

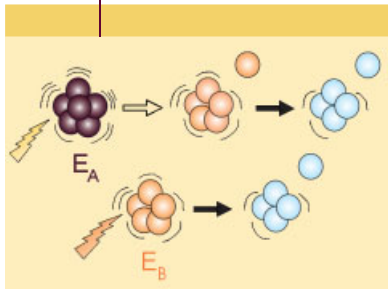
PHYSIKALISCHE CHEMIE

## Wie stabil sind Moleküle?

Das wohl wichtigste Charakteristikum von zusammengesetzten Teilchen wie Molekülen, Fullerenen, Polymeren oder Clustern ist ihre Stabilität. Bisherige Methoden zur Bestimmung von Stabilitäten sind jedoch auf Modellannahmen angewiesen und daher mit Unsicherheiten behaftet. Ein neues Verfahren ermöglicht eine von Modellen unabhängige Bestimmung von Stabilitäten [1].

Der zweistufige Zerfall (oben) und die zugehörige „Thermometer-Reaktion“ (unten) am Beispiel der Photodissoziation atomarer Cluster.

ABB. 1 PHOTODISSOZIATION

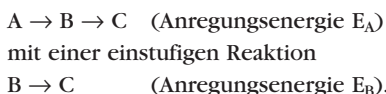


Die charakteristische Größe bei der Stabilität von Teilchen ist die Dissoziationsenergie, also die Mindestenergie, die aufgewendet werden muss, um eine Zerfallsreaktion einzuleiten. Im Fall von Teilchen, die aus mehreren Atomen zusammengesetzt sind, erfolgt der Zerfall im Allgemeinen jedoch nicht sofort, selbst wenn sie über die Dissoziationsenergie hinaus angeregt wurden. Stattdessen wird die Anregungsenergie statistisch auf die Freiheitsgrade des Systems verteilt, vor allem auf die der atomaren Schwingung. Erst wenn die Energiemenge, die sich aufgrund der statistischen Umverteilung zufällig in einem geeigneten Freiheitsgrad befindet (etwa in der Schwingung eines Oberflächenatoms), hinreichend groß ist, kommt es schließlich zum Zerfall.

Die Wahrscheinlichkeit dafür, und damit die beobachtete Zerfallsrate, ist im Allgemeinen umso höher, je kleiner das Teilchen ist, das heißt je weniger Freiheitsgrade zur Verfügung stehen, und je weiter die Anregungsenergie die Dissoziationsenergie übertrifft. Selbst bei relativ kleinen Teilchen ist daher oft ein Vielfaches der Dissoziationsenergie notwendig, um einen Zerfall beobachten zu können.

Im Laufe der Zeit wurden die verschiedensten Ansätze entwickelt, um die Dissoziationsenergie aus beobachteten Teilcheneigenschaften zu rekonstruieren. Neben thermochemischen und spektroskopischen Verfahren kommen insbesondere statistische Theorien des oben beschriebenen „unimolekularen“ Zerfalls zur Anwendung. Dafür lässt sich die experimentelle Problematik auch folgendermaßen formulieren: Bei der Zerfallsmessung nach einer Anregung bleibt unbestimmt, welche Restenergie in den Produkten verbleibt. Es fehlt gewissermaßen ein „Thermometer“ dafür. Daher sind diese Verfahren durchweg auf Modellannahmen über das untersuchte Teilchen angewiesen und erweisen sich als anfällig für systematische Fehler.

Die neue, Modell-unabhängige Bestimmung von Dissoziationsenergien beruht auf einem Vergleich einer zweistufigen Reaktion der Form



Wenn eine messbare Eigenschaft der Reaktion  $B \rightarrow C$  (beispielsweise die Zerfallsrate oder die Verteilung

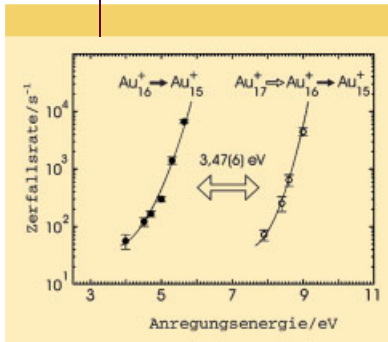
auf verschiedene Zerfallswege) von der Anregungsenergie abhängt, kann diese Reaktion als „unkalibriertes Thermometer“ für die Energie des Zwischenzustandes B dienen [1, 2]. Wählt man die beiden Energien  $E_A$  und  $E_B$  derart, dass dieses Thermometer in beiden Fällen denselben Wert anzeigt, dann ergibt sich für die Energie der Reaktion  $A \rightarrow B$  die Differenz der Anregungsenergien  $E_A - E_B$ . Auf diese Weise kann durch den Zugewinn an Information bei der Kombination zweier Messungen eine Modellierung der Reaktion umgangen werden.

Die neue Methode wurde zunächst für atomare Goldcluster  $Au_n^+$  ( $n=14-24$ ) entwickelt [1]. Die Rate des unimolekularen Zerfalls (Abbildung 1) dient dabei als energieabhängige Messgröße (Abbildung 2). Bisherige Modell-abhängige Methoden ergaben Werte, die weit über die statistischen Unsicherheiten hinaus voneinander abweichen. Ferner sind diese Werte innerhalb der verschiedenen Modelle stark von der verwendeten Anregungsenergie abhängig. Demgegenüber liefert die neue Methode zuverlässige Werte für die Dissoziationsenergien, die mit einer Genauigkeit von etwa 1 % typischerweise eine Größenordnung besser sind als die traditionell bestimmten Werte.

Mit dem neuen Verfahren wurde nun die Dissoziationsenergie des  $V_{13}^+$ -Clusters gemessen, der ein Modellsystem für die Erforschung der Strahlungseigenschaften nanoskopischer Metallteilchen darstellt. Erst durch die genaue Kenntnis der Dissoziationsenergie wird jetzt eine wesentlich verbesserte Aussage über die Strahlungseigenschaften möglich.

Auch auf Mischsysteme wie Molekül-Cluster-Komplexe wurde das neue Verfahren vor kurzem angewendet. Dabei geht es um die Bindungsenergie eines Methanolmoleküls an einen Metallcluster [3]. In diesem Fall müssen auch innere Freiheitsgrade des neutralen Fragments (hier des Methanolmoleküls) berücksichtigt werden, weswegen das Verfahren im

ABB. 2 ZERFALLSRATEN



Zerfallsraten als Funktion der Anregungsenergie: In der Differenz der Energien für die zweistufige und die einstufige Reaktion (3,47 eV für das System  $Au_{17}^+$ ) spiegelt sich die Dissoziationsenergie wider.

strengen Sinne nicht mehr Modell unabhängig ist. Da aber das Methanolmolekül wie die meisten Moleküle vergleichbarer Komplexität sehr gut bekannt ist, sind die verbleibenden Unsicherheiten gering.

- [1] M. Vogel et al., Phys. Rev. Lett. **2001**, *87*, 013401.  
 [2] M. Vogel, et al., Chem. Phys. Lett. **2001**, *346*, 117.  
 [3] M. Vogel, et al., J. Chem. Phys. **2002**, *116*, 9658.

Manuel Vogel, U Mainz,  
 Klavs Hansen, U Jyväskylä, SF  
 Lutz Schweikhard, U Greifswald

## FORSCHUNG

### Fälschungsverdacht bestätigt

Nun hat auch die Physik ihren Forschungsskandal. Der Verdacht, Jan Hendrik Schön von den Bell Labs habe wissenschaftliche Daten gefälscht und veröffentlicht, hat sich in vollem Umfang bestätigt. Wie berichtet [1], hatten die Bell Labs eine Kommission eingesetzt, um die Vorwürfe gegen ihn zu überprüfen. Der im September veröffentlichte Bericht [2] lässt nun keine Zweifel mehr bestehen. Von 24 untersuchten Arbeiten aus *Science* und *Nature* enthalten 16 gefälschte Messwerte. Davon betroffen sind auch zwei aktuelle Beiträge, die in unserer Zeitschrift erschienen sind [3].

Die Kommission unterteilte die Fälschungen in drei Kategorien: 1) Ersetzen von Abbildungen, Messkurven und Teilen davon, 2) Daten mit unrealistisch kleinen Fehlerbalken und 3) Ergebnisse, die bekannten physikalischen Gesetzen widersprechen. Schön bestätigte, dass die Daten in einigen Fällen „nicht korrekt“ seien. Die Kommission war überdies nicht in der Lage, die Experimente zu rekonstruieren, weil Schön alle Rohdaten gelöscht hatte, angeblich wegen fehlenden Speicherplatzes auf seinen Computern.

„Hendrik Schön missachtete rücksichtslos die Heiligkeit von Daten im Wertesystem der Wissenschaften“, ist das Fazit der Kommission.

Die insgesamt 20 Ko-Autoren werden in dem Bericht von objektiver Schuld freigesprochen. Die Kommission hielt ihnen zugute, dass „ein Ko-Autor nicht für die Gesamtheit der gemeinschaftlichen Bemühung verantwortlich“ sei. Anders sieht dies Siegfried Großmann, einer von drei Ombudleuten bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG). In einem Interview [4] meinte er, man könne erwarten, dass wenigstens eines der Gruppenmitglieder Manipulationen erkennt: „Das ist eine Frage der Kunst, dieses Fach zu beherrschen.“

Schön wurde bei den Bell Labs fristlos gekündigt, sein Fehlverhalten hat aber weitere Folgen: Die Max-Planck-Gesellschaft verzichtet auf seine Berufung als Direktor des Stuttgarter Max-Planck-Instituts für Festkörperforschung. Auch die DFG wird aktiv. Schön hat vom 1.8.1998 bis zum 31.1.2000 ein Postdokorandenstipendium der DFG für seinen Forschungsaufenthalt an den Bell Labs erhalten. Erste Überprüfungen haben ergeben, dass sich zwei der im Abschlussbericht von Schön an die DFG genannten Publikationen auf der Fälschungsliste der Kommission befinden. Die DFG hat Schön daher zu einer Stellungnahme aufgefordert. Überdies wird sich der Ausschuss zur Untersuchung von Vorwürfen wissenschaftlichen Fehlverhaltens der DFG mit dem Fall befassen und eventuell sanktionsähnliche Maßnahmen vorschlagen. Außerdem wird eine Prüfungskommission der Universität Konstanz, wo Schön promoviert hat, alle seine Tätigkeiten an der Universität und im Zusammenhang mit der Universität untersuchen.

- [1] Physik in unserer Zeit **2002**, *33* (4), 159.  
 [2] [www.lucent.com/news\\_events/research-review.html](http://www.lucent.com/news_events/research-review.html)  
 [3] Physik in unserer Zeit **2000**, *32* (4), 179; **2000**, *32* (5), 230.  
 [4] Phys. Journ. **2002**, *1* (7/8), 7.

## PHYSICS NEWS

Einem internationalen Team um Jeffrey Hangst von der Universität Aarhus, Dänemark, ist es gelungen, in größeren Mengen **Antiwasserstoff** herzustellen. Sie nutzten hierfür den Antiproton Decelerator des CERN, der Antiprotonen mit einer Energie von 5,3 MeV liefert. Diese gelangen in eine Penning-Falle, genannt Athena (AnTiHydrogEN Apparatus), wo sie mit Positronen vermischt werden und zum Teil rekombinieren. So entstehen innerhalb von etwa drei Minuten rund 50 000 Antiwasserstoffatome. Da diese neutral sind, bewegen sie sich aus der Falle heraus und stoßen an die Apparaturwand, wo sie annihilieren. Die mittlere Lebensdauer beträgt wenige Millionstel Sekunden. Für die angestrebten Präzisionsmessungen, wie Laserspektroskopie muss die derzeitige Apparatur noch erweitert werden. Nature online, 18.9.2002, doi:10.1038/nature01096

+++

Astronomen der Europäischen Südsternwarte, ESO, haben zum ersten Mal alle **vier Großteleskope des Very Large Telescope in Chile zu einem Interferometer gekoppelt**. Hierfür führten sie die Lichtbündel der bis zu 130 Meter voneinander entfernten Instrumente paarweise in einem gemeinsamen Brennpunkt zusammen. Die ESO will noch drei kleinere Fernrohre optisch zuschalten und Kameras mit adaptiver Optik installieren. Diese Anlage hätte dann das Auflösungsvermögen eines Einzelteleskops mit einem 200-Meter-Spiegel. [www.eso.org/outreach/press-rel/pr-2002/pr-16-02.html](http://www.eso.org/outreach/press-rel/pr-2002/pr-16-02.html)

+++

Physiker des MPI für Quantenoptik haben beobachtet, wie ein **Bose-Einstein-Kondensat zerfällt** und unter bestimmten Voraussetzungen nach etwa 0,6 ms wieder auftritt. Der Kollaps der Materiewelle wird durch zahlreiche Zusammenstöße zwischen den Atomen verursacht. Das darauffolgende Wiederaufleben der Materiewelle zeigt, dass bei diesen ultrakalten Temperaturen Kollisionen nicht, wie man erwarten könnte, Unordnung verursachen, sondern völlig geordnet und kontrolliert ablaufen. M. Greiner et al., Nature **2002**, *419*, 51.

+++

Forscher des Fritz-Haber-Instituts in Berlin sowie der Universitäten Essen, Leiden (Niederlande) und Cork (Irland) haben mit Hilfe von Computersimulationen geklärt, in welchen Einzelschritten die **Adsorption und Desorption von Wasserstoff auf Siliziumoberflächen** verläuft. Dazu setzten die Forscher erstmals ein so genanntes Quanten-Monte-Carlo-Verfahren ein, mit dem sich Reaktionsschritte weit genauer als bisher berechnen lassen. C. Filippi et al., Phys. Rev. Lett. **2002**, *89*, 166102.

TB