

Inhalt

1.	Einleitung	7
	<i>Literatur</i>	8
2.	Strukturmodelle	9
2.1.	Beschreibung der Modelle	9
2.2.	Zwei-Strukturen-Modelle	12
2.3.	Vergleich der Kontinuum- und Mischungsmodelle	15
2.4.	Sogenannte statistische Modelle des Wassers	20
2.5.	Computer-Modellierung der Wasserstruktur	23
	<i>Literatur</i>	27
3.	Diffractionsuntersuchung	30
3.1.	Röntgenbeugung	30
3.1.1.	Experimentelle Daten über den Strukturfaktor und die Radialverteilungs- funktion des Wassers	30
3.1.2.	Beschreibung der Radialverteilungsfunktion des Wassers auf der Grundlage des SAMOILOV-Modells	35
3.1.3.	Kriterium für die Unterscheidung der H-Brücken-Vernetzung von Wasser und Eis	38
3.1.4.	Die zufällige tetraedrische Vernetzung als Grundlage der Wasserstruktur	40
3.2.	Neutronenbeugung	46
3.2.1	Experimentelle Daten, Strukturfaktor und Paarkorrelationsfunktionen für Wasser	46
3.2.2.	Korrelierte und unkorrelierte Orientierung	56
3.2.3.	Das „verbesserte Wasser-Modell“ von OHTOMO und ARAKAWA	58
3.2.4.	Resümee	64
3.3.	Elektronenbeugung	64
3.3.1.	Begründung für die Anwendung der Elektronenbeugungsmethode	64
3.3.2.	Experimentelle Probleme	65
3.3.3.	Strukturfaktor und Korrelationsfunktion	66
3.3.4.	Experimentelle Resultate der Elektronenbeugung an flüssigem Wasser und Vergleich mit den Röntgen- und Neutronenbeugungsergebnissen	70
3.3.5.	Vergleich der experimentellen Ergebnisse der Diffractionsanalysen mit den theoretischen Ergebnissen von molekulardynamischen und Monte-Carlo- Untersuchungen	73
	<i>Literatur</i>	74

4.	Struktur und Dynamik des reinen Wassers	77
4.1.	Schwingungsspektren des Wassers	77
4.1.1.	Grundlegende Fakten der Schwingungsspektroskopie des Wassers	77
4.1.2.	Spektroskopischer Nachweis des Fehlens von aufgebrochenen H-Brücken im Wasser	80
4.1.3.	Beziehungen zwischen den Bandenkonturen der HOD-Moleküle in Raman- und IR-Spektren	85
4.1.4.	Temperaturtransformation der Konturen der HOD-Moleküle	87
4.1.5.	Berechnung und Interpretation der Konturen der Moleküle H_2O und D_2O	93
4.1.6.	Resümee	101
4.2.	Die Neutronenstreuungsanalyse zur Untersuchung der Schwingungs- und Diffusionsstruktur des Wassers	102
4.2.1.	Quasielastische Neutronenstreuung (QNS)	102
4.2.2.	Diskussion der Diffusionsmodelle und Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen der quasielastischen Neutronenstreuung an Wasser	106
4.2.3.	Rotationsdiffusion und Berücksichtigung von Orientierungseffekten	110
4.2.4.	Der Beitrag der rotatorischen Diffusion der Wassermoleküle	111
4.2.5.	Inelastische Neutronenstreuung (INS)	116
4.3.	Vergleichende Resultate der Absorption im Fernen Infrarot (FIR)	120
	<i>Literatur</i>	129
5.	Der Einfluß von Elektrolyten und Nichtelektrolyten auf die Struktur des Wassers	133
5.1.	Wäßrige Elektrolytlösungen	133
5.1.1.	Ion-Solvens-Wechselwirkungen	134
5.1.2.	Solvens-Solvens-Wechselwirkungen	145
5.1.3.	Das mikroskopische Bild der Struktur und Dynamik in Elektrolytlösungen	151
5.2.	Lösungen von Nichtelektrolyten	153
5.2.1.	Die Stabilisierung der H-Brückenbindungen des Wassers durch Nichtelektro- lyte	154
5.2.2.	Die mikroskopische Heterogenität in wäßrigen Lösungen von Nichtelektro- lyten	159
5.2.3.	Das allgemeine Bild der Struktur wäßriger Lösungen von Nichtelektrolyten	165
	<i>Literatur</i>	169
6.	Sachregister	173