

Water droog doorgerekend

Mysterieus gewoon molecuul blijft bij de buren plakken

H₂O, bij velen bekend als water, wordt slecht begrepen voor een zo belangrijk molecuul dat zo simpel in elkaar zit. De eerste volledige computersimulatie brengt opheldering.

Water is vreemd: als het bevriest zet het uit, in tegenstelling tot de meeste stoffen. En voor een piepklein, licht molecuul smelt en verdampt het wel bij heel hoge temperaturen: 0 en 100 graden Celsius. Als water normaal was, zou ijs zinken in water. Al zou niemand dat ooit zien gebeuren op aarde. Want daar zou vermoedelijk alleen waterdamp voorkomen, en zeker geen mensen.

Onderzoekers van de Universiteit van Delaware en de Radboud Universiteit in Nijmegen hebben nu de vreemde eigenschappen van water eindelijk precies kunnen voorspellen met een nieuwe computersimulatie van watermoleculen, waarover ze in Science berichten.

Kwalitatief was wel bekend waarom water zich zo uitzonderlijk gedraagt. Tussen een waterstofatoom en het zuurstofatoom van naburige watermoleculen kan zich een 'waterstofbrug' vormen, een zwakke aantrekkingskracht die de beide moleculen bij elkaar houdt. Daardoor smelt en verdampt water pas bij hoge temperaturen.

In ijs helpen waterstofbruggen daarnaast bij het vormen van een vrij ruime kristalstructuur waarbij ieder watermolecuul vier buren op gelijke afstand heeft zitten. Als het ijs smelt 'zakt' deze luchtige structuur in elkaar, en wordt de afstand tussen watermoleculen kleiner, en de dichtheid dus groter.

Maar voor preciezere, kwantitatieve berekeningen van deze effecten lieten computermodellen het tot nog toe afweten. Bij de meeste moleculen is het genoeg om met hulp van de quantummechanica de krachten tussen twee moleculen uit te rekenen, en dan te extrapoleren naar de miljarden moleculen die een vloeistof of een vaste stof bevolken.

Maar watermoleculen beïnvloeden elkaar sterk, onder andere door die waterstofbruggen. De krachten tussen drie watermoleculen zijn daardoor heel anders dan de gecombineerde krachten tussen de afzonderlijke moleculen, zodat je eigenlijk clusters van drie (of zelfs vier of vijf) moleculen zou moeten doorrekenen.

Computers kunnen dat nog niet aan. Een noodoplossing is het gebruiken van experimentele gegevens, bijvoorbeeld het lichtdoorlatingspectrum van water, om onvolledige berekeningen te 'fitten'. Daarbij gebruik je onzekerheden in de berekeningen om de uitkomsten zo af te stemmen dat ze in ieder geval kloppen met de experimenten. Maar als je zulke watermodellen gaat gebruiken voor simulaties, geven ze nogal eens onzinnige resultaten.

Liever zouden wateronderzoekers een vanaf de grond opgebouwd, 'droog', watermodel gebruiken: je begint met natuurconstanten als de massa van het zuurstofatoom en waterstofatoom, en met hulp van quantummechanica reken je vervolgens alles uit.

Dat is de onderzoekers nu gelukt, tot aan eigenschappen van vloeibaar water toe. Ijs is met het model ook door te rekenen, net als superkritisch water (tussen gas en vloeibaar) en onderkoeld water. "En je kunt het ook gebruiken voor het simuleren van chemische of biologische processen, daar speelt water ook een grote rol", zegt co-auteur Ad van der Avoird.

Daarnaast geeft het rekenwerk een nieuw, onafhankelijk antwoord bij een wetenschappelijke ruzie over waterstofbruggen in vloeibaar water. De gevestigde theorie stelt dat ieder watermolecuul gemiddeld zo'n drie à vier waterstofbruggen met de buren vormt, bijna net als in ijs. Maar een artikel in Science in 2004 pleitte geloofwaardig voor een lager aantal van gemiddeld twee waterstofbruggen per molecuul. Van der Avoird: "Wij komen uit op drie à vier waterstofbruggen, dus dat is nu weerlegd."

Bruno van Wayenburg

Robert Bukowski, Krzysztof Szalewicz, Gerrit C. Groenenboom, Ad van der Avoird, 'Prediction of the properties of water from first principles', Science, 2 maart 2007