

Alle Rechte beim Urheber.

Abdruck nur gegen Belegexemplar, Honorar plus 7% MwSt.

Simulation setzt Elemente unter hohen Druck

Wer chemische Reaktionen von Stoffen untersuchen will, muss physikalische Größen berücksichtigen. Eine solche Größe ist der Druck. Nimmt der Druck zu, verschiebt sich das Reaktionsgleichgewicht in Richtung der Seite, auf der weniger, aber größere Moleküle vorliegen. So entsteht beispielsweise in einem Gemisch aus Stickstoff und Wasserstoff weniger Ammoniak, wenn der Gasdruck des Gemischs erhöht wird. Steigert man den Druck weiter, wirkt er nicht nur auf das Reaktionsverhalten der Gasmoleküle; auch die Eigenschaften der Elemente ändern sich dann unter dem Einfluss des Druckes. Ein Millionenfaches des atmosphärischen Druckes haben Wissenschaftler der ETH Zürich in einer Simulation auf Wasserstoff- und Sauerstoffmolekülen lasten lassen und festgestellt, dass sie selbst unter diesem enormen Druck ihre molekulare Struktur beibehalten müssten.

Bei Drücken jenseits der Megabargrenze verkleinert sich das Volumen eines Moleküls. Die Abnahme des Volumens stellt sich in der Folge der Übertragung von Elektronen ein. Dabei tauscht ein Molekül die Elektronen mit anderen Molekülen als auch mit sich selbst aus. In der Folge des Elektronentransfers verändern sich die chemischen und physikalischen Eigenschaften der Elemente: Das chemisch träge Edelmetall Platin wird reaktiv, das Alkalimetall Kalium bekommt die Eigenschaften von Übergangsmetallen und aus Schwefel, Sauerstoff und Wasserstoff werden metallische Supraleiter. Die Metallisierung von Wasserstoff unter hohem Druck gilt als eine mögliche Erklärung für die magnetischen Feldlinien des Planeten Jupiter, der fast ausschließlich aus Wasserstoff besteht und in dessen Innern Drücke von mehreren hundert Megabar herrschen.

Das Element Wasserstoff existiert unter atmosphärischen Bedingungen nur kurz atomar. Es reagiert sofort mit dem freien Elektron eines anderen Wasserstoffatoms zu einem H₂-Molekül. In der metallisierten Form, also bei hohen Drücken, ist das Elektron des Wasserstoffs nur noch schwach an den Atomrumpf gebunden; es kann als Strom abfließen. Die elektrische Leitfähigkeit von Wasserstoffmolekülen mit kovalenten Bindungen ähnelt demnach unter hohem Druck der von Metallen. Supraleitend wird der Wasserstoff, wenn sich durch den Druck eine Gitterstruktur bildet, in der die Elektronen nicht mehr

Alle Rechte beim Urheber.

Abdruck nur gegen Belegexemplar, Honorar plus 7% MwSt.

einem Wasserstoffion zugeordnet werden können und sie sich frei von einem Wasserstoffatomrumpf zum anderen bewegen. In diese Form eines nicht-molekularen ‚Polymergitters‘ sollte unter bisherigen Annahmen der Wasserstoff bei etwa fünf Megabar übergehen. Die Simulation der Forscher Artem Oganov und Colin Glass vom Laboratorium für Kristallographie der ETH Zürich sagt dagegen voraus, dass auch bei Drücken von sechs Megabar der molekulare Zustand des Wasserstoffs erhalten bleibt.

Auch der Sauerstoff ändert seine physikalischen Eigenschaften, wird er unter Druck gesetzt. Durch die elektronenbedingte Volumenänderung des Sauerstoffmoleküls ändert sich auch dessen Absorption elektromagnetischer Strahlung. Der hellblau schimmernde Sauerstoff erscheint bei zunehmendem Druck in einer immer tieferen Röte, bis er im supraleitenden Zustand schließlich schwarz wird. Diesen Farbwechsel erklärt die Simulation dadurch, dass die Sauerstoffmoleküle schwache intermolekulare Bindungen eingehen, wenn der Druck erhöht wird. „Dadurch kommen exotische Molekülketten und andere molekulare Zusammenschlüsse wie zum Beispiel Paare zustande“, sagt Glass.