne Narbenbildung ermöglicht und die damit endlich die von Laser-Skalpellen erhoffte Grenze der (Einzelzell-) minimalinvasiven Chirurgie erreicht. Diese Forschung wird mittlerweile von einem ‚Advanced Grant‘ des Europäischen Forschungsrates gefördert und beinhaltet ein Netzwerk von über 50 Chirurgen, die neue Anwendungen in der Neurochirurgie, der Stimmbandheilung, sowie deren Verwendung beim Einsatz von Mikrocochlea-Implantaten und/ oder zur Restrukturierung kritischer Blutgefäße untersuchen. Unter Ausnutzung dieses Abtragungsprozesses konnte auch gezeigt werden, dass Eiweiße aus Flüssigkeiten vollständig intakt in die Gasphase überführt werden können. Dies wurde durch massenspektroskopische Analyse des Abtragungsprozesses bestätigt. Neue bildgebende massenspektroskopische Verfahren werden zur Zeit ebenfalls entwickelt, die zum Ziel haben, die Sensitivität dieser chemischen Analyseverfahren bis hin zum Nachweis einzelner Eiweißmoleküle zu treiben, und dies unter Ausnutzung der hohen Effizienz, mit der Eiweiße in die Gasphase überführt werden können. PIRL öffnet so das Tor zur massenspektroskopischen *in-situ*-Bildgebung und damit zur Biodiagnostik einzelner Eiweißmoleküle. Solche Entwicklungen beschleunigen die Biodiagnostik um Größenordnungen (daher wird weniger Zeit für Probenpräparation und auch weniger Proben insgesamt benötigt). Diese Art neuer Diagnostik kann während laserchirurgischer Eingriffe Informationen in Echtzeit zum Operationsstatus liefern und stellt so eine molekulare Rückkopplung zum Chirurgen her. Chirurgen nutzen zur Zeit nur den Tast- und Sehsinn während ihrer Eingriffe. Demnächst steht ihnen ein weiterer ‚Sinn‘ zur Verfügung, eine Art ‚Geruchssinn‘ auf molekularer Ebene.

All diese potentiellen Anwendungen sind aus der Grundlagenforschung heraus entstanden, die wiederum durch das Ziel, strukturelle Übergänge auf atomarer Ebene beobachten zu wollen, getrieben wurden. Dies ist Zeugnis der großen Bedeutung von Grundlagenforschung. Man kann niemals vorhersagen, wohin neue Einsichten führen.



VERTEX Serie

FT-IR Spektrometer für Forschung & Entwicklung

Bruker bietet die führende FT-IR Technologie und die Kompetenz für zuverlässige und zerstörungsfreie Halbleiterforschung und Qualitätskontrolle. Profitieren Sie von 40 Jahren Erfahrung im Bereich der IR-basierten Halbleiteranalytik.

- VERTEX 70 und VERTEX 70v: permanent justiertes RockSolid™ Interferometer und neue optische Breitbandkomponenten für mittleres und fernes Infrarot.
- VERTEX 80 und VERTEX 80v: UltraScan™ Interferometer mit hochpräzise, linearen Gaslager und TrueAlignment Technologie.
- Vollautomatischer Strahlenteilerwechsel für das VERTEX 80v Vakuumspektrometer.

Weiter Informationen
finden Sie unter:
www.bruker.de/optik

Bruker Optik GmbH
Rudolf-Plank-Str. 27
76275 Ettlingen
Tel. +49 7243 504 2000
Fax. +49 7243 504 2050
E-Mail: info@brukeroptics.de

UHH-Max-Planck-Forschungsgruppe Ultraschnelle Moleküldynamik

Die unabhängige Arbeitsgruppe für *Ultraschnelle Moleküldynamik* erforscht chemische Umwandlungen in molekularen Systemen mit modernsten Ultrakurzzeitmethoden der Spektroskopie. Der Schwerpunkt der Forschungsaktivitäten liegt im Bereich der physikalischen und (bio)chemischen Prozesse in flüssiger Phase. Die zeitaufgelösten Experimente haben zum Ziel, die Umwandlungen in Materie auf den relevanten Längenskalen unterhalb von Angström und mit einer Zeitauflösung unter 100 Femtosekunden spektroskopisch zu verfolgen. Dabei nutzt die Gruppe einen Spektralbereich, der sieben Größenordnungen umfasst, von THz- bis hin zu harten Röntgenstrahlen (mit entsprechenden Photonenenergien von 1meV bis über 10keV). Während THz-Pulse besonders sensitiv auf intermolekulare Schwingungen und damit auf die Wechselwirkungen zwischen den Molekülen des Lösungsmittels und des gelösten Stoffes sind, liefert die Femtosekunden-Infrarotspektroskopie Informationen über die Struktur innerhalb eines Moleküls. Elektronische Anregungen können sehr gut mit sichtbarer und ultravioletter Strahlung verfolgt werden, und atomar aufgelöste Informationen über die Valenzladungsdichte, den Spinzustand, und die umgebene Struktur sind wiederum mit Röntgenpulsen in einzigartiger Weise zugänglich. Damit bearbeitet die Gruppe folgende Forschungsfelder:

Chemie und Magnetismus von Übergangsmetall-Komplexen –Materialien

Übergangsmetalle zeichnen sich durch das flexible Verhalten ihrer Valenzelektronen aus, die die Physik und Chemie

von Übergangsmetall-haltigen Stoffen in vielfältiger Weise bestimmen. Während Übergangsmetalloxide in komplexen Materialien wie Supraleitern, neuen Speichermedien mit kolossalem Magnetowiderstand wesentlich sind, sind es in der Chemie die ‚artverwandten‘ Übergangsmetallkomplexe, die in der Synthese, Katalyse, und in Metallproteinen eine herausragende Rolle inne haben. Durch die Fähigkeit, mit relativ kleinem Energieaufwand und ohne Brechung von chemischen Bindungen Elektronen aufzunehmen und abzugeben, erschließen sich ungeahnte Möglichkeiten, die in biologischen Prozessen (wie zum Beispiel der Photosynthese) von entscheidender Bedeutung sind. Femtosekunden-Röntgenspektroskopie, wie sie in Lösungen insbesondere im weichen Röntgenbereich von Nils Huse und Robert Schoenlein zum ersten Mal gezeigt wurde, erlaubt, die Chemie von Übergangsmetallen mit atomarer Auflösung detailliert in den wesentlichen Freiheitsgraden (Spinzustand, Ladungsdichteverteilung, strukturelle Änderungen mit Pikometer-Auflösung) zu erforschen.

Solvatation und Wechselwirkungen in flüssiger Phase mit atomarer Auflösung

Als weiteres Forschungsthema bearbeitet die Gruppe die Wechselwirkungen zwischen Molekülen in flüssiger Phase. Dabei geht es vor allem um die Beeinflussung der elektronischen Struktur der gelösten Stoffe, um zu verstehen, in welcher Art und Weise die Fluktuationen des Lösungsmittels die Valenzladungsdichte der gelösten Stoffe und damit ihr chemisches Verhalten beeinflusst. Dies mündet in der Fragestellung, ob es möglich ist, unter bestimmten

Bedingungen chemische Umwandlungen gezielt durch ultrakurze Schwingungsanregungen auszulösen. Hier nutzt die Gruppe die gesamte Breite der Schwingungsspektroskopie, um durch Kombination von THz/Infrarot und Röntgenstrahlung in Femtosekunden-Experimenten auf neuen Wegen unerreichte Informationen zugänglich zu machen.

Dynamik Wasserstoffverbrückter Systeme

Wasserstoffbrücken sind in ihrer Art einzigartig, weil sie schwach genug sind, um ständig zu brechen und sich neu zu formieren, aber gleichzeitig sehr gerichtet und damit stark genug, unser Erbgut außerhalb der Zellteilung stabil und doch zusammenzuhalten, die Bausteine und Reaktionszentren von Eiweißen zu formen und Wasser als einzigartigem Lösungsmittel eine Vielzahl an Anomalien zu geben. Um zu verstehen, wie Wasserstoffbrücken die Dynamik während des Ablaufs chemischer Reaktionen beeinflussen, nutzt die UMD-Gruppe Schwingungs- und Röntgenspektroskopie, um den Einfluss struktureller Anregungen auf das elektronische System (also die Valenzladungsdichte) mittels Röntgenspektroskopie zu verstehen.

Investieren in die Zukunft.

- ✗ Ideen
- ✗ Kompetenz
- ✗ Erfahrung


VMK

Verlag für Marketing und Kommunikation GmbH & Co. KG

Faberstraße 17 | 67590 Monsheim

[fon] ++49.(0)6243.909.0
[fax] ++49.(0)6243.909.400
[mail] info@vmk-verlag.de
[web] www.vmk-verlag.de

VMK



Druckerei GmbH

Faberstraße 17 | 67590 Monsheim

[fon] ++49.(0)6243.909.110
[fax] ++49.(0)6243.909.100
[mail] info@vmk-druckerei.de
[web] www.vmk-druckerei.de



www.vmk-verlag.de

Ihre Partner für Publikationen

UND

Drucksachen aller Art

im Innern von Planeten und Sternen vorliegen. In enger Verbindung dazu steht unsere Erforschung von dichten Plasmen, die sich weit weg vom Gleichgewicht befinden, und von Prozessen, die zu neuen Materiezuständen führen.

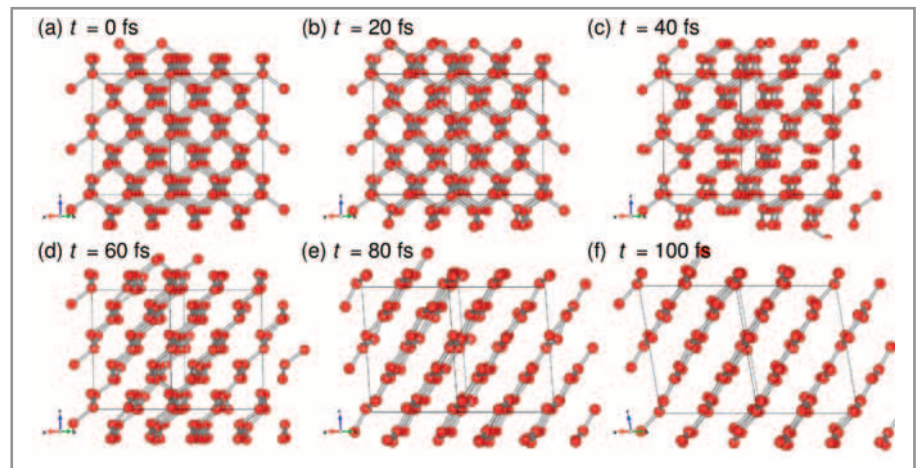


Abbildung 3: Ultraschnelle, röntgeninduzierte Konversion von Diamant zu Graphit.

Arbeitskreis Struktur und Dynamik kalter Moleküle, Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie am Center for Free-Electron Laser Science

Leiterin: Dr. Melanie Schnell

Die unabhängige Max-Planck-Forschungsgruppe umfasst acht Mitarbeiter. Wir beschäftigen uns mit der Untersuchung der Struktur, der Chiralität und der Dynamik polarer Moleküle und ihrer Komplexe in der Gasphase. Ziel ist es, den Zusammenhang zwischen Struktur und Chiralität auf der einen Seite sowie Dynamik auf der anderen Seite besser zu verstehen. Dafür entwickeln und verwenden wir verschiedene spektroskopische Methoden, mit einem Schwerpunkt auf Breitband-Rotationsspektroskopie. Kürzlich gelang es uns beispielsweise, Rotationspektroskopie so weiterzuentwickeln, dass wir die Enantiomere chiraler Moleküle voneinander unterscheiden und ihre absolute Konfiguration bestimmen können.

In einem weiteren Forschungszweig beschäftigen wir uns mit dem Forschungsgebiet kalter Moleküle, d.h. wir entwickeln neue Methoden, um Molekülpakete kontrolliert abzubremesen und schließlich zu fangen. Die gefangenen Moleküle stehen dann für weiterführende Experimente, wie z.B. der Präzisionsspektroskopie, zur Verfügung.

Enantiomerenunterscheidung chiraler Moleküle

Mit der Breitband-Rotationsspektroskopie, die erst vor einigen Jahren von der Arbeitsgruppe um Prof. Brooks Pate, University of Virginia, entwickelt wurde und seither das Feld der hochauflösenden Spektroskopie signifikant verändert, kann nicht nur ein Großteil des gesamten Rotationsspektrums polarer Moleküle aufgenommen werden. Es eignet sich auch hervorragend für die Kombination mit anderen Strahlungsquellen in Doppelresonanz-Experimenten. In Zusammenarbeit mit Dr. Dave Patterson and Prof. John M. Doyle von der Harvard Universität haben wir eine neue Methode entwickelt, die auf richtungsabhängiger Doppelreso-

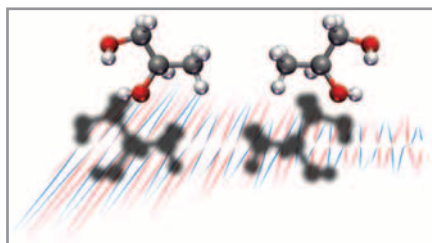


Abbildung 1: Die Enantiomere chiraler Moleküle, hier 1,2-Propandiol, können mit zweifach resonanter Breitband-Rotationsspektroskopie anhand einer Phasenverschiebung von 180° im Freien Induktionszerfall unterschieden werden.

nanz-Rotationsspektroskopie basiert. Mit ihr können wir unter anderem die Enantiomere chiraler Moleküle direkt unterscheiden und einen eventuellen Enantiomerenüberschuß bestimmen^{1,2}. Dabei nutzen wir aus, dass sich die Strukturen chiraler Moleküle und damit auch ihre Dipolmomente spiegelbildlich zueinander verhalten, d.h., das Produkt der drei Dipolmomentkomponenten $\mu_x\mu_y\mu_z$ bezogen auf das Molekülträgheitsachsensystem hat für die beiden Enantiomere entgegengesetzte Vorzeichen. In unseren Experimenten können wir diesen Unterschied in einem Phasenunterschied von 180° im gemessenen Emissionssignal sichtbar machen. Dieser Phasenunterschied ist für die beiden Enantiomere des 1,2-Propandiols schematisch in Abbildung 1 dargestellt. Zudem ist unsere Methode hochgradig mischungskompatibel, so dass wir mehrere chirale Moleküle gleichzeitig untersuchen können. Zur Zeit arbeiten wir daran, die Methode auf größere Moleküle mit mehreren stereogenen Zentren zu erweitern und ein verlässliches Protokoll für die Bestimmung der absoluten Konfigurationen der Enantiomere zu entwickeln.

Struktur und Dynamik polarer Moleküle

Mit Hilfe der Rotationsspektroskopie können wir die Strukturen polarer Moleküle in der Gasphase hochgenau bestimmen.

Darüber hinaus sind aber auch Informationen über andere Moleküleigenschaften, wie dem Dipolmoment, der intramolekularen Dynamik sowie über die chemische Umgebung einzelner Kerne und damit über den Bindungscharakter durch eine Analyse der Kernquadrupolkopplung zugänglich. Wir konzentrieren uns zur Zeit vornehmlich auf biologisch relevante Moleküle, wie Terpene, Aminosäuren und Zucker, und ihre Komplexe. Wir haben kürzlich eine Laserablationsquelle aufgebaut, mit der wir auch empfindliche Biomoleküle wie Zucker und Aminosäuren in die Gasphase bringen können. Wir interessieren uns insbesondere auch für ihre Komplexe, mit denen wir Grundprinzipien der Molekülerkennung an Modellsystemen untersuchen.

Durch die sehr geringen Linienbreiten der Rotationsübergänge sowie der hohen Empfindlichkeit der Rotationskonstanten (über die Trägheitsmomente) auf schon kleine Strukturänderungen sind Rotationsspektren wie Fingerabdrücke für polare Moleküle. Selbst Konformere und Isotopologe können klar unterschieden werden. Durch diese Molekülspezifität eignet sich die Rotationsspektroskopie hervorragend für die Analyse komplexer Molekülmischungen, wie beispielsweise eine Probe kommerziell erhältlichen Teebaumöls, das vornehmlich aus verschiedenen Terpenen besteht.

Auch Reaktionsprodukte, wie zum Beispiel von Fragmentierungen oder Photodissoziationen, können anhand ihrer Rotationspektren analysiert werden. Wir haben kürzlich den Schmerzmittelwirkstoff Ibuprofen untersucht. Neben vier verschiedenen Konformeren in der Gasphase konnten wir auch Fragmentierungsprodukte identifizieren, die aus Abspaltung von CO₂ resultieren. Durch dezidierte spektroskopische Bestimmung der vorhandenen Spezies als Funktion der Temperatur sollten auch Rückschlüsse auf den Fragmentierungsmechanismus möglich sein.

¹ D. Patterson, M. Schnell, J.M. Doyle, *Nature* 497 (2013) 475-477

² V.A. Shubert, D. Schmitz, D. Patterson, J.M. Doyle, M. Schnell, *Angew. Chemie Int. Ed.* 53 (2014) 1152-1155

Kalte und abgebremste Moleküle in der Gasphase

In einem weiteren Forschungszweig beschäftigen wir uns mit kalten, abgebremsten Molekülen. Wir entwickeln neuartige Methoden, mit denen auch größere Moleküle in sogenannten hochfeldsuchenden Zuständen kontrolliert abgebremst und gefangen werden können, um sie so für weiterführende Experimente zugänglich zu machen. Wir konzentrieren uns dabei insbesondere auf die Möglichkeiten, die uns maßgeschneiderte, intensive Mikrowellenfelder bieten. Erst kürzlich konnten wir in Zusammenarbeit mit Prof. Gerard Meijer (Radboud Universität Nijmegen) einen neuartigen Mikrowellenabbremsdemonstrieren^{3,4}. Zur Zeit arbeiten wir daran, das Konzept auf größere Moleküle, wie 4-Aminobenzonitril, zu erweitern.

³ H.Odashima, S. Merz, K. Enomoto, M. Schnell*, G. Meijer, Phys. Rev. Lett. 104 (2010) 253001.

⁴ S. Merz, N. Vanhaecke, W. Jäger, M. Schnell*, G. Meijer, Phys. Rev. A 85 (2012) 063411.



think tesa

>> Ihre Karriere bei der tesa Gruppe.

Mehr als nur ein Klebefilm.

Mit einem Klebefilm fing alles an. Heute entwickeln wir als eigenständiges Technologie-Unternehmen selbstklebende Systemlösungen für Industrie, Handwerk, Büro und Haushalt. Wir unterstützen Endverbraucher, den Alltag kreativ zu gestalten und die Lebensqualität zu erhöhen. In der Automobil-, Papier- und Elektronikbranche optimieren wir in enger Zusammenarbeit mit unseren Kunden Fertigungsprozesse und Endprodukte. Als einer der weltweiten Marktführer wollen wir auch in Zukunft weiter wachsen. Und wie sieht Ihre Zukunft aus?

Wir suchen regelmäßig:

**Hochschulabsolventen / Praktikanten /
Masteranden / Nachwuchskräfte (m/w)**

Fachrichtungen:

**Maschinenbau
Chemie
Elektrotechnik
Verfahrenstechnik
Wirtschaftsingenieurwesen**

Detaillierte Informationen zu den einzelnen Stellen sowie die Möglichkeit sich online zu bewerben, finden Sie auf unserer Homepage www.tesa.de

Do you think tesa?

Dann freuen wir uns, Sie kennenzulernen!

tesa SE

Ein Beiersdorf Unternehmen



Arbeitskreis Theoretische und Computergestützte Chemie, Institut für Physikalische Chemie und Zentrum für Bioinformatik

Leiter: Prof. Dr. Tobias Schwabe

Unser Arbeitskreis an der Universität Hamburg besteht seit September 2011. Wir sind derzeit noch in einem bescheidenen Umfang mit einem Arbeitskreisleiter und einem wissenschaftlichen Mitarbeiter aufgestellt. Unser Forschungsschwerpunkt liegt auf der Entwicklung und Evaluierung quantenchemischer Methoden. Dabei ist die Motivation für neue Methoden vorrangig, neue Werkzeuge für eine effizientere Behandlung von chemischen Fragestellungen zur Verfügung zu stellen bzw. deren Zugang überhaupt möglich zu machen. Neu entwickelte Methoden bedürfen dabei selbstverständlich einer kritischen Überprüfung, um ihre Einsatzmöglichkeiten bestmöglich abschätzen zu können. Bei der Evaluierung von Methoden konzentrieren wir uns aber nicht ausschließlich auf die Entwicklungen unserer Arbeitsgruppe. Vielmehr gilt es, ebenso Ansätze anderer Forscher zu überprüfen. Hierzu bedarf es gleichfalls einiger Fachkenntnis, um die Stärken und Schwächen einer neuen Methode richtig einordnen zu können. Solche unabhängigen Untersuchungen sind wichtig, um eher anwendungsorientierten Forschern der Computerchemie eine Hilfestellung bei der Methodenwahl zu geben bzw. auf Problemfälle hinzuweisen. Abbildung 1 soll einen Eindruck unserer Themenschwerpunkte vermitteln.

Im Folgenden sollen aber vor allem die Arbeiten zur Methode der polarisierbaren Einbettung sowie zu den Doppelhybrid-Dichtefunktionalen vorgestellt werden.

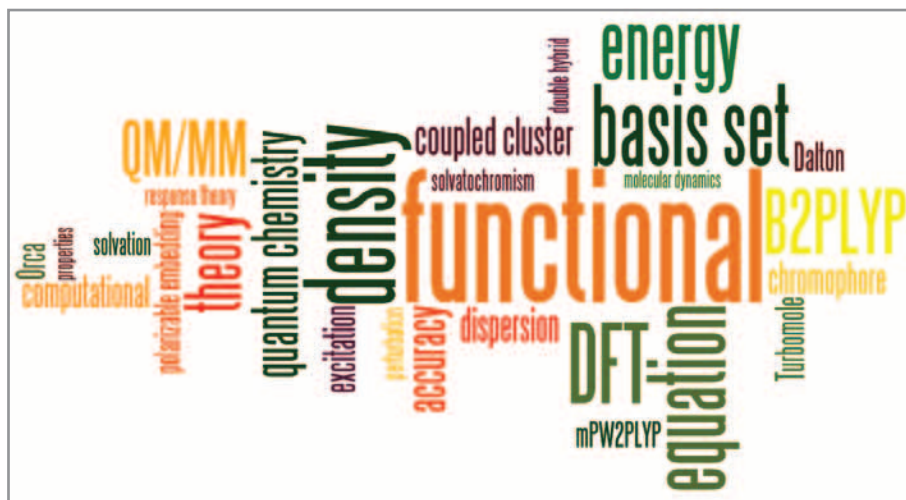


Abb. 1: Die wichtigsten Schlagworte zur Forschung im AK als Wordle präsentiert.

Modellierung von Umgebungseinflüssen in quantenchemischen Rechnungen

Eine der häufigsten Vereinfachungen in der Computerchemie ist die Vernachlässigung der Umgebung, also z.B. des Lösungsmittels, der Kristallnachbarn oder eines Proteingerüsts. Da uns der Einfluss der Umgebung auf die spektroskopischen Eigenschaften eines Moleküls interessiert, ist in diesem Fall diese Vereinfachung nicht möglich. Damit der Rechenaufwand für unsere Untersuchungen nicht zu groß wird, haben wir die Methode der polarisierbaren Einbettung mitentwickelt. Unser Ansatz be-

steht darin, zunächst das Molekül in seiner Umgebung mit einer klassischen Moleküldynamik (MD) zu beschreiben und daraus mehrere repräsentative Schnappschüsse zu extrahieren. In einem anschließenden Schritt wird für jeden dieser Schnappschüsse ein Modell aus quantenmechanischer (QM) und klassischer molekülmechanischer (MM) Betrachtung erstellt, was als QM/MM-Ansatz bezeichnet wird.

In den Standard-QM/MM-Ansätzen sind die Partialladungen der Umgebungsmoleküle fix, weshalb keine Rückkopplung zwischen den beiden Teilsystemen beschrieben wird.

Die Rückkopplung ist aber wichtig zur genauen Beschreibung von spektroskopischen Eigenschaften. Um eine wechselseitige Kopplung zwischen QM- und MM-Teilsystem erreichen zu können, ist die Methode der polarisierbaren Einbettung (PE) entwickelt worden. Dabei werden durch die Polarisierbarkeit der klassischen Atomzentren Dipolmomente induziert, die für die notwendige Rückkopplung sorgen. Die PE ist somit eine Erweiterung der Standard-QM/MM-Ansätze.

Ein weiterer Vorteil ist, dass die Atome im klassischen Bereich nicht nur durch ihre Punktladungen und ihre Polarisierbarkeit, sondern auch durch höhere Multipolmomente beschrieben werden. Die Werte hierzu müssen dabei nicht aus empirischen Daten gewonnen werden. Vielmehr lassen sie sich direkt aus quantenmechanischen Berechnungen gewinnen. Diese höhere Unabhängigkeit vom Experiment erlaubt eine flexiblere Modellierung ganz unterschiedlicher Umgebungen. Die Methode ist sowohl mit dem Ansatz der Dichtefunktionaltheorie, der heutigen Standardmethode der Computerchemie sowie mit den noch genaueren Coupled-Cluster-Verfahren kombinierbar. In einer ersten Studie konnte gezeigt werden, dass mit diesem Ansatz die experimentellen Daten zur Solvatochromie von Aceton in den Lösungsmitteln Wasser, Methanol, Acetonitril und Tetrachlormethan sehr genau reproduziert werden können.

Darüber hinaus erlaubt die Methode ein Proteingerüst zu modellieren und lässt sich daher analog auf Fragestellungen der Spektroskopie von Biomolekülen anwenden. So konnte z.B. gezeigt werden, dass der experimentell bestätigte sehr geringe Einfluss auf die Absorption des Chromophors im *Photoactive Yellow Protein* (PYP) nicht auf eine zu vernachlässigende Interaktion mit dem Protein, sondern auf sich gegenseitig aufhebende physikalische Effekte zurückzuführen ist. Ein wesentlicher Bestandteil ist dabei die Rückkopplung zwischen Chromophor und Protein, so dass die PE-Methode entscheidend für eine korrekte Berechnung gewesen ist. Weiter konnte unsere Arbeits-

gruppe Computerstudien zum Überprüfen möglicher Mutanten zum Einsatz in der Optogenetik oder zum Einfluss der Proteinumgebung auf einen Marker für die Zwei-Photon-Absorptionsspektroskopie unterstützen.

Doppelhybride zur Erweiterung der Dichtefunktionaltheorie

Wie bereits erwähnt, ist die Dichtefunktionaltheorie (DFT) die Standardmethode der Quantenchemie. Trotz vieler Vorzüge weist sie ebenso einige Defizite auf, die teilweise dadurch behoben werden konnten, dass die Konzepte der DFT mit der herkömmlichen Hartree-Fock-Methode kombiniert wurde. Dies führte zur Klasse der Hybridfunktionale. Ein weiterer Schritt führt den Ansatz der Møller-Plesset-Störungstheorie und die Hybridfunktionale zusammen. Dadurch können häufig noch genauere und robustere Ergebnisse als mit den Standard-Dichtefunktionalnäherungen erzielt werden, wenn auch für den Preis eines etwas höheren Rechenaufwands.

Da die Doppelhybridfunktionale noch eine relativ junge Entwicklung sind, bieten sie

mehrere Ansatzpunkte für weitere Untersuchungen. Vor allem ihre Anwendung auf neue Moleküleigenschaften sowie weitere Verbesserungen der Genauigkeit sind hier

für uns von Interesse, worauf mehrere Arbeiten aus unserem Arbeitskreis abzielen. Aber auch neue Ansätze für eine bessere Effizienz werden untersucht.

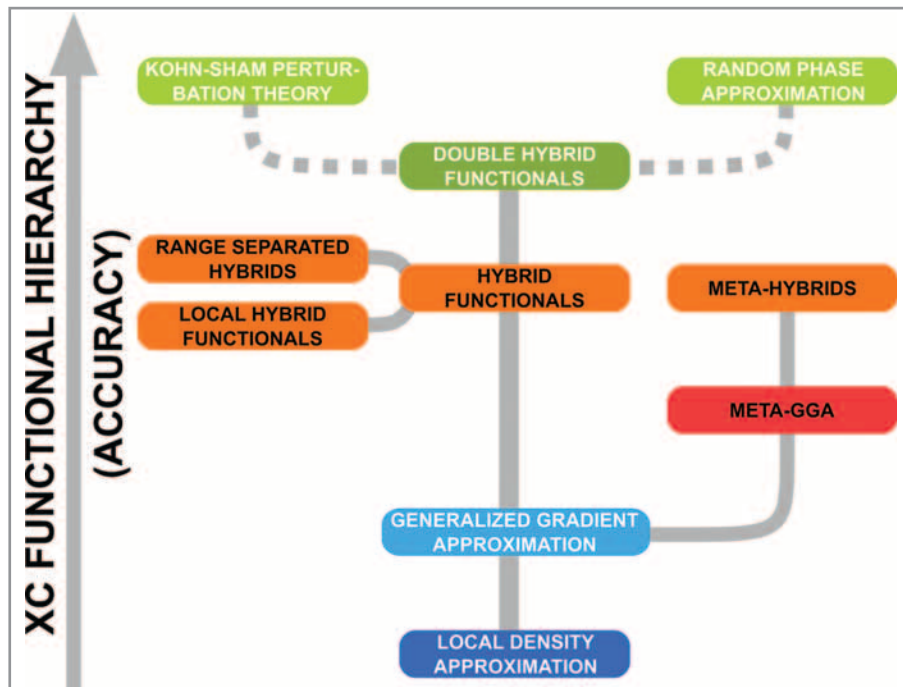


Abb. 2: Skizze zur Hierarchie der verschiedenen Dichtefunktionalnäherungen. Generell steigt die Genauigkeit, aber auch der Rechenaufwand mit den höheren Methoden.

BEI UNS STIMMT DIE CHEMIE!



**ALLES AUS
EINER HAND –
VOM LAYOUT
BIS HIN ZUM
FERTIGEN
PRODUKT!**



**WIR LASSEN
UNSERE IDEEN RAUS!**

VMK

VMK
Verlag für Marketing
und Kommunikation
GmbH & Co. KG

Faberstrasse 17
67590 Monsheim
Tel. 0049.6243.909.0
Fax 0049.6243.909.400
info@vmk-verlag.de
www.vmk-verlag.de

Arbeitskreis Nanochemie, Institut für Physikalische Chemie

Leiter: Prof. Dr. Horst Weller

Der Arbeitskreis umfasst ca. 40 Mitarbeiter und beschäftigt sich mit der Synthese und Charakterisierung von Nanopartikeln, Untersuchungen zur Nukleation und zum Wachstum der Teilchen, Anwendungen im Bereich Fotovoltaik, Katalyse, Sensorik und Medizin sowie mit der Untersuchung der mechanischen Eigenschaften von Nanokompositen.

Synthese und Charakterisierung von Nanopartikeln

Das wohl berühmteste Beispiel der Arbeiten ist die Synthese von kolloidalen Halbleiterpartikeln, in denen im Nanometergrößenbereich ein allmählicher Übergang von Festkörper- zu Moleküleigenschaften erfolgt. Das Foto in Abbildung 1, das mittlerweile weltweit als Anschauungsobjekt für den sogenannten Größenquantisierungseffekt dient, zeigt dies eindrucksvoll anhand der Fluoreszenz von Cadmiumselenid-Partikeln. Mit sinkendem Teilchendurchmesser ändert sich die Farbe rot (6 nm) zu blau (2.5 nm).

Die Optimierung der Syntheseverfahren hat in den vergangenen 3 Jahrzehnten dazu geführt, dass heute Fluoreszenzquantenausbeuten von über 90 % realisiert werden können und die Fotostabilität im Vergleich zu herkömmlichen organischen Farbstoffen um ein vielfaches höher ist. Darüber hinaus zeichnet sich die Fluoreszenz durch eine hohe Farbreinheit aus, was insgesamt zu zahlreichen Anwendungen geführt hat. Eines der eindrucksvollsten Beispiele ist die Verwendung solcher Teilchen in der neuesten Generation von Fernsehern und Monitoren. Gegenwärtig werden zahlreiche

Syntheseverfahren für andere Materialien entwickelt, um den verfügbaren Spektralbereich bis in das nahe Infrarot auszudehnen und weniger toxische Materialien zum Einsatz zu bringen.

Ein weiterer Materialbereich sind plasmomische Nanopartikel aus Gold und Silber. Durch Licht wird in diesen Teilchen eine kollektive Schwingung der Leitungselektronen angeregt, die interessante Farbeffekte hervorbringt und gleichzeitig zu einer starken Erhöhung der lokalen elektrischen Felder führt. Hieraus ergeben sich interessante Forschungsthemen im Bereich der Grundlagenforschung, aber auch Anwendungsmöglichkeiten als Raman-Sonden und als Bio-Marker sowie als Lichtabsorber in der medizinischen Fotohyperthermie.

Weitere Syntheseaktivitäten liegen im Bereich von Platin- und Palladium-Legierungspartikeln, die einerseits interessante magnetische, andererseits auch hervorragende katalytische Eigenschaften besitzen.

Einen besonderen Stellenwert nehmen auch oxidische Nanopartikel ein. Beispiele hierfür sind Nanokristalle aus Fe_3O_4 als Kontrastmittel für die Kernspintomographie sowie TiO_2 und ZrO_2 als Füllmaterial



Abbildung 1: Fluoreszenz von CdSe Nanopartikeln

für hierarchisch aufgebaute Polymerkomposite mit besonderen mechanischen Eigenschaften oder photonische Kristalle aus solchen Partikeln, die als Beschichtung in thermisch hoch beanspruchten Bauteilen Verwendung finden sollen.

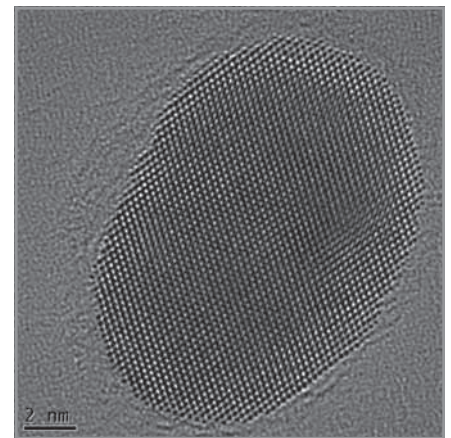


Abbildung 2: Hochauflösende elektronenmikroskopische Aufnahme eines Gold-Nanopartikels

Sechs Elektronenmikroskope mit aufeinander abgestimmten Spezifikationen stehen der Gruppe zur Verfügung, um schnelle Vorcharakterisierungen der Proben vornehmen zu können oder in höchstauflösenden Aufnahmen detaillierte Fragen zur atomaren Struktur, dem Phasenverhalten und der chemischen Zusammensetzung der Teilchen zu beantworten. Ein Beispiel zeigt Abbildung 2, in der ein Gold-Teilchen bei hoher Vergrößerung gezeigt ist. Man erkennt klar die Kristallstruktur und die Facettierung der Oberflächen.

Für technische Anwendungen ist es erforderlich, verlässliche Syntheseverfahren zu etablieren, die die Produktion großer Mengen immer gleicher Partikel erlauben. Üblicherweise werden die Partikel durch Kolbensynthese in kleinen Mengen hergestellt. Das Aufskalieren stellt sich häufig als sehr schwierig heraus, da geringe Konzentrations- oder Temperaturschwankungen während des Durchmischens der Vorläuferverbindungen meist einen großen Einfluss auf die Geschwindigkeiten von Nukleation und Wachstum haben und somit die Größenverteilung im Produkt bestimmen. Wir haben deshalb die Partikelsynthese, die bei Temperaturen bis zu 300°C ablaufen, auf



Abbildung 3: Anlage zur Herstellung von Solarzellen unter Schutzgasatmosphäre

Fließreaktoren überführt, mithilfe derer diese Probleme durch immer konstante Misch- und Wachstumsbedingungen umgangen werden und mühelos die Kilogramm-Synthese der Nanopartikel möglich ist. Die Anwendung dieser Produktionsverfahren zum Verkauf der Teilchen erfolgt im Centrum für Angewandte Nanotechnologie (CAN).

Daneben laufen Forschungsprojekte im Rahmen des Bundesexzellenzclusters „The Hamburg Centre for Ultrafast Imaging“, um die Entstehung und das Wachstum sowie die gezielte Kontrolle von Form und kristalliner Phase der Teilchen besser zu verstehen.

Nanopartikel für Solarzellen

Halbleiternanopartikel wurden von unserer Gruppe bereits in den achtziger Jahren weltweit erstmalig als Lichtabsorber in Solarzellen eingesetzt. Es gelang, die elektronischen und optischen Eigenschaften der Partikel unter Ausnutzung des Größenquantisierungseffektes so anzupassen, dass das Sonnenspektrum optimal genutzt werden konnte. Damals verwendete man flüssige Elektrolyte, die für den technologischen Einsatz allerdings wenig geeignet waren. Seit etwa 10 Jahren gibt es intensive Bemühungen, die einzigartigen Eigenschaften der Partikel in reinen Festkörperzellen zu nutzen. Dies wurde besonders dadurch intensiviert, dass theoretische Berechnungen für solche Zellen erheblich höhere erreichbare Wirkungsgrade prognostizieren, als sie in herkömmlichen Solarzellen aus thermodynamischen Gründen realisierbar sind. Zwar ist man heute diesem Ziel in der Praxis noch fern, aber es hat kaum eine Neuentwicklung in der photovoltaischen Forschung gegeben, bei der in einer so kurzen Zeit die international berichteten

Wirkungsgrade so schnell angestiegen sind (bis auf etwa 8 %).

Eines der Hauptprobleme liegt im Ladungstransport zwischen den einzelnen Nanopartikeln. Hier versuchen wir, maßgeschneiderte Moleküle einzusetzen, um dies zu verbessern. Die Herstellung der Zellen erfolgt in einer Anlage, bei der von der Chemie bis zur fertigen Zelle und deren Charakterisierung alle Prozessschritte unter Inertgas und staubfreien Bedingungen ausgeführt werden können (Abbildung 3).

Nanopartikel in der Elektrokatalyse (Dr. Hauke Heller)

Brennstoffzellen sind ein wichtiges Glied im Gesamtkonzept regenerativer Energien. Unsere Gruppe verfolgt hierbei einen Ansatz, bei der chemisch synthetisierte Platin- und Palladiumlegierungen auf Kohlenstoffnanoröhrchen aufgebracht und zur Methanol- oder Wasserstoffoxidation sowie zur Sauerstoffreduktion eingesetzt werden. Die Grundidee dieses Konzeptes beruht darauf, dass Kohlenstoffnanoröhrchen die besten elektrischen Leiter und dazu noch sehr klein sind, ein großes Oberflächen-zu-Volumen-Verhältnis aufweisen und somit sowohl eine gute Erreichbarkeit der Katalysatorpartikel für den chemischen Brennstoff als auch einen weitgehend verlustfreien Stromtransport zu den äußeren Elektroden der Brennstoffzelle ermöglichen. Die kontrollierte kolloidchemische Synthese der Partikel wiederum erlaubt die Herstellung sehr kleiner und einheitlicher Teilchen mit weitgehender Kontrolle der genauen chemischen Zusammensetzung und sogar kontrollierter Facettierung der Oberflächen. Aus der Katalyseforschung an Einkristalloberflächen ist nämlich bekannt,

dass ganz bestimmte Kristallflächen besonders hohe katalytische Aktivitäten aufweisen. Insgesamt erhoffen wir uns durch diesen Ansatz leichtere, effektivere und billigere Brennstoffzellen.

Nanopartikel in der Sensorik (Dr. Tobias Vossmeier)

Dünne Filme ligandstabiler Metall-Nanopartikel zeigen eine Reihe außergewöhnlicher Eigenschaften, die sich hervorragend für die Entwicklung neuartiger Sensoren eignen. Lässt man beispielsweise elektrischen Strom durch solche Filme fließen, so bewegen sich die Ladungsträger, indem sie von einem Nanopartikel zum nächsten „tunneln“. Dieser Tunnelprozess ist ein quantenmechanischer Effekt, dessen Wahrscheinlichkeit exponentiell mit zunehmendem Abstand der Nanopartikel abnimmt. Daher bewirkt schon eine winzige Zunahme der Partikelabstände eine deutlich messbare Abnahme der elektrischen Leitfähigkeit. Durch Nutzung dieses Effektes konnten wir auf der Basis organisch vernetzter Gold-Nanopartikel neuartige Sensoren entwickeln, die 10- bis 100-mal empfindlicher auf Dehnung reagieren als herkömmliche Dehnungsmessstreifen. Solche Sensoren werden unter anderem zur Überwachung der mechanischen Beanspruchung von Maschinenbauteilen oder tragenden Konstruktionselementen in Gebäuden und Flugzeugen benötigt.

Der beschriebene Tunnelmechanismus ermöglicht es außerdem, neuartige chemische Sensoren auf der Basis von Nanopartikelfilmen herzustellen. Es konnte gezeigt werden, dass solche Sensoren die Detektion bestimmter Analytverbindungen mit Nachweisgrenzen im unteren ppb-Bereich ermöglichen.

Aktuell beschäftigen wir uns damit, die Empfindlichkeit dieser Sensoren noch weiter zu steigern und gleichzeitig das Spektrum potentieller Anwendungen zu erweitern. So gelang es uns vor kurzem, dünne freistehende Membranen aus Gold-Nanopartikeln zu präparieren, die nun für die Entwicklung hochempfindlicher Drucksensoren von Interesse sind.

Nanopartikel in hoch beanspruchten Werkstoffen (Dr. Tobias Vossmeier)

Als Mitglied des Sonderforschungsbereichs „Maßgeschneiderte Multiskalige Material-

systeme - M³⁺ (SFB 986) entwickeln wir in enger Zusammenarbeit mit der Technischen Universität Hamburg-Harburg (TUHH) und dem Helmholtzzentrum Geesthacht Methoden zur Herstellung neuartiger, hoch belastbarer Werkstoffe. Inspiriert vom Aufbau natürlicher Biomineralien, sind diese Werkstoffe hierarchisch aufgebaut. Den Grundbaustein der untersten Hierarchieebene bilden Nanopartikel, beispielsweise aus TiO₂ und Fe₂O₃, die in unserem Labor in unterschiedlichen Formen, z.B. als sphärische Partikel, Stäbchen oder Plättchen, synthetisiert werden (Abb. 4)

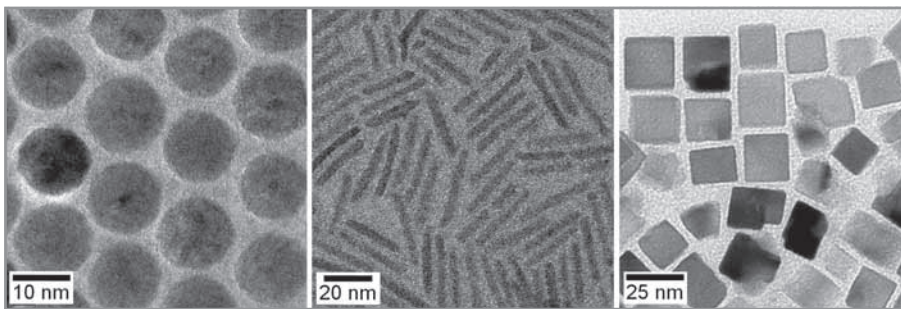


Abbildung 4: TiO₂ und Fe₂O₃ Nanopartikel unterschiedlicher Formen.

Sie verleihen dem Werkstoff Härte und Kratzfestigkeit, wie sie sonst von keramischen Festkörpermateriale bekannt sind. Durch die Compoundierung der Partikel mit speziellen Polymeren wird das Material außerdem mit der Formbarkeit und Stoßfestigkeit metallischer Werkstoffe ausgestattet. Hierfür ist es notwendig, dass die Oberfläche der Nanopartikel mit funktionellen Gruppen versehen wird, die die kovalente Anbindung des Polymers bewirken und somit eine dreidimensional vernetzte Gefügestruktur erzeugen. Durch die so ermöglichte Kombination völlig unterschiedlicher Materialeigenschaften werden ganz neuartige Anwendungen realisierbar, z.B. kratzfeste Beschichtungen von Smartphone-Displays oder ultraleichte und dennoch hochstabile Flugzeugflügel.

In einem weiteren Teilprojekt des SFB 986 beschäftigen wir uns mit der Präparation von Nano- und Mikropartikeln für den Aufbau hitzebeständiger, photonischer Materialien. Als hoch effektive Wärmedämmbeschichtungen könnten solche Materialien beispielsweise die Lebensdauer von Kraftwerksturbinen erheblich verlängern. Oder sie lassen sich in thermophotovoltaischen Anlagen nutzen, um Wärmestrahlung, die bei vielen Prozessen bisher ungenutzt

verloren geht, mit hoher Effizienz in Strom umzuwandeln. Um solche Anwendungen jedoch realisieren zu können, müssen die von uns präparierten Partikel einige ganz besondere Eigenschaften aufweisen. Für den Aufbau geordneter photonischer Strukturen sind beispielsweise nur Partikel geeignet, die eine extrem enge Größenverteilung aufweisen. Außerdem muss es möglich sein, die optischen Eigenschaften der Partikel für spezielle Anforderungen zu optimieren, z.B. durch einen zwiebelartigen Aufbau, bei dem mit jeder Schale der Brechungsindex variiert wird. Darüber hinaus müssen die Partikel Betriebstemperaturen

von über 1200 °C unbeschadet überstehen. Um diese extremen Anforderungen zu erfüllen, konzentrieren wir uns einerseits auf die Entwicklung neuer Verfahren zur Synthese monodisperser ZrO₂-Nano und -Mikropartikel, die zur Steigerung ihrer thermischen Belastbarkeit mit verschiedenen Metallionen dotiert werden. Diese Partikel werden derzeit von unseren Partnern an der TUHH zum Aufbau photonischer Wärmedämmbeschichtungen genutzt. Andererseits haben wir ein Verfahren entwickelt, mit dem es gelingt, metallisch-dielektrische Nanopartikel zu erzeugen. Sie sollen nun die Herstellung photonischer Absorber für hoch effiziente thermophotovoltaische Zellen ermöglichen.

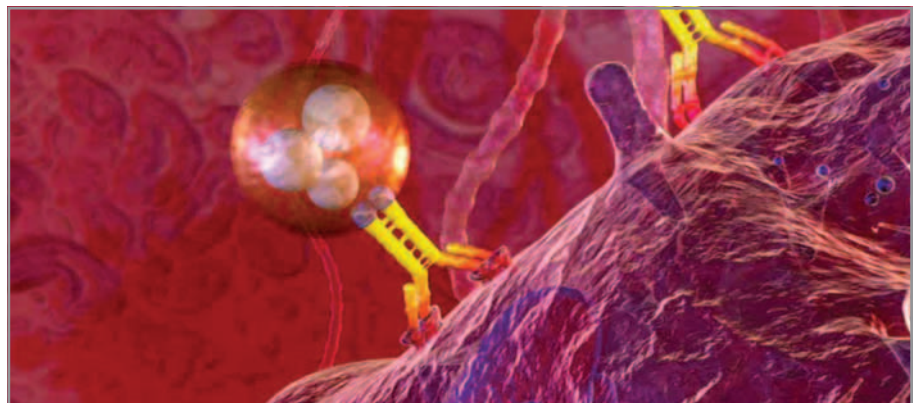


Abbildung 5: Schematische Darstellung einer Nanokapsel, die auf einer Zelloberfläche andockt

Nanopartikel in der Medizin

Seit etwa 10 Jahren ist einer der Forschungsschwerpunkte der Gruppe die Anwendung von Nanopartikeln in der Medizin und Biologie. Hierbei geht es einerseits darum, verbesserte Kontrastmittel zur frühzeitigen Diagnose von Erkrankungen und zur Visualisierung molekularbiologischer Prozesse zu entwickeln und andererseits Medikamente zielgerichtet an den Ort der Erkrankung zu transportieren. Zum Einsatz kommen im wesentlichen fluoreszente Halbleiternanokristalle und Nanoteilchen aus Gold und superparamagnetischem Eisenoxid. Diese Partikel lassen sich besonders gut mit modernen optischen Mikroskopen bzw. in der Röntgen- oder Kernspintomographie nachweisen. Neben der Optimierung der Partikel in Hinblick auf deren optische und magnetische Eigenschaften stehen die Entwicklung einer geeigneten biokompatiblen Hülle und die Anbindung spezifischer biologischer Liganden im Zentrum der Forschungsaktivitäten. Die Umhüllung der Partikel soll dafür sorgen, dass die Teilchen beim Einbringen in den Körper nicht gleich vom Immunsystem erkannt und metabolisiert werden, und die Bioliganden sollen ein Anbinden an bestimmte Zellen und ggf. eine nachfolgende Zellaufnahme ermöglichen. Besonders im Bereich der Umhüllung der Partikel mit einer Art Tarnkappe für das Immunsystem sind in den letzten Jahren große Erfolge erzielt worden, und es geht jetzt in verstärktem Maße darum, wie man die biologisch aktiven Liganden so selektiv an die Partikel anbinden kann, dass sie ihre volle Funktionsfähigkeit erhalten. In Zusammenarbeit mit zahlreichen forschenden Gruppen des Universitätskrankenhauses Eppendorf werden präklinische Tests durchgeführt, die bereits zu neuen Ansätzen in der Diagnostik von Fettstoffwechselerkrankungen und der Behandlung von Multipler Sklerose geführt haben.

OTTO STERN - Nobelpreis 1943 für seine Forschung als Professor für Physikalische Chemie in Hamburg

Horst Förster

Kindheit und Jugend 1888-1906

Otto Stern wurde am 17. Februar 1888 als Ältester von 5 Kindern (2 Söhne, 3 Töchter) des Mühlenbesitzers Oskar Stern und seiner Ehefrau Eugenie, geb. Rosenthal, in Sohrau, Oberschlesien, geboren. Dieses Städtchen war an der „Drei-Kaiser-Ecke“ gelegen, wie man das Zusammentreffen der Länder von Österreich-Ungarn, dem Russischen und dem Deutschen Reich nannte.

Die Stadt, polnisch Zory genannt, hatte damals eine Einwohnerzahl von etwa 4000 (heute 60.000) und liegt an der Raude (poln. Ruda), einem rechten Nebenfluss der Oder, im südwestlichen Teil der Woiwodschaft Schlesien nahe der tschechischen Grenze, ca. 30 km südwestlich von Kattowitz, ca. 90 km westlich von Krakau. Eine Gedenktafel am Rathaus erinnert an den Nobelpreisträger.

Noch vor dem Einsetzen der Schulpflicht erfolgte 1892 der Umzug der Familie nach Breslau.

Ostern 1894 wurde Otto eingeschult. Ostern 1906 verließ er das Johannes-Gymnasium mit dem Zeugnis der Reife. Das Gymnasium war in der damaligen Zeit auf das Erlernen der klassischen Sprachen ausgerichtet, was zu Lasten der Ausbildung in Mathematik und Naturwissenschaften ging. Diese Kenntnisse versuchte er sich durch das Studium entsprechender Bücher anzueignen.

Die wohlhabende jüdische Familie Stern, zu der Getreidehändler und Mühlenbesitzer gehörten, konnte es sich leisten, ihre Kinder studieren zu lassen ohne das unmittelbare Ziel, einen Beruf für den Broterwerb zu ergreifen.

Studium bei Sommerfeld, Pringsheim, Lummer, Abegg und Sackur 1906-12

Stern absolvierte, speziell an der physikalische Chemie interessiert, ein 12-semesteriges Chemiestudium, davon je 1 Semester in Freiburg und München sowie 10 in Breslau. Theoretische Physik hörte er in München bei Arnold Sommerfeld, Experi-

mentalphysik an der Leopoldina in Breslau bei Ernst Pringsheim und Otto Lummer. In einem späteren Interview hat Stern eingeräumt, dass er während seines Münchner Semesters zwar Sommerfelds Vorlesungen besucht, jedoch nichts verstanden habe. Generell Vorlesungen beeindruckten ihn nicht so sehr; er lernte lieber – siehe seine Schulzeit – aus Büchern, wobei für seine Entwicklung vor allem die Schriften Ludwig Boltzmanns über Molekulartheorie und statistische Mechanik sowie die von Rudolf Clausius und Walther Nernst über Thermodynamik von Bedeutung waren.

In Breslau bestand Stern am 6. März 1908 das Verbandsexamen. Nach seiner Rückkehr stand für ihn fest, dass er sein Studium mit einer Arbeit in physikalischer Chemie beenden würde. Dieses Fach wurde zu seiner Zeit in Breslau von Richard Abegg und Otto Sackur vertreten, welche die statistische Thermodynamik und Molekulartheorie stärker betonten. 2 Jahre vor Sterns Studiumsabschluss, kurz vor Eröffnung des für ihn neuerrichteten Instituts für Physikalische Chemie im Jahre 1910, verunglückte Abegg bei einer Freiballonfahrt tödlich.

Das Thema für Sterns Dissertation wurde von Otto Sackur angeregt. Titel: *"Zur kinetischen Theorie des osmotischen Druckes konzentrierter Lösungen und über die Gültigkeit des Henryschen Gesetzes für konzentrierte Lösungen von Kohlendioxid in organischen Lösungsmitteln bei tiefen Temperaturen"*.

Am 6. März 1912 bestand er das Rigorosum. Am 13. April 1912 wurde er zum Doktor der Philosophie promoviert. Seine Dissertation hat er als seine erste Publikation unter dem obigen Titel in der Zeitschrift für Physikalische Chemie veröffentlicht.

Erste Theoretische Phase – Lehrjahre in Prag und Zürich, 1912-14

1912 wird Stern, angeregt durch Otto Sackur, durch Vermittlung von Fritz Haber, der mit Einstein bekannt war, finanziell unabhängiger Mitarbeiter von Albert Einstein, der seit 1911 Ordinarius für Theoretische Physik an der Deutschen Universität Prag ist.

Stern hatte das Gespür, dass Einstein der bedeutendste Physiker der Gegenwart bzw. Zukunft ist. Er hat später einmal gesagt, dass ihn eine Art Abenteuerlust zu diesem Schritt gedrängt habe. Häufiges Zusammentreffen und Diskussionen fanden in einem Café statt, welches einem Bordell angeschlossen war. Aus dieser Zusammenarbeit entwickelt sich lebenslange Freundschaft. Einstein fühlte sich in Prag wegen der scheinheiligen, antisemitischen Atmosphäre im habsburgischen Österreich nicht wohl und folgte erleichtert 1912 einem Ruf an die ETH Zürich.

1913 folgt ihm Stern nach Zürich. Dort traf er auch mit Paul Ehrenfest und Max von Laue zusammen.

In Zusammenarbeit mit Einstein entstand die Publikation *Einige Argumente für die Annahme einer molekularen Agitation am absoluten Nullpunkt*.

Das 1911 von Rutherford vorgestellte saturnische Atommodell erwies sich als mechanisch und elektrisch instabil und schrie förmlich nach einer verbesserten Deutung. 1913 entwickelte Niels Bohr das nach ihm benannte Atommodell, wo er durch 2 Hypothesen die klassische Physik außer Kraft setzte. Während Debye und Sommerfeld begeistert ein Loblied sangen, erklärten Stern und von Laue, dass sie ihren Hut nehmen würden, wenn sich dieser Unsinn von Bohr als richtig erweisen sollte.

Stern beschäftigt sich mit der Bestimmung der absoluten Entropie und verfasst eine Arbeit mit dem Titel *"Zur kinetischen Theorie des Dampfdrucks einatomiger fester Stoffe und über die Entropiekonstante einatomiger Gase"*, deren Ziel es war, eine Dampfdruckformel für einen 1-atomigen Festkörper in einem T-Gebiet abzuleiten, in dem dieser der klassischen Theorie gehorcht sowie die Dulong-Petitsche spezifische Wärme besitzt und zwar auf zwei Wegen, thermodynamisch aus der Entropie bzw. mit einem molekularkinetischen Modell. Auf beiden Wegen gelangte er zu einem übereinstimmenden Ergebnis.

1913 reicht er die 8(!)-seitige Arbeit als Habilitationsschrift ein und erhält 1913 die *Venia legendi* der ETH Zürich für das Fach physikalische Chemie. Im August 1913 wird er Privatdozent für physikalische Chemie an der ETH Zürich.

Zweite Theoretische Phase: Flucht in die Selbständigkeit – Frankfurt und Wehrdienst – 1914-19

Privatdozent in Frankfurt

Der Wunsch, Zürich zu verlassen, wurde vermutlich durch den Weggang seines Lehrers Einstein ausgelöst, der 1914 zum Direktor des KWI für Physik nach Berlin berufen wurde.

Im November 1914 beantragte er von Berlin aus seine Umhabilitation zur Zulassung als Privatdozent für theoretische Physik an der Universität Frankfurt am Main mit der gleichen bereits oben erwähnten Habilitationsschrift und dem Zitieren von 3 weiteren Publikationen sowie "noch einigen kleineren Artikeln mehr polemischer oder literarischer Art".

Nach seiner Umhabilitation wurde er Privatdozent für Theoretische Physik an der Universität Frankfurt. Dort traf er auf ein Umfeld, welches bestimmt war durch den Theoretischen Physiker Max von Laue, der im August 1914 von Zürich nach Frankfurt gewechselt hatte, und Richard Wachsmuth, dem Ordinarius für Experimentalphysik.

Nach Ausbruch des Weltkriegs meldet sich Stern bei der Armee und wurde zunächst als Gefreiter, später als Unteroffizier, mit technischen Aufgaben betraut.

Im Jahre 1916 publizierte er 2 Arbeiten, erschienen in den *Annalen der Physik*: *Die Entropie fester Lösungen* und *Über eine Methode zur Berechnung der Entropie von Systemen elastisch gekoppelter Massenpunkte*, entstanden in Lomcza/Polen, im Nordosten Polens nahe der russischen Grenze, ca. 75 km westlich von Bialystock, wo er seit Ende 1915 als Wetterbeobachter stationiert war. Da er viel freie Zeit hatte, nutzte er diese, um sich mit dem Problem der Energieberechnung eines Systems gekoppelter Massenpunkte zu beschäftigen.

Im Felde und bei Walther Nernst in Berlin
1919 war er zur Durchführung kriegswichtiger Forschung an das Institut für Physikalische Chemie der Friedrich-Wilhelm-

Universität Berlin abkommandiert, dessen Leiter Walther Nernst war.

Hier traf er mit Max Volmer und James Franck zusammen. Volmer hat später erzählt, dass Stern ihm regelmäßig Nachhilfestunden in Thermodynamik gegeben habe, während er selbst Apparate konstruierte und glastechnische Arbeiten übernahm. Unmittelbares Ergebnis dieser Zusammenarbeit waren 3 gemeinsame Veröffentlichungen:

- *Über die Abklingzeit der Fluoreszenz;*
- *Sind die Abweichungen der Atomgewichte von der Ganzzahligkeit durch Isotopie erklärbar?*
- *Bemerkungen zum photochemischen Äquivalenzgesetz vom Standpunkt der Bohr-Einsteinschen Auffassung der Lichtabsorption.*

In der ersten gelang ihnen erstmals die Berechnung von Abklingzeit und der Lebensdauer im angeregten Zustand und eine umfassende quantitative Beschreibung photochemischer Prozesse durch die Stern-Volmer-Gleichung.

In der zweiten Arbeit sind Stern und Volmer der Überlegung nachgegangen, ob Wasserstoff mit der Atommasse 1,008 ein Gemisch zweier Isotope mit den Atommassen 1 und 2 oder ob die Abweichung auf das Massenäquivalent der Bindungsenergie zurückzuführen sei. Man darf nicht vergessen, dass zu dieser Zeit die Kerne nur aus Protonen und Elektronen zusammengesetzt betrachtet wurden und das Neutron sowie das Isotop Deuterium erst 1932 entdeckt wurden.

Beide lernten während ihrer Arbeiten Nernsts Assistentin Dr. Lotte Pusch kennen. Zwischen Lotte Pusch, Otto Stern und Max Volmer entwickelte sich eine enge Freundschaft. Zum Leidwesen Otto Sterns gab Lotte Pusch dem Werben Volmers nach und beide wurden am 15. März 1920 getraut.

Stern hat gegen Ende seiner Berliner Zeit im November 1918 eine Arbeit *Zusammenfassender Bericht über die Molekulartheorie des Dampfdrucks fester Stoffe und ihre Bedeutung für die Berechnung chemischer Konstanten* fertiggestellt, in der er sich nochmals mit den bereits in seiner Habilitationsschrift behandelten Themen auseinandersetzt.

Erste Experimentelle Phase: Privatdozent in Frankfurt und Extraordinarius in Rostock, 1919-22

Assistent bei Max Born

Nach seiner Entlassung vom Militär kehrte Stern nach Frankfurt zurück und setzte zunächst seine Arbeit an theoretischen Problemen fort, von nun an mit Max Born, zu dessen Institut für theoretische Physik seine Stelle gehörte.

1919 wurde Stern Titularprofessor und firmierte fortan bei den Physikalischen Lehrveranstaltungen als Privatdozent Prof. Dr. O. Stern. Aus dieser Zusammenarbeit mit Max Born entsprang die Arbeit *Über die Oberflächenenergie der Kristalle und ihren Einfluss auf die Kristallgestalt*.

1920 folgte eine weitere theoretische Arbeit von Stern *Zur Molekulartheorie des Paramagnetismus fester Salze*, in der er sich erstmalig mit dem magnetischen Moment befasst, was ihn später nicht mehr loslassen sollte.

In diese Zeit fällt Sterns Interesse an einer neuen Technik, der Atom- oder Molekularstrahl-Methode, für deren erfolgreiche Verwendung er das richtige Gespür hatte. Die Anfänge dieser Technik gehen auf Louis Dunoyer zurück, der 1911 in *Comptes Rendus* eine Abhandlung *"Sur la théorie cinétique de gaz et la réalisation d'un rayonnement matériel d'origine thermique"* veröffentlichte, nachdem ihm im Jahr zuvor die Herstellung von Na-Atomstrahlen gelungen war. Bei diesem Verfahren wird die zu untersuchende Substanz (z.B. in einem Ofen) in den Gaszustand überführt und durch Blenden und Evakuieren ausgedünnt, so dass es zu einer strahlenartigen Ausbreitung der Teilchen kommt, die sich auf diese Weise einzeln spektroskopisch oder magnetisch untersuchen lassen. Gewissermaßen zur Bewährung sollte sie 9 Jahre später bei der Ermittlung der Molekülgeschwindigkeit verwendet werden.

Gegen Ende des 19. Jahrhunderts hatte sich das Lehrgebäude der kinetischen Gastheorie entwickelt, deren Begründer Maxwell, Clausius und Boltzmann waren. Maxwell hat 1859 das Geschwindigkeitsverteilungsgesetz intuitiv gefunden und 1867 verbessert hergeleitet. Hiernach ist die

$$\frac{\text{Molekelzahl}}{\text{Geschwindigkeitsintervall } \Delta v} \sim v^2 \exp[-m v^2/2kT]$$

mit der Geschwindigkeit v , der Masse m , der Temperatur T und der Boltzmann-Konstanten k .

Es dauerte 61 Jahre, ehe es von Stern direkt experimentell bestätigt wurde. Die Arbeit *Eine direkte Messung der thermischen Molekulargeschwindigkeit* wurde in der Zeitschrift für Physik veröffentlicht.

Der Silber-Atomstrahl wurde nach einem Verfahren von Knudsen durch Verdampfen von einem versilberten Pt-Draht ins Vakuum über eine Blende auf eine Auffangplatte (Target) gelenkt, auf der er kondensiert wird. Bei einer Rotation der Anordnung um eine Drehachse \perp Molekularstrahl sollte sich der Auftreffpunkt um

$$\Delta = \frac{\text{Umdrehungen pro Sekunde}}{\text{mittlere Geschwindigkeit}} = 2\pi v l^2 / \sqrt{v^2}$$

mit der Drehfrequenz v und dem Abstand (Quelle-Target) l entgegen der Rotationsrichtung verschieben.

Das Ergebnis für die wahrscheinlichste Geschwindigkeit betrug 450-500 m/s bei 1200°C; während 477 m/s berechnet waren.

Gegen die Publikation wurden von verschiedenen Seiten Einwände erhoben, von denen allerdings nur der von Einstein berechtigt war. Dieser hatte angemerkt, dass von den schnelleren Molekülen verhältnismäßig mehr ausströmen, so dass an Stelle von $\frac{3kT}{m}$ mit einem mittleren Geschwindigkeitsquadrat von $\frac{4kT}{m}$ gerechnet werden muss. Stern hat dies im Oktober 1920 in einem Nachtrag korrigiert.

Ständiger Gast und Mitarbeiter der Abteilung Born: Walther Gerlach

Zu einem ersten Zusammentreffen zwischen Otto Stern und Walther Gerlach kam es während des 1. Weltkriegs, als Stern an einem Verfahren zur Viskositätssteigerung von Mineralölen durch elektrische Entladungen arbeitete.

Gerlach brachte große Erfahrung auf dem Gebiet der Vakuumtechnik mit, als er im Herbst 1920 von Tübingen nach Frankfurt zu Prof. Wachsmuth mit der Fragestellung kam, ob der anomale Diamagnetismus des Wismuts eine Kristalleigenschaft ist oder auch an Bi-Dampf auftritt.

Die Quantenmechanik wird allgemein axiomatisch formuliert, d.h. man geht von Postulaten, unbewiesenen Behauptungen, aus, mit deren Hilfe man eine Theorie entwickelt, deren Resultate mit dem Experiment übereinstimmen müssen. In diesem Fall ist das Postulat gerechtfertigt. Ein ähnliches Vorgehen findet man in der Euklidischen Geometrie und in der Thermodynamik mit ihren 3 Hauptsätzen.

Pieter Zeeman (1865-1943) entdeckte 1896 die von H. A. Lorentz elektronentheoretisch vorausgesagte Aufspaltung im Magnetfeld, welche den Namen Zeeman-Effekt erhielt (1902 Nobelpreis an Zeeman und Lorentz). Um den Zeeman-Effekt auf der Basis der Bohrschen Theorie zu erklären, sah sich P. Debye 1916 gezwungen, die Hypothese von der Richtungsquantelung einzuführen, wonach bei Mikroteilchen nicht nur der Drehimpuls sondern auch seine Komponenten in durch ein magnetisches oder elektrisches Feld ausgezeichnete Richtung diskrete Werte annehmen können. Während Sommerfeld in Erweiterung des Bohr-Modells für seine "erlaubten" Elektronenbahnen axiomatisch forderte, dass der dazugehörige Drehimpuls L mit der Quantenzahl ℓ nur Werte von $\ell \hbar$ annehmen kann, verlangte das neue Konzept – auch wiederum axiomatisch –, dass auch seine L_z -Komponenten in Vorzugsrichtung z , welche durch eine magnetische oder elektrische Feldrichtung vorgegeben ist, der Bedingung $L_z = L \cos \alpha = m \hbar$ gehorchen, wobei die Orientierungsquantenzahl (magnetische Quantenzahl) m mit einem $\Delta m = 1$ zwischen $+\ell$ und $-\ell$ läuft, also $2\ell+1$ verschiedene Werte annehmen kann. In einem halbklassischen Bild heißt das, dass der Vektor des Drehimpulses nur bestimmte Orientierungen α im Raum einnehmen kann, daher der Name Raum- oder Richtungsquantisierung. Diese Idee war so revolutionär, dass sogar Debye nicht daran glaubte, dass sie physikalische Realität besäße. Debye äußerte sich so: *"Sie glauben doch nicht, dass die Einstellung der Atome etwas physikalisch Reelles ist; das ist eine Rechenvorschrift - Kursbuch der Elektronen"*. Im Falle atomarer magnetischer Momente erwartete Bohr eine Aufspaltung in 2 Gruppen mit ihren Momenten entweder parallel oder entgegengesetzt zum Magnetfeld. Sommerfeld hingegen hatte keine klare Meinung und schwankte zwischen 3 möglichen diskreten Positionen und einer willkürlichen, d.h. klassischen Verteilung.

Diese $2\ell+1$ Projektionen oder z-Komponenten des Drehimpulses sind seine messbaren Komponenten $L_z = (0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell) \hbar$. Da sie nur beim Anlegen eines magnetischen oder elektrischen Feldes aufgespalten sind und bei dessen Abschalten gleichenergetisch zusammenfallen, spricht man von $2\ell+1$ -facher Entartung oder einem statistischen Gewicht von $2\ell+1$.

Die Frage von Stern an Gerlach, ob er wisse, was Richtungsquantelung sei, verneinte dieser. Im übrigen glaubte Stern selbst nicht an die Debyesche Hypothese. Daher planten beide ein Experiment, welches ihre Zweifel erhärten sollte. Beschleunigt wurde dies durch eine Arbeit von Kallmann und Reiche.

1913 hatte Johannes Stark (1874-1957) die dem Zeeman-Effekt analoge Aufspaltung der Spektrallinien in einem elektrischen Feld entdeckt (Stark-Effekt, Nobelpreis 1919). A. Kallmann und F. Reiche hatten eine Arbeit über die Ablenkung von elektrischen Dipolmolekülen in einem inhomogenen elektrischen Feld im Band 6 der Zeitschrift für Physik eingereicht, von denen Stern die Korrekturen übersandt wurden. Die darin angestellten Überlegungen ergänzten die von Stern und Gerlach, die allerdings das magnetische Pendant zum Gegenstand hatten. Dies alarmierte Stern, der den dringenden Anlass sah, sich hier mit einer Publikation das Primat zu sichern. Sie ging im August 1921 unter dem Titel *"Ein Weg zur experimentellen Prüfung der Richtungsquantelung im Magnetfeld"* bei der Zeitschrift für Physik ein.

In dieser beschreibt er die Versuchsanordnung, mit der man zwischen dem klassischen und dem quantentheoretischen Fall unterscheiden könnte, indem man einen Atomstrahl einem inhomogenen Magnetfeld, analog dem inhomogenen elektrischen Feld von Kallmann und Reiche, aussetzt. Im klassischen Fall sollten für jede Geschwindigkeit alle Ablenkungen von 0 bis zum quantentheoretischen Wert $\mu = e\hbar/2m$ möglich sein. Der Fleck auf dem Target sollte durch das Magnetfeld nur verbreitert sein, das Intensitätsmaximum an der ursprünglichen Stelle zu finden sein. Im quantentheoretischen Fall würde der Fleck auf dem Target in zwei Flecken gleicher Größe, aber halber Intensität, aufspalten.

Der nach dem vorgeschlagenen Prinzip durchgeführte Versuch in der Nacht vom

5. auf den 6. November 1921 von Stern und Gerlach ergab mit einer runden Blende von 0,1 mm eine elliptische Verbreiterung um 0,03-0,04 mm in Richtung der Inhomogenität, entsprechend einem magnetischen Moment von 1-2 Bohrsche Magnetonen (BM). Das BM ist der Betrag des magnetischen (Dipol-)Moments eines im Wasserstoff-Grundzustand um den Kern kreisenden Elektrons und quasi Einheit oder Quant des magnetischen Moments. Damit war scheinbar die klassische Erwartung von Stern und Sommerfeld bestätigt. Gerlach in einem Brief an Edgar Meyer in Zürich: "Es geht: statt des runden Silber Niederschlags ein im Magnetfeld wesentlich verbreiteter - also Sommerfeld." Das Ergebnis wurde in Form einer 2-seitigen Vorläufigen Mitteilung "Der experimentelle Nachweis des magnetischen Moments des Silberatoms" am 18. November 1921 an die Zeitschrift für Physik gesandt.

Zwischen Frankfurt und Rostock

Zum 1. Oktober wurde Stern als Extraordinarius für Theoretische Physik an die Universität Rostock berufen, wobei ihm am 1. Dezember Immanuel Estermann, der unter Max Volmer in Hamburg promoviert hatte, als Assistent folgte. In Rostock konnten keine neuen Experimente durchgeführt werden; die liefen inzwischen in Frankfurt weiter.

Über das Rostocker Institut hat Stern später im *Zürcher Interview* gesagt: „Im Übrigen konnte ich dort nicht sehr viel machen, weil es erstens kein sehr schönes Institut war, ein sehr kümmerliches Institut, und zweitens weil ich furchtbar viel mit den Vorlesungen zu tun hatte.“

Stern hatte allerdings in Rostock die Muße, die in Frankfurt erhaltenen Ergebnisse zu durchdenken. Er konnte nur zu Weihnachten 1921 und Ostern 1922 zu Besprechungen und Vermessung der Inhomogenität nach Frankfurt kommen. Während Sterns Anwesenheit war Feinmechanikermeister Schmidt den Doktoranden gegenüber freundlicher gesonnen, vermutlich weil es dann für seine Pfeife einen besseren Tabak gab.

Wegen dieser Umstände war Gerlach gezwungen, im Wesentlichen allein weiterzuarbeiten. Er hatte die Idee, das Auflösungsvermögen zu erhöhen, indem er die kreisförmigen Blenden durch Spalte ersetzte. Inzwischen stand für die Versuche

nicht mehr ein Leihmagnet zur Verfügung, sondern man konnte einen solchen mit Mitteln des KWI für Physik beschaffen, dessen Direktor, Albert Einstein, herzlich gedankt wurde.

Anfang Februar 1922 kam es zu einem Zusammentreffen zwischen Stern und Gerlach in Göttingen, wo man noch einmal alle Fakten auf den Prüfstand stellte mit dem Ergebnis "Es geht nicht!". Ein Eisenbahnstreik verzögerte die Heimreise von Gerlach nach Frankfurt um anderthalb Tage, die er schließlich im Güterzug verbringen musste. Während dieser Zeit dachte er nochmals über alle Details nach und beschloss, es noch einmal zu versuchen. Nach einem Umbau der Apparatur mit einer Spaltblende von 0,03-0,04 mm Breite, deren Erprobung gemeinsam in den Weihnachtstagen erfolgte, gelang schließlich in den ersten Februartagen 1922 die erste Strahlaufspaltung. Bis dahin bereitete die Versuchsanordnung immer wieder große Schwierigkeiten. Der Ofen musste auf 1300 K geheizt und in einer nicht ausheizbaren Apparatur ein Vakuum von 10^{-5} Torr über Stunden aufrechterhalten werden, da die Exposition 4-8 h dauerte. Als Pumpen standen eine Gaedesche Molekularpumpe und eine Volmersche Hg-Diffusionspumpe zur Verfügung, wobei es häufig zu einem Bruch der Glasverbindung zu den Pumpen kam. Die Hauptlast und die Verantwortung lagen auf den Schultern von Gerlach, der die häufigen Nachtwachen mit dem Lesen von Sonderdrucken, Korrekturen, dem Verfassen von Rezensionen und Veröffentlichungen verbrachte, wobei Kakao und Tee in großen Mengen konsumiert und viel geraucht wurde. Anfang Februar war es soweit: eine 8-stündige Exposition eines Ag-Atomstrahls ergab zum ersten Mal nach dem Entwickeln eine Aufspaltung in 2 getrennte Strahlen, wobei Mechanikermeister Schmidt und Professor Madelung Zeugen wurden. Im Mineralogischen Institut wurde zur Information der Fachwelt ein Mikrophotogramm angefertigt.

Der Doktorand Schütz wurde von Gerlach beauftragt, Stern sofort ein Telegramm mit dem Inhalt "Bohr hat doch recht!" zu schicken. Am 8. Februar 1922 sandte Gerlach eine Postkarte zu Niels Bohr, auf der der Ag-Strahl ohne und mit Magnetfeld abgebildet war, mit den Worten "Sehr verehrter Herr Bohr, anbei die Fortsetzung unserer Arbeit (vide Zeitschr. f. Physik VIII Seite 110, 1921.): Der experimentelle Nachweis der

Richtungsquantelung. Wir gratulieren zur Bestätigung Ihrer Theorie! Mit hochachtungsvollen Grüßen Ihr ergebenster Walther Gerlach". Ende Februar wurde das Ergebnis von Stern und Gerlach in Form einer 4-seitigen Mitteilung mit dem Titel "Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld" an die Zeitschrift für Physik geschickt, die im Band 9 auf Seite 349 veröffentlicht wurde. Ende März erfolgte eine weitere Mitteilung O. Stern, M. Gerlach: *Das magnetische Moment des Silberatoms* in derselben Zeitschrift, worin über die Bestimmung des magnetischen Moments des Ag-Atoms zu 1 BM berichtet wurde.

Die Kommentare einiger Fachkollegen, nachdem sie die Mikrofotografien kommentarlos erhalten hatten:

James Franck: "...Wichtiger ist aber, ob wirklich nunmehr die Richtungsquantelung bewiesen ist. Schreiben Sie außer Ihrem Rebus auch mal, was nun wirklich los ist."

Friedrich Paschen: "...Ihr Versuch beweist zum ersten Mal die Realität von Bohrschen Zuständen."

Wolfgang Pauli: "Jetzt wird hoffentlich auch der ungläubige Stern von der Richtungsquantelung überzeugt sein."

Niels Bohr: "...Ich sollte sehr dankbar sein, wenn Sie oder Herr Stern mir mit einigen Zeilen freundlich mitteilen wollen, ob Sie Ihre Experimente dahin deuten, dass die magnetische Achse des Silberatoms immer parallel dem Felde steht und nicht senkrecht zu diesem stehen kann, für welche letztere Behauptung man auch theoretische Gründe geben kann."

Diese Kommentare zeigen, wie hilflos selbst große Physiker angesichts der Ergebnisse waren und dass damals Geschichte der Quantentheorie geschrieben wurde. Auch Stern und Gerlach wussten auf die Frage, wer für das magnetische Moment verantwortlich ist, keine Antwort. Heute beschreiben praktisch alle Lehrbücher die Stern-Gerlach-Aufspaltung als Nachweis des Elektronenspins ohne klarzustellen, dass die Experimentatoren keine Ahnung hatten, dass sie den Spin entdeckt hatten. Sie hatten quasi den Wald vor lauter Bäumen nicht gesehen.

Der inzwischen schon ein Viertel Jahrhundert alte Zeeman-Effekt bereitete immer

noch Verdruss. Zwar hatte H. A. Lorentz das beim normalen Zeeman-Effekt auftretende Zeeman-Triplett klassisch erklärt, was nunmehr nur noch quantentheoretisch übersetzt werden musste. Probleme bereitete jedoch der, wie man heute sagt, bei Nicht-Singulettatomen auftretende anomale Zeeman-Effekt mit seiner komplizierteren Aufspaltung. Wolfgang Pauli soll einmal ganz niedergeschlagen auf einer Parkbank in Kopenhagen gesessen haben. Auf die Frage, was ihn so bedrücke, soll er geantwortet haben: „Wie soll man sich angesichts des anomalen Zeeman-Effekts nicht unglücklich fühlen.“ Alfred Landé, der bei Sommerfeld in München promoviert und bei Born in Frankfurt habilitiert hatte, arbeitete an der Aufspaltung der Spektren im Magnetfeld und löste in Konkurrenz zu Sommerfeld, Paschen und Back das Rätsel des anomalen Zeeman-Effekts durch Einführung des nach ihm benannten g-Faktors. Hierbei fand er heraus, dass die experimentellen Daten mit seinen halbempirischen Formeln nur dann übereinstimmten, wenn er in der Formel für den Drehimpuls das (Quantenzahl)² durch Quantenzahl × (Quantenzahl+1) ersetzte. Außerdem waren die Drehimpulse oft ein Vielfaches von $\hbar/2$ und nicht von \hbar , so als ob offenbar halbe Quanten auftraten. Für die Erklärung des ersteren benötigte man die Quantenmechanik, für das letztere den Spin.

Im November 1925 machten zwei junge Holländer, George Eugene Uhlenbeck (1900 -1988) und Samuel Abraham Goudsmit (1902 -1978), die beide bei Paul Ehrenfest in Leyden studiert hatten, die Entdeckung, dass das bis dahin als Punktladung angesehen Elektron einen Eigendrehimpuls besitzt, der ein ganzzahliges Vielfaches von $\hbar/2$ ist. Während für den Bahndrehimpuls und das ihm entsprechende magnetische Moment der *magnetomechanische Parallelismus* gilt

$$\mu_e = -g_e e \hbar / 2m_e = \text{Bohrsches Magneton (BM)} = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ JT}^{-1}$$

$$g_e = 1 = \text{g-Faktor des Bahndrehimpulses,}$$

gilt für den Zusammenhang zwischen Eigendrehimpuls und dem ihm entsprechenden magnetischen Moment die *magnetomechanische Anomalie*, d.h. Verdoppelung.

$$\mu_s = -g_s e \hbar / 2m_e$$

$$g_s = 2,0023 = \text{g-Faktor des Spins,}$$

was wiederum aus der Diracschen relativistisch-wellenmechanischen Theorie des Elektrons folgte.

Ralph Kronig – später Ralph de Laer Kronig – (1904 -1995) wurde als Kind ungarischstämmiger Amerikaner in Dresden geboren, genoss dort auch seine Schulausbildung und ging zum Studium nach New York an die Columbia University. 1925 erhielt er dort seinen PhD und wurde im gleichen Jahr Dozent und 1927 Assistant Professor. Gleichfalls wie Uhlenbeck mit Fermi befreundet, entwickelte er bereits im Januar 1925 als Doktorand die Vorstellung vom Elektronenspin. Pauli hatte damals bereits eine starke Reputation und warf diese auch entsprechend in die Waagschale. Unglücklicherweise legte Kronig Pauli seine Überlegungen zur kritischen Einsicht vor, die von Heisenberg und Pauli strikt abgelehnt wurden. Pauli unterlief ein schwerer Fehler, indem er Kronig seine Hypothese ausredete. Als Paulis Kritik Uhlenbeck und Goudsmit bekannt wurde, wollten sie ihr bereits eingesandtes Manuskript wieder zurückziehen. Doch Ehrenfest überredete sie, es nicht zu tun, da sie es sich aufgrund ihrer Jugend leisten könnten, eine unorthodoxe Arbeit zu veröffentlichen. Ihr Artikel erschien in *Die Naturwissenschaften* und beide gelten allgemein als die Entdecker des Elektronenspins, obwohl Kronig mit gleichem Fug und Recht als unabhängiger Entdecker genannt werden muss. Unter Physikern kreiste der Spruch

"Der Kronig hätt' den Spin entdeckt hätt' Pauli ihn nicht abgeschreckt!"

Alle drei haben den eigentlich wohlverdienten Nobelpreis aber nicht erhalten.

Pauli wurde das "Gewissen der Physik" genannt. Als Perfektionist legte er alle Schwachstellen nicht-ausgegorener Theorien offen. Seine direkte Kritik konnte zuweilen verletzend sein. Er spielte sich in vielen Fällen zum Zensor auf. Doch vielleicht war er in einer Zeit, in der die Physik zum Teil völlig unkonventionelle Wege ging, als Kontrollinstanz unverzichtbar. Als solche musste aber auch ein gelegentliches Versagen einkalkuliert werden wie im Falle Kronig und wie sich später noch bei Stern, Frisch und Estermann zeigen wird.

Stern als auch Gerlach waren beide starke Raucher und bevorzugten neben dem Pfeifen- vor allem das Zigarrenrauchen. In den vielen Stunden, die sie mit der Durchführung ihrer Experimente verbrachten, wuchs der Verbrauch an Tee und Kakao stark an und es wurde sehr viel geraucht. Von Stern

stammt die folgende Episode: „Gerlach entfernte den Detektorflansch, konnte aber keine Spur von einem Silberniederschlag entdecken und übergab mir den Flansch. Während Gerlach mir über die Schulter blickte und ich genau die Platte musterte, waren wir überrascht zu sehen, dass allmählich die Spur des Strahlniederschlags auftauchte.Schließlich erkannten wir, dass dies auf unsere billigen Zigarren zurückzuführen war, die ich mir als Extraordinarius wegen meines bescheidenen Gehalts nur leisten konnte und die eine Menge Schwefel enthielten. Auf diese Weise wurde das Silber in Silbersulfid überführt, was besser sichtbar war.“ Ob wahr oder nicht, auf jeden Fall haben Stern und Estermann zu Entwicklungsmethoden gegriffen, um die Niederschläge besser sichtbar zu machen.

Sterns Position in Rostock war aber nur eine Zwischenstation, denn gegen Ende 1922 erhielt er einen Ruf auf das Ordinariat für Physikalische Chemie der Universität Hamburg, welches nach Ablösung des mit Max Volmer besetzten Extraordinariats errichtet worden war, und die Ernennung zum Direktor des Instituts für Physikalische Chemie.

In Frankfurt und Rostock war Geschichte der Quantentheorie geschrieben worden. Sie fand ihre Würdigung an der Johann-Wolfgang-Goethe-Universität in Frankfurt am Main, wo am Physikalischen Institut eine Gedenktafel montiert und im Vorraum des großen Hörsaals der Physik am Campus Riedberg ein Gemälde der beiden Forscher von Jürgen Jaumann aufgehängt wurde.

Zweite Experimentelle Phase: Ordinarius in Hamburg, 1923-33

Hamburgs langer Weg zur Universität

In Hamburg war es ein langwieriger und schmerzhafter Weg, der vom Universitätsvorläufer, dem Akademischen Gymnasium, schließlich zur Universität führte. Über viele Jahrzehnte zeigten die primär kaufmännisch orientierten Bürger, die sogenannten "Pfeffersäcke", mangelnde Finanzierbereitschaft.

1898 wurde ein Neubau für das Chemische und Physikalische Staatslaboratorium an der Jungiusstraße errichtet, bei dem 2/3 auf die Chemie und 1/3 auf die Physik entfielen.

1892 war auf dem gleichen Gelände wegen der in Hamburg grassierenden Cholera-

epidemie ein Hygieneinstitut errichtet worden.

Die Wissenschaftlichen Anstalten wurden in der Folgezeit weiter ausgebaut. Beschleunigt wurde die Entwicklung 1907 durch die Gründung der Hamburgischen Wissenschaftlichen Stiftung, deren Vorsitzender der Kaufmann Edmund Siemens war. Dieser sorgte dafür, dass 1911 ein Vorlesungsgebäude entstand.

Ein Antrag auf Gründung einer Hamburgischen Universität im Jahre 1912 fand in der Bürgerschaft keine Mehrheit. Anfang 1919 lehnte die alte Bürgerschaft erneut eine Universitätsgründung ab. Am 20.3.1919 endlich beschließt die neu gewählte Bürgerschaft das Universitätsgesetz.

Am 31.3.1919 erfolgt die Errichtung eines a.o. Lehrstuhls für Physikalische Chemie. Am 28.6.1920 ergeht der Ruf auf diesen Lehrstuhl an den 35-jährigen Max Volmer, tätig bei der AuerGesellschaft in Berlin, als einzigen Kandidaten, wegen seines reichen Erfahrungsschatzes, seiner hervorragenden Reputation und weil eine junge Universität junge Köpfe braucht. Am 30.6.1920 nimmt Volmer den Ruf an und beginnt seine Lehrtätigkeit am 1. Oktober.

Das Extraordinariat für Physikalische Chemie ist von 1920 an zunächst eine Abteilung des Chemischen Staatsinstituts. 1922 werden ihm Räume im Physikalischen Staatsinstitut zur Verfügung gestellt.

Dort waren die Arbeitsbedingungen recht ungünstig, d.h. die räumliche, apparative, personelle Ausstattung als auch die finanziellen Mittel ungenügend. Die Gerätes mussten großenteils vom Chemischen und Physikalischen Staatsinstitut ausgeliehen, die Versuchsanordnungen mit einfachen Mitteln hergestellt werden.

Volmers Antrag auf Umwandlung des Extraordinariats in ein Ordinariat wurde von den Kollegen des Chemischen Staatsinstituts unterstützt, aber erst 1923 durchgesetzt. Ehe dies geschieht, nahm Volmer im Mai 1922 einen Ruf an die TH Berlin-Charlottenburg an.

Otto Stern kommt nach Hamburg

Der 1921 an der Hamburgischen Universität geschaffene Lehrstuhl für Theoretische Physik wurde am 1.10.1921 von Wilhelm Lenz, einem Schüler Arnold Sommerfelds,

besetzt. In den 20er Jahren gelang es ihm, das Wunderkind Wolfgang Pauli als Assistenten zu gewinnen, der während seiner Hamburger Zeit sein Ausschließungsprinzip entdeckte. Lenz setzte sich nach dem Weggang Volmers für eine Berufung Otto Sterns ein, damals a.o. Prof. in Rostock. Ab 1.1.1923 übernahm dieser die Leitung des nunmehr selbständigen Instituts für Physikalische Chemie. Letzteres erhielt aufgrund seiner Berufungszusage eine eigene Ausstattung. Immer noch untergebracht im Physikalischen Staatsinstitut baute Stern ein physikalisch-chemisches Praktikum auf, denn die Physikalische Chemie war inzwischen Pflichtfach für alle Chemiker. Ferner entstand ein Molekularstrahl-Laboratorium, wobei ihm Immanuel Estermann assistierte.

Estermann 1900 in Berlin geboren, mit der Familie 1914 nach Palästina ausgewandert und noch vor Ende des 1. Weltkriegs nach Hamburg zurückgekehrt, studierte Chemie an der Universität Hamburg und promovierte 1921 bei Max Volmer. Im gleichen Jahr begleitete er Otto Stern nach Rostock.

In den 20er Jahren entwickelte sich im Umkreis von Lenz und Stern unter Mitwirkung von Pauli eine rege Diskussions- und Forschungstätigkeit, an der auch Gäste, wie z.B. der mit einem Reisestipendium ausgerüstete Isidor Isaac Rabi, teilnahmen. Bis Anfang der 30er Jahre haben in Hamburg fünf Wissenschaftler zusammengearbeitet, denen später der Nobelpreis verliehen wurde: Stern 1943, Rabi 1944, Pauli 1945, Segrè 1959, und Jensen 1963.

Stern pflegte die Verbindung zu anderen großen Zeitgenossen auf physikalisch-chemischen Gebiet. Zu diesen gehörten Irving Langmuir und sein langjähriger Freund Wolfgang Pauli.

Im Institut herrschte nach wie vor große Raumnot. Für die Lehr- und Forschungsaufgaben standen 4 Zimmer und eine Kellerwerkstatt zur Verfügung. Ein Ruf Otto Sterns an die Universität Frankfurt sorgte schließlich dafür, dass für das Institut für Physikalische Chemie ein Anbau an das Physikalische Staatsinstitut 1929 bewilligt wurde, der 1931 fertiggestellt wurde.

Im Staatsarchiv Hamburg findet sich die Aktennotiz eines hohen Verwaltungsbeamten vom 15. Mai 1929, anlässlich der Beantragung des Institutsneubaus:

"Ich möchte, wenn ich auch nicht selbst für die Hochschulpolitik verantwortlich bin, nochmals mit allem Nachdruck darauf hinweisen, um mein Gewissen zu entlasten, dass Herr Prof. Stern auf dem Gebiet der physikalischen Chemie neben Einstein der bedeutendste Gelehrte ist, der zwar wenig aus sich macht, aber geradezu einen Weltruf genießt. Hamburger Herren, die in Amerika gewesen sind, werden wohl nach keinem Gelehrten öfter gefragt als nach Herrn Prof. Stern. Geht er von Hamburg fort, so ist gleichwertiger Ersatz überhaupt nicht zu finden. Es gibt nur einige jüngere Herren, die aber sehr unbedeutend sind. Abgesehen von seinem internationalen Ruf hat Herr Prof. Stern die seltene Gabe, nicht nur die Kollegen seines eigenen Faches, sondern auch die Kollegen der benachbarten Gebiete an sich zu ziehen, sie zu wissenschaftlichen Arbeiten anzuregen; dann ist ihm eine glänzende Problemstellung zu eigen, kurz: er ist innerhalb der hiesigen Mathematisch-naturwissenschaftlichen Fakultät ein ganz hervorragender wissenschaftlicher Mittelpunkt, dessen Fortgang – wenn ich diese abgegriffene Phrase gebrauchen darf – eine fühlbare Lücke zurücklassen würde."

Stern hatte von Max von Laue das Angebot auf einen Direktorposten am KWI in Berlin erhalten. Gerade auf einem Forschungsaufenthalt in Berkeley, schrieb er am 26. Januar 1930 eine Absage, aus der nur einige Phrasen angeführt sein sollen, die aber für Stern's Charakter typisch sind: *„Ich habe in Hamburg alles bekommen, was ich wollte (Neubau, Verdopplung des Personaletats, Vervielfachung der Werkstatt, usw.Jetzt gleich, nachdem sich die Hamburger so ins Zeug gelegt haben, von Hamburg wegzugehen, wäre einfach nicht anständig von mir gewesen.....“*

Typisch für Stern ist eine enge Zusammenarbeit mit der Physik, weniger hingegen mit seinen Kollegen des Chemischen Staatsinstituts. Dies mag daran liegen, dass es im Fach Chemie keine übergreifende Veranstaltung wie ein Chemisches Kolloquium gab. Solche gab es aber im Fach Physik. Hier haben Stern und Estermann die Gelegenheit ergriffen und zusammen mit ihren Physiker-Kollegen drei Lehrveranstaltungen durchgehend während seiner ganzen Hamburger Zeit gemeinsam veranstaltet, wie das Theoretisch-physikalische Seminar, das Physikalische Proseminar und das Physikalische Kolloquium.

1924 wurde Stern durch eine grundlegende Veröffentlichung von Debye über die Theorie der Elektrolyte veranlasst, über den Aufbau der Schicht an der Grenze zwischen Elektrode und Elektrolytlösung nachzudenken: Über diesen kurzzeitigen Ausflug in die Elektrochemie, das Stern-Modell der elektrochemischen Doppelschicht, wird noch an anderer Stelle die Rede sein.

Molekularstrahlen als Materiewellen

In den Jahren 1923/24 veröffentlichte Prinz Louis de Broglie, 7. Herzog von Broglie, (1892-1987) mehrere kurze Arbeiten im Comptes Rendus, die er dann als Dissertation zusammenfasste und damit die physikalische Fakultät der Sorbonne in Verlegenheit brachte. Beeindruckt war hingegen Langevin, der eine Kopie an Einstein weiterleitete, welcher sich wie auch Debye sehr lobend äußerte. Gegenstand von de Broglies Überlegungen waren einander scheinbar antagonistisch gegenüberstehende Anschauungen, was beispielsweise in der Optik zur Teilung in Geometrische (Newton: Emissionstheorie) und Physikalische Optik (Huygens: Wellentheorie) bei der Beschreibung der Eigenschaften des Lichts geführt hatte. De Broglie erweiterte dieses duale Verhalten auf Materie generell, von dem akzeptiert werden muss, dass es sich bei einem Experiment als Teilchen, bei einem anderen wie eine Welle verhält. Diesen Welle-Teilchen-Dualismus kann man philosophisch als "Einheit der Gegensätze" beschreiben. Den Brückenschlag zwischen beiden Verhaltensformen bildet die de Broglie-Beziehung, in der die Wellenlänge λ der Welle mit der Masse m eines mit einer Geschwindigkeit v bewegten Teilchens in Beziehung gesetzt wird

$$\lambda = h/mv$$

Ein Elektron, das sich mit einer Geschwindigkeit von 10^6 m/s bewegt, hat demnach eine de Broglie-Wellenlänge von

$$\lambda = 6,6 \cdot 10^{-34} / 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^6 = 7 \cdot 10^{-10} = 7 \text{ \AA},$$

eine Größe von molekularer Dimension.

De Broglies Hypothese wurde 1927 experimentell von Clinton Joseph Davisson (1881-1958) und Lester Halbert Germer (1896-1971) bestätigt, die ein Elektronenbeugungsbild nach Reflexion an einem Ni-Kristall erhielten. George Paget Thomson (1892-1975) erhielt etwa gleichzeitig Beugungsbilder beim Durchgang von Elektro-

nen durch eine Celluloid sowie Metall-Folie. Davisson und Thomson erhielten 1937 dafür den Nobelpreis für Physik.

Bereits 1927 hatten Knauer und Stern die spiegelnde Reflexion von H_2 - und He-Strahlen an polierten Metalloberflächen beobachtet. Die Gültigkeit der de Broglie-Hypothese für schwerere Teilchen wurde 1930 durch Estermann und Stern und 1931 von Estermann, Frisch und Stern durch Beugung von He-, H_2 - und H-Molekularstrahlen an Einkristallobereflächen nachgewiesen. Die Experimente wurden vor allem durch die Hygroskopizität der Kristalle beeinträchtigt. Monochromatische Molekularstrahlen konnten entweder durch rotierende Spalte oder durch Beugung an Einkristallen erzeugt und damit Experimente durchgeführt werden, wobei keine Verbreiterung durch die Maxwellsche Geschwindigkeitsverteilung mehr auftrat. Experimente mit He bestätigten die de Broglie-Formel mit einer Genauigkeit von 1%.

Das Hamburger Molekularstrahlteam hatte in dieser Zeit die Mitarbeiter Knauer, Brill, Fraser, Rabi, Taylor und Estermann.

Kernphysik – was ist das?

Im Stern-Gerlach-Experiment (SGE) hatten die Molekularstrahlen einen Beitrag zur Aufklärung der Elektronenhülle geleistet. War mit ihrer Hilfe auch ein solcher hinsichtlich des Atomkerns möglich?

Als Estermann kurz nach der Übersiedlung in Hamburg einen Kurs "Kernphysik" ankündigte, wurde er von einem älteren Kollegen gefragt: „Kernphysik – was ist das? Ein Kapitel mit diesem Titel gibt es zwar in Sommerfelds Buch *Atombau und Spektrallinien*, aber das ist doch sicher nicht ausreichend für einen 1-semesterigen Kurs.“

Mit der Verbesserung der spektroskopischen Technik hinsichtlich des Auflösungsvermögens vor allem durch Einführung der Interferenzspektroskopie wurde gegen Ende des 19. Jahrhunderts eine weitere Aufspaltung der Feinstruktur (FS), die Hyperfeinstruktur (HFS) der Atomlinien, unabhängig voneinander von A. A. Michelson sowie Ch. Fabry und A. Perot entdeckt. Zur Erklärung wurde einerseits die Isotopie, andererseits die Wechselwirkung der Elektronen mit magnetischen Dipol- und elektrischen Quadrupolmomenten herangezogen. Ab 1930 hat sich Hans Kopfermann, erster Doktorand von James Franck in Göttingen

und Assistent von Rudolf Ladenburg am KWI für Physikalische Chemie in Berlin, der HFS-Spektroskopie getrennter Isotope zugewandt und die Ergebnisse in seinem Standardwerk *Kernmomente* zusammengefasst.

1924 postulierte Wolfgang Pauli in den Naturwissenschaften den Kernspin und ein damit verbundenes magnetisches Moment, dessen Wechselwirkung mit den Elektronen zu deren Termaufspaltung und damit zur HFS führt.

Wenn für die FS das Bohrsche Magneton $\mu_B = e\hbar/2m$ verantwortlich war, musste die viel kleinere Aufspaltung der HFS durch viel kleinere magnetische Momente, den Kernmomenten μ_N , bewirkt werden. Für den Atomkern wurde eine kompliziertere Struktur vermutet, als bis dahin bekannt war, was Untersuchungen über Kernspins und magnetische Kernmomente notwendig machte. Einerseits bot sich hier die HFS-Spektroskopie an, allerdings waren hier die Berechnungen der magnetischen Kernmomente sehr schwierig, welche zusammen mit einer Reihe notwendiger Näherungen zu ungenauen Ergebnissen führte. Als Alternative boten sich hier Molekularstrahllexperimente an, wobei Wasserstoff und Deuterium als "Lichtquelle" Verwendung finden sollten.

Schulmeister Pauli erleidet eine Schlappe

1928 hatte Paul Dirac die relativistische Quantentheorie entwickelt, der zufolge Proton und Elektron einen Spin von $\frac{1}{2}\hbar$ und entsprechend magnetische Momente von $\mu_N = e\hbar/2m_p$ (Kernmagneton) und $\mu_e = e\hbar/2m_e = \mu_B$ (Bohrsches Magneton) besitzen sollten, was nach experimenteller Bestätigung schrie. Da dies aus der HFS-Aufspaltung nicht machbar schien, kamen hier nur Molekularstrahllexperimente in Frage.

Die Planung im Hamburger Molekularstrahl-Laboratorium sah für die experimentelle Anordnung Folgendes vor: Es sollte im Großen und Ganzen beim SGE-Prinzip geblieben werden, jedoch engere Spalte, stärkere Magnetfelder und empfindlichere Detektoren Verwendung finden. Außerdem sollte das Vakuumsystem grundlegend verbessert werden.

Als Untersuchungsobjekt wurde ein H_2 -Molekülstrahl gewählt, da

- ein Protonenstrahl eine starke Ablenkung durch seine Ladung
- ein H-Atomstrahl eine starke Ablenkung durch sein elektronisches Moment

erfahren würde, neben der das kleine Protonenmoment nicht messbar wäre.

Das Wasserstoff-Molekül hat im Grundzustand folgende Elektronenkonfiguration:

Beide Elektronen sind s-Elektronen, haben wegen $\ell=0$ keinen Bahndrehimpuls und daher auch keine Bahndrehimpulskomponente in Vorzugsrichtung z. Folglich gibt es auch kein magnetisches Bahnmoment, was klassisch schwer verständlich ist.

Beide Elektronen besetzen das $1\sigma_g^+$ -Orbital mit entgegengesetztem Spin, d.h. der Gesamtspin $S=0$ und daher gibt es kein magnetisches Spinnmoment μ_s . Da weder vom Bahn- noch vom Eigen-Drehimpuls des Wasserstoffmoleküls magnetische Momente ausgehen, eignet sich sein Molekülstrahl ideal zur Bestimmung des magnetischen Protonenmoments.

Beim zweiatomigen Wasserstoffmolekül tritt ein weiterer Drehimpuls auf, der Rotations-Drehimpuls. Dieser wird nach dem gleichen Schema ("Strickmuster") gebildet wie die beiden anderen. Die Rotationsenergien steigen mit der Rotations-Quantenzahl $J = 0, 1, 2, \dots$ etwa quadratisch gemäß $\sim J(J+1) \hbar$ an. Das H_2 -Molekül in einem Zustand, der durch die Rotations-quantenzahl J charakterisiert ist, kann $2J+1$ verschiedene Rotationszustände einnehmen mit dem Drehimpuls $\sqrt{J(J+1)} \hbar$ und den Drehimpulskomponenten $m_J = -J, \dots, 0, \dots, +J$. Ohne Vorzugsrichtung sind die Energiezustände $2J+1$ -fach entartet. Dem Rotations-Drehimpuls entspricht ein magnetisches Rotationsmoment μ_R , welches in einem inhomogenen Magnetfeld zu einer Rotations-Aufspaltung S_R führt. Bei hinreichend tiefen Temperaturen ist nur der Rotations-Grundzustand mit $J=0$ besetzt, bei dem auch die Rotations-Aufspaltung verschwindet.

Nach theoretischer Abschätzung des Fermi-Mitarbeiters Ettore Majorana (1906-1938) sollte μ_J , das dem Rotationsdrehimpuls bei seiner Wirkung auf die Elektronenhülle entsprechende magnetische Moment, $3J$ Kernmagnetonen betragen.

Als zweiatomiges *homonukleares* Molekül bringt Wasserstoff eine weitere Komplikation mit sich, die bei der Ermittlung des magnetischen Protonenmoments beachtet werden muss: die Kernspinoisomerie.

Symmetrie ist ein übergeordnetes Prinzip, das auch auf physikalische Erscheinungen angewandt werden kann. Die Symmetrie äußert sich hier in ihrer Unveränderlichkeit oder, wie man sagt, Invarianz gegenüber bestimmten Transformationen.

Unter Parität versteht man die Eigenschaft eines physikalischen Systems, wie es auf eine räumliche Spiegelung d.h. auf eine Inversion seiner Koordinaten reagiert. Bewirkt wird dies durch einen Paritätsoperator Π , der die räumlichen Koordinaten q in ihr Negatives überführt

$$\Pi \psi(q) = \psi(-q)$$

Die Funktion $\psi(q)$ hat eine gerade Parität (+), wenn

$$\psi(q) = \psi(-q) \quad \text{z.B. } y = \cos x$$

und eine ungerade Parität (-), wenn

$$\psi(q) = -\psi(-q) \quad \text{z.B. } y = \sin x$$

Das H_2 -Molekül hat aufgrund seiner Symmetrie das für Π erforderliche Inversionszentrum. Die Paritäten der Rotationszustände lassen sich von den Legendreschen Polynomen herleiten: Rotationszustände mit geradzahligem J haben gerade, solche mit ungeradzahligem J ungerade Parität.

Der Kernspineinfluss macht sich bei homonuklearen zweiatomigen Molekülen dadurch bemerkbar, dass die Kernspinvektoren $I = \hbar \sqrt{I(I+1)}$ wegen der gleichen Kernspin-Quantenzahlen $I_1 = I_2 = I$ der beiden Kerne zu einem Gesamt-Kernspin T mit den Quantenzahlen

$$T = 2I, 2I-1, \dots, 0$$

zusammentreten, dessen Komponenten in z-Richtung die Quantenzahlen

$$m_T = T, T-1, \dots, -T$$

haben, d.h. $2T+1$ -fach entartet sind.

Experimentelle Hinweise führten 1926 zu einer von Dirac und Heisenberg formulierten Behauptung, die unter dem Namen

Pauli-Prinzip oder Paulisches Antisymmetrieprinzip bekannt geworden ist, da sie 1940 von W. Pauli aus der relativistischen Quantenfeldtheorie hergeleitet wurde: Falls man – wie wir es tun – sich mit einer nichtrelativistischen Behandlung begnügt, nimmt das Pauli-Prinzip den Charakter eines zusätzlichen Postulats an. Angewandt auf das Wasserstoffmolekül mit 2 nichtunterscheidbaren Kernen vom Spin $\frac{1}{2}$ (Fermionen) fordert das Ausschließungsprinzip, dass sich die den Zustand des Systems charakterisierende Gesamtwellenfunktion ψ' , abhängig von Raum- und Spinkoordinaten,

$\psi' = \psi \times \alpha =$ Koordinatenfunktion $\psi \times$ Kernspinfaktor α ,

antisymmetrisch gegenüber dem gegenseitigen Koordinatenaustausch verhalten muss.

Die Zustände mit Koordinatenfunktionen gerader Parität müssen mit antisymmetrischen Spinfaktoren, die ungerader Parität mit symmetrischen Spinfaktoren kombiniert werden. Mit anderen Worten: bei A_2 -Molekülen werden aufeinanderfolgende Energiezustände abwechselnd von Molekülen mit entgegengesetzten Spinfaktoren besetzt.

Für einen Kernspin I existieren $2I+1$ verschiedene Orientierungen zur Vorzugsrichtung, beim zweiatomigen Molekül $(2I+1)^2$ und entsprechende Spinfaktoren.

Bezeichnen wir wie beim H_2 mit $l = \frac{1}{2}$ die *spin-up*-Stellung mit u , die *spin-down*-Stellung mit d , dann gibt es 3 Kombinationen, die auf den Austausch symmetrisch reagieren: $uu, dd, ud + du$, hingegen nur 1 mit antisymmetrischem Verhalten: $ud - du$. Führt man die Überlegungen allgemein mit den verschiedenen Orientierungs-Quantenzahlen m_l durch, dann ergeben sich

$(I+1)(2I+1)$ symmetrische Spinfaktoren und

$I(2I+1)$ antisymmetrische Spinfaktoren,

d.h. bei $l = \frac{1}{2}$ sind es 3 symmetrische Spinfaktoren und 1 antisymmetrischer Spinfaktor.

Vereinbarungsgemäß bezeichnet man das Kernspinoisomer mit dem höheren statistischen Gewicht 3, d.h. parallele Kernspins, mit dem Präfix *ortho*, das mit dem kleineren statistischen Gewicht 1, d.h.

antiparallele Kernspins, mit para. Da das Pauli-Prinzip vorschreibt, dass sich die Gesamtwellenfunktion bei Teilchenaustausch antisymmetrisch verhalten soll, müssen die Rotationszustände gerader (positiver, symmetrischer) Parität mit den Spinfaktoren ungerader (negativer, asymmetrischer) Parität kombinieren, d.h. o-H₂ besetzt die ungeraden ($J = 1, 3, 5, \dots$); hingegen p-H₂ die geraden Rotationszustände ($J = 0, 2, 4, \dots$). Die statistischen Gewichte betragen 3 und 1, d.h. bei normalen Temperaturen verhält sich o : p wie 3 : 1.

Die Zahl der energetischen Übergänge wird durch sog. Auswahlregeln eingeschränkt. Für Zustände unterschiedlicher Symmetrie gilt das Übergangverbot

$$\text{antisym} \leftrightarrow \text{sym}$$

d.h. der Übergang zwischen diesen beiden Zuständen ist verboten. Wie Dennison 1927 als Erster erkannte, lassen sich Moleküle dieser Art als eine Mischung von 2 Modifikationen auffassen, den ortho- und para-Kernspinoisomeren.

Doch keine Regel ohne Ausnahme. Die obige Auswahlregel wird nicht vollkommen streng befolgt: über Wochen und Monate findet ein allmählicher Übergang statt. Nach Untersuchungen von Farkas und Harteck sowie Clusius und Bartholomé wird dieser durch Aktivkohle und eine Reihe paramagnetischer Substanzen, wie O₂, NO und gelösten Ionen, katalysiert.

Mit tiefen Temperaturen in Gegenwart eines solchen Katalysators gelingt die Herstellung von reinem p-Wasserstoff. Beim Aufwärmen besetzt dieser nur die geraden Rotationszustände mit $J = 0, 2, 4, \dots$.

Wegen der Kleinheit des magnetischen Protonenmoments wurden hohe Maßstäbe an die Durchführung der Experimente gelegt. Das SGE wurde im Prinzip beibehalten, jedoch in vielen Einzelheiten bedeutend verfeinert.

Prinzip ist die auf das zu bestimmende magnetische Moment μ im inhomogenen Magnetfeld mit dem Gradienten der magnetischen Induktion $\frac{\partial z}{\partial B}$ wirkende Kraft

$$K = \mu \frac{\partial z}{\partial B} \cos \alpha, \quad \alpha = \angle \mu, B$$

welche der Aufspaltung proportional ist.

Im Frühjahr 1932 wurde mit der Neukonstruktion der Apparatur begonnen, an der Otto Robert Frisch, Neffe von Lise Meitner, beteiligt war, der 1930 zum Molekularstrahlteam gestoßen war. Estermann weilte zu dieser Zeit als Stipendiat der Rockefeller-Foundation an der University of California. Die Experimentieranordnung hatte folgende Merkmale:

- sehr enge Spalte
- große Feldinhomogenität
- langer Strahlweg im inhomogenen Magnetfeld
- empfindliche Detektoren
- gutes Vakuumsystem.

Dennoch ergaben sich gewisse Fehlfunktionen von Apparaturteilen, die dazu führten, dass im November 1932 eine neue Apparatur von im Grunde gleichem Design, jedoch mit einigen Veränderungen in der Dimensionierung und mit technischen Verbesserungen aufgebaut wurde wie

- Vergrößerung des Magnetpolabstands von 0,5 auf 1 mm, unter Aufrechterhaltung von Feldstärke und Inhomogenität
- Verbesserung der Manometer-Detektoren: Verkleinerung und besseres Signal/Rauschen
- Verbesserung des Vakuumsystems durch in den USA gewonnene Erfahrungen.

Es galt, die beiden Unbekannten, Rotations- und Kernspinaufspaltung, für sich getrennt zu bestimmen. Für angenommene Werte sollten dann Schemata berechnet und mit dem Experiment verglichen werden.

Zunächst wurde am kernspinfreien p-H₂ die Rotationsaufspaltung bestimmt: Bei sehr tiefen Temperaturen geht Wasserstoff praktisch quantitativ in den dreimpulslosen $J=0$ -p-H₂ über. Beim Erwärmen auf Zimmertemperatur wird der $J=2$ -Zustand zu 46,1% besetzt (höhere J vernachlässigbar) und damit auch die Rotationsaufspaltung zugänglich, wonach ein Aufspaltungsmuster aus 5 äquidistanten ($= S_R$) Linien vorausgesagt wurde.

Nach Einweisung des Teams in die Herstellung von flüssigem Wasserstoff wurde etwa ein Liter flüssiger Wasserstoff hergestellt, aus dem wiederum mittels einer zufällig katalytisch sehr wirksamen Aktivkohle eine entsprechende Menge p-H₂ erzeugt werden konnte, der bei L-N₂-Temperatur in besonders reinen Glasgefäßen für die magnetischen Experimente aufbewahrt wurde.

Zur Bestimmung der Kernspinaufspaltung musste o-H₂ zugemischt werden. Dies geschieht am einfachsten durch Abkühlen auf LO₂-Temperatur, bei der die $J=0$ - und $J=1$ -Zustände praktisch gleichstark besetzt und höhere Rotationszustände vernachlässigbar sind. Wasserstoff besteht wegen der statistischen Gewichte 1 : 3 bei 90 K aus 25% p-H₂ und 75% o-H₂.

Überraschendes Ergebnis der Ablenkungsexperimente war ein Abweichen von der theoretischen Vorhersage: an Stelle der Rotationsaufspaltung von $3 \mu_N$ wurde eine solche von etwa $0,8-0,9 \mu_N$ beobachtet, d.h. im vorhergesagten Aufspaltungsschema mussten die Abstände zu den Rotations-satelliten stark verengt werden, und das Protonenmoment musste gegenüber dem Diracschen Wert auf das 2-3-fache vergrößert werden, um das Aufspaltungsbild richtig wiederzugeben.

Die experimentellen Ergebnisse mit der neuen Apparatur ergaben schließlich ein Rotationsmoment von $0,85 \mu_N$ und ein Protonenmoment von $2,5 \mu_N$ bei einem Fehler von 10%, hauptsächlich zurückzuführen auf die ungenaue Bestimmung der Feldinhomogenität. Das überraschende Ergebnis, vorgestellt auf der Solvay-Konferenz 1933, war, dass es nicht möglich ist, die Diracsche Theorie vom Elektron auf das Proton zu übertragen, indem man einfach die Elektronenmasse durch die Protonenmasse ersetzt.

Die 3 Hamburger haben nicht gezögert, ihre spektakulären Ergebnisse der Öffentlichkeit mitzuteilen. Nach einem kurzen Artikel in *Nature* folgten ausführlichere Darstellungen in der *Zeitschrift für Physik*:

So wurde auch Pauli eines Besseren belehrt, der vorher in schulmeisterlicher Manier, rechthaberisch auftretend, von einem überflüssigen, zeitvergeudenden Experiment gesprochen hatte, da das Ergebnis bereits bekannt sei. Die von Estermann, Frisch und Stern erstmals durchgeführte Bestimmung des anomalen magnetischen Moments des Protons hat bis heute keine zufriedenstellende Erklärung gefunden. Sie deutete bereits darauf hin, dass das Proton im strengen Sinne kein Elementarteilchen ist, sondern aus 2 up -Quarks und einem $down$ -Quark besteht. 10 Jahre später wurde die Entdeckung mit der Verleihung des Nobelpreises an Otto Stern gewürdigt.

Kernphysikalische Forschung in Hamburg unter dem Damoklesschwert des Nationalsozialismus

1932 wurden etwa gleichzeitig Deuterium und das Neutron entdeckt, was natürlich die "Scientifique Community" zur Bestimmung von deren Eigenschaften herausfordert. Es sei daran erinnert, dass bereits 1919 Stern zusammen mit seinem Kollegen Volmer der Frage nachgegangen waren, ob die Atommasse von Wasserstoff nicht mit einem Isotopengemisch der Massen 1 und 2 zu erklären sei.

Da in Deutschland kein schweres Wasser zugänglich war, erhielten die Hamburger Forscher 0,5 ml 85%iges D_2O von G. N. Lewis, von der University of California in Berkeley. Für das Deuteron $d = p + n$, damals noch Deuteron genannt, hatten optische Messungen einen Kernspin von $I = 1$ wahrscheinlich gemacht. Die in Hamburg meist bis spät in die Nacht durchgeführten Experimente ergaben wegen der Beimischung von HD und H_2 und wegen der auch hier wieder auftretenden Kernspin-Problematik keine sehr genauen Ergebnisse, ließen aber für das magnetische Moment des Deuterons einen viel kleineren Wert als für den gewöhnlichen Wasserstoff schließen. Das Ergebnis wurde von Estermann und Stern am 19. August 1933 unter dem Titel "Über die magnetische Ablenkung von Isotopen Wasserstoffmolekülen und das magnetische Moment des Deuterons" als Vorläufige Mitteilung als U.z.M. (Untersuchungen zur Molekularstrahlmethode aus dem Institut für physikalische Chemie der Hamburgischen Universität) Nr. 29 in der Z. Physik veröffentlicht. In Pittsburgh wurde das Experiment wiederholt und auf ein Moment von 0,8 bis 0,9 μ_N geschlossen.

Die Erklärung war, dass das Neutron ein dem Proton entgegengesetztes magnetisches Moment von etwa $-1,6 \mu_N$ besitzen musste. Der heute gültige Wert liegt bei $-1,9130427 \mu_N$.

Kurz vor dem Verlassen von Hamburg gelang O. R. Frisch, den Photonen-Rückstoß an einem Natrium-Atomstrahl mit Hilfe der Frequenzverschiebung zwischen Absorption und Emission nachzuweisen.

Die Veröffentlichung schließt mit dem Satz: „Es wäre zweifellos möglich gewesen, durch genauere Messungen wesentlich sauberere und einwandfreiere Ergebnisse zu erhalten, doch mußten die Versuche aus

äußeren Gründen vorzeitig abgebrochen werden.“

Wenige Wochen nach Beendigung der Ablenkungsversuche im Hamburger Laboratorium mussten die meisten Mitarbeiter dasselbe verlassen.

Abwicklung in Hamburg

Die Wandlung Deutschlands Anfang 1933 läßt sich stichwortartig wie folgt charakterisieren:

- 30. Jan. 1933 Hitler wird Reichskanzler
- 7. April 1933 Gesetz zur Wiederherstellung des Berufsbeamtentums (ermöglicht Entlassung politisch missliebiger und „nicht-arischer“ Beamter)
- 10. Mai 1933 Bücherverbrennungen
- 14. Juli 1933 Verbot aller Parteien mit Ausnahme der NSDAP

Die Machtübernahme durch die Nazis führte bald – wenn auch ein wenig langsamer als im übrigen Reichsgebiet – in der jetzt "Hansischen Universität" zu personellen, später auch zu materiellen Konsequenzen. An der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät in Hamburg traten Juli 1933 folgende Ereignisse ein:

- dem theoretischen Physiker Prof. Walter Gordon wird gekündigt,
- Sterns Mitarbeitern Estermann, Frisch und Schnurmann wird gekündigt und die Lehrbefugnis entzogen,
- dem Atom- und Astrophysiker Prof. Rudolf Minkowski wird die Lehrbefugnis entzogen,
- Stern wird aufgefordert, das Bild seines Lehrers Einstein aus seinem Arbeitszimmer zu entfernen.

Stern war ein aufmerksamer Beobachter der politischen Landschaft und eifriger Zeitungsleser. Die unaufhaltsame Verschlechterung der universitären Atmosphäre war nicht mehr zu leugnen.

Stern als Weltkriegsteilnehmer war von den Nürnberger Gesetzen ausgenommen. Während an anderen Universitäten die Terminierung zum sofortigen Berufsverbot führte, entschieden die mit einem gesunden Geschäftssinn ausgestatteten Hamburger Behörden, dass die Mitarbeiter ihre Arbeit solange fortsetzen durften, solange sie ihr Gehalt erhielten. Allerdings wurde diese Entscheidung weniger wegen der Forschung als vielmehr wegen der aufrechtzuerhaltenden Lehre getroffen.

Stern richtete am 2. Mai 1933 an den Dekan das folgende Schreiben:

"Ew. Spektabilität

beehere ich mich zu bestätigen, dass ich im Einverständnis und nach Rücksprache mit Ew. Spektabilität selbst, der Hochschulbehörde und Herrn Prof. Dr. P. Rabe die Vorlesung No 731 (Physikalische Chemie III. Teil) ausfallen lasse.

Ew. Spektabilität ergebenster

O. Stern"

Aus Zürich folgte am 30. Juni ein Brief mit dem Inhalt:

"An die Landesschulbehörde Abteilung Hochschulwesen z. Hd. Von Herrn Prof. Dr. Rein

Hierdurch bestätige ich der Landesschulbehörde meine telegraphisch ausgesprochene Bitte, mich zum 1. Oktober 1933 aus dem Staatsdienst zu entlassen. Ich sehe mich durch die Ereignisse der letzten Zeit zu diesem für mich äußerst schmerzlichen Schritte genötigt.

Falls die Landesschulbehörde eine nähere Begründung wünscht, stehe ich hierfür nach meiner voraussichtlich am Dienstag, d. 4. VII. 1933 erfolgenden Rückkehr von dem Kongress zur Verfügung.

Otto Stern

Professor für physikalische Chemie"

Auf der 209. Sitzung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Hamburg vom 12. Juli 1933 standen neben anderem drei Punkte der Tagesordnung

- Probevorlesung nebst Kolloquium Dr. Knauer,
- Entlassung des nichtbeamteten ao. Professors für Physik Walter Gordon,
- Wahl eines Berufungsausschusses für die Nachfolge Prof. Otto Stern.

Die Habilitation von Dr. Knauer, der sich ein wenig mit dem Zeitgeist eingelassen hatte, verlief problemlos und ihm wurde die *venia legendi* für Physik zuerkannt.

Zum Abschluss heißt es lapidar:

"Der Herr Dekan hat es übernommen, Herrn Stern für die der Fakultät geleisteten Arbeiten und Verdienste mündlich zu danken."

In der Emigration 1933-69

Stern verließ Hamburg und ging an das Carnegie-Institut nach Pittsburgh, wo ihm durch eine Forschungsprofessur und seinem Mitarbeiter Estermann als Associate Professor eine neue Wirkungsstätte angeboten worden war. Seine Apparaturen für die Molekularstrahl-Experimente aus Hamburg durfte er mitnehmen. Damit versiegte hier abrupt eine Quelle einzigartiger Kreativität.

Im Exil ist leider das große Potential Sterns versickert, "aus Gründen, die noch im Dunkel liegen", wie Wolf Walther schreibt, der versucht hat, den Spuren Sterns in den USA nachzugehen.

Im Mai 1934 haben Estermann und Stern vom Carnegie Institute of Technology aus eine Kurzmitteilung "Magnetic Moment of the Deuteron" in Nature veröffentlicht, in der sie das magnetische Moment mit $0,7 \mu_N$ angeben. 1935 folgte dann "Remarks on the measurement of the magnetic moment of the proton" in Science.

1937 hat er im *Physical Review* eine neue Methode zur Messung des Bohrschen Magnetons vorgestellt, die auf dem freien Fall der Teilchen im Gravitationsfeld basiert. Ferner wurde die Streuung langsamer Neutronen durch flüssigen o- und p-Wasserstoff untersucht und über die verfeinerte Bestimmung des magnetischen Protonenmoments berichtet.

Zehn Jahre später hat er mit der Methode des freien Falls die Geschwindigkeitsverteilung eines Cs-Molekularstrahls bestimmt und über die mittlere freie Weglänge von Cs-Atomen in He, Stickstoff und Cs-Dampf berichtet. In diese Zeit hinein fällt auch die Nobel Lecture *The method of molecular rays*, die er wohl anlässlich der 1944 – durch den Krieg verspäteten - Überreichung des Nobelpreises 1943 für Physik gehalten hat.

In der Laudatio heißt es:

„...für seine Beiträge zur Entwicklung der Molekularstrahlmethode und die Entdeckung des magnetischen Moments des Protons“.

Am 10. Dezember 1944 arrangierte die American Scandinavian Foundation ein Essen anlässlich der Verleihung der Nobelpreise 1943 und 1944 in Gegenwart des

schwedischen Botschafters Wollmar F. Bostroem im Waldorf-Astoria-Hotel, New York.

Erbsenzähler haben die Nominierungen zum Nobelpreis überprüft und sind auf folgende Ergebnisse gekommen: Es erhielt Einstein 66, Planck 74, Sommerfeld 80, jedoch Stern 81 Nominierungen!

1946 zieht sich Stern von seinem akademischen Amt zurück und übersiedelt nach Berkeley, Californien, dessen intellektuelle und klimatische Atmosphären ihm besser zusagen. Dort nahm er regelmäßig am Physikalischen Kolloquium teil und blieb interessiert an den großen Entdeckungen der Teilchen- und Astrophysik. Für Berkeley hatte er schon früher eine gewisse Vorliebe entwickelt, einesteils wegen der Kollegen, anderenteils wegen des Klimas. Vorher war er von der University of California als Visiting Professor eingeladen worden und erhielt 1930 den *honorary doctor of laws degree*. Jedoch, als er emigrieren musste, erhielt er von Berkeley kein Angebot. Anziehungspunkt waren auch seine zwei Schwestern, die Berkeley zum Wohnsitz gewählt hatten.

In Rev. Mod. Phys. folgten Überlegungen *On the term $k \ln n$ in the entropy*. Dann klafft eine 12-jährige Lücke bis zur letzten Publikation *On a proposal to base wave mechanics on Nernst's theorem* in den Helvetica Physica Acta. Das Nernstsche Theorem war Gegenstand von tiefem Interesse während seines ganzen Lebens.

Als Stern in die Vereinigten Staaten kam, neigte er dazu, sich abzuschotten. Noch zu seinem 70. Geburtstag ehrten ihn die mit der Molekularstrahltechnik Arbeitenden mit einem speziellen, ihm gewidmeten Buch. Doch danach wurde er selten auf Treffen gesehen. Wenige alte Freunde besuchten ihn gelegentlich, wobei klar wurde, dass er das Alleinsein schätzte.

Das Zentrum der physikalischen Forschung verlagerte sich nach Sterns Vertreibung zur Columbia University, wo Isidor Isaac Rabi, der 1927/28 ein Jahr lang mit Pauli in Hamburg gearbeitet und gelegentlich auch am hamburger Strahlungslaboratorium hospitiert hatte, eine neue Schule gegründet hatte, welche die Sternsche Tradition fortsetzte und sie durch die Einführung moderner Radiofrequenz- und Vakuumtechnik erweiterte.

Mit Hilfe dieser Atomstrahl-Resonanz-Methode ließen sich die Kernmomente sehr genau bestimmen. Rabi erhielt dafür, wie bereits erwähnt, 1944 – also ein Jahr später als Stern – den Nobelpreis für Physik.

Stern hat in den 50er und 60er Jahren fast jedes Jahr noch ausgedehnte Reisen nach Europa unternommen, wobei er mit alten Freunden wie Pauli, von Laue, Bohr zusammengekommen ist. Besonders hatte es ihm die Schweiz angetan, wo Chantarella im Engadin und Zürich seine bevorzugten Ziele waren. Deutschen Boden wollte er allerdings nicht wieder betreten. Hier gehen die Zeugnisse auseinander: Während Segrè davon spricht, dass er Deutschland nie wieder besucht habe, soll er seiner Nichte zufolge dieses Versprechen jedoch gebrochen und seinen Freund Max Volmer besucht haben, der betagt – er war 3 Jahre älter – und krank in Babelsberg lebte. Die Wiederaufnahme in die Göttinger Akademie der Wissenschaften hat er mit der Begründung abgelehnt, dass die Ermordung ungezählter unschuldiger Menschen in der Hitlerzeit es ihm unmöglich mache, sich wieder als Mitglied der Göttinger Akademie zu betrachten. Er hat ebenso die Bezüge eines Emeritus, die ihm zustanden, im Gegensatz zu Estermann, nie in Anspruch genommen.

Wie schon am Stern-Gerlach-Experiment klageworden sein sollte, lagen Sterns Fähigkeiten eher im Planen und Auswerten von Experimenten als in deren Durchführung. Er schloß sich lieber erfahreneren Experimentatoren an, die seine Fähigkeiten ergänzten, so geschehen im Falle von Gerlach, Estermann, Knauer und Frisch.

Stern war nie verheiratet. Als junger Mensch pflegte er gern zu tanzen. Er war ein guter Tennisspieler. In Hamburg entwickelte er sich zu einer Art Lebemann: Er pflegte in den besten Hotels abzusteigen, liebte gute Küche, teure Zigarren und im allgemeinen die Feinheiten des Lebens. Er war leicht erreichbar durch seine Studenten und Postdocs, mit denen er öfters sein Mittagessen einnahm, in Hamburg im "Hallali" am Neuen Jungfernstieg neben dem Hotel "Vier Jahreszeiten". Otto Robert Frisch schreibt in seiner Autobiographie „What little I remember“: „Beim Mittagessen wurde entweder über Physik oder das Kino gesprochen. Stern ging praktisch jeden Abend ins Kino, und manchmal sah er an einem Tag gleich zwei Filme. Er beklagte sich oft darüber, dass keine der Hamburger

Zeitungen ihn als Filmkritiker anstellen wollte. Er war der Ansicht, dass er in dieser Sparte allen anderen weit überlegen war, zudem würde er kein Honorar verlangen, da er das Geld nicht brauchte und ja sowieso ins Kino ging!“

Kino ging ihm einfach über alles. In Hamburg musste ihm sein Begleiter Wolfgang Pauli sagen, ob er den Film bereits gesehen hätte oder nicht. In den Hamburger Jahren soll er einmal beiläufig bemerkt haben, dass es doch schön wäre, während eines guten Films zu sterben. Dies sollte in Erfüllung gehen: Am 17. August 1969 erleidet er während einer Filmvorführung einen Herzanfall, an dem er schließlich 81-jährig gestorben ist.

Sein Grab befindet sich zusammen mit dem seiner 1945 verstorbenen Schwester Elise auf dem Sunset View Cemetery in Kensington, Urnengarten, Reihe 12, Grab 69A.

Nachruf von Emilio Segrè

Stern war einer der größten Physiker dieses Jahrhunderts. Er veröffentlichte relativ wenige Arbeiten, aber von welchem Gehalt waren die, die er schrieb! Der Leser wusste nicht, was er am meisten bewundern sollte, die Einfachheit und die Tiefe der Ideen, die Genialität der angewandten Techniken oder die unweigerliche Stärke der Schlussfolgerungen.

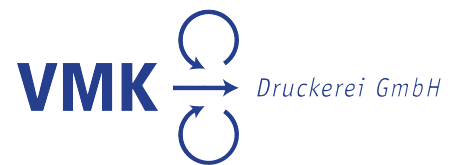
Literatur

1. Publications of Otto Stern, Z. Phys. D - Atoms, Molecules and Clusters **10**, 117 (1988)
2. E. Segrè, Die großen Physiker und ihre Entdeckungen, R. Piper & Co, München, Zürich, 1981
3. W. Finkelburg, Einführung in die Atomphysik, Springer, Berlin•Göttingen•Heidelberg, 1964
4. I. N. Levine, Physical Chemistry, Mac-Graw Hill, New York, 1988
5. I. N. Levine, Molecular Spectroscopy, Wiley, New York, London, Sydney, Toronto, 1975
6. H. Haken, H. C. Wolf, Molekülphysik und Quantenchemie, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1992
7. P. W. Atkins, Physikalische Chemie, VCH Weinheim, 1996
8. H. Schmidt-Böcking, K. Reich, Otto Stern, Societäts-Verlag, Frankfurt, 2011
9. Brockhaus abc Physik, VEB F. A. Brockhaus, Leipzig, 1972
10. Der Brockhaus Naturwissenschaft und Technik, F.A. Brockhaus, Mannheim•Leipzig, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 2003
11. Brockhaus Nobelpreise, F. A. Brockhaus, Mannheim•Leipzig, 2004
12. Lexikon der bedeutenden Naturwissenschaftler, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 2007
13. W. Trageser (Hrsg.), Stern-Stunden Höhepunkte Frankfurter Physik, J. W. Goethe-Universität, Frankfurt am Main, 2004
14. D. Meschede, Gerthsen Physik, Springer, Berlin•Göttingen•Heidelberg, 2002
15. fachlexikon abc forscher und erfinder, Harri Deutsch, Thun•Frankfurt am Main, 1992
16. Lexikon bedeutender Chemiker, VEB Bibliographisches Institut, Leipzig, 1988
17. W. Schütz, Persönliche Erinnerungen an die Entdeckung des Stern-Gerlach-Effektes, Phys. Blätter **25**, 343 (1969)
18. W. Gerlach, Otto Stern zum Gedenken, Phys. Blätter **25**, 412 (1969)
19. W. Gerlach, Zur Entdeckung des "Stern-Gerlach-Effektes", Phys. Blätter **25**, 472 (1969)
20. P. E. Toschek, Zum hundertsten Geburtstag von Otto Stern – Festkolloquium in Hamburg, Phys. Blätter **44**, 78 (1988)
21. I. Estermann, Otto Stern 1888-1969, Haifa
22. E. Segrè, Otto Stern 1888-1969 – A Biographical Memoir, National Academy of Sciences, Washington D. C., 1973
23. I. Estermann, Am. J. Phys. **43**, 661 (1975)
24. N. F. Ramsey, Z. Phys. D **10**, 121 (1988)
25. B. Friedrich, D. Herschbach, Physics Today **56**, 53 (2003)
26. W. Walter in Krause, Huber, Fischer (Hrsg.), Hochschulalltag im 'Dritten Reich'. Die Hamburger Universität 1933-1945, D. Reimer Verlag, Hamburg 1991
27. P. E. Toschek, Hamburgs Geschichte einmal anders, Entwicklung der Naturwissenschaften, Medizin und Technik – Teil 1, S. 151, Norderstedt: Books on Demand, 2007
28. Vorlesungsverzeichnisse der Universität Hamburg 1923-33
29. K. Witte, Zur Geschichte des Physikalischen Staatsinstituts und der Physik in Hamburg, UniHH, 1985
30. R. Frisch. Z. Phys. **86**, 42 (1933)
31. O. R. Frisch, Woran ich mich erinne – Physik und Physiker meiner Zeit, Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft mbH Stuttgart 1981
32. E. Segrè, OTTO STERN, Biographical Memoir, National Academy of Sciences, Washington D. C., 1973
33. F. Hund, Geschichte der Quantentheorie, Bibliographisches Institut, Mannheim, 1967
34. W. Walter in Universität Hamburg 1919-1969, Selbstverlag der Universität, Hamburg, 1969, S. 262 ff.
37. O. Blumtritt, Max Volmer 1885-1965 – Eine Biographie, TU Berlin, Berlin, 1985
38. S. Holzner, Quantenphysik für Dummies, Wiley-VCH, Weinheim, 2012
39. M. Scharnweber, Das magnetische Moment des Protons, Hauptseminarvortrag, hep.phy.tu-dresden.de/Home/Seminare/HS2005/scharnweber.pdf

βει υης ζτιωωτ διε ζηεωιε...

... präsentieren Sie zielgerecht Ihre Produkte und Dienstleistungen!

- » **preiswerter
All-in-one-Service!**
- » **Druckerzeugnisse von A-Z**
- » **Lernen Sie uns kennen –
wir visualisieren Ihr Know-how**



VMK Druckerei GmbH
Faberstrasse 17
67590 Monsheim
Tel. 0049.6243.909.110
Fax 0049.6243.909.100
info@vmk-druckerei.de
www.vmk-druckerei.de



Chemie, die verbindet. Damit Elektroautos lange Strecken lieben.

Gemeinsam mit Partnern aus der Wissenschaft und Wirtschaft entwickeln Forscher der BASF Materialien für leistungsstärkere und zuverlässigere Batterien. Wenn wir zukünftig in Elektroautos weite Strecken fahren, dann ist das Chemie, die verbindet. Von BASF.

www.electromobility.basf.com

 **BASF**

The Chemical Company