

“Water wil graag water zijn”

Water heeft, zoals bekend, een grote reeks eigenschappen die je niet zou verwachten bij een stof met een zo eenvoudige molecuulstructuur. De verklaring daarvoor vinden is een zoektocht met vele deelnemers over de gehele wereld, zowel afkomstig uit de reguliere wetenschap als het alternatieve circuit. In H₂O nummer 23 van 2008 vertelde de Nijmeegse hoogleraar Theoretische Chemie Ad van der Avoird over zijn baanbrekend onderzoek naar de bindingskrachten in en tussen watermoleculen. In dit nummer het verslag van een gesprek met professor Mischa Bonn, groepsleider Bio-oppervlakte Spectroscopie bij het AMOLF te Amsterdam en buitengewoon hoogleraar Experimentele Fysica aan de Universiteit van Amsterdam. Het gesprek had plaats in zijn werkkamer in het splinternieuwe AMOLF-gebouw op het Science Park in Amsterdam, dat 18 maart is geopend, met groen als overheersende kleur.

Waar staat AMOLF voor?

“Het AMOLF is het instituut voor Atoom- en Molecuulfysica, één van de instituten van de stichting FOM (Fundamenteel Onderzoek der Materie). Het wordt gefinancierd uit de gelden die het ministerie van Onderwijs, Cultuur en Wetenschap via het NWO beschikbaar stelt voor wetenschappelijk onderzoek. We verrichten zowel fundamenteel als funderend onderzoek. Fundamenteel wil zeggen dat je de principes van het leven op aarde en de samenhang daarvan met de materie en de kosmos probeert te achterhalen en doorgronden. Funderend houdt in dat zulk onderzoek mogelijk ook technologisch nut kan hebben, dat je concepten ontwikkelt die anderen mogelijk verder kunnen toepassen. In het AMOLF hebben we drie afdelingen: nanofotonica, moleculaire nanofysica en biofysica.”

“Nanofotonica houdt zich bezig met lichtstralen, zoals laserstralen, en probeert die als het ware slimme trucjes te leren. Dingen te laten doen die stralen normaliter niet doen, bijvoorbeeld een hoek omgaan zonder spiegel. Bij moleculaire nanofysica, mijn afdeling, proberen we lichtstralen te gebruiken om natuurlijke processen beter te leren kennen en begrijpen. Daarbij gaat het er ook om de rol van water beter te doorgronden. De derde afdeling, biofysica, houdt zich bezig met de krachten die werkzaam zijn in cellen. Bijvoorbeeld bij het proces van de celdeling, waarvan de meesten zich de beelden wel herinneren uit hun biologielessen. Hoe wordt zo'n deling gegenereerd, welke krachten zijn daar werkzaam, hoe sterk of hoe groot zijn die, etc.?”

Ik las dat u watermoleculen in de grenslaag bestudeert.

“Op een wetenschappelijk watersymposium van de Rijksuniversiteit Groningen eind vorig jaar heb ik daarover een voordracht gehouden. Ik zal proberen u de kern van dat verhaal duidelijk te maken. Ik had in een vroeger stadium spectroscopisch

onderzoek gedaan naar katalyseprocessen op metaaloppervlakken. Dat leidde tot de vraag om ook eens met mijn kennis van oppervlakt-specifieke spectrometrie naar biomembranen te kijken. Onze huid is zo'n biomembraan, maar ook alle cellen in lichamen van levende wezens zijn omgeven door membranen. Aan weerszijde van zulke membranen bevindt zich vloeistof, waarvan water een belangrijk deel uitmaakt. Zo'n biologisch membraan bestaat uit eiwitten met daartussen lipiden. Deze lipiden zijn amfifyl, dat wil zeggen dat ze bestaan uit een groot apolair deel dat water afstoot met een polaire kop. Die polaire kop, die dus een lading heeft, trekt watermoleculen met hun ladingsverdeling aan. Er heeft dus een wisselwerking tussen eiwitten, lipiden en water plaats. Om daarop meer zicht te krijgen, ben ik eerst gaan kijken naar de oppervlaktelaag van water op het water-luchtgrensvlak. En dan met name naar de allerbuitenste laag watermoleculen in dat grensvlak. Dus de laag die maar één molecuul dik is.”

Hoe bekijkt je zo'n extreem dunne laag?

“Dat doen we met de zogenaamde vibratiespectroscopie. U kent het fenomeen van de waterstofbruggen, de kracht die de watermoleculen aan elkaar bindt. In het watermolecuul zitten de beide H-atomen niet symmetrisch aan weerszijden van het O-atoom, maar onder een hoek. Verder ontstaat een ladingverdeling waarbij het O-atoom negatief en de beide H-atomen positief geladen zijn. Het O-atoom trekt een H-atoom van een ander watermolecuul aan, de beide H-atomen de O-moleculen van twee andere watermoleculen, etc. Dit resulteert in bindingen die we waterstofbruggen noemen en die overal in het water tussen alle moleculen aanwezig zijn behalve in de buitenste laag.”

“Door de configuratie van het H₂O-molecuul steken daar H-atomen uit het water in de lucht. Zo'n waterstofbrug maakt de verbindingen tussen zuurstof en waterstof in het watermolecuul een beetje zwakker. De

verbinding lijkt op een veer: ze trilt. Als de verbinding sterk is, dus niet verzwakt door waterstofbruggen, is de trillingsfrequentie hoog. Sterke waterstofbruggen resulteren in lage trillingsfrequenties binnen het waterstofmolecuul. Op die manier kunnen de trillingen van het watermolecuul ons informatie geven over de eigenschappen en de lokale omgeving van het water. Met infrarood licht kun je vibraties van water in kaart brengen. Als je nu na een eerste infrarood-lichtimpuls een tweede geeft met gewoon zichtbaar licht, zie je de som van beide impulsen. Dat proces kan niet plaatsvinden in de vloeistof, alleen in de allerbovenste laag. Die monomoleculaire laag geeft een ander vibratiespectrum, dat je apart kunt meten.”

Wat blijkt uit zo'n meting?

“Het spectrum van de grenslaag water-lucht vertoont drie pieken, drie trillingsfrequenties dus. De derde piek, de hoogste frequentie, komt overeen met het gedrag van een watermolecuul in de lucht, de gasfase van water. Die heeft geen waterstofbrug en dus een hoge frequentie. Dat is dus een O-H-groep die uit het water steekt, de lucht in. De andere twee pieken liggen in het gebied van de waterstofbruggen. De eerste piek is vele jaren lang gerelateerd aan water in de ijsfase, de fase waarin de H₂O-moleculen in zes ringen vast gegroepeerd zijn, de reden waarom ijs een vaste stof is. De tweede piek werd aan de vloeistoffase van water gerelateerd. Zeventien jaar lang was dit een algemeen aanvaarde verklaring. De drie pieken zouden dus aangeven dat je aan het oppervlak van water met watermoleculen in de ijs-, de vloeistof- en de gasfase te maken had.”

“Toen ik mij met water ging bezig houden, vond ik die ijspiek niet logisch. Ergens zou dan in de bovenlaag zo'n vaste ringverbinding aanwezig moeten zijn. Ik begreep niet waar dat zou moeten zijn. Wat je met je ogen ziet, is juist het omgekeerde. Als je naar een ijsblokje kijkt, zie je dat het aan de buitenzijde altijd een dun laagje water heeft. Daar heb je te maken met de opeenvolging ijs, water, lucht. Houd je twee ijsblokjes tegen elkaar, dan bevriest het waterlaagje ertussen, omdat je de lucht tussen de blokjes hebt weggedrukt. Er vormt zich dan een waterlaagje om het grotere ijsblokje. Water op ijs is dus thermodynamisch gunstig, ijs op water niet. Ik zette dus mijn vraagtekens bij die zogenaamde ijspiek in het spectrum. Het alternatief zou een buigvibratie kunnen zijn tussen de twee H-atomen in het H₂O-molecuul.”

Hoe kun je meten of zo'n gedachte juist is?

“Water is H₂O, zwaar water is D₂O. Deze 'D' staat voor Deuterium, een H-atoom met twee neutronen in plaats van één, en dus tweemaal zo zwaar. D₂O is een isotoop van H₂O die in de natuur voorkomt. Dat is ook het geval met de tussenvorm HDO. Via concentratieprocessen met centrifuges kun je water maken dat veel van deze HDO-moleculen bevat. Als je nu dezelfde vibratiemetingen doet aan zulk water,



Mischa Bonn (foto: Arjan Bronkhorst).

dan zie dat je de eerste twee pieken uit het spectrum als afzonderlijke pieken verdwijnen. Er blijft slechts één piek over. Als die pieken het gevolg waren van ijs- en vloeistofachtige structuurverschillen, zoals de verklaring was, zou dat niet gebeuren. Dat de twee pieken verworden tot één, als je van H_2O naar HDO gaat, komt doordat de andere vibratie van water, de buigvibratie, verandert. De aanwezigheid van twee pieken heeft dus niets te maken met de waterstructuur."

"Dit fenomeen, de aanwezigheid van twee vibratiepieken, zie je dan ook aan elk wateroppervlak. Bij het grensvlak met lucht, maar ook bij dat met een membraan of met glas. Dat klopt ook, want de oorzaak zit in de waterfase. Overigens zijn die situaties wel verschillend. Bij het grensvlak met lucht heb je te maken met dat ene H-atoom dat in de lucht steekt. Bij glas zit dat anders. Glas is siliciumoxide; SiO_2 . Daar krijg je aan het grensvlak sterke waterstofbruggen tussen de negatieve lading op de O-atomen van het SiO_2 en de positief geladen H-atomen van het H_2O . De bindings situatie is anders, maar in geen van deze gevallen is sprake van ijsachtige structuren van H_2O -moleculen in de grenslaag."

Wat zegt dit nu over de bijzondere eigenschappen van water?

"Water wil graag water zijn, dat is misschien wel het meest bijzondere. Geen gas, maar die uiterst flexibele vloeistof met zijn waterstofbruggen, die bindingen aangaan voor een zeer korte tijdsduur, in de orde van grootte van $\pm 10^{-12}$ seconden en dan weer wisselen. Maar wel zodat voortdurend vrijwel alle bindingsmogelijkheden bezet zijn. Nu is dat ene H-atoom dat in de luchtfase steekt, energetisch heel

ongunstig. Dit wil naar beneden toe, maar daardoor wordt een ander H-atoom omhoog gedrongen. Dat gebeurt ook voortdurend, maar wel in één picoseconde. Dat maakt dat de oppervlaktetenspanning in de bovenlaag hoog is, waardoor een waterdruppel een bolachtige vorm aanneemt en waterinsecten als schaatsenrijders op het water kunnen lopen."

Waarom bent u hiermee bezig?

"Vanuit de wens en de behoefte om de rol van het water aan een biologisch oppervlak, een celmembraan bijvoorbeeld, beter te begrijpen. Wat is de rol van het water in en aan een levende cel? In onze werkgroep bestuderen we bijvoorbeeld ook het water rond ionen. Neem een eenvoudige stof als keukenzout: NaCl. Deze splitst zich in Na^+ - en Cl^- -ionen. Rond het Na^+ -ion groeperen zich driedimensionaal gezien vier H_2O -moleculen met het negatief geladen O-atoom naar het Na^+ -ion gericht. Bij het Cl^- -ion gebeurt het omgekeerde. Daar ontstaat een schil van watermoleculen, die zich met één van hun H-atomen naar het Cl^- -ion richten. Dat noemen we een solvatieschil. De lengte waarover zo'n aparte groepering zich uitstrekt, hangt af van de lading van het ion."

"Dit soort fundamentele kennis is nodig om zicht te krijgen op de rol van het water in de levende natuur. Want we weten dat water een essentiële voorwaarde is, wil leven zich manifesteren. Eiwitten zijn moleculen met aparte ladingsverdelingen. Hoe reageert het water hierop? Hoe werken membranen eigenlijk? Als je met dat soort fundamentele vragen aan de slag wilt, is kennis van de rol

van het water daarbij onmisbaar. Een stapje in de vorming van begrip."

Hoe kan een onjuist beeld zolang bestaan?

"In de literatuur verschijnen veel tegenstrijdige berichten. Dat komt omdat men met verschillende technieken werkt. Het lijkt dan alsof men aan hetzelfde verschijnsel metingen heeft verricht, maar dat hoeft niet het geval te zijn. Terwijl de metingen op zich wel consistent zijn. Ik neem nog even de bevindingen rond Na^+ - en Cl^- -ionen als voorbeeld. In zo'n hydratatiebinding zijn de vrijheidsgraden van de atomen verschillend. De twee H-atomen van een watermolecuul waarvan de O gebonden is aan de Na^+ , kunnen roteren rond de as van deze O- Na -binding. De H-atomen van een watermolecuul dat gebonden is via een OH- Cl^- -binding, kunnen dat niet maar hebben weer andere vrijheidsgraden. Dat inzicht heb je nodig om tot een goede interpretatie van spectrografische metingen te komen en fenomenen te verklaren."

Hoe ziet uw levensloop eruit?

"Ik ben in 1971 in Nijmegen geboren. Van 1988 tot 1993 studeerde ik aan de Univer-

“Wat is de rol van het water in en aan een levende cel?”

siteit van Amsterdam fysische chemie. Van 1993 tot 1996 heb ik promotieonderzoek gedaan op het AMOLF aan katalysatoren, in het bijzonder aan zeolieten. Na mijn promotie werkte ik twee jaar aan het Max Planck Instituut in Berlijn als postdoctoraal onderzoeker. Daar hield ik mij bezig met onderzoek aan metaaloppervlakken. Na verblijf van een jaar aan de Columbia University in New York heb ik in 1999 aan de Universiteit Leiden een aanstelling gekregen aan de faculteit Scheikunde. Daar deed ik onderzoek naar chemische processen aan oppervlakken. In 2004 ben ik bij het AMOLF als groepsleider benoemd. In 2005 werd ik buitengewoon hoogleraar Experimentele Fysica aan de Universiteit van Amsterdam. Ook daar richten we ons op ultrasnelle processen aan oppervlakken."

Sommige eigenschappen van water worden vanuit een geheugenfunctie verklaard.

"Met die gedachte kan ik niets. De bindingsprocessen verlopen zo snel, de waterstofbruggen wisselen zo frequent, er is sprake van zulke lokale structuren, dat ik mij niets bij een opslag of een vasthouden van informatie kan voorstellen. Laat ik het zo zeggen: vanuit mijn wetenschappelijke kennis heb ik daar geen enkele indicatie voor."

Maarten Gast