

# 'MET COMPUTERSIMULATIES KUN JE DE NATUURWETTEN EEN BEETJE MANIPULEREN'

Moleculen zijn te klein en te snel om in een laboratorium goed te kunnen onderzoeken. Daarom bootst Bernd Ensing met een computer na hoe water zich op moleculair niveau gedraagt.

**S**cheikundigen zijn druk in de weer met het ontleden van de vreemde eigenschappen van water. Dit doen ze niet alleen met experimenten in het lab, maar vooral ook met geavanceerde computermodellen. Bernd Ensing, computationeel scheikundige aan de UvA, legt uit wat water zo bijzonder maakt.

## Wat voor bizarre eigenschappen heeft water waar gewone stervelingen helemaal niet bijilstaan?

'Water heeft een enorm aantal bijzondere eigenschappen – als je de lijstjes op internet mag geloven misschien wel honderd. De bekendste is dat de dichtheid van water niet continu toeneemt als je het afkoelt, zoals verder met bijna alle andere stoffen het geval is. Water heeft een maximale dichtheid bij 4°C, waarna de dichtheid weer afneemt.

'Mensen draaien niet voor niets in de winter de buitenkraan dicht; anders knapt de leiding. En we worden er ook pijnlijk aan herinnerd als we onze bierflesjes te

lang in de vriezer hebben laten liggen en de ochtend na een feestje een klomp ijsgeworden bierschuim aantreffen. De meeste mensen kennen deze eigenschap van water, maar staan er niet bij stil dat dit eigenlijk heel bijzonder is.

'Daarnaast lossen heel veel stoffen, zoals zout en suiker, goed op in water. In bijvoorbeeld olie lukt dat niet. Ook absorbeert water heel goed warmte. Je moet heel veel warmte-energie in water stoppen voordat de temperatuur met een graad toeneemt. Als je op een hete dag over het strand loopt, dan brand je je voeten. Maar als je dan naar de zee rent, die net zo veel zon heeft gezien als het zand, dan is die nog lekker koel.

'Water heeft ook een hoge oppervlaktespanning, waardoor insecten op water kunnen lopen. En het heeft sterke cohesie met andere stoffen, wat planten in staat stelt om door capillaire werking water op te zuigen. Tot slot is water ook nog eens de enige stof die in alle drie de fasen op het oppervlak van de aarde voorkomt: gasvormig, vloeibaar en vast.'

## Wat is er zo bijzonder aan de moleculaire structuur van water waardoor het deze eigenschappen heeft?

'Dat is een heel subtiel dingetje. Wetenschappers zijn het daar nog niet zo heel lang over eens. Een watermolecuul bestaat slechts uit drie atomen – een zuurstofatoom en twee waterstofatomen – en heeft een heel lage massa. Dan vraag je je al snel af wat daar nu zo bijzonder aan kan zijn.

'Het zuurstofatoom trekt makkelijk elektronen aan. Waterstofatomen staan hun elektronen juist makkelijk af. Daardoor is een watermolecuul aan de kant van het zuurstofatoom een beetje negatief geladen en aan de kant van de waterstofatomen een beetje positief geladen. Met andere woorden: water heeft een dipoolmoment.

'Door deze ladingsverschuiving maken watermoleculen heel makkelijk een speciaal soort bindingen. Eén molecuul kan vier zogeheten waterstofbindingen maken: twee aan de kant van het zuurstofatoom en eentje per waterstofatoom. Dat zijn heel veel bindingen in een heel klein volume. Daardoor interacteert het heel sterk met andere moleculen en heeft het bijvoorbeeld een heel hoog smeltpunt en een heel hoog kookpunt.

'Andere moleculen, zelfs moleculen die structureel enigszins op water lijken, hebben dat niet. Het naar rotte eieren stinkende waterstofsulfide (H<sub>2</sub>S) is bijvoorbeeld bijna twee keer zo zwaar als H<sub>2</sub>O waardoor je zou verwachten dat het smelt- en kookpunt ervan hoger ligt dan dat van water. Waterstofsulfide is bij

kamertemperatuur echter een gas; het kookt al bij -60°C. Het heeft verder ook geen van de bijzondere eigenschappen die water wel heeft.'

## Mogelijk kent water twee verschillende vloeibare fasen. En daarnaast elf, of misschien wel meer, vaste fasen. Hoe kan zo'n klein molecuultje voor zo veel verschillende vormen zorgen?

'Op dit moment staat de teller zelfs op achttien verschillende soorten waterijs. En dat kunnen er nog veel meer zijn. Het gaat om het aantal manieren waarop je het molecuul kunt stapelen. Vergelijk het maar met hoe je sinaasappels in een kistje kunt stapelen. De sinaasappels staan dan symbool voor de zuurstofjes. Voor elke vorm waarin je die zuurstofjes kunt stapelen, zijn er dan ook nog eens legio manieren waarop je de waterstofjes daartussenin kunt plaatsen.'

## Is het aantal fasen waarin water kan voorkomen het grootste waterraadsel waar scheikundigen momenteel mee stoeien?

'Het gróóste raadsel? Dat weet ik niet. Maar het is wel een heel bijzonder mysterie. Behalve kennis levert dit mysterie ons waarschijnlijk alleen geen toepassingen op voor ons huidige leven of technologie. Het is echt door nieuwsgierigheid gedreven onderzoek – hoewel het wel belangrijk is voor het testen van theorieën die op hun beurt weer praktische toepassingen kunnen opleveren.

'Water is op nog veel meer vlakken een interessant onderzoeksonderwerp. Bijvoorbeeld in de biologie. Zo zijn collega's van mij aan het uitzoeken of het water in cellen dezelfde eigenschappen heeft als het water in je drinkglas. Dat is belangrijk als je wilt begrijpen hoe het vouwen en ontvouwen van eiwitten in zijn werk gaat.

'Daarnaast heb je de zogeheten groene katalyse. Op dit moment gebruiken we veel organische, milieuvervuilende

'Mensen realiseren zich vaak niet wat eigenlijk allemaal scheikunde is'

oplosmiddelen. Beter is het om water als oplosmiddel te gebruiken. Daarvoor moet je katalysatoren ontwikkelen die ook in water werken.

'Met behulp van elektrokatalyse, een bijzondere vorm van groene katalyse, kunnen we ook veel processen milieuvriendelijk maken. Elektriciteit uit zonne- en windenergie zou je kunnen gebruiken om water te splitsen in waterstof en zuurstof. Dat levert je dan groene brandstof op. En uit de lucht gefilterd CO<sub>2</sub> zou je met elektrokatalyse kunnen omzetten in alcoholen en suikers. Dit kan allemaal helpen bij het tegengaan van de aardopwarming.'

## Wat voor rol spelen computermodellen in het onderzoek naar dit soort vraagstukken?

'In het laboratorium kun je allerlei experimenten doen, maar vaak is het dan een beetje gissen wat er op moleculair niveau

nou écht gebeurt; welk molecuul op welke manier met welk ander molecuul reageert. Dat kun je niet zien. Moleculen zijn daar te klein voor en ze bewegen te snel.

'Met computersimulaties heb je dat probleem niet. Daarmee kun je de moleculen neerzetten zoals je wilt en de simulatie in slow motion afspelen en terugspoelen. Daarnaast kun je de natuurwetten een beetje manipuleren zodat je kunt testen of causale verbanden die je vermoedt echt kloppen. Als je vermoedt dat een bepaalde interactie achter een reactie zit, dan kun je die interactie uitzetten en kijken of de reactie dan daadwerkelijk uitblijft. In het echt kan dat niet.'

## Scheikunde kan dus meehelpen met het oplossen van veel maatschappelijke problemen. Zouden meer studenten voor scheikunde moeten kiezen?

'Scheikunde klinkt misschien een beetje oubollig. Je krijgt het al op de middelbare school en denkt dan misschien 'dat ken ik nu allemaal wel'. Dat is jammer, want mensen realiseren zich vaak niet – inclusief scheikundigen zelf – wat eigenlijk allemaal scheikunde is. Bij veel maatschappelijke problemen kan scheikunde een onderdeel zijn van de oplossing. Weinig mensen hebben dat op het netvlies, waardoor ze onderschatten hoe leuk en uitdagend scheikunde is.' ■