

Wie individuell sind Moleküle?

Dr. Peter Bützer

Da die **Isotope eines Elements** die gleiche Anzahl an Protonen im Kern aufweisen, haben sie auch die gleiche Anzahl an Elektronen in der Hülle. Sie verhalten sich somit chemisch gleichartig. Die Unterschiede in den oben angegebenen Eigenschaften führen aber doch zu charakteristischen Effekten (Isotopie-Effekte). Sie beruhen auf den unterschiedlichen physikalischen Eigenschaften der Kerne, z. B. auf den unterschiedlichen Massen. Die Massendifferenz führt z. B. zu kinetischen Isotopie-Effekten. So beträgt der Unterschied der Einbauraten von $^{14}\text{CO}_2$ und $^{12}\text{CO}_2$ bei der Photosynthese ca. 3%, was bei der Altersbestimmung mit der Radiokarbon-Methode berücksichtigt werden muss. Die *unterschiedlichen Eigenschaften* der Isotope eines Elements *in chemischen Verbindungen* und bei Reaktionen macht man sich bei der Isotopentrennung zunutze.

Isotope (Beispiele):

Wasserstoff: 3 natürliche Isotope (in Klammern Eigennamen und prozentuale Häufigkeit): ^1H (Protium, 99,985%), ^2H (Deuterium, 0,015%), ^3H (Tritium, auf 10^{18} stabilen ^1H kommt ein radioaktives ^3H ; 12,3 a HWZ).

Kohlenstoff: 3 natürliche Isotope: ^{12}C (98,90%) und ^{13}C (1,10%). ^{14}C (Die lebenden Organismen enthalten pro 10^{12} stabilen ^{12}C - und ^{13}C -Atomen ein radioaktives ^{14}C -Atom, 5730 a HWZ)

Stickstoff: 2 natürliche Isotope (in Klammern Angabe der Häufigkeit): ^{14}N (99,634%) und ^{15}N (0,366%), wobei das Isotopenverhältnis im Stickstoff aus anderen Quellen als Luft vom angegebenen Verhältnis bis zu 1,5% abweichen kann (z. B. in Erdgasen).

Sauerstoff: 3 natürliche Isotope (in Klammern jeweils die prozentuale Häufigkeit) ^{16}O (99,762%), ^{17}O (0,038%), ^{18}O (0,200%),

Moleküle mit natürlichen Isotopen:

Mögliche Moleküle mit m Isotopen von n Atomen in einem Molekül:
Die Reihenfolge ist wesentlich, sofern im Molekül unterscheidbar
Wiederholungen gestattet, da dasselbe Isotop mehrfach auftreten kann:

Variationen: $V(k, n) = n^k$

n: Anzahl Isotope (Anzahl unterschiedlicher Elemente)
k: Anzahl Atome dieser Sorte im Molekül (Anzahl Plätze)

Beispiel: Wasser

(Reihenfolge unwesentlich da beide H nicht unterscheidbar, Wiederholungen gestattet)

Kombinationen: $C(k, n) = \frac{n(n+1)(n+2)\dots(n+k-1)}{1 \cdot 2 \cdot 3 \dots k}$

H: n = 3, k = 2;

$C(k, n) = 3(3+1) / (1 \times 2) = 12/2 = 6$

O : n = 3, k = 1

H_2 : C = 6; O_1 : n = 3; Total : $6 \times 3 = 18$ isotopisch verschiedene Moleküle (verhalten sich chemisch praktisch gleich)

Folgerung:

Es gibt, ganz überraschenderweise, 18 unterschiedliche, natürliche Wassermoleküle

Beispiel: Ethanol CH₃-CH₂-OH

C₂: $x = 3^2 = 8$; H₆: $x = 3^6 = 729$; O₁ = 3

Total: 17'496 isotopisch verschiedene Moleküle?

CH₃: Reihenfolge 112 = 121 = 211 -> -2, gilt auch für 113; 221; 223; 331; 332 total 6 x 2 = -12

Variante 123 ist verschieden von 132, da chiral, aber gleich 231 oder 312 d.H. -2

CH₂: Variante 12 ist verschieden von 21, ebenso die anderen Varianten 13, 23 (chiral)

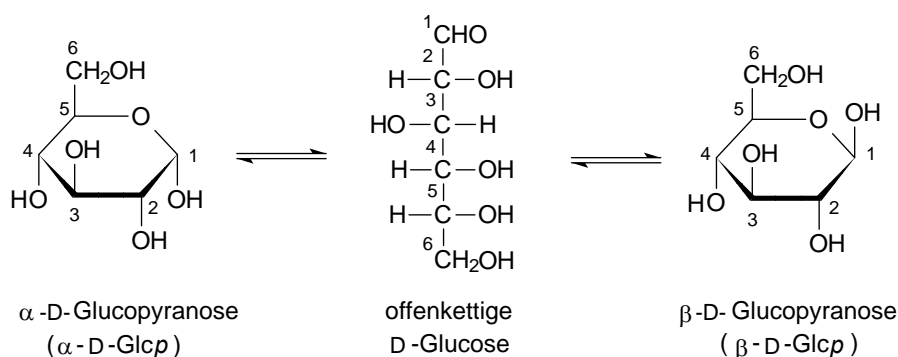
Total: 17'496 - 14 = 17'482 isotopisch verschiedene Moleküle (verhalten sich chemisch praktisch gleich)

Folgerung: Die verschiedenen Isotope können für räumlich unterschiedliche Moleküle sorgen.

Beispiel: Traubenzucker C₆H₁₂O₆

(Reihenfolge wesentlich, Wiederholungen gestattet.)

An der Stelle 6: CH₂ ¹H-²H ≠ ²H-¹H und ¹H-³H ≠ ³H-¹H da hier ein chirales Zentrum entsteht)



3 Isotope H, 3 Isotope C, 3 Isotope O;

C₆: $x = 3^6 = 729$; H₁₂: $x = 3^{12} = 531441$; O₆: $x = 3^6 = 729$:

Total: 282'429'536'481 isotopisch verschiedene Moleküle (verhalten sich chemisch praktisch gleich)

Beispiel: Häm C₃₄H₃₂FeN₄O₄

(Wiederholungen gestattet, Reihenfolge wesentlich, ausser z.T. bei CH₃ (4 x), CH₂ in Einfachbindungen (4 x). Kann bei der riesigen Gesamtzahl vernachlässigt werden)

Eisen: Natürliche Isotope ⁵⁶Fe (91,66%), ⁵⁴Fe (5,82%), ⁵⁷Fe (2,19%), ⁵⁸Fe (0,33%).

C₃₄: $x = 3^{34} = 1.668 \cdot 10^{16}$; H₃₂: $x = 3^{32} = 1.853 \cdot 10^{15}$;

O₄: $x = 3^4 = 81$; N₄: $x = 2^4 = 16$; Fe: $x = 1^4 = 4$:

Total: ca. 1.978×10^{33} isotopisch verschiedene Moleküle (verhalten sich chemisch praktisch gleich)

Frage: wieviel *verschiedene* Moleküle sind denkbar von:

C₂₉₅₄H₄₅₁₆N₇₈₀O₈₀₆S₁₂Fe₄: Hämoglobin, also noch das Protein?
(etwa 10^{17} Moleküle in einem Tropfen Blut)

Schwefel: ³²S (95,02%), ³³S (0,75%), ³⁴S (4,21%), ³⁶S (0,02%)

Eisen: ⁵⁶Fe (91,66%), ⁵⁴Fe (5,82%), ⁵⁷Fe (2,19%), ⁵⁸Fe (0,33%)

