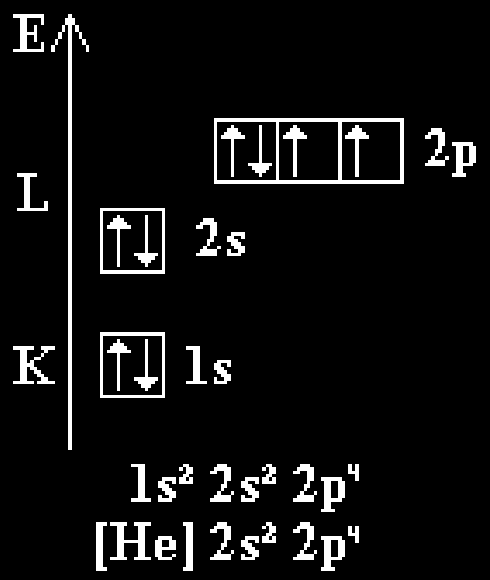
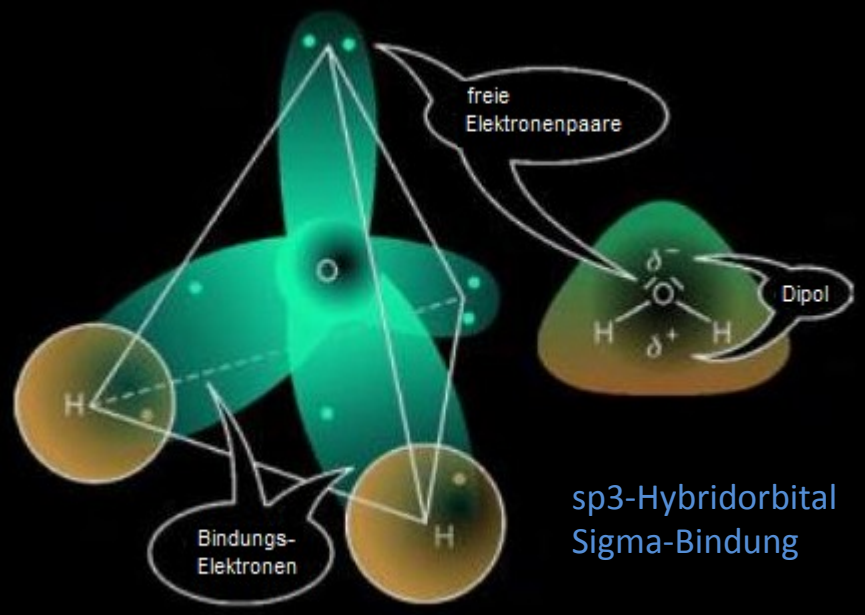
Exkurs: Wasser

Das Elixier des Lebens

Wasser – Anatomie eines Moleküls



VSEPR-Modell



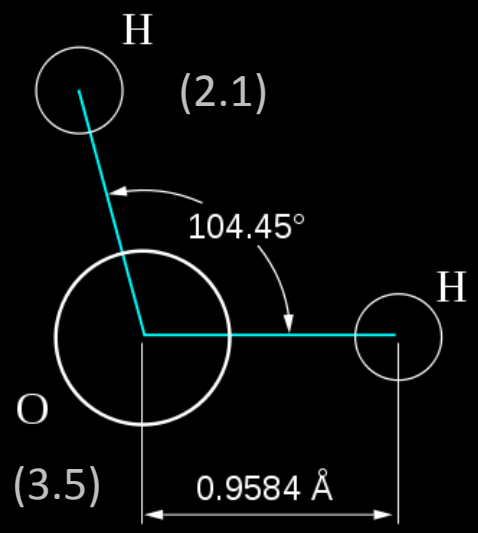
sp3-Hybridorbital
Sigma-Bindung

Elektronenkonfiguration
Sauerstoff

Das vollbesetzte 2s-Orbital sowie die drei p-Orbitale (eins voll besetzt) bilden eine Tetraederstruktur mit dem Sauerstoffrumpf in der Mitte → zwei nichtbindende Elektronenpaare und zwei „bindende“ Elektronen

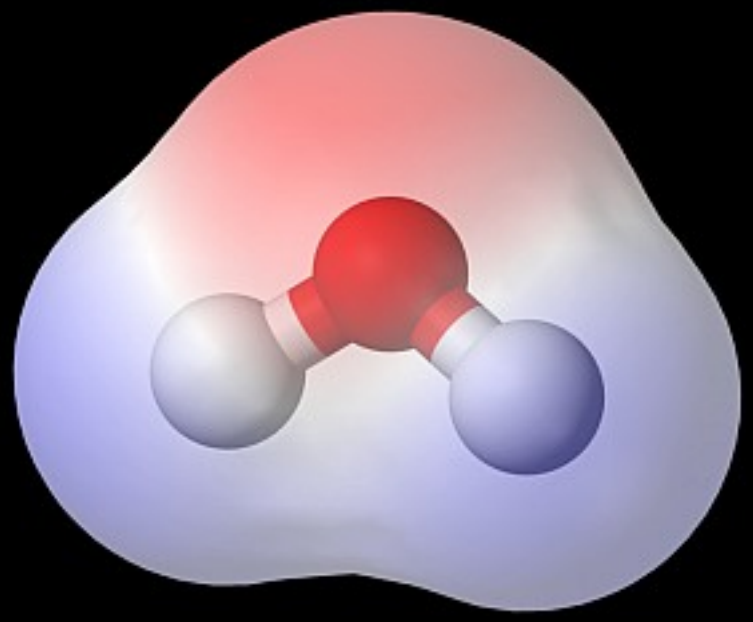
Tetraederwinkel 109° → wird verkleinert (104.5°), wenn sich zwei Wasserstoffatome anlagern

Das Wassermolekül ist ein polar-kovalentes Molekül



Ladungs-Dipol

Mehr negativ geladen



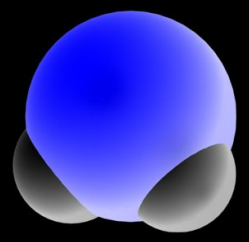
Mehr positiv geladen

Unterschiedliche Partialladungen

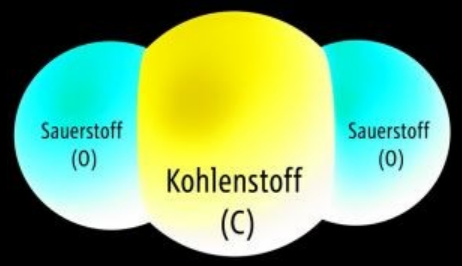
Durch die unterschiedlichen Partialladungen kann das Molekül von elektromagnetischen Wellen mit einer Frequenz im Mikrowellen-Bereich (2.45 GHz) in Schwingungen und Rotationen versetzt werden

→ Erwärmung des Wassers

Vergleich mit zu Wasser homologen Molekülen CO_2 / H_2S



Schwefelwasserstoff



Kohlendioxid

Dihydrogenmonoxid

Elektronegativitätsdifferenz = 0.38
→sehr schwacher Dipol

Bindungswinkel 91.3° (kaum Hybr.)

Schmelzpunkt -85.7 °C
Siedepunkt -60.2 °C
Differenz 25.5 °

geringere Wärmekapazität

Elektronegativitätsdifferenz = 1.24
→sehr starker Dipol

Bindungswinkel 104.5° (sp3-Hybr.)

Schmelzpunkt 0 °C
Siedepunkt 100 °C
Differenz 100 °

Sehr gutes Lösungsmittel
hohe Wärmekapazität

Durch den ausgeprägten Dipolcharakter wird Wasser zu einem außergewöhnlichen Stoff

Außergewöhnliche Eigenschaften von H_2O (Auswahl)

Wasser ist im Gegensatz zu dazu homologen Stoffen über einen großen Temperaturbereich flüssig (unter Normalbedingungen zwischen 0 °C und 100 °C, ohne Berücksichtigung der Dipoleigenschaften läge der Siedepunkt 46 °C oberhalb des Gefrierpunktes)

Wasser erreicht seine größte Dichte unter Normalbedingungen bei +3.98 °C (Anomalie)

Wasser ist der einzige Stoff auf der Erde, der in nennenswerter Menge in allen drei Aggregatzuständen (fest, flüssig, gasförmig) vorkommt

Der kritische Punkt des Wassers liegt bei 374.15 °C und 2.21 · 10^7 Pa, der Tripelpunkt bei 0.01 °C und 611,657 Pa.

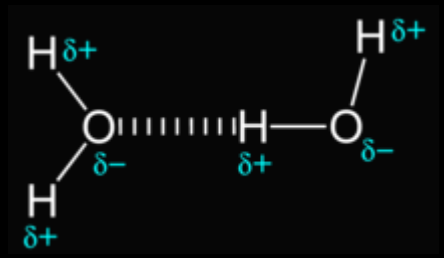
Flüssiges Wasser hat eine sehr hohe spezifische Wärmekapazität von 4187 J/(kg·K)
1 Liter Wasser zum kochen bringen → 0.1 kWh Energie

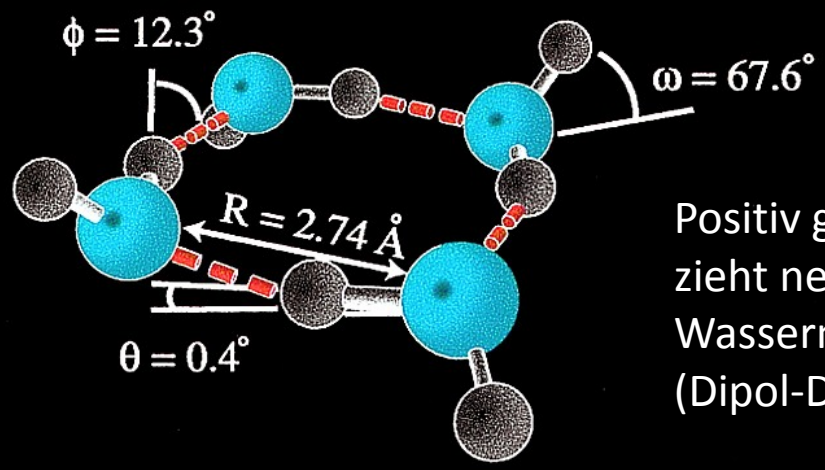
Reines Wasser ist ein Nichtleiter. Durch Lösung von Salzen kann die Leitfähigkeit jedoch sehr schnell zunehmen

Wasser hat eine sehr große Oberflächenspannung

Molekulare Struktur von flüssigem Wasser

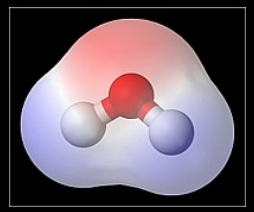
Kleinster Grundbaustein: Wasser-Tetramer (4 Grundeinheiten)





Positiv geladener Teil des Wassermoleküls (O) zieht negativ geladenen Teil (H) eines anderen Wassermoleküls an – elektrostatische Anziehung (Dipol-Dipol-Wechselwirkung)

→ **Wasserstoffbrücke**

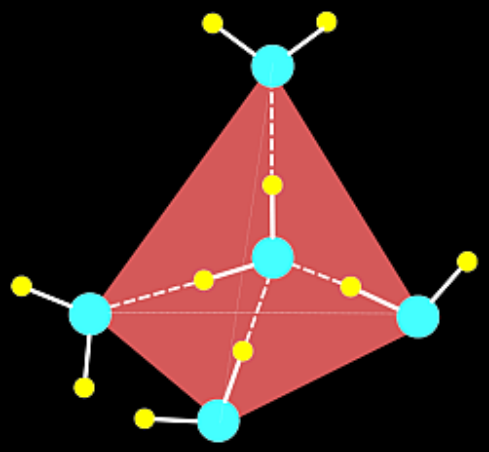


Bindungsstärke ~ 5 kJ/mol (~1/10 kovalenter Bindungen)

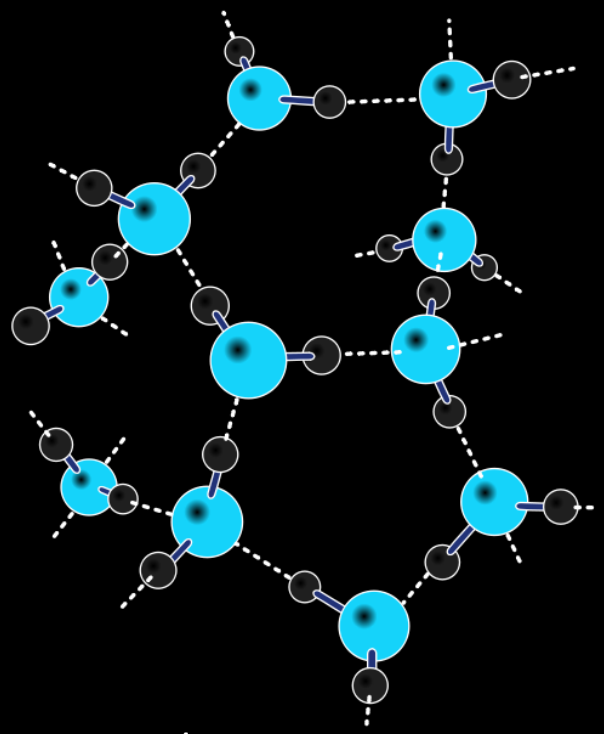
Typische Lebensdauer einer Wasserstoffbrücke ca. 1-20 ps

Wasser neigt zur Clusterbildung (= Vernetzung von Tetrameren), wobei die Neigung mit steigender Temperatur abnimmt

Wassercluster und ihre makroskopischen Eigenschaften



Räumliche Vernetzung



Wasser-Tetramer als Grundfläche
eines Tetraeders (= Pentamer)

T~20 °C → Wärmeenergie ~ 0.6 kJ/mol -> Bindungsenergie ~ 5 kJ/mol

Ein (meist kurzlebiger) autonomer Zusammenschluß von mehreren Wassermolekülen zu einem größeren Verbund wird als **Wassercluster** bezeichnet

→ große Zwischenräume zwischen den Molekülen (hat Auswirkungen auf die Dichte)
→ bei Temperaturerhöhung zerfallen größere Wassercluster in kleinere
→ Wassercluster sind kurzlebige Gebilde im dynamischen Gleichgewicht

Auswirkungen der Clusterbildung auf die makroskopischen Eigenschaften von Wasser

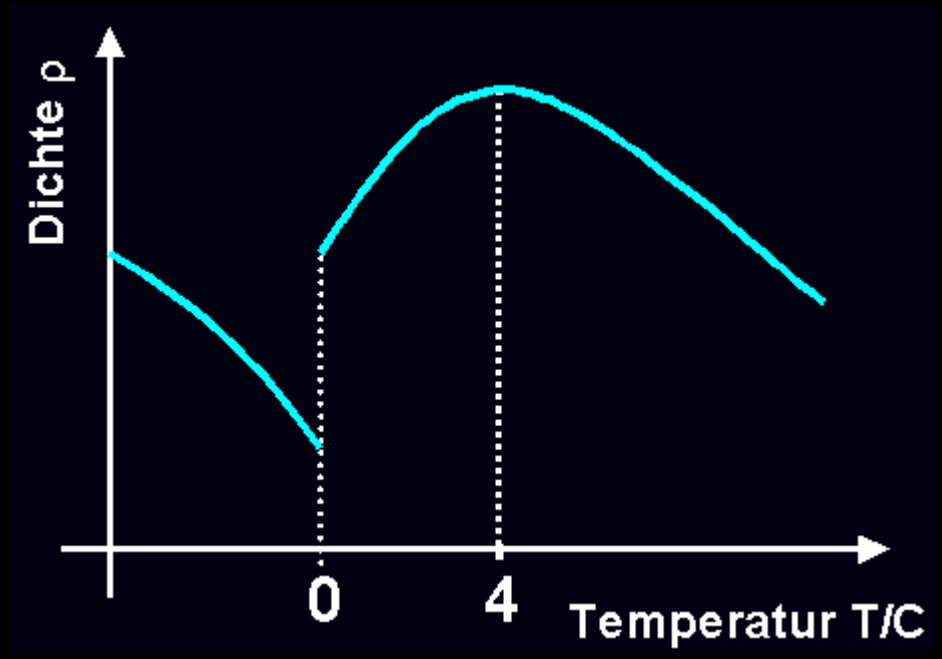
Anomalie des Wassers: Größte Dichte (1000 kg/m³) bei einer Temperatur von 3.98 °C

Wassercluster umschließen ein Volumen, welches bei maximaler Clusterbildung (d.h. bei T~ 4 °C) am kleinsten ist.

Temperaturerhöhung: Moleküle im Cluster benötigen mehr Raum um zu schwingen (Dichte nimmt ab)

Temperaturerniedrigung: Durch Wandel in pentamere kristalline Strukturen wird Volumen benötigt (Dichte nimmt ab)

→ kristallines Eis enthält mehr Hohlräume zwischen den Wassermolekülen als in flüssigen Wasser



Extrem wichtig für Lebewesen, die in (kalten) Regionen im Wasser leben.

Sehr hohe Wärmekapazität von flüssigen Wasser

Die Wärmekapazität ist hoch, solange die Cluster weitgehend intakt und untereinander verschiebbar sind.

→ dieser Effekt nimmt oberhalb von T=37 °C schnell ab
→ bei T= 38 – 42 °C bricht ein Cluster nach dem anderen auf (es wird immer weniger Wärmeenergie erforderlich, um die Wassertemperatur um 1 ° zu erhöhen)

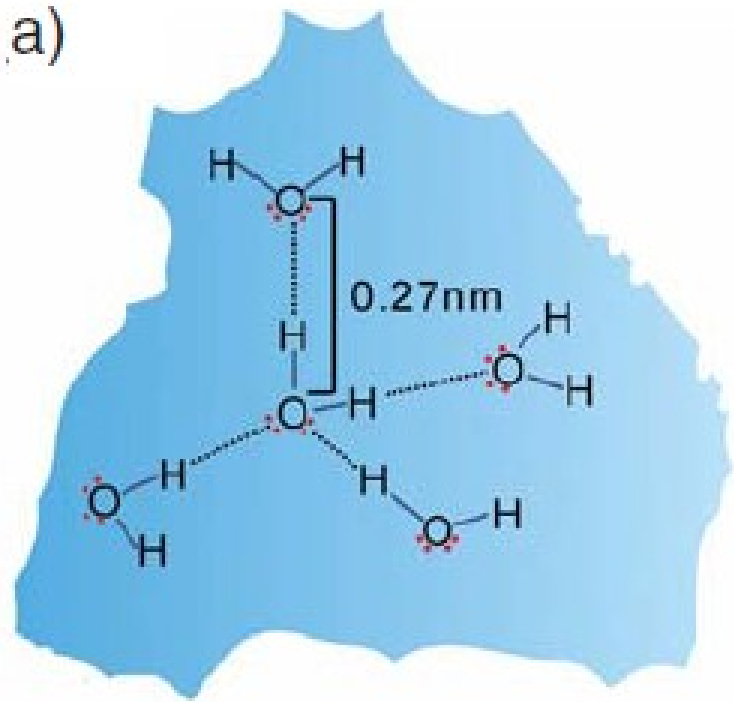
Problem Fieber: Temperaturanstieg von 37.5 °C -> 38.5 °C erfordert eine Wärmemenge von ~ 30 kCal

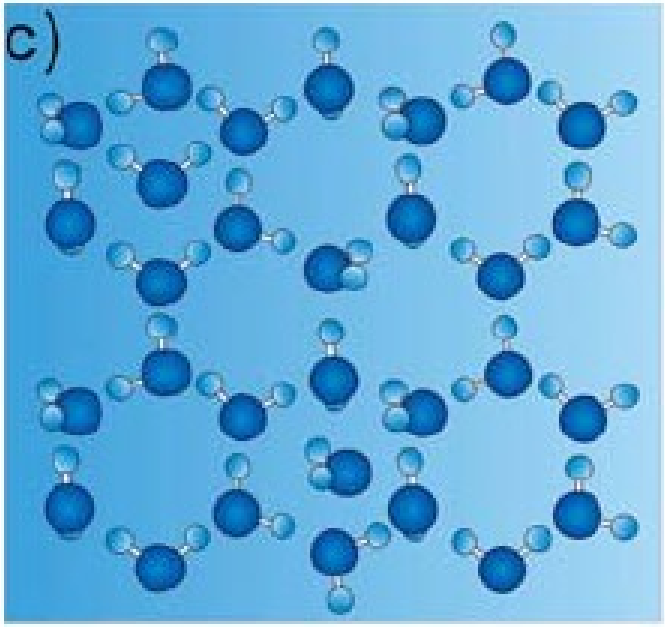
Cluster zerfallen in den engen Kapillaren des Blutkreislaufs; Hydrathüllen um Na-Ionen beginnen sich aufzulösen (Signalweiterleitung im Nervensystem wird gestört, Muskelfunktionen sind reduziert)

T~40 °C : es droht ein **biochemischer Kollaps**

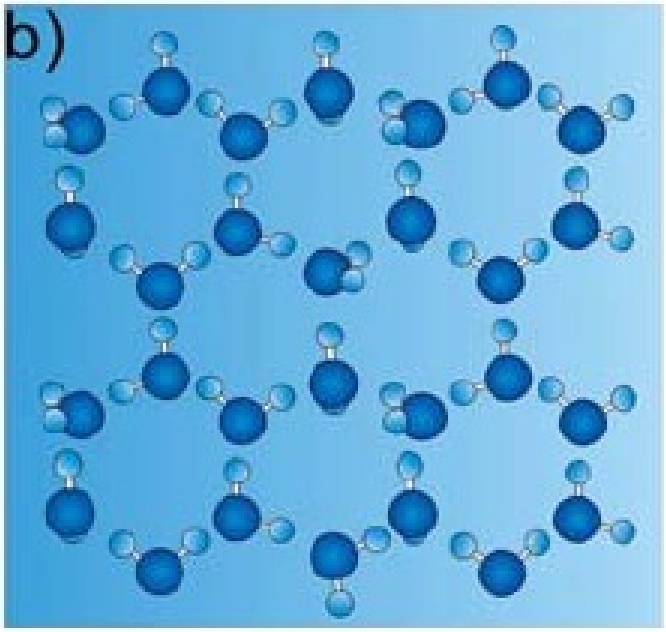
→ Abtransport der überschüssigen Wärme durch Schwitzen (Schweiß)

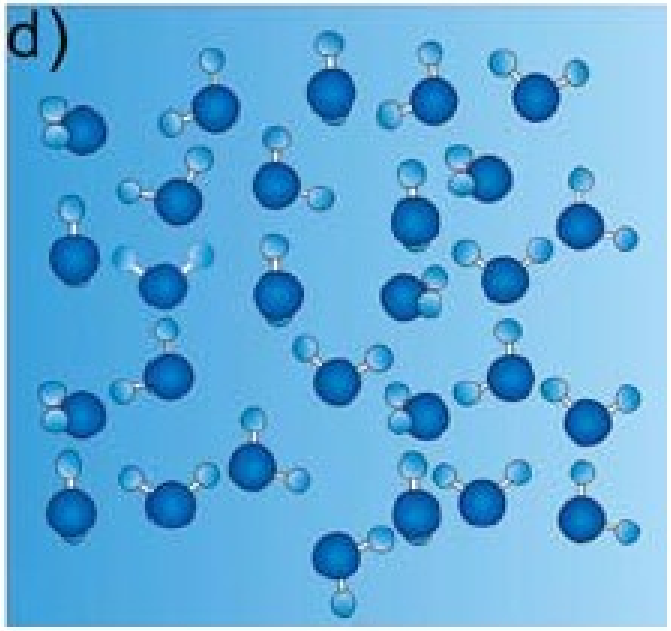
Wasser-Cluster





Gestörtes Muster bei 20 °C und z.T. aufgeöstes Muster bei 37 °C (noch ~60% intakt)





4 °C
-> ideale pentamere Struktur

Ebene:
hexagonales Muster

Viskosität und Oberflächenspannung

Ungestörte Cluster sind steif, d.h. kaltes Wasser müßte sich eher wie Sirup verhalten ...

aber -> Einzelmoleküle können schnell in leicht gestörte Cluster eindringen, temporär Brücken bilden / auflösen und somit das Wasser „fluider“ machen

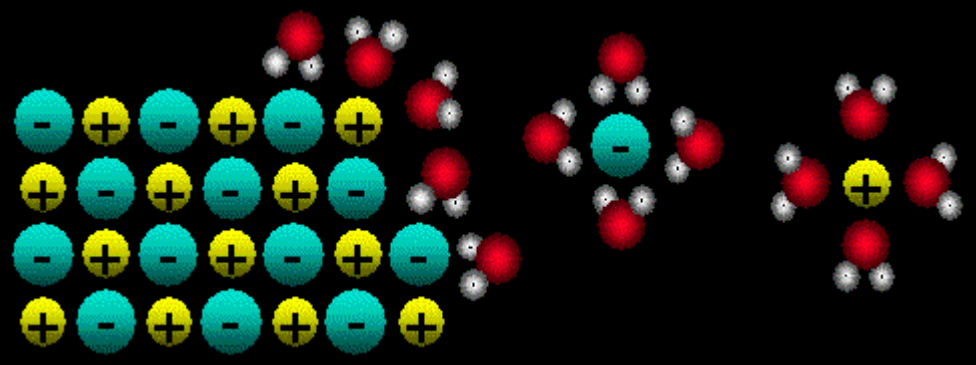
Sehr hoher Siedepunkt (100 °C) → Cluster halten Wassermoleküle an der Oberfläche fest, weshalb sie nicht so leicht „abdampfen“ können

→ sehr hohe Oberflächenspannung

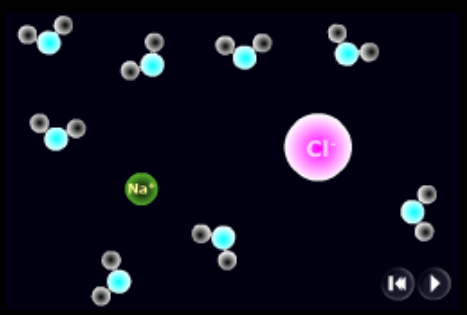
Wasser als ideales Lösungsmittel

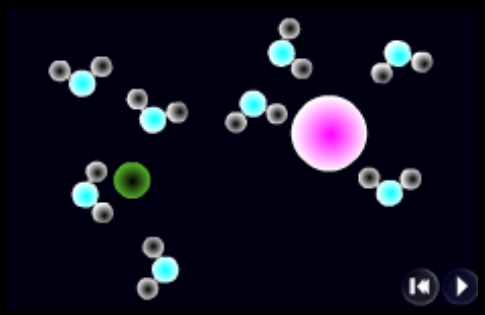
Wasser ist der Stoff mit der größten Dielektrizitätskonstanten (Permittivität) ~ 80

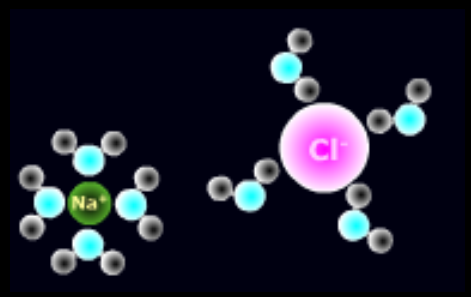
d.h. die Wassermolekül-Dipole können die Gitterbindungsenergie von Ionenkristallen soweit herabsetzen, daß deren Kationen und Anionen dissoziieren und in Lösung gehen



Bildung von Hydrathüllen um die Ionen







In der Fähigkeit, sehr viele verschiedene anorganische und organische Stoffe zu lösen, liegt eine wichtige biologische Bedeutung des Wassers, welches auf diese Weise Reaktionsräume für biochemische Reaktionen bereitstellt.

Einige verstörende Tatsachen...

In jedem Mensch (und jedem Hund) sind von 100 Molekülen 99 Wassermoleküle

Ein Mensch (oder ein großer Hund) von 75 kg besteht zu 50 kg aus Wasser

→ restliche 25 kg (35 Gewichtsprozente) entfallen auf die Proteine der Muskeln, die Lipide der Nerven, Zellwände und Fettgewebe sowie auf das Kalziumphosphat der Knochen und Zähne.

→ Verdursten ist sehr gefährlich!

Grund: Wassermolekül ist sehr leicht
Organische Moleküle sind im Mittel 30x schwerer als ein Wassermolekül

Deshalb: von 100 Molekülen im Menschen ist nur 1 kein Wassermolekül

Biochemie findet generell im „wässrigen“ Milieu statt

Wasser ist die ideale Substanz des Lebens, weil sich so viele hydrophile Molekülsorten in hoher Konzentration darin lösen lassen

→ Hydrathüllen können Ionen nach außen abschirmen, weshalb eine hohe Ionenkonzentration im Wasser möglich wird

→ funktionelle Gruppen (Aminogruppe, Zucker, Nukleotide) sind aufgrund ihrer Polarität „hydrophil“ und damit sehr gut wasserlöslich. Sie können Wasser als Reaktionsräume nutzen, in denen die Ausgangsstoffe leicht durch Diffusion zueinander finden

Reines Wasser ist geruchs- und geschmacklos. Deshalb kann

APOLLINARIS Tafelwasser

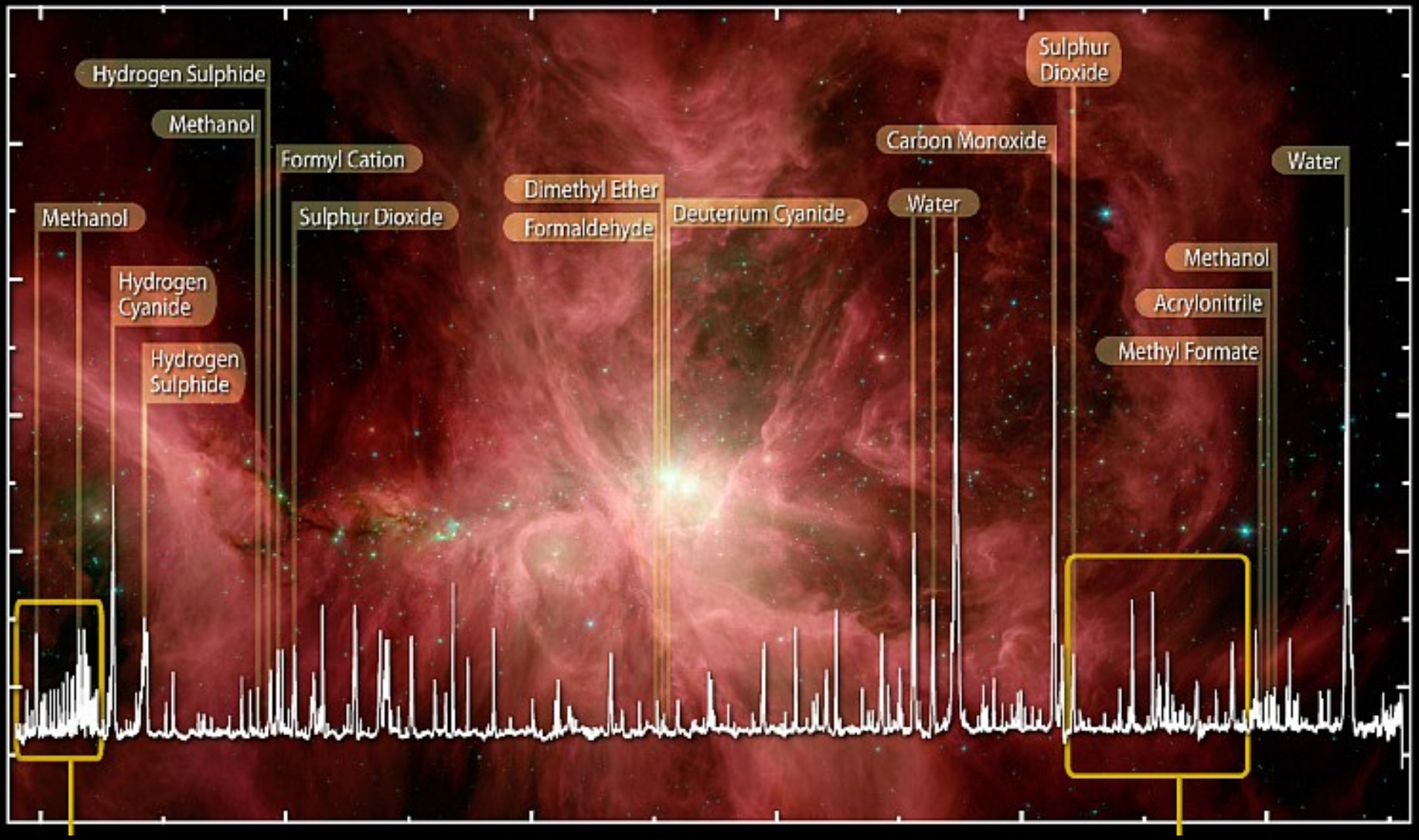
kein reines Wasser sein.

Wasser im Kosmos

Durchmesser ~ 30 Lj
Masse > 700 M(Sonne)

Im Orionnebel entstehen pro Tag 10^11 km³ Wassermoleküle, d.h. eine Menge, die der 60-fachen Wassermenge der gesamten Erde entspricht.

Herschel- Spektrum (IR) vom Orionnebel



Wasser Wasser Wasser

Ohne Wasser, merkt euch das, wär´ uns´re Welt ein leeres Faß…