

Was gibt uns die Chemie? – Leistungen, Entwicklungsmöglichkeiten und Risiken

Michael Buback

Im Unterschied zu Physik und Biologie hat die Öffentlichkeit ein sehr konträres Bild von der Chemie. Fast im Sinne von gut und böse werden der Nutzen der Chemie bei der Verbesserung der Lebensbedingungen und die Gefährdung der Umwelt durch Chemikalien gesehen. Man unterteilt in natürliche (biologische) und unnatürliche (chemisch gewonnene) Substanzen. Die Chemie erscheint einerseits als reine Wissenschaft, die sich in Anspruch und Glanz neben Physik und Biologie behauptet, aber auch als Chemieindustrie, die den ständig wachsenden Bedürfnissen einer sich bedrohlich vermehrenden Weltbevölkerung zu dienen hat. Hervorragende Wirkstoffe und raffinierte, hoch funktionelle Werkstoffe stehen langweilig anmutenden Massenprodukten gegenüber, die in Mengen von über 100 Millionen Jahrestonnen weltweit hergestellt werden.

In diesem Spannungsfeld scheinbarer Gegensätzlichkeiten bewegt sich die Chemie. Ihre Aufgabe besteht darin, die Zusammensetzung von Stoffen zu ermitteln, die Verknüpfung von Struktur und Wirkung möglichst auf molekularer Basis zu erkennen und Methoden und Verfahren zur optimalen Herstellung bekannter, modifizierter und vor allem neuartiger Stoffe unter Berücksichtigung vieler Randbedingungen zu entwickeln. Die Chemie hat sich auch mit den Aspekten einer nachhaltigen Chemieproduktion zu befassen.

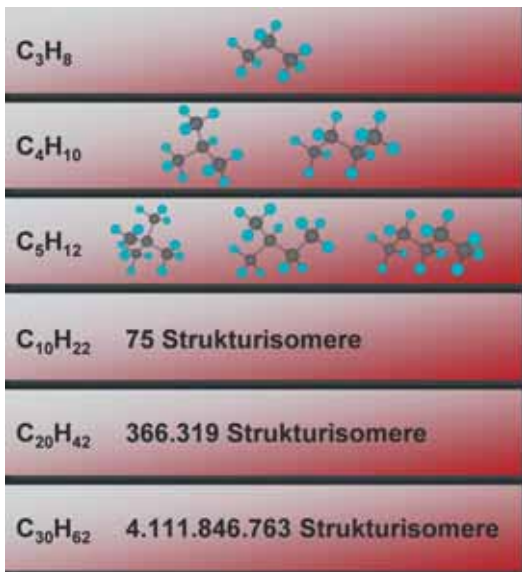
Faszination der Chemie

Das Weltbild der Physik ist zweifellos faszinierend. Das Gleiche gilt für die Biologie, gerade zu Zeiten der Aufschlüsselung des Humangenoms. Gibt es auch eine Faszination der Chemie? Jürgen Mittelstraß [1] beschreibt die Chemie als Laborwissenschaft – zwar fleißig, erfolgreich und weltverändernd, aber den Chemiker als Aschenputtel, dessen Labor nach mühevoller Arbeit riecht. Das Vorurteil, die Chemie gebe keine Orientierung im Sinne eines Beitrags zum Weltbild, gilt aber nicht mehr. Die Chemie ist heute in starkem Maße theoretisch basiert. Auch sind die Grenzen zwischen Chemie, Physik und Biologie fließend geworden. Das „Stoffumwandeln“ weist auf eine Nähe zur Biologie hin, auf den „Stoffwechsel“, der eine Fülle chemischer Reaktionen einschließt. Wir wissen, daß alle menschliche Tätigkeit und Empfindung von komplexen chemischen Reaktionen begleitet ist.

Die Gesamtheit der uns umgebenden Stoffe besteht aus der sehr begrenzten Zahl von etwa 100 chemischen Elementen. Dennoch hat die Chemie bei der Synthese molekularer und supramolekularer Spezies ein unerschöpfliches, faszinierendes Wirkungsfeld. Angesichts der enormen, sich mit der Größe der Moleküle außerordentlich steigenden Vielfalt herstellbarer Moleküle liegt die besondere Herausforderung darin, mit hoher Selektivität möglichst nur die jeweils gewünschte chemische Verbindung zu synthetisieren.

Biologische große Moleküle (Makromoleküle) sind in der Regel durch die große Strukturtreue bezüglich der Anzahl und Sequenz ihrer Bausteine charakterisiert. Synthetische makromolekulare Substanzen bestehen dagegen oft aus einer breiten Verteilung von in Größe und Struktur unterschiedlichen Molekülen. Eine aus zwei Bausteinen hergestellte makromolekulare Verbindung, ein binäres Copolymer, kann aus einer gewaltigen Vielfalt von sich in Größe, in der Sequenz der beiden Bausteine und in der Anzahl und Art von Kurzketten- und Langketten-Verzweigungen an einer polymeren Hauptkette unterscheidenden Molekülen bestehen.

Grundvoraussetzung für die gezielte chemische Synthese ist die Kenntnis der Molekülstruktur. Die Lösung dieser analytischen Aufgabenstellung beruht auf dem Wissen um das Gleich- und Verschiedensein von Molekülen. Methan ist der Grundkörper der Kohlenwasserstoffe. Die vier Wasserstoffatome sind tetraedrisch um ein Kohlenstoffatom angeordnet. Beim sukzessiven Ersetzen der H-Atome durch mit Wasserstoff abgesättigte Kohlenstoffatome können größere Kohlenwasserstoffe bis hin zu einem Polyethylen-Molekül aufgebaut werden. Dabei ist die Struktur (Konstitution) bis zum Propan (C_3H_8) eindeutig (Abb. 1). Beim Übergang zum Butan (C_4H_{10}) kann das vierte C-Atom seitlich oder in der Mitte angefügt werden. Es entstehen zwei Strukturisomere, Verbindungen mit derselben Art und Anzahl von Atomen, aber in unterschiedlicher Ver-



knüpfung. Pentan (C_5H_{12}) besitzt drei Strukturisomere. Deren Zahl steigt mit der Größe des Kohlenwasserstoffs rasch an. Sie liegt für den Kohlenwasserstoff $C_{30}H_{62}$ bereits bei über vier Milliarden [2]. Der längste bislang als definiertes Einzelmolekül synthetisierte Kohlenwasserstoff mit einer linearen Kette von 390 C-Atomen [3] stellt eine ausgezeichnete Spezies innerhalb der riesigen Familie isomerer Kohlenwasserstoffe der Summenformel $C_{390}H_{782}$ dar. Es hängt vom Verwendungszweck ab, ob diese Vielfalt eine Rolle spielt. Strukturelle Unterschiede können sich erheblich auf die Materialeigenschaften auswirken. Bei Polymermolekülen bestimmt man die Zahl an Kurz- und Langkettenverzweigungen. Aus der Häufigkeit und Größe von Seitenästen resultierende Effekte lassen sich leicht am Beispiel von verschiedenen gefügten Holzstapeln veranschaulichen. Als Grenzfälle können Strukturen vorliegen wie bei langen Stämmen ohne Äste oder solchen mit stark verzweigtem Geäst. Die erzielbare hohe Packungsdichte im ersten Fall äußert sich bei Makromolekülen in hoher Festigkeit, während die verzweigte Struktur mit geringer Dichte und hoher Flexibilität verknüpft ist. Beide Eigenschaftsbilder, hohe Dichte und Festigkeit sowie andererseits geringe Dichte und hohe Flexibilität können, wie auch vielfältige Zwischensituationen, gewünschte Material-Eigenschaften darstellen.

Sehr wichtig ist darüber hinaus die Stereoisomerie. Sie kennzeichnet Moleküle unterschiedlicher räumlicher Anordnung, aber gleicher Konstitution. Bekannt ist die Spiegelbildisomerie, die für Moleküle mit Kohlenstoffatomen eine herausragende Rolle spielt. Sind die über die vier Bindungen mit einem C-Atom verknüpften Atome (oder Atomgruppen) verschieden, gibt es bei gleicher Konstitution zwei Stereoformen, die sich nur durch Spiegelung an einer Ebene außerhalb des Moleküls zur Deckung bringen lassen. Man er-

hält zwei Enantiomere. Abb. 2 zeigt die beiden enantiomeren Formen der Aminosäure Alanin, bei der das C-Atom von einem H-Atom, einer Methylgruppe, einer Carboxylgruppe und einer Aminogruppe umgeben ist.

Die Spiegelbildisomerie läßt sich an unseren Händen illustrieren. Die Positionen von Daumen, kleinem Finger, Handfläche und Handrücken markieren für die Gesamtheit der Hand das Vorliegen einer Spiegelbildisomerie. Die Händigkeit (Chiralität) wird deshalb auch zur Charakterisierung dieser Art von Symmetrie eingesetzt. Durch keine noch so kühne Dreh- oder zulässige Biegeoperation kann die linke in die rechte Hand überführt werden. Da nun biologische Systeme aus chiralen Molekülen aufgebaut sind, können sich bei der Verknüpfung biologisch relevanter Moleküle ähnlich unerwünschte Situationen ergeben, wie sie vorliegen, wenn sich nur Handschuhe gleicher Händigkeit oder nur Schuhe gleicher Füßigkeit finden lassen. Die Folgen können allerdings im molekularen Bereich dramatisch sein. Moleküle unterschiedlicher Chiralität können, da die Rezeptoren ebenfalls chiral sind, sehr unterschiedlich schmecken und riechen. Sie können überhaupt sehr unterschiedliche Wirkungen entfalten, wobei die eine erwünscht, die andere fatal sein kann. In diesem Zusammenhang ist das schreckliche Beispiel des Medikaments Thalidomid anzuführen, das unter dem Handelsnamen Contergan verkauft wurde und bei dem die eine von zwei enantiomeren Verbindungen eine fruchtschädigende Wirkung zeigt. Die schlimmen Folgen haben zur starken Ausrichtung auf die Synthese enantiomerenreiner pharmazeutischer Wirkstoffe beigetragen. Das Ziel, auch in ihrer räumlichen Struktur genau definierte chemische Verbindungen zu synthetisieren, stellt eine besondere Herausforderung für Chemiker dar.

Nutzen und Risiken der Chemie

Die Chemie spielt eine entscheidende Rolle für die Verbesserung menschlicher Lebensbedingungen. Weltweit werden etwa 150 Millionen Tonnen Ammoniak pro Jahr hergestellt. Davon gehen 90 % in die Düngemittel-Produktion, ohne die etwa ein Drittel der heute lebenden Menschen nicht ernährt werden könnte. Der Beitrag der Chemie zur Erlangung und Erhaltung der Gesundheit ist enorm. Beim Bundesgesundheitsamt sind 140.000 Arzneimittel registriert, von denen etwa die Hälfte aus industrieller Produktion stammt. Frühe Meilensteine in der Arzneimittel-Entwicklung sind: die Einführung des Aspirins (Acetylsalicylsäure) durch Hoffmann und Dreser (Bayer AG 1899) und der Penicillin-Antibiotika (Fleming 1928), die Synthese von Sexualhormonen (Butenandt in Kooperation mit der Schering AG um 1930). Ein neueres Beispiel ist die Ein-

Abb. 1
Art und Anzahl von
Strukturisomeren ei-
niger gesättigter
Kohlenwasserstoffe

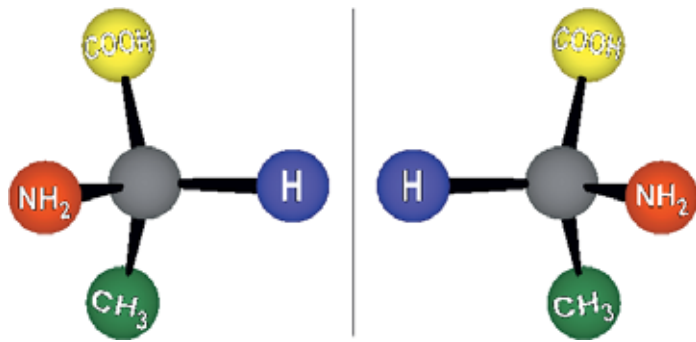


Abb. 2
Enantiomere der
Aminosäure Alanin,
die in tetraedrischer
Anordnung vier un-
terschiedliche Sub-
stituenten am zentra-
len Kohlenstoffatom
besitzt. Die Gerade
zwischen den beiden
Molekülformen
kennzeichnet die
Spiegelebene

führung der Cephalosporine als Breitband-Antibiotika. Heute stammt der größte Teil der verwendeten Arzneimittel aus chemischer Synthese. Bei Vorgabe von Leitstrukturen werden vielfältige Molekülvariationen durchgeführt, wobei zunehmend Methoden der kombinatorischen Chemie zum Einsatz gelangen. Dem Gesundheitssektor zuzurechnen ist auch der Hygienebereich. Hinzu kommen Körperpflegemittel und Kosmetika.

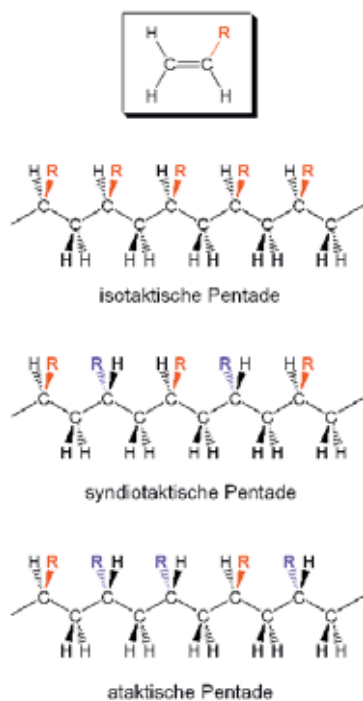
Mit der Synthese der Polyamide (Nylon) setzte die außerordentliche Beeinflussung des Bekleidungssektors ein. Die Herstellung von Farbstoffen sowie von Pflege- und Reinigungs-Hilfsmitteln für Bekleidung belegen die hohe, aber öffentlich wenig anerkannte Bedeutung der Chemie im Alltag. Im Wohnbereich sind Fußbodenbeläge, Gardinen und Möbel aus synthetischen Materialien allgegenwärtig und oft kann der bloße Augenschein nicht klären, ob ein Material aus einem „natürlichen“ Werkstoff oder aus chemischer Produktion stammt. Es kommen erhebliche Mengen an Dämmstoffen in Hauswänden und Dächern hinzu. Haushaltsgeräte bestehen weitgehend aus Kunststoffen.

Zum Gesamtbereich der Kommunikation gehören neben der Übertragung vielfältiger Informationen auch die Sektoren Freizeitgestaltung und Mobilität. Die Verarbeitung bildlicher Information beruht auf der Anwendung chemischer Verfahren. Die Chemie stellt die zur Informationsspeicherung benötigten Materialien bereit. Optische Datenspeicher nutzen die Transparenz, Zähigkeit und somit Formstabilität sowie die geringe Wasseraufnahme des Werkstoffs Polycarbonat. Sportgeräte enthalten chemische High-Tech-Komponenten. Bei den von vielen bewunderten „Geräten“ der Formel 1-Fahrer denken wohl nur wenige der Millionen begeisterter Zuschauer an die darin enthaltenen Verbundwerkstoffe, die chemische Spitzenerzeugnisse sind. Für den Einsatz polymerer Werkstoffe im Mobilitätsbereich spricht die erzielbare Gewichtsreduktion. Die Einsparung von 100 kg Gewicht bedeutet eine Verringerung des Treibstoffbedarfs um etwa 0,5 Liter pro 100 km.

Polymere Faserverbundwerkstoffe erreichen Festigkeit nach dem in der Natur vorgefundenen Prinzip, Rippen in Blätter einzufügen. Sie werden aufgrund ihrer hohen Festigkeit, Steifigkeit und Schlagzähigkeit bei geringem spezifischen Gewicht und der Möglichkeit, Bauteile integral (anstelle aus vielen zusammenzufügenden Einzelkomponenten) herzustellen, inzwischen in der Zivilluftfahrt eingesetzt. Der Mittelkasten des Seitenleitwerks des Airbus ist heute das größte in Serie als Faserverbund hergestellte tragende Bauteil. Beim Auto liegt der Gewichtsanteil an Kunststoff bei etwa 15 %. Die Entwicklung zielt auf die Herstellung von Modulen aus polymerem Werkstoff. Wir erfreuen uns an der Oberflächenqualität unserer Autos, an der die Nutzungsdauer wesentlich erhöhenden Güte der Lackierungen und an den raffiniert eingebrachten Pigmenten. Hier ist eine Menge gute Chemie enthalten.

Polymere Kunststoffe sind neben den Grundchemikalien Schwefelsäure und Ammoniak die mengenmäßig am meisten hergestellten Chemieprodukte. Der Pro-Kopf-Verbrauch an Polymeren ist ein wichtiger Indikator für den Wohlstand eines Landes. In den ärmsten Ländern der Welt liegt er unter 500 g pro Jahr, wohingegen in hoch entwickelten Ländern die Grenze von 100 kg überschritten wird. Besonders reizvoll an der Herstellung von Kunststoffen ist, daß man ausgehend von einer Monomersorte, je nach Wahl der Synthesebedingungen, zu einer Vielzahl von polymeren Verbindungen gelangen kann. Die Struktur der Polymermoleküle dokumentiert die Abfolge der Wachstumsschritte und der zum Polymeren führenden Übertragungs- und Abbruchschritte, die auf vielerlei Weise erfolgen können. Die Situation ist vergleichbar mit der von den Ringen im Baumstamm erzählten Geschichte über das Leben eines Baumes. Diese Tatsache kann bei Polymeren mit dazu beitragen, aus der Struktur und Größenverteilung von unter wohldefinierten Bedingungen hergestellten Polymeren die Kinetik der individuellen, am Molekülaufbau beteiligten Teilschritte zu ermitteln. Die technische Nutzenanwendung der Verknüpfung von Polymereigenschaften mit der Abfolge vieler Einzelschritte unter Synthesebedingungen besteht darin, Polymerisations-Bedingungen so zu wählen, daß gewünschte Zielpolymere entstehen. Die Voraussage von Polymer-Eigenschaften kann durch Simulationen aufbauend auf kinetischer Detail-Information erfolgen.

Die Stereochemie spielt auch bei synthetischen Makromolekülen eine bedeutende Rolle. Abb. 3 zeigt am Beispiel einer Fünferfolge (Pentade), daß bei Monomeren des Typs CH_2CHR , zu dem Styrol und Vinylchlorid gehören, unterschiedliche, nicht ineinander überführbare Folgen der Monomerbausteine entstehen. Die Hauptkette des Polymermoleküls liegt in der Papierebene. Die Substituenten H und R an jedem zweiten C-



Atom befinden sich entweder über oder unter der Papierebene, wobei die gestrichelt gezeichnete Bindung den letzteren Fall kennzeichnet. Liegen alle Substituenten R auf derselben Seite der Bildebene und haben sie somit gleiche Konfiguration, handelt es sich um eine isotaktische Pentade. Bei alternierender Konfiguration spricht man von einer syndiotaktischen Pentade und, wenn keine Regelmäßigkeit der Konfiguration vorliegt, von einer ataktischen Pentade. Erhebliche Wirkungen zeigen sich, wenn eine regelmäßige Abfolge von Konfigurationen über die gesamte Hauptkette eines großen Makromoleküls mit 1.000 oder gar 10.000 Wiederholeinheiten vorliegt. So weist isotaktisches Polystyrol einen Schmelzpunkt bei 230°C auf, während ataktisches Polystyrol einen Erweichungsbereich bei etwa 100°C zeigt. Hieraus resultieren enorme Konsequenzen für die Nutzungseigenschaften. Kunststoffe und andere Erzeugnisse aus chemischer Synthese sind allgegenwärtig. Ohne die Farbprodukte der chemischen Industrie wäre unsere Welt in eine Düsternis gehüllt, wie wir sie von einigen Ölgemälden alter Meister kennen. Ohne die Nutzung chemischer Prozesse und Produkte wäre die Menschheit heute nicht mehr überlebensfähig. Auch die Nutzung der photovoltaischen Solarzellentechnik und der angestrebte intensive Einsatz von Brennstoffzellen sind ohne den Beitrag der Chemie nicht möglich. Die enorme Entwicklung der Mikroelektronik ist ohne den durch die Chemie gebotenen Zugang zu höchst reinem, einkristallinem Silicium nicht denkbar.

Ein Grund für die angesichts des Nutzens überraschend geringe öffentliche Akzeptanz der Chemie liegt nach Quadbeck-Seeger [1] darin, daß die Betätigung der Chemie vielfach im heute als nicht mehr relevant empfundenen Bedürfnisbereich liegt. Die Deckung der Grundbedürfnisse wird als selbstverständlich angesehen. Die Leistungen der Chemie sind vielfach nicht bekannt, da sie meist in Vorleistungen für andere Branchen verborgen sind.

Andererseits werden mögliche Gefahren chemischer Produktionsanlagen und Produkte sehr intensiv wahrgenommen. Dabei ist eine Tätigkeit in der chemischen Industrie heute vergleichsweise ungefährlich. Bei der Reihung nach steigender Zahl von Arbeitsunfällen liegt sie auf Platz vier unter vierzehn Gewerbebezweigen. Das Baugewerbe hat etwa dreimal so viele meldepflichtige Unfälle. Auch machen in der chemischen Industrie Vergiftungen und Verätzungen nur etwa 3 % der Unfälle aus. Es besteht ein starker Wettbewerb in und zwischen den Firmen um das Erreichen hoher Sicherheitsstandards. Die Genehmigungsverfahren neuer Anlagen beanspruchen oft viele Jahre. Diese Sorgfalt ist unter anderem in der in chemischen Anlagen anzutreffenden enormen Energiedichte begründet. Heute können in einem einzigen Reaktor am Tag 1.000 Tonnen Polyethylen hergestellt werden. Würde man die dem hierzu benötigten Ausgangsmaterial entsprechende Menge Mineralöl in Automotoren verbrennen, so könnten 100.000 Autos pro Tag eine Strecke von jeweils 200 km fahren.

Große Chemie-Unglücksfälle resultierten aus Stoff-Freisetzung, Bränden und Explosionen. Besonders bekannt sind die Unglücke von Flixborough (1974), wobei die zerstörende Wirkung durch eine Druckwelle nach Zündung einer freigesetzten, brennbaren Gaswolke erfolgte, die mit Stoff-Freisetzung verbundenen Unglücksfälle von Seveso (1976), wobei Tetrachlorodibenzodioxin (Dioxin) austrat, von Bhopal und von Mexiko (1984) sowie der Brand in Schweizerhalle bei Basel (1986). Es wurden umfassende Sicherheitsanalysen durchgeführt und ein umfangreiches Regelwerk erarbeitet. Bei statistischer Bewertung des Risikos ist der Chemiebeschäftigte heute in der Firma vor Gefahren sicherer als daheim. Bei der Bewertung der Gefährlichkeit von Chemieprodukten ist zu beachten, daß es nur ganz wenige ungefährliche Substanzen gibt. Wasser kann hier angeführt werden. Es gilt das von Paracelsus formulierte Prinzip: „Allein die Dosis macht, daß ein Ding ein Gift ist“. Es gibt eine Kennzeichnungspflicht für giftige Substanzen, wobei die Toxizität als mittlere tödliche Dosis im Tierversuch bestimmt wird, in mg Substanz pro kg Körpergewicht. Als sehr giftig werden Substanzen mit Werten unter 25 mg/kg eingestuft. Besonders giftig ist Botulin [3], ein von Bakterien gebildetes Protein, bei dem die tödli-

Abb. 3

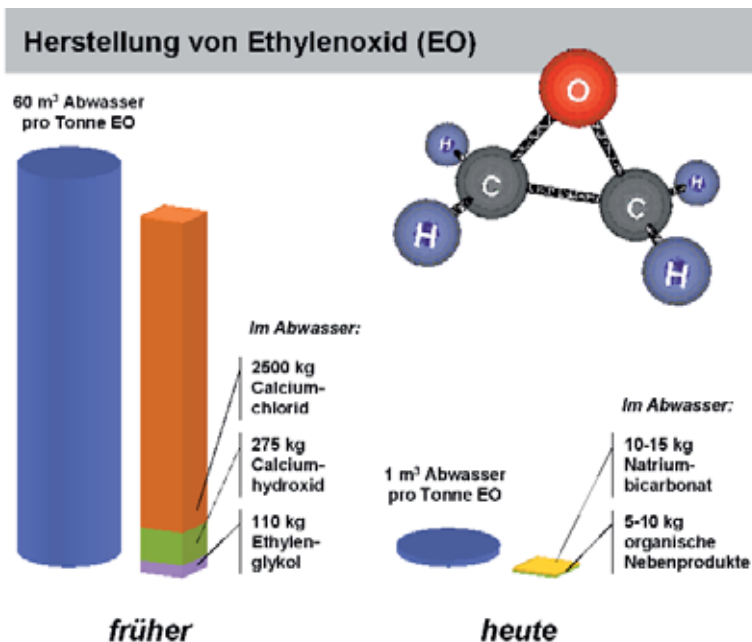
Aus einem Monomer des Typs $\text{CH}_2=\text{CHR}$ zugängliche isotaktische, syndiotaktische und ataktische Folgen von Fünfer-Wiederholeinheiten (Pentaden)

che Dosis etwa 0,1 ng pro kg beträgt. Ein Gramm dieser natürlich produzierten Substanz könnte somit 133 Millionen Menschen mit dem Durchschnittsgewicht von 75 kg töten. Die giftigste synthetisch hergestellte Verbindung, das Dioxin, ist etwa 200.000 mal weniger giftig, hat allerdings den Nachteil, daß sie sehr stabil ist und von Organismen nicht abgebaut wird.

Auf manchen Chemikalienflaschen angebrachte Totenköpfe haben eine negative psychologische Wirkung. Aber auch 3,3 g reiner Ethylalkohol pro kg Körpergewicht stellen eine tödliche Dosis dar, was eine Totenkopf-Kennzeichnung an manchem Hochprozentigen rechtfertigen würde, zumal die Gefahr der übermäßigen oralen Aufnahme höher ist als etwa bei Kochsalz. Hier liegt die tödliche Dosis erst bei etwa 10 g pro Kilogramm Körpergewicht, so daß sich kein 100 kg-Gewichtiger vor einer Einkilogramm-Packung Kochsalz ängstigen muß.

Für die in den Verkehr gebrachten Stoffe gelten strenge Richtlinien. Man sollte aber nicht nur die giftigen Substanzen im Auge behalten. So wissen wir, daß die Fluorchlorkohlenwasserstoffe einerseits ungiftig, unbrennbar und ideal isolierend und somit perfekte Arbeitsmedien für Kälteanlagen sind, sie andererseits aber zum Entstehen des „Ozonlochs“ beitragen. Markl weist darauf hin, daß auch eine völlig harmlose Substanz, wenn sie millionen- und milliardenfach eingesetzt wird, schädliche Folgen haben kann [1]. Manche der Chemie angelastete nachteilige Wirkungen resultieren vor allem aus dem gewaltig ansteigenden Wachstum der Erdbevölkerung. Spuren Mengen giftiger Stoffe werden erst durch enorme Fortschritte in der chemischen Analytik nachweisbar. Diese Anstrengungen haben

Abb. 4
Herstellung von Ethylenoxid (EO) nach dem früheren Chlorhydrin-Verfahren und durch die heutige Oxidation am Silberkatalysator
(Quelle: Fonds der Chemischen Industrie)



schwerwiegende Folgen für die chemische Industrie, wenn verlangt wird, das gerade noch Meßbare als zulässigen Grenzwert einzuhalten. Bei den besonders bekannten und teils mit außerordentlicher Empfindlichkeit meßbaren teratogenen oder kanzerogenen Stoffen werden teils grotesk anmutende Forderungen gestellt. Vergleicht man die Gefährdung durch Dioxin mit der durch Alkohol, so entspricht der in den USA festgelegte akzeptierbare Grenzwert von sechs Femtogramm Dioxin pro kg Körpergewicht und Tag einer Schädigung, wie sie durch ein Dreimillionstel Glas Bier pro Tag hervorgerufen wird, entsprechend einem Bier in 8.000 Jahren, das allerdings gleichmäßig über die Jahre verteilt zu trinken ist, um Spitzenschädigungen zu vermeiden. Für den Chemiker gibt es den Widerspruch zwischen Chemie und Natur nicht, da sich die Chemie ja mit der Zusammensetzung und den Eigenschaften synthetischer wie auch natürlich vorkommender Stoffe befaßt. Auch hat sich ein Zusammenwirken von chemisch Industriellem und biologisch Natürlichem in der Biotechnologie ergeben, wobei die evolutionären Errungenschaften der „natürlichen“ Chemie und speziell ihre hoch selektiven Katalysatoren in technischen Synthesen genutzt werden.

Die auf die Menschheit zukommenden, mit der gewaltig anwachsenden Erdbevölkerung verknüpften Probleme können nur durch einen intensiven Einsatz der Chemie in ihrer Wirkung gemindert und, was zu hoffen ist, gelöst werden.

Wie könnte es weitergehen?

Eine Zielvorstellung ist, ausgehend von mikroskopischer Betrachtung, die bei atomaren und molekularen Längenabmessungen und bei Zeitskalen, die der Schwingungsfrequenz von Atomen oder Molekülteilen entsprechen, zum Verständnis makroskopischer Stoffeigenschaften zu gelangen. Besondere Aufmerksamkeit wird nanoskaligen Systemen gelten. Optische und elektronische Eigenschaften vieler Materialien sind von den Abmessungen bestimmt, wobei sich bei Nanometer-Abmessungen ausgeprägte Veränderungen zeigen.

Die mikroskopische Betrachtungsweise wird durch enorme Erfolge der Quantenchemie begünstigt. So können kleine Moleküle mit sehr hoher Genauigkeit berechnet werden, aber es gelingen auch bereits zuverlässige Rechnungen an Molekülen, die aus etwa 50 Atomen aufgebaut sind.

Wichtige Aktivitäten gelten der nachhaltigen, zukunftsverträglichen Chemie. Problemlösungen werden erforderlich aufgrund der begrenzten Verfügbarkeit natürlicher Ressourcen und der Belastbarkeit des Ökosystems. Es geht um die Umstellung von Prozessen auf eine effizientere Rohstoffbasis, um prozeßintegrierten Umwelt-

schutz oder zumindest um einen dem chemischen Prozeß nachgelagerten Umweltschutz. Abb. 4 illustriert am Beispiel der Ethylenoxidsynthese, in welchem dramatischem Umfang die Abwassermenge und Reststoffbelastung durch Entwicklung eines neuen Verfahrens reduziert werden können. Wichtige Aspekte sind die Verwendung nachwachsender Rohstoffe, die Einführung von Recyclingsystemen und die Reduzierung von Energieverbrauch und Schadstoffemission. Produkte der chemischen Industrie sind auch Waschmittel, deren volle Waschkraft schon unterhalb von 60°C bereitsteht. Hieraus resultieren erhebliche Einsparungen an elektrischer Energie. Durch Wärmedämmung mit Styropor oder Polyurethan-Schaum können bei einem Einfamilienhaus jährlich bis zu 2.500 Liter Heizöl gespart werden. Die Herstellung des erforderlichen Polyurethans erfordert lediglich 1.700 Liter Heizöl, also eine Menge, die bereits nach acht Monaten kompensiert ist.

Von den Perspektiven chemischer Forschung seien drei Bereiche kurz angesprochen: Supramolekulare Chemie, Reaktionsdynamik und Katalyse. Durch Zusammenschluß einfacher Bausteine zu einer geordneten, komplexen Überstruktur entstehen neue Eigenschaften und Funktionen, die nur der Gesamtheit, aber keinem der Teile eigen sind. Gesichtspunkte dieser *Supramolekularen Chemie* können auch als Syntheseprinzip dienen. Besondere Bedeutung besitzt die supramolekulare Chemie für die Wirt-Gast-Chemie, bei der Hohlräume so erzeugt werden, daß einem Gastmolekül ein optimal angepaßter Raum geboten wird. Hierdurch lassen sich hohe Spezifitäten erreichen, vor allem wenn spezifischer Einschluß und selektiv katalytische Umsetzung verknüpft werden. Die Verbindung zwischen supramolekularen Systemen und biologischen Funktionseinheiten ist offensichtlich, und es liegt nahe, ausgehend von einer „selbstorganisierten“ Chemie biologische Modellsysteme nachzuahmen. Im Bereich der *Reaktionsdynamik* werden chemische Prozesse mit Femtosekunden-Laserpulsen, deren Dauer also dem milliardsten Teil einer Millionstel-Sekunde entspricht, angestoßen. Das molekulare kinetische Geschehen wird, ebenfalls auf der Femtosekunden-Skala, mit optischen Abfragepulsen detektiert. Mit diesen Ultrakurzzeit-Techniken werden Elementarvorgänge, auch solche an Oberflächen, und chemische Schritte bei biologischen Prozessen studiert.

Die Bedeutung der *Katalyse* ist unverändert groß. Katalysatoren erlauben es, die Geschwindigkeit einer Reaktion zu erhöhen, ohne selbst verbraucht zu werden. Sie gehen kurzfristig mit den Reaktionspartnern eine Verknüpfung ein und stellen für eine spezielle Reaktion einen günstigen Pfad bereit, der schnell und mit hoher Selektivität durchlaufen wird. Der Katalysatorforschung

stehen inzwischen hervorragende Methoden zur Verfügung. So erlaubt das Rastertunnelmikroskop die Detektion von Molekülen an Einkristalloberflächen sowie die Beobachtung der aus den adsorbierten Molekülen mit geringem Energieaufwand gebildeten Fragmente. Ziel technischer Katalyseverfahren ist es, ausgehend von uneingeschränkt verfügbaren Ausgangsstoffen mit Hilfe hoch selektiver Katalysatoren direkt und möglichst ausschließlich zu gewünschten Produkten zu gelangen.

Chemische Forschungsaktivitäten werden zunehmend im Grenzgebiet zur Biologie und Physik erfolgen. Die Sicherung einer gedeihlichen Zukunft benötigt wie in der Vergangenheit eine kompetente Chemie. Ein gutes Ansehen der Chemie ist wichtig, um leistungsfähige und leistungswillige junge Menschen für die Chemie zu gewinnen. Ihre Begeisterung und Motivation werden dringend benötigt wie auch das Wohlwollen der Öffentlichkeit gegenüber der Chemie.

Anschrift des Verfassers:

Prof. Dr. Michael Buback
Universität Göttingen
Institut für Physikalische Chemie
Tammannstraße 6
37077 Göttingen

Anmerkung

Dieser Beitrag geht auf eine Vorlesung im SS 2001 zurück, die von der Akademie in Göttingen ausgerichtet wurde. Die ungekürzte Fassung wurde gedruckt in: *Wissenschaften 2001, Diagnosen und Prognosen*. Hrsg. von der Akademie der Wissenschaften zu Göttingen, Göttingen 2001, S. 179-203

Literatur

- [1] J. Mittelstraß, G. Stock (Hrsg.), *Chemie und Geisteswissenschaften – Versuch eine Annäherung*, Berlin 1992, darin besonders: J. Mittelstraß, *Chemie und Geisteswissenschaften. Eine Einleitung*, H. Markl, *Die Natürlichkeit der Chemie*, G. Quinkert, *Spuren der Chemie im Weltbild unsere Zeit* und H.-J. Quadbeck-Seeger, *Chemie und die Entwicklung der Lebensbedingungen*
- [2] R. Hoffmann, *Sein und Schein – Reflexionen über die Chemie*, Weinheim 1997
- [3] H.-J. Quadbeck-Seeger, *Chemie der Rekorde*, Weinheim 1999