

Maximilian Peter-Paul Kovar

Theoretische Chemie.

Brücke zwischen Experiment und Wirklichkeit

Makroskopisch vs. Mikroskopisch

Chemie ist die Wissenschaft, die sich mit der Natur der Materie, ihren Transformationen und Eigenschaften beschäftigt. Ihre Sprache ist jedoch zunächst die des Beobachtbaren: Experimente liefern Farben, Temperaturen, Reaktionsgeschwindigkeiten oder Aggregatzustände. Doch was im Labor letztlich messbar wird, ist das makroskopische Echo unzähliger mikroskopischer Vorgänge – Bewegungen von Atomen, Wechselwirkungen von Elektronen, ständige Umordnungen molekularer Strukturen. Zwischen diesen beiden Ebenen – dem Beobachtbaren und dem tatsächlich Geschehenden – liegt eine epistemische Kluft.

Die theoretische Chemie dient als Brücke über diese Kluft. Sie übersetzt das Sichtbare in Modelle, die auf quantenmechanischen, klassisch-physikalischen oder statistischen Prinzipien beruhen, und erlaubt so einen rationalen Zugang zur mikroskopischen Wirklichkeit. Durch mathematische Formulierung und Simulation entsteht ein zweiter Zugangsweg zur Natur – einer, der nicht misst, sondern berechnet, nicht beobachtet, sondern vorhersagt. Der Vortrag fragte daher: Wie lässt sich aus solchen Modellen Wirklichkeit gewinnen? Und wie verändert sich unser Verständnis von chemischer Realität, wenn sie nicht nur im Reagenzglas, sondern auch im Rechner stattfindet?

Das Erkenntnisobjekt der Chemie ist vielschichtig: Einerseits begegnet sie uns phänomenologisch, wenn man Stoffe mischt, Temperaturen misst und Produkte isoliert. Diese Phänomene sind makroskopischer Natur – sie beschreiben Emergenzen, die aus dem kollektiven Verhalten unzähliger Teilchen entstehen. Farbe, Dichte, Leitfähigkeit oder Viskosität sind beobachtbare Manifestationen, die jedoch nur indirekt Auskunft über die zugrundeliegende Struktur geben.

Die mikroskopische Ebene hingegen beschreibt, was tatsächlich geschieht: wie sich Elektronenwolken neu organisieren, wie Bindungen entstehen und zerbrechen, wie Atome in Schwingung geraten. Hier ist die Wirklichkeit keine Frage des Sehens, sondern des Rechnens. Sie entfaltet sich in Wellenfunktionen, Potentialhyperflächen und Energieprofilen – Abstraktionen, die zwar mathematisch sind, aber physikalische Wahrheit tragen.

Diese Spannung zwischen Makro- und Mikrowelt prägt die Methodik der Chemie: Das Experiment liefert Daten über das, was sich zeigt; die Theorie sucht die Gesetze dessen, was sich verbirgt. Erst im Zusammenspiel entsteht ein kohärentes Bild der materiellen Welt.

Die Brücke: Modellbildung und Simulation

Die theoretische Chemie bildet die methodische Verbindung zwischen den beiden Sphären. Sie versucht nicht, das Experiment zu ersetzen, sondern es zu vervollständigen – indem sie Modelle schafft, die das Verhalten von Materie aus ihren konstituierenden Prinzipien heraus erklären. Dabei werden experimentell beobachtbare Eigenschaften wie Stabilität, Reaktionsgeschwindigkeit oder Leitfähigkeit auf die Ebene atomarer und elektronischer Wechselwirkungen zurückgeführt.

Grundlage dieser Brückenbildung ist die Modellierung. Jedes Modell ist eine idealisierte Repräsentation chemischer Wirklichkeit: Es abstrahiert, vereinfacht und macht rechnerisch zugänglich, was auf direktem Wege unmessbar bleibt. Je nach Fragestellung kann dieses Modell quantenmechanisch, klassisch-mechanisch oder statistisch sein.

Ab-initio-Methoden und die Dichtefunktionaltheorie beschreiben Elektronen und Bindungen auf Grundlage der Quantenmechanik, während Molekulardynamik und Kraftfeldmodelle klassisch-physikalische Näherungen nutzen, um Bewegungen und Wechselwirkungen von vielen Millionen Atomen zu simulieren.

Um die Brücke zwischen Beobachtung und Berechnung erfahrbar zu machen, wurden im Vortrag mehrere Fallbeispiele vorgestellt, die zeigen, wie sich mikroskopische Realität durch Modellbildung rekonstruieren lässt.

Einige Fallbeispiele

Das erste Beispiel betraf eine klassische organische Reaktion. Im Labor erscheint sie als makroskopisches Geschehen – das Entstehen und Verschwinden von Farben, Temperaturänderungen, Produktbildung. Im Modell dagegen wird sie zu einer Abfolge atomarer Umordnungen, deren Übergangszustände, Energien und Zwischenprodukte sich mit quantenchemischen Methoden berechnen lassen. Während das Experiment isolierte Resultate liefert, erlaubt die Theorie den Blick in den Reaktionsverlauf selbst.^{1,2}

Ein weiteres Beispiel entstammte der Materialchemie: Experimentell wurden nanoporöse Materialien gefunden, die die Fähigkeit haben, auch kleinste Mengen Luftfeuchtigkeit zu binden und somit auch in trockenen Regionen möglicherweise Zugang zu Trinkwasser zu gewährleisten. Für die Weiterentwicklung dieser Materialien hin zu einem tatsächlich anwendbaren Produkt ist es aber vonnöten, besser zu verstehen, wie sie zu dieser Eigenschaft kommen. Molekulardynamische Simulationen ermöglichen es, dies direkt auf atomarer Ebene zu analysieren. Sie zeigen, wie sich makroskopische Parameter wie Wasseraufnahme und Leitfähigkeit aus mikroskopischen Fluktuationen ergeben – und machen so experimentell schwer zugängliche Mechanismen sichtbar.^{3–5}

Mit ähnlichen Methoden können sogenannte ionische Flüssigkeiten – Salze, die auch bei niedrigen Temperaturen als Schmelze vorliegen und die in vielversprechender Weise eine hohe Leitfähigkeit bei gleichzeitiger Nicht-Entflammbarkeit, biologischer Abbaubarkeit und geringer Toxizität versprechen – erforscht werden. Das Ziel hierbei ist es, die besten Flüssigkeiten für sogenannte Superkondensatoren, die zukünftig als

Energiespeicheralternative zu herkömmlichen
Batterien und Akkumulatoren dienen könnten, zu identifizieren.^{6–10}

Auch jenseits physikalischer Fragestellungen kommen rechnergestützte Ansätze zum Einsatz: Im Bereich der *Cheminformatics* etwa werden riesige Molekülbibliotheken algorithmisch durchsucht, um Kandidaten für neue Wirkstoffe zu identifizieren – ein Ansatz, der experimentelle Screeningverfahren zunehmend ersetzt.¹¹

Bereits mit reiner Schulmathematik lässt sich ein simples Modell für sogenannte Tenside erstellen: Tenside sind Moleküle, die gleichzeitig einen hydrophoben und einen hydrophilen Teil aufweisen. Löst man sie in Wasser, werden sie sich zunächst an der Oberfläche aufhalten, wo ihre hydrophobe Domäne der Luft, ihre hydrophile Domäne dem Wasser entgegengestreckt ist. Erhöht man die Konzentration dieser Tenside, auch nachdem jeder Platz an der Oberfläche besetzt ist, so reorganisieren sie sich auf submikroskopischer Ebene im Wasser zu bestimmten geometrischen Formen. Diese können Mizellar (kugelförmig), zylindrisch oder lamellar (schichtartig) sein. Eine der verlässlichsten Methoden zur Vorhersage dieser Strukturen basiert auf drei nur durch Bindungslängen und Atomradien errechenbaren Größen: Der Länge l_0 der hydrophoben Domäne und ihrem Volumen V_0 sowie der Fläche σ_A , zwischen hydrophober und hydrophiler Domäne innerhalb des Moleküls. Deren Herleitung (am Beispiel einer kugelförmigen Mizelle) verläuft folgendermaßen: Bei g Molekülen ergibt sich das Gesamtvolumen einer Mizelle als $V_{sphere} = gV_0$, wobei das Gesamtvolumen einer Kugel jedenfalls $V_{sphere} = \frac{4}{3}\pi r^3$ entspricht. Demnach gilt $gV_0 = \frac{4}{3}\pi r^3$. Außerdem kann über die Oberfläche einer solchen Mizelle angenommen werden, dass $A_{sphere} = g\sigma_A$ gilt, wobei die Oberfläche einer Kugel stets $A_{sphere} = 4\pi r^2$ ist. Demnach gilt $g\sigma_A = 4\pi r^2$. Formt man so beide erhaltenen Ausdrücke auf den Radius r um, für den schlussendlich gelten muss, dass er maximal gleichgroß wie die Länge des hydrophoben Restes sein kann ($r \leq l_0$), da sich sonst im inneren ein Vakuum bilden müsste, erhält man $r = \frac{3V_0}{\sigma_A}$. Setzt man diesen Ausdruck nun ein und bringt alle Parameter auf eine Seite der Gleichung, erhält man $\frac{V_0}{\sigma_A l_0} \leq \frac{1}{3}$. Mit anderen Worten: Aus Tensiden in Lösung kann sich nur dann eine kugelförmige Struktur bilden, wenn das Verhältnis zwischen dem Volumen der hydrophoben Domäne einerseits und andererseits dem Produkt aus der Fläche zwischen hydrophober und hydrophiler Domäne innerhalb des Moleküls und der Länge der hydrophoben Domäne kleiner oder gleich $\frac{1}{3}$ ist. So lässt sich beispielsweise herausfinden, welche Moleküle in Waschmitteln und Seifen als Tenside taugen und welche nicht. Von der Sauberkeit eines Hemdes über die Textur einer Gesichtsscreme – überall entscheidet die molekulare Selbstorganisation über den makroskopischen Effekt.¹²

In all diesen Fällen zeigt sich das Grundanliegen der theoretischen Chemie deutlich: Sie schafft Verständlichkeit, indem sie das Sichtbare in Modelle übersetzt, die das Unsichtbare beschreiben. Von Reaktionsmechanismen über Materialeigenschaften bis hin zur Selbstorganisation molekularer Systeme – die theoretische Chemie verwandelt

Beobachtung in Erklärung und macht so ihrem
Anspruch als Brücke zwischen Experiment und Wirklichkeit alle Ehre.

Literatur

1. Zülicke, L. *Molekulare Theoretische Chemie - Eine Einführung*. (Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, 2015).
2. Leach, A. R. *Molecular Modelling - Principles and Applications*. (Pearson Education Limited, 2001).
3. Kim, H. *et al.* Adsorption-based atmospheric water harvesting device for arid climates. *Nat. Commun.* **9**, 1191 (2018).
4. Zheng, Z., Hanikel, N., Lyu, H. & Yaghi, O. M. Broadly Tunable Atmospheric Water Harvesting in Multivariate Metal–Organic Frameworks. *J. Am. Chem. Soc.* **144**, 22669–22675 (2022).
5. Schweng, P., Mayer, F., Galehdari, D., Weiland, K. & Woodward, R. T. A Robust and Low-Cost Sulfonated Hypercrosslinked Polymer for Atmospheric Water Harvesting. *Small* **19**, 2304562 (2023).
6. Singh, S. K. & Savoy, A. W. Ionic liquids synthesis and applications: An overview. *J. Mol. Liq.* **297**, 112038 (2020).
7. Welton, T. Ionic liquids: a brief history. *Biophys. Rev.* **10**, 691–706 (2018).
8. Eftekhari, A. Supercapacitors utilising ionic liquids. *Energy Storage Mater.* **9**, 47–69 (2017).
9. Hunt, P. A. The simulation of imidazolium-based ionic liquids†. *Mol. Simul.* **32**, 1–10 (2006).
10. Schröder, C., Haberler, M. & Steinhauser, O. On the computation and contribution of conductivity in molecular ionic liquids. *J. Chem. Phys.* **128**, 134501 (2008).
11. Leach, A. R. & Gillet, V. J. *An Introduction to Cheminformatics*. (Springer, 2007).
12. Israelachvili, J. N., Mitchell, D. J. & Ninham, B. W. Theory of self-assembly of hydrocarbon amphiphiles into micelles and bilayers. *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2* **72**, 1525 (1976).