

# Wasser, die unbekannte Substanz

## Physikalisch-chemische Struktur und Eigenschaften

### 1. Einleitung

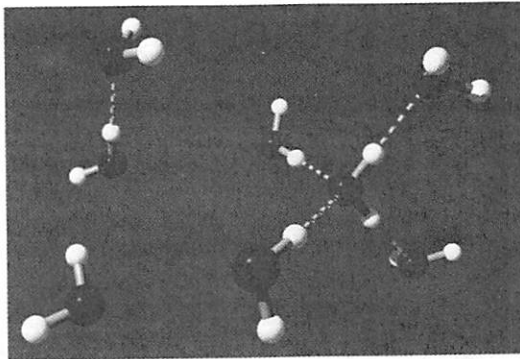
Wasser ist ubiquitär auf unserem Planeten und die einzige Substanz, die uns in der Natur in allen drei physikalischen Aggregatzuständen – fest, flüssig und gasförmig – begegnet. Wasser ist das Reaktionsmedium aller biochemischen und physiologischen Vorgänge. Darüberhinaus synthetisiert jeder Mensch bei der Umsetzung seiner Nahrung täglich etwa 300 Gramm davon. In den letzten Jahrzehnten wurden die physikalischen, chemischen und biologischen Aspekte dieser Substanz in einer großen Zahl von Monographien und Übersichtsartikeln diskutiert. Eine Auswahl sei hier genannt<sup>1-5</sup>.

### 2. Anomalien des Wassers

Wasser ist wahrscheinlich die einzige Substanz, deren chemische Formel –  $H_2O$  – jedermann geläufig ist. Dieses einfache, dreiatomige Molekül ist der Baustein einer Flüssigkeit, die ein sehr komplexes, sich von allen anderen unterscheidendes Verhalten zeigt. Einige dieser sogenannten Anomalien des Wassers sind uns aus dem Alltag wohlbekannt, ohne daß sie als solche wahrgenommen werden. Wasser dehnt sich beim Erstarren aus, so daß Eis wegen seiner geringeren Dichte auf der Oberfläche schwimmt. Bei jeder anderen Flüssigkeit sinkt hingegen der erstarrte Festkörper auf den Grund. Eine gewöhnliche Flüssigkeit kontrahiert beim Abkühlen, bis sie unmittelbar am Gefrierpunkt ihre höchste Dichte erreicht hat. Wasser hingegen beginnt vier Grad oberhalb des Gefrierpunktes sich wieder auszudehnen, einen Teil der Ausdehnung beim Übergang zum Eis antizipierend. Diese beiden Anomalien sind von großer Wichtigkeit für das Überwintern des Lebens in Gewässern: aufgrund der Dichteverhältnisse gefrieren diese von der Oberfläche aus ein und es bleibt ein Refugium in der Tiefe.

Eine weitere Anomalie zeigt sich bei Druckexperimenten. Üblicherweise geht eine Flüssigkeit unter hohem Druck in die feste, kristalline Form über, bei weiterer Druckerhöhung verfestigt sich der Kristall. Dahingegen wird bei Druckerhöhung das Wasser fluider und Eis schmilzt. Diese Anomalie nutzen wir im Winter zu unserem Vergnügen: das Eis schmilzt unter dem Druck der Schrittschuhkufen und wir gleiten auf dem entstandenen Flüssigkeitsfilm. Schließlich gibt es eine Anomalie, die das Wasser als Lösungsmittel betrifft. Üblicherweise mischen sich Substanzen bei höheren Temperaturen besser (zum Beispiel nimmt die Löslichkeit von Zucker in Wasser mit steigender Tem-

1  
Aus quantenmechanischen Rechnungen erhaltene Strukturen eines einzelnen Wassermoleküls, eines über eine Wasserstoffbrücke verbundenen Dimers und eines tetraedrisch von Nachbarmolekülen umgebenen Zentralmoleküls.



peratur zu). Die Löslichkeit sogenannter unpolarer Moleküle (das sind Moleküle ohne oder mit einem sehr geringen elektrischen Feld) nimmt in Wasser hingegen mit *abnehmender* Temperatur zu. Ein einfaches Beispiel für ein solches Molekül ist das fast kugelförmige Erdgasmolekül Methan ( $\text{CH}_4$ ).

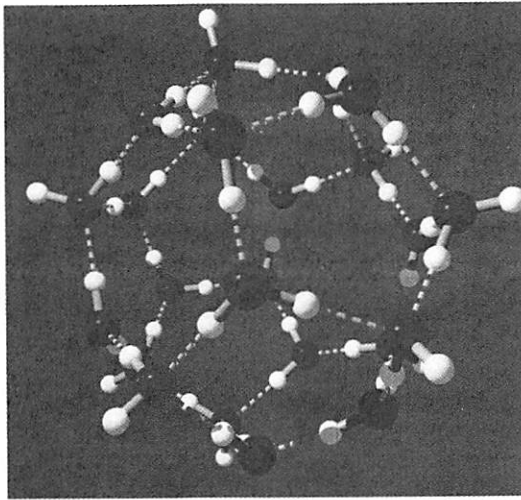
### 3. Molekulare Struktur des Wassers

Diese und weitere Anomalien können aus der Kenntnis der Struktur des Wassers verstanden werden. Seit den Anfängen der modernen Naturwissenschaften wurde hierüber spekuliert. Der Astronom Kepler schloß aus der Beobachtung der Gestalt von Schneeflocken und von pflanzlichen Formen (Blüten, Samenstände), daß im Eis, aber auch im flüssigen Wasser Strukturen existieren sollten, die man als regelmäßige Fünf- und Sechsringe beschreiben könne<sup>6</sup>. Der Physiker Wilhelm Konrad Röntgen, bekannt durch die Entdeckung der nach ihm benannten Strahlung, veröffentlichte 1892 zur Erklärung der Anomalien des Wassers die Hypothese, daß Wasser eine Lösung von eisähnlich strukturierten Bereichen in einer sich ansonsten normal verhaltenden Flüssigkeit sei<sup>7</sup>. Heute sind die verschiedenen Eiskristallstrukturen wohlbekannt und auch zur Struktur des flüssigen Wassers gibt es eine große Zahl von Untersuchungen. Die wichtigsten Methoden zur Bestimmung der Struktur einer Flüssigkeit sind heute Röntgen- und Neutronenbeugungsexperimente<sup>8</sup>, spektroskopische Messungen<sup>9</sup> und Computersimulationsrechnungen<sup>10</sup>.

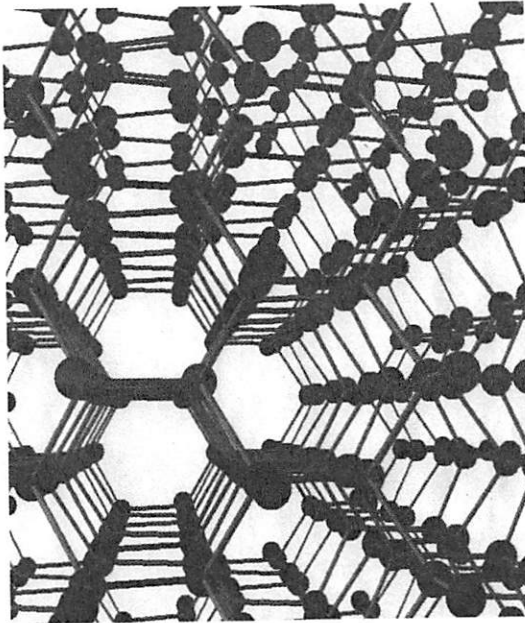
Um den molekularen Aufbau des Wassers zu verstehen, beginnt man am besten bei der Struktur und den Eigenschaften eines einzelnen  $\text{H}_2\text{O}$ -Moleküls. Das Wassermolekül ist ein sogenanntes polares Molekül, das heißt, es besitzt ein ausgeprägtes elektrisches Feld, das dadurch zustande kommt, daß es zwei unterschiedlich geladene Enden besitzt: Das Sauerstoffatom trägt eine negative, die Wasserstoffatome eine positive Partialladung. Ein zweites Molekül wird sich nun nach diesem Feld ausrichten. Ähnlich wie sich zwei Magnete so drehen, daß sich entgegengesetzte Pole gegenüberstehen, zeigt bei einem Wasser-Paar ein Molekül mit seinem positiv geladenen Wasserstoffatom auf die negative Ladung des Sauerstoffs (Abb. 1).

Diese Struktur nennt man aus naheliegenden Gründen eine Wasserstoffbrücken-Bindung. Sie ist sehr viel schwächer als eine normale chemische Bindung innerhalb eines Moleküls (etwa zwischen H und O) und kann daher leicht durch Wärmebewegung deformiert und aufgebrochen werden, etwa wenn Eis schmilzt. Wenn wir weitere Wassermoleküle hinzufügen, entsteht bevorzugt eine tetraedrische Anordnung der Nachbarn. Dabei fungieren zwei der Nachbarn des zentralen Moleküls als Wasserstoff-Akzeptoren, zwei als Donatoren. Dies ist das in allen Einkristallstrukturen und auch in flüssigem Wasser vorherrschende Strukturmotiv (Abb. 1).

Bei weiterem Hinzufügen von Molekülen werden auch Ringe ausgebildet, schließlich aus Fünf- und Sechsringen aufgebaute Polyeder, wie der in



2  
*Aus quantenmechanischen Rechnungen (vgl. Anm. 11) erhaltener Tetrakaidekaeder aus wasserstoffbrückenverbundenen Wassermolekülen.*



3  
 Kristallstruktur des hexagonalen Eis I. Es sind nur die Sauerstoffatome (Kugeln) und die Wasserstoffbrücken (Linien) gezeigt. Die Wasserstoffe der einzelnen Moleküle liegen auf diesen Verbindungslinien.

ergibt sich eine offene Netzwerkstruktur. Die anderen Kristallstrukturen unterscheiden sich durch eine andere Anordnung der Sechserringe oder durch die Ausbildung von Fünferingen. Allen gemeinsam ist die tetraedrische Nahordnung, die jedes Wassermolekül über Wasserstoffbrücken mit vier Nachbarn verbindet, sowie die Existenz eines quasi unendlich ausgedehnten Bindungsnetzwerks.

Schließlich sei noch eine verwandte Klasse von Kristallstrukturen genannt, die sogenannten Gashydrate oder Clathrat-Hydrate<sup>13</sup>. Diese sind aus regelmäßigen Polyedern der in Abb. 2 gezeigten Art aufgebaut. Allerdings sind diese großen Hohlräume nur stabil, wenn kleine Gastmoleküle, wie etwa das erwähnte Methan, eingebaut werden. Diese Substanzklasse sei hier erwähnt, weil sie seit einigen Jahren ein besonderes Interesse hervorruft, nämlich als potentielle Energiequelle nicht abzusehenden Ausmaßes: Clathrate werden auf dem Grund praktisch aller Meere gefunden und ein Kubikmeter enthält etwa 170 Kubikmeter Methan (Erdgas) bei Normaldruck. Andererseits ist Methan ein Treibhausgas und durch das Auftauen clathralthaltiger Permafrostböden und das damit verbundene Freisetzen des Gases muß ein sich selbst verstärkender Treibhauseffekt befürchtet werden. Auch diesen Strukturen ist eine tetraedrische Nahordnung und ein ausgedehntes Netzwerk von Wasserstoffbrücken-Bindungen gemeinsam.

Schließlich zur Struktur des flüssigen Wassers: Abb. 4 zeigt eine durch eine Computersimulation erzeugte »Momentaufnahme«, wie sie aufgrund der raschen thermischen Bewegung der Moleküle nicht direkt experimentell zugänglich ist. Wie alle Flüssigkeiten, so unterscheidet sich auch diese vom kristallinen Festkörper dadurch, daß die Fernordnung verschwunden ist, eine gewisse Nahordnung aber weiterhin vorhanden ist. Lokal beobachtet man immer noch eine überwiegend, wenn auch verzerrte, tetraedrische Anordnung der Nachbarn. Einzelne Wassermoleküle besitzen aber nicht wie im Eiskristall vier Wasserstoffbrücken zu den Nachbarn, sondern zwei, drei oder fünf. Man findet weiterhin bevorzugt Sechser-

Abb. 2 abgebildete Tetraikadekaeder<sup>11</sup>. Die Berechnung solcher Strukturen kann heute sehr genau über quantenmechanische Ab-initio-Methoden vorgenommen werden, für deren Entwicklung vor kurzem der Chemie-Nobelpreis an John Pople und Walter Kohn verliehen wurde<sup>12</sup>.

Aus den aufgeführten Strukturelementen lassen sich nun die bekannten Eis-Kristallstrukturen aufbauen. Es ist ein besonderes Merkmal der Substanz Wasser, daß diese eine große Zahl unterschiedlicher Kristallformen ausbilden kann (Polymorphismus), je nach Druck- und Temperaturverhältnissen. Abb. 3 zeigt die Struktur des hexagonalen Eis I, die Kristallstruktur, die sich beim Gefrieren unter Normaldruck ausbildet. Man erkennt die tetraedrische Nahordnung, das Vorherrschen von Sechseringen und die quasi unendlich-periodische Fortsetzung der lokalen Strukturmotive, die für Kristalle typisch ist. Insgesamt

ringe, obwohl auch Fünfer-, Siebener- und größere Ringe existieren. Allgemein kann man sagen, daß man in der Flüssigkeit alle Strukturelemente, die aus Kristallstrukturen bekannt sind, wiederfinden kann, wenn auch in verzerrter Form und aufgrund der Wärmebewegung von nur kurzer Lebensdauer. Selbst die komplexen Käfigstrukturen der Clathrate können in Simulationsrechnungen als kurzlebige, verzerrte Hohlräume oder in Form bevorzugter Anordnungen der Wassermoleküle in den Hydrathüllen gelöster Teilchen wiedergefunden werden<sup>14</sup>. Experimentell können solche Details wegen der schnellen Molekülbewegungen und wegen der Vielfalt der lokalen Strukturen nicht beobachtet, sondern nur »mittlere Lokalstrukturen« detektiert werden. Man könnte auch sagen: Eine Kristallstruktur kann wegen der unendlichen Periodizität mit wenigen Worten beschrieben werden, für eine Flüssigkeit bräuchte man unendlich viele Worte, weil sie an jedem Ort und zu jedem Zeitpunkt etwas anders aussieht.

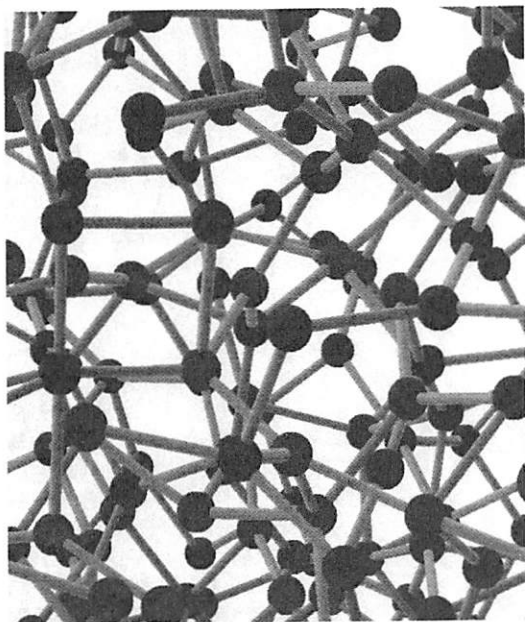
Schließlich ist von Wichtigkeit, daß das makroskopisch ausgedehnte Netzwerk von Wasserstoffbrücken, wie in Abb. 3 für das Eis dargestellt, auch in der Flüssigkeit anzutreffen ist (Abb. 4). Die meisten Wasserstoffbrücken »überleben« den Schmelzprozess, wenn auch in verzerrter Form. Aufgrund der stetigen Wärmebewegung der Moleküle sind diese Bindungen in der Flüssigkeit aber nur sehr kurzlebig. Mit einer mittleren Lebensdauer in der Größenordnung von etwa einer Piko-sekunde ( $10^{-12}$  s) werden die Wasserstoffbrücken fortwährend gebildet und wieder gebrochen. Flüssiges Wasser stellt sich also als ein raumerfüllendes dreidimensionales statistisches Netzwerk von kurzlebigen Wasserstoffbrücken dar, das einer stetigen schnellen Restrukturierung unterworfen ist<sup>15</sup>.

Hier stellt sich folgendes Problem: Von einer Flüssigkeit, deren Moleküle so stark untereinander vernetzt sind wie oben besprochen, würde man eigentlich erwarten, daß sie hochviskos und weit weniger fluid ist als Wasser. Eine Erklärung für diesen scheinbaren Widerspruch wurde vor kurzem gefunden<sup>16</sup>: Nach dem Kollaps des per-

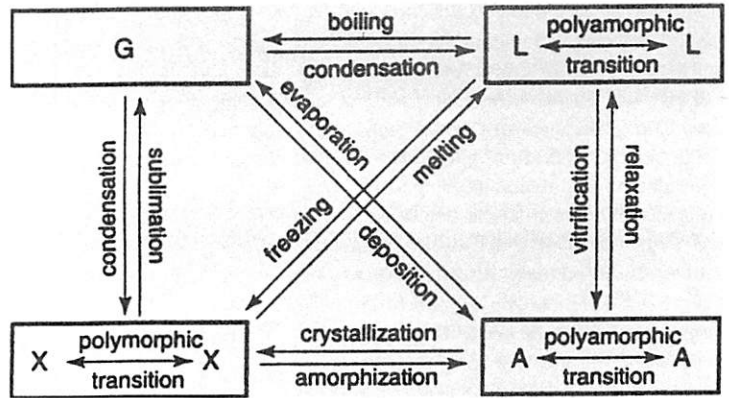
fekt tetraedrisch organisierten und voluminösen Netzwerks des Eises zur dichter gepackten Flüssigkeitsstruktur findet man häufig auch Wassermoleküle mit fünf Nachbarn oder fünf Wasserstoffbrücken. Solche Anordnungen stellen einen »Unruheherd« im ausgedehnten Wasserstoffbrücken-Netzwerk dar und führen dadurch zu der beobachteten ständigen Restrukturierung und damit zu einer erhöhten Mobilität der Wassermoleküle. Man sagt auch, der fünfte Nachbar wirkt als Katalysator, der die hohe Beweglichkeit und damit die Fluidität des Wassers bewirkt.

Aus dem bisher gesagten können die zu Anfang aufgezählten Anomalien zwanglos erklärt werden: Beim Schmelzen geht die voluminöse Eisstruktur durch Verzerrung der perfekt tetraedrischen Nahordnung in die dichter gepackte Flüssigkeitsstruktur über. Entsprechend wird bei Druckanwendung die offene Eisstruktur zusammenbre-

4  
Wasserstoffbrücken-Bindungs-Struktur des flüssigen Wassers. Darstellung wie in Abb. 3. Die Fernordnung des Kristalls ist verschwunden, die Nahordnung bleibt verzerrt erhalten.



5  
 Illustration der Zwei-  
 flüssigkeits-Hypothese  
 des unterkühlten  
 Wassers. Übergänge  
 zwischen gasförmiger  
 (G), flüssigen (L),  
 kristallinen (X) und  
 amorph-glasartigen  
 Phasen (A) des Was-  
 sers. (Vgl. Anm. 5)



chen und in die dichtere Flüssigkeitsstruktur übergehen. Bei weiterer Druckerhöhung, wenn die Dichte weiter zunimmt, werden mehr Moleküle mit fünf Nachbarn vorliegen und damit die Fluidität zunehmen. Schließlich wird die Zunahme des Volumens beziehungsweise der Löslichkeit unpolare Teilchen in kaltem Wasser durch die zunehmende Zahl von offenen, eis- oder clathratähnlichen Strukturen bei Annäherung an den Gefrierpunkt bewirkt.

#### 4. Unterkühltes Wasser und amorphes Eis

In den letzten zwei Dekaden wurden neue überraschende Eigenschaften des Wassers gefunden, zu deren Erklärung unterschiedliche physikalische Modelle und Hypothesen aufgestellt wurden. Um einen Eindruck von diesen Entwicklungen und dem daraus entstehenden erweiterten Bild zu geben, sei das momentan wohl überzeugendste der vorgeschlagenen Szenarien erläutert. Hierzu wird ein in Abb. 5 reproduziertes Diagramm von Mishima und Stanley<sup>17</sup> benutzt. Wir hatten gesehen, daß Wasser als Gas (G), Flüssigkeit (L) und in unterschiedlichen kristallinen Formen (X) existieren kann. In jüngster Zeit ist es nun gelungen zwei neue feste Formen (A) des Wassers herzustellen. Dabei handelt es sich um metastabile, nicht-kristalline, glasartig-amorphe Zustände, die strukturell der Flüssigkeit ähnlich sind. Diese beiden amorphen Eisformen unterscheiden sich durch ihre Dichte und ähneln strukturell flüssigem Wasser bei Normaldruck und unter sehr hohem Druck von einigen Tausend Atmosphären. In Analogie zum bekannten Polymorphismus der Kristallstrukturen wird dieses Phänomen Polyamorphismus genannt.

Es erhebt sich natürlich sofort die Frage, ob es einen kontinuierlichen Übergang zwischen den strukturell vergleichbaren ungeordneten Zuständen A und L gibt. Leider existiert amorphes Eis nur unterhalb  $-120^{\circ}\text{C}$ , bei Erwärmung findet sofortige Kristallisation statt<sup>18</sup>. Andererseits läßt sich flüssiges Wasser nur bis maximal  $-38^{\circ}\text{C}$  unterkühlen. Auch dann tritt unvermeidlich Kristallisation ein. Es bleibt also eine Lücke von etwa  $80^{\circ}\text{C}$ , innerhalb derer eine nicht-kristalline Form des Wassers nicht lange genug existieren kann, um daran heute experimentelle Untersuchungen durchzuführen. Das Verhalten des unterkühlten Wassers bei Annäherung an die Unterkühlungsgrenze bei  $-38^{\circ}\text{C}$  (zunehmende Dichte- und Strukturfluktuationen) und Ergebnisse aus Computersimulationen lassen allerdings vermuten, daß in dem bisher experimentell nicht zugänglichen Temperaturbereich analog zum Polyamor-



phismus der festen Phase eine Phasentrennung in zwei verschiedene Formen des flüssigen Wassers mit unterschiedlichen Dichten und Strukturen stattfinden könnte. Abb. 6 zeigt eine durch eine Computersimulation erhaltene Struktur von unterkühltem Wasser, die als Vorstadium eines Entmischungsprozesses gedeutet werden kann. Die hellen Bereiche entsprechen dabei dem geordneten, weniger dichten Zustand<sup>19</sup>.

Es sei hier aber nochmals betont, daß das geschilderte Zweiflüssigkeits-Szenario in unterkühltem Wasser wegen der erwähnten experimentellen Schwierigkeiten keineswegs gesichert ist, sondern eine, wenn auch physikalisch plausible, Hypothese darstellt. Es sind momentan allerdings noch alternative Erklärungsmodelle für das Verhalten des unterkühlten Wassers in der Diskussion<sup>20</sup>.

Die Untersuchung des unterkühlten Wassers und des amorphen Eises dient zunächst der Erweiterung des grundlegenden Verständnisses des flüssigen Zustands als solchem. Insbesondere im Bereich des Übergangs von Flüssigkeit zu festem Glas stellen sich weitere Fragen: Wie kann man etwa die Änderung der Mobilität der Moleküle oder der Viskosität von Schmelzen beim Abkühlen zum Glas quantitativ beschreiben und welche molekularen Mechanismen liegen dem zugrunde? Des weiteren können die diskutierten Beobachtungen und Erklärungsmodelle andere Felder der Forschung beeinflussen, in denen die Struktur und molekulare Dynamik des Wassers eine wichtige Rolle spielen, zum Beispiel was die Funktion des Wassers für die Wirkungsweise von Proteinen betrifft: Es gibt Hinweise, daß sich das Wasser in der unmittelbaren Nachbarschaft von Proteinen wie unterkühltes Wasser verhält, so daß sich die Frage stellt, welche Bedeutung die im unterkühlten Wasser beobachteten starken Strukturfluktuationen hierfür haben. Ein anderes Beispiel sind Untersuchungen zur Veränderung der Eigenschaften des Wassers und seiner Funktion in Poren in biologischen oder technischen Materialien. So ist das Verständnis des unterkühlten Wassers von großer Wichtigkeit für Fortschritte in der Kryobiologie, also bei der Kältekonserverung von biologischem Gewebe. Schließlich sei erwähnt, daß Computersimulationen vorhersagen, daß flüssiges  $\text{SiO}_2$  (sogenannte Silikatschmelzen, die Hauptbestandteil des Magmas im oberen Erdmantel sind) bei den hohen Drücken und Temperaturen, wie sie im Erdinneren herrschen, einen ähnlichen Polymorphismus wie das unterkühlte Wasser zeigen.



6  
Struktur des unterkühlten Wassers. Die Abbildung wurde aus Computersimulationsrechnungen erhalten. Es deuten sich Bereiche unterschiedlichen Ordnungsgrads an (helle Bereiche: besser tetraedrisch geordnetes Wasser) (vgl. Anm. 19).

## 5. Zusammenfassung

Als Resümee kann festgestellt werden, daß es in den letzten Jahren gelungen ist, durch das Zusammenspiel von Theorie, Experiment und Computersimulation ein detailliertes Bild von der molekularen Struktur und auch der hier nur am Rande erwähnten molekularen Dynamik des Wassers zu erhalten. Dieses Bild ist aber noch längst nicht vollständig, noch bestehen zahlreiche Rätsel weiter, es tauchen sogar immer wieder neue auf.

Die Tatsache, daß diese von ihrer chemischen Zusammensetzung her so einfache Substanz ein so reiches Spektrum an unterschiedlichen Phänomenen zeigt, ist

sicherlich eine der Voraussetzungen für das Entstehen und die Entwicklung des Lebens auf unserem Planeten. Man kann vermuten, daß die belebte Natur alle Eigenschaften des Wassers für sich nutzt. So werden auch die noch unverstandenen Eigenschaften des unterkühlten Wassers von biologischer Relevanz sein. Diese Zusammenhänge gilt es noch zu entdecken.

Schließlich sei noch angemerkt, daß sich dieser Beitrag nur mit den Eigenschaften des reinen Wassers beschäftigen konnte. Wasser zeigt als Lösungsmittel, insbesondere in der Biologie, eine weitere Vielzahl von einzigartigen Eigenschaften, deren Erforschung und Verständnis eine der interessantesten Aufgaben der modernen Naturwissenschaften ist.

#### Anmerkungen

1. Eisenberg, D., Kautzmann, W.: *The Structure and Properties of Water*. Oxford 1969.
2. Franks, F. (Hg.): *Water – A Comprehensive Treatise*. 7 Bände. London 1972 – 1980.
3. Franks, F.: *Water*. London 1984.
4. Stillinger, F.H.: »Water Revisited«. In: *Science* 209(1980), S. 453 – 457.
5. Mishima, O., Stanley, F.H.: »The relationship between liquid, supercooled and glassy water«. In: *Nature* 396 (1998), S. 329 – 335.
6. Kepler, J.: *The Sixcornered Snowflake*. 1611. Englisch: Oxford 1966.
7. Röntgen, W.: »Über die Konstitution des flüssigen Wassers«. In: *Ann. d. Phys. u. Chem.* 45(1892), S. 91 – 97.
8. Egelstaff, P.A.: *An Introduction to the Liquid State*. Oxford 1994.
9. Luck, W.A.P.: »Modellbetrachtung von Flüssigkeiten mit Wasserstoffbrücken«. In: *Angew. Chemie* 92(1980), S. 29 – 42.
10. van Gunsteren, W.F., Berendsen, H.J.C.: »Moleküldynamik-Computersimulationen: Methodik, Anwendungen und Perspektiven in der Chemie«. In: *Angew. Chemie* 102(1990), S. 1020 – 1055.
11. Ludwig, R., Weinhold, F.: »Quantum Cluster Equilibrium Theory of Liquids: Freezing of QCE/3 – 216 water for tetrakai-decahedral »Bucky-ice««. In: *J. Chem. Phys.* 110(1999), S. 508 – 515.
12. »Nobelpreise für Chemie und Medizin 1998«. In: *Nachrichten aus Chem., Techn. u. Lab.* 46(1998), S. 1040 – 1041.
13. International Conference on Natural Gas Hydrates. *Annals of the New York Academy of Sciences*. Bd. 715. New York 1994.
14. Geiger, A., Mausbach, P., Schnitker, J.: »Computer Simulation Study of the Hydrogen-Bond Network in Metastable Water«. In: Neilson, G.W., Enderby, J.E. (Hg.): *Water and Aqueous Solutions*. Bristol 1986.
15. Stanley, H.E. u.a.: »Interpretation of the unusual behaviour of H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O at low temperatures: Are concepts of percolation relevant to the »puzzle of liquid water«?. In: *Physica A* 106A(1981), S. 260 – 277.
16. Sciortino, F., Geiger, A., Stanley, H.E.: »Effect of defects on molecular mobility in liquid water«. In: *Nature* 354(1991), S. 218 – 221.
17. Mishima, O., Stanley, F.H.: 1998; vgl. Anm. 5.
18. Es wird vermutet, daß amorphes Eis ein wichtiger Bestandteil von Kometen ist. Das plötzliche Erscheinen (»Ausbruch«) der Kometen wird mit der Kristallisation und der dabei freiwerdenden latenten Wärme erklärt. Siehe hierzu: Smoluchowski, R.: »Amorphous ice and the behavior of cometary nuclei«. In: *Astrophys. J.* 224(1981), S. L31 – L34.
19. Klene, M.: *Zu langreichweitigen Struktur- und Dichtefluktuationen in Wasser*. Diplomarbeit. Dortmund 1998.
20. Debenedetti, P.G.: *Metastable Liquids – Concepts and Principles*. Princeton 1996; vgl. auch Anm. 5.