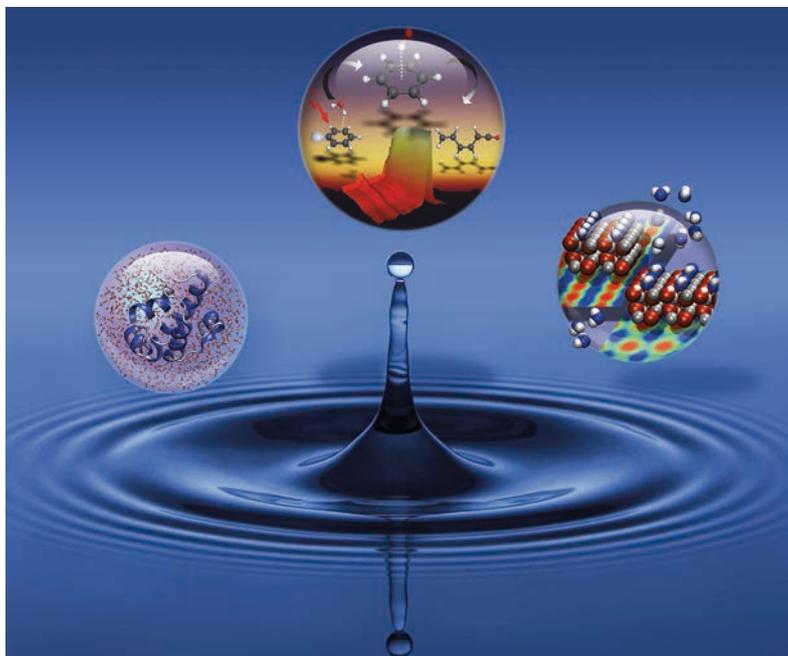


Eine Lösung für Lösungen

Der Exzellenzcluster RESOLV hat sich zum Ziel gesetzt, ein übergreifendes Verständnis für das Lösen von Substanzen zu entwickeln.

Stefan Jorda

Koffeinfreier Kaffee, elektrochemische Energiespeicher oder die Proteinfaltung – auf den ersten Blick haben diese Themen nichts miteinander zu tun, doch tatsächlich spielen immer Lösungsmittel eine entscheidende Rolle. Brüht man beispielsweise Kaffeebohnen mit heißem Wasser auf, lösen sich Koffein und Geschmacksstoffe, und das Ergebnis ist gewöhnlicher Kaffee. Ganz anders, wenn man überkritisches Kohlendioxid statt Wasser nimmt: Dann geht nur das Koffein in Lösung, die Geschmacksstoffe aber bleiben in den Bohnen, die sich nun als koffeinfreier Kaffee aufbrühen lassen. Die Rolle des Lösungsmittels bei diesem und vielen anderen Prozessen auf der Ebene einzelner Moleküle zu verstehen und ein vollständiges Bild zu entwickeln, ist Ziel des Exzellenzclusters RESOLV (Ruhr Explores SOLVation), in dem Chemiker, Chemieingenieure, Physiker und Biologen der Ruhr-Universität Bochum (RUB) sowie benachbarter Universitäten und Forschungsinstitute zusammen arbeiten. „Wir möchten ‚Solvation Science‘ als eigenes interdisziplinäres Forschungsfeld etablieren, ähnlich wie die Neurowissenschaften“, sagt Martina Havenith, Professorin für



Lösungsmittel wie Wasser spielen eine Schlüsselrolle bei biomolekularen Prozessen wie der Proteinfaltung (linkes In-

set), bei chemischen Reaktionen (Mitte) oder der Ladungstrennung an Grenzflächen (rechts).

Physikalische Chemie und Cluster-Koordinatorin.

Löst man eine Substanz in Wasser, so lagern sich Wassermoleküle über Wasserstoffbrücken an die Moleküle oder Ionen des gelösten Stoffs an. Diese Hydratation – oder allgemeiner Solvation bei beliebigen Lösungsmitteln – ist einer der grundlegendsten Vorgänge in der

Chemie, in der chemischen Verfahrenstechnik und in der Biologie. Sie spielt zum Beispiel eine wichtige Rolle für die Funktion von Proteinen. In der Vergangenheit hat sich die Forschung dennoch ausschließlich auf die „Hauptakteure“ konzentriert. „Das Wasser wurde gesehen als Zuschauermenge, die zurückweicht, wenn die Hauptdarsteller,

DER EXZELLENZCLUSTER „RESOLV“

Beteiligte Institutionen:

Ruhr-Universität Bochum, Technische Universität Dortmund, Universität Duisburg-Essen, Fraunhofer-Institut für Umwelt-, Sicherheits- und Energietechnik, Max-Planck-Institute für Chemische Energiekonversion, Eisenforschung sowie Kohlenforschung.

Koordinatorin: Prof. Dr. Martina Havenith

Forschungsgebiete:

■ **Solvation in chemischen Prozessen:** Entwicklung und Optimierung von

wichtigen chemischen Prozessen in Labor und Industrie. Ziel ist es, spezifische Solvationseffekte im molekularen Detail zu verstehen für eine breite Vielfalt an chemischen Reaktionen (Koordinator: Prof. Dr. Wolfram Sander).

■ **Solvation und biomolekulare Funktion:** Wasser hat eine vitale Funktion in den meisten biomolekularen und zellulären Prozessen. Die Verbindung der Solvationsdynamik mit der biomolekularen Funktion soll vielfältige Durchbrüche ermöglichen (Prof. Dr. Roland Winter).



■ **Ionen-Solvation und Ladungstransfer an Grenzflächen:** Grenzflächen spielen eine zentrale Rolle in den Molekularwissenschaften. Eine grundlegende Herausforderung besteht darin, die Solvation von festen Grenzflächen auf einer molekularen Ebene zu verstehen (Prof. Dr. Dominik Marx).

die Proteine, den roten Teppich betreten“, erläutert Havenith. Doch inzwischen hätten Experimente gezeigt, dass die Wechselwirkung zwischen Proteinen und Wasser stärker berücksichtigt werden muss. Daher besteht der besondere Ansatz von RESOLV darin, das Lösungsmittel generell als Akteur und nicht nur als Beobachter zu verstehen.

Neue experimentelle Methoden erlauben es dazu, einzelne Moleküle zu beobachten. Wasserstoffbrücken öffnen und schließen sich bei Raumtemperatur etwa einmal pro Pikosekunde, „wie bei einem Disco-Tänzer, der sich hin und wieder dreht und mit jemand anderem weiter tanzt“, sagt Havenith. Die Terahertz-Spektroskopie zeigt, dass Proteine den Tanz von bis zu tausend Wassermolekülen beeinflussen können, und zwar biologisch aktive Proteine stärker als andere. Dies wirft die Frage auf, ob der Tanz eine funktionelle Rolle spielt. Parallel zu den experimentellen Techniken gab es auch große Fortschritte in der Theorie, die es heute erlaubt, bis zu hundert Wassermoleküle gleichzeitig zu simulieren. „Jetzt ist genau der Zeitpunkt, an dem sich die mikroskopischen Beobachtungen einzelner Moleküle mit den Ergebnissen der Simulationen treffen“, betont Havenith.

Neben der Rolle des Wassers in biomolekularen Prozessen gehören zu den drei thematischen Säulen des Clusters die Rolle der Solvatation in chemischen Reaktionen sowie der Ladungstransfer an Oberflächen. Dabei geht es unter anderem um die Frage, ob sich Reaktionen durch die Wahl des Lösungsmittels gezielt steuern lassen, beispielsweise, um Produkte eindeutiger Händigkeit zu erzeugen. Solche „enantiomeren-reinen“ Reaktionen sind insbesondere für Arzneimittel wichtig, jenseits von empirischen Regeln bislang aber nicht verstanden.⁴¹⁾ Der Ladungstransfer spielt eine zentrale Rolle für Energieumwandlung und -speicherung in Brennstoffzellen oder Batterien. Auch hier erlauben es hochauflösende mikroskopische Methoden beispielsweise, ein einzelnes Wassermolekül auf einer Pla-

tinoberfläche zu untersuchen oder die Frage zu beantworten, wie groß der kleinste Tropfen Salzsäure ist, sprich: wie viele Wassermoleküle notwendig sind, bis in einem HCl-Molekül Ladungstrennung auftritt. Auch wenn die Solvatation ein zentrales Thema der Chemie ist, liefert die Physik mit der Methodenentwicklung in der Theorie sowie bei Spektroskopie und Mikroskopie oder den THz-Quellen essenzielle Beiträge zu all diesen Fragen.

Vernetzt und familienfreundlich

Im Rahmen der Exzellenzinitiative erhält RESOLV 28 Millionen Euro über die Laufzeit von fünf Jahren, die im Herbst 2012 begonnen hat. Bis zur Halbzeit wurden vier neue Professoren berufen und mehrere Nachwuchsgruppen zwischen den beteiligten Max-Planck-Instituten und der RUB eingerichtet. Durch aktive Kooperationen mit den außeruniversitären Einrichtungen ist eine neue Kultur der Zusammenarbeit entstanden, und auch die Industrie beteiligt sich. So finanziert das Unternehmen Evonik eine Stiftungsprofessur. In die an RESOLV angeschlossene International Faculty sind weltweit führende Gruppen u. a. in Cambridge, Berkeley oder Yale eingebunden. Damit verknüpft sind Postdoc-Stellen, deren Finanzierung sich Cluster und Partnerinstitution teilen, sodass Postdocs von der Expertise der Partner profitieren und ihr eigenes Netzwerk aufbauen können. Die 80 Doktoranden des Graduiertenkollegs sollen drei Monate an einer Partnerinstitution verbringen. „Moderne Führungskräfte in Industrie und Wissenschaft müssen international kooperieren und sich in internationaler Umgebung zurechtfinden“, begründet Havenith.

Die Physikochemikerin ist eine der wenigen Sprecherinnen eines Exzellenzclusters und hat während ihrer eigenen Karriere weibliche Vorbilder vermisst. Daher führt RESOLV gemeinsam mit einem Cluster-ähnlichen Forschungsprogramm an der ETH Zürich unter der Leitung von Ursula Keller ein

professionelles Coaching speziell für Frauen durch, um Führungskräfte auszubilden. Zu den „gender activities“ gehören auch ein aktives Recruiting von Wissenschaftlerinnen sowie eine sehr familienfreundliche Politik: Da eine schwangere Chemie-Doktorandin aufgrund des Mutterschutzgesetzes nicht mehr im Labor arbeiten darf, erhält sie eine studentische Hilfskraft, welche die Messungen durchführt. Dadurch kann die Doktorandin ihr Projekt weiterführen und gleichzeitig Führungsqualitäten erwerben. Ähnlich verfahren die Bochumer auch bei Professorinnen oder Postdocs, die bei Schwangerschaft Mitarbeiter auf einer Qualifikationsstufe unter ihrer eigenen erhalten.

Unabhängig und parallel zu dem Exzellenzcluster hatten die Wissenschaftler von RESOLV auch einen Forschungsbau beantragt, der ebenfalls bewilligt wurde. Das „Zentrum für molekulare Spektroskopie und Simulation solvensgesteuerter Prozesse“ (ZEMOS) entsteht derzeit auf dem Campus der RUB und wird Platz für hundert Wissenschaftler und Laborräume bieten. Der 44 Millionen Euro teure Forschungsbau soll im Frühjahr 2016 bezugsfertig sein, also recht knapp vor dem Ende der Förderperiode des Clusters. Die Verantwortlichen von RESOLV rechnen denn auch fest mit der Möglichkeit, ungeachtet des Endes der Exzellenzinitiative einen Verlängerungsantrag stellen zu können. Schließlich gibt es noch viel zu tun, denn – so Martina Havenith – „was in Lehrbüchern über die Rolle von Wasser in biologischen Prozessen steht, ist vermutlich so nicht richtig“.

+) Thalidomid, Ende der 1950er-Jahre als Contergan verkauft, ist eine Verbindung mit zwei Enantiomeren, die eine beruhigende bzw. fruchtschädigende Wirkung haben.

DIE EXZELLENZCLUSTER

In loser Folge stellt das Physik Journal die Cluster der zweiten Runde der Exzellenzinitiative mit Schwerpunkt in der Physik bzw. starker Beteiligung von Physikern vor:

- Center for Advancing Electronics Dresden (cfaed), Dresden (April 2014, S. 26)
- Precision Physics, Fundamental Interactions and Structure of Matter (PRISMA), Mainz (Juni 2013, S. 24)
- Hearing4all, Oldenburg (Juli 2014, S. 24)
- Ruhr Explores Solvation (RESOLV), Bochum
- The Hamburg Centre for Ultrafast Imaging (CUI), Hamburg (November 2013, S. 20)