



LUDWIG-  
MAXIMILIANS-  
UNIVERSITÄT  
MÜNCHEN

KOMMUNIKATION UND PRESSE



F-75-11 • 3 Seiten

19.10.2011

Kommunikation und Presse

# PRESSEINFORMATION

## FORSCHUNG

### Leuchts Spuren verraten Ordnung im Chaos

### Fundamentale Theorie erstmals experimentell bestätigt

Luise Dirscherl (Leitung)

Telefon +49 (0)89 2180 - 2706  
Telefax +49 (0)89 2180 - 3656  
[dirscherl@lmu.de](mailto:dirscherl@lmu.de)

Infoservice:  
+49 (0)89 2180 - 3423

Geschwister-Scholl-Platz 1  
80539 München  
[presse@lmu.de](mailto:presse@lmu.de)  
[www.lmu.de](http://www.lmu.de)

München, 19. Oktober 2011 – Das sogenannte Ergodentheorem ist ein fundamentales naturwissenschaftliches Prinzip: Es besagt, dass sich in physikalischen Systemen alle Einzelteilchen genauso „chaotisch“ verhalten wie das gesamte Ensemble – vom Verhalten des Einzelnen also auf das Ganze geschlossen werden kann. Obwohl dieses Prinzip weitreichende Konsequenzen hat, war es bisher ein reines Gedankengebäude. Professor Christoph Bräuchle und seinem Team vom Department Chemie der Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) München gelang es nun gemeinsam mit Professor Jörg Kärger und dessen Arbeitsgruppe (Universität Leipzig) zum ersten Mal, durch die Messung des Diffusionsverhaltens einzelner Moleküle sowie ganzer Molekülensembles im selben System das Ergodentheorem experimentell zu bestätigen. Dazu nutzten die Forscher an der LMU fluoreszierende Moleküle, deren "Leuchts Spuren" den Weg jedes einzelnen Moleküls genau nachzeichneten, während die Leipziger Gruppe das entsprechende Molekülensemble untersuchte. „Nun wird es sehr interessant, Systeme genauer zu untersuchen, die sich nicht entsprechend des Ergodentheorems verhalten und herauszufinden, aus welchen Gründen das nicht der Fall ist“, sagt Bräuchle.

Diffusion ist die durch thermische Energie – das heißt Wärme – ausgelöste zufällige Bewegung von Teilchen, etwa von Atomen und Molekülen. Dieser physikalische Prozess ist essenziell für unzählige Abläufe in der Natur, aber auch für viele technische Verfahren. Bei fast jeder chemischen Reaktion ist Diffusion der entscheidende Mechanismus, damit sich die potenziellen Reaktionspartner überhaupt nahe genug kommen, um miteinander zu reagieren. Das Ergodentheorem ist für die dynamischen Prozesse der Diffusion ein allgemein anerkanntes zentrales Prinzip: Es besagt, dass die häufig wiederholte Messung einer Beobachtungsgröße - wie etwa der pro Zeiteinheit zurückgelegten Wegstrecke - an einem einzelnen Teilchen zum selben Mittelwert führt wie die gleichzeitige Messung dieser Größe an vielen Teilchen - zumindest, wenn sich die Systeme im Gleichgewicht

**Kommunikation und Presse**

Telefon +49 (0)89 2180 - 2706  
Telefax +49 (0)89 2180 - 3656  
[dirtscherl@lmu.de](mailto:dirscherl@lmu.de)

**Infoservice:**  
**+49 (0)89 2180 - 3423**

befinden. „Obwohl bereits seit 150 Jahren Diffusionsmessungen durchgeführt werden, konnte das Ergodenprinzip bisher noch nicht experimentell überprüft werden“, erklärt Kärger. Dies lag daran, dass bisher Diffusionsmessungen nur als Ensemblemessungen – das heißt als gleichzeitige Messung vieler Teilchen – durchgeführt werden konnten. Eine wichtige Methode dazu ist die Pulsgradientenmethode der NMR (Kern-Spin-Resonanz), für deren Einsatz die Arbeitsgruppe von Kärger bekannt ist. Der konkrete Diffusionsweg eines einzelnen Teilchens dagegen entzog sich bisher den Beobachtungsmöglichkeiten der Wissenschaftler. „Mit der Entwicklung der Einzelmolekülspektroskopie und –mikroskopie können inzwischen aber auch die Spuren – und damit das Diffusionsverhalten - einzelner Moleküle untersucht werden“, erklärt Bräuchle. Bei den optischen Einzelmolekülmethoden wird das Molekül über seine Fluoreszenz beobachtbar und kann anhand seiner „leuchtenden Spuren“ bis auf wenige Nanometer genau lokalisiert und verfolgt werden.

Eine weitere Schwierigkeit bestand jedoch darin, dass beide Methoden sehr gegensätzliche Bedingungen für erfolgreiche Messungen erfordern. So sind für die NMR-Messungen hohe Konzentrationen und große Diffusionskoeffizienten der Moleküle erforderlich, während die Einzelmolekülspektroskopie extrem geringe Konzentrationen und kleine Diffusionskoeffizienten erfordert. Durch die Verwendung spezieller organischer Farbstoffmoleküle mit guter Fluoreszenz, die als Gastmoleküle in porösen Gläsern mit nanometergroßen Poren diffundieren, konnten die Forscher das Problem lösen und mit beiden Messmethoden unter gleichen Bedingungen sowohl Einzelmolekülmessungen als auch Ensemblemessungen durchführen.

Auf diese Weise gelang den Forschern der Nachweis, dass die durch die verschiedenen Methoden erhaltenen Diffusionskoeffizienten und damit das Diffusionsverhalten übereinstimmt – die erste experimentelle Bestätigung des Ergodentheorems in diesem Bereich. Als nächsten Schritt wollen die Wissenschaftler solche Systeme genauer untersuchen, in denen das Ergodentheorem nicht gilt. „Die Diffusion von Nanoteilchen in Zellen scheint solch ein interessanter Fall zu sein“, sagt Bräuchle, „für uns ist es wichtig herauszufinden, aus welchen Gründen das Ergodentheorem hier nicht greift“.

Das Projekt wurde in München im Rahmen des Exzellenzclusters „Nanosystems Initiative Munich“ (NIM) sowie über den Sonderforschungsbereich 749 (Dynamik und Intermediate molekularer Transformationen) und durch das FOR 877 in Leipzig (From local constraints to macroscopic transport) von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) gefördert. (göd)

**Publikation:**

Single-particle and ensemble diffusivities - Test of ergodicity  
F. Feil, S. Naumov, J. Michaelis, R. Valiullin, D. Enke, J. Kärger, C. Bräuchle  
Angewandte Chemie/International Edition Angewandte Chemie, Online  
Publication, 14. Oktober 2011  
DOI: 10.1002/ange.201105388

**Ansprechpartner:**

Prof. Dr. Christoph Bräuchle  
Department Chemie, Lehrstuhl Physikalische Chemie I  
Tel.: 089/2180-77549  
Fax: 089/2180-77550  
<http://www.cup.uni-muenchen.de/pc/braeuchle/>

**Kommunikation und Presse**

Telefon +49 (0)89 2180 - 2706  
Telefax +49 (0)89 2180 - 3656  
[dirtscherl@lmu.de](mailto:dirscherl@lmu.de)

**Infoservice:**  
**+49 (0)89 2180 - 3423**