



Molekulargewicht

1 Molekulargewicht und Grössencharakterisierung	2
1.1 Wieso Gewicht und nicht Grösse?	2
1.2 Was bedeutet die Grösse eines Moleküls?	4
1.3 Praktische Vorteile des Molekulargewichts	4
1.4 Das Konzept des Molecular Weight Cut-Off	5
1.5 Warum die Porengrösse keine bessere Alternative ist	5
1.6 Grenzen der Beschreibung über das Molekulargewicht	5
2 Dalton (Da) und Kilodalton (kDa)	5
2.1 Umrechnung zwischen g/mol und Dalton	6
3 Molecular Weight Cut-Off (MWCO)	6
4 Bestimmung des MWCO	7
5 Hinweise zu typischen Fehlinterpretationen	8
5.1 Dalton und molare Masse	8
5.2 Annahme, Membran trennt bei MWCO im Datenblatt	8
5.3 Vergleich MWCO Angaben verschiedener Hersteller	8
6 Moleküle in Lebensmitteln	9

1 Molekulargewicht und Grössencharakterisierung

Das Molekulargewicht ist eine fundamentale Kenngrösse zur Beschreibung von Atomen, Molekülen und makromolekularen Verbindungen. Es beschreibt die Masse eines einzelnen Moleküls und wird üblicherweise in Dalton (Da) angegeben.

1.1 Wieso Gewicht und nicht Grösse?

In der Ultrafiltration wird der Rückhalt von gelösten Stoffen üblicherweise über das Molekulargewicht angegeben, häufig in Form des sogenannten Molecular Weight Cut-Off (MWCO). Diese Praxis wirkt kontraintuitiv, da der physikalische Mechanismus der Trennung primär auf räumlicher (sterischer) Hinderung des Transportes durch die Membran basiert. Man könnte daher erwarten, dass eine *geometrische* Grösse wie der Moleküldurchmesser oder ein Porendurchmesser der Membran die relevantere Kenngrösse darstellt. Trotzdem hat sich das Molekulargewicht als etablierter Standard durchgesetzt hat.

Zurückgehalten werden in der Ultrafiltration vor allem Makromoleküle wie Proteine, Polysaccharide oder synthetische Polymere. Niedermolekulare gelöste Stoffe sowie das Lösungsmittel, in der Regel Wasser, können die Ultrafiltrationsmembran hingegen weitgehend ungehindert passieren. Der Trennbereich der Ultrafiltration liegt zwischen der Mikrofiltration und der Nanofiltration und ist durch effektive Porenabmessungen im Bereich von etwa 1 bis 100 Nanometern charakterisiert.

Einheit	Symbol	Länge in Meter	Typische Grössenbeispiele
Meter	m	1	Mensch, Versuchsaufbau
Millimeter	mm	10^{-3}	Sandkorn, Membrandicke
Mikrometer	μm	10^{-6}	Bakterien, Zellen
Nanometer	nm	10^{-9}	Proteine, Poren der Ultrafiltration

Tabelle 1. Übersicht über ausgewählte Längenskalen mit typischen Beispielen aus Alltag, Biologie und Membrantechnik

Der dominierende Rückhalte Mechanismus bei der Ultrafiltration ist die räumliche Exklusion. Moleküle, deren effektive Ausdehnung grösser ist als die durchlässigen Poren der Membran, werden zurückgehalten. Weitere Effekte wie elektrostatische Wechselwirkungen, Adsorption oder Konzentrationspolarisation können den Rückhalt beeinflussen, ändern jedoch nichts daran, dass die Grösse des Moleküls die zentrale physikalische Rolle spielt.

Stoffklasse	Beispiel	Molekulargewicht (Da)	Typische effektive Grösse (nm)
Disaccharid	Laktose	342	~ 0.5
Disaccharid	Saccharose	342	~ 0.5
Peptid	kurzes Peptid	1 000–5 000	~ 1–2
Protein	globuläres Protein	10 000–100 000	~ 3–10
Makromolekül	Polymer (z.B. Dextran)	> 100 000	> 10

Tabelle 2. Vergleich von Molekulargewicht und typischer effektiver Grösse verschiedener Molekülklassen in wässriger Lösung

Ein Vergleich zwischen niedermolekularen Zuckern und Peptiden zeigt, dass Molekulargewicht und geometrische Ausdehnung eines Moleküls nicht proportional zueinander skalieren. Während das Molekulargewicht eines Peptids gegenüber einem Disaccharid deutlich zunimmt, wächst die effektive Molekülgrösse nur vergleichsweise schwach.

Ein Disaccharid wie Laktose oder Saccharose besitzt ein Molekulargewicht von etwa 342 Da und eine effektive, hydratisierte Grösse von ungefähr 0.5 nm. Ein kurzes Peptid weist typischerweise ein Molekulargewicht im Bereich von 1 000 bis 3 000 Da auf und ist damit etwa drei- bis neunmal schwerer als ein Disaccharid. Der effektive Durchmesser eines solchen Peptids liegt jedoch meist nur bei etwa 1 bis 1.5 nm.

Damit ist das Peptid zwar ein Vielfaches schwerer, aber geometrisch lediglich etwa zwei- bis maximal dreimal grösser als das Disaccharid.

Dieses Verhalten ist eine direkte Konsequenz der geometrischen Skalierung dreidimensionaler Objekte.

Das Molekulargewicht ist näherungsweise proportional zum Volumen des Moleküls,

$$M \propto V.$$

Für ein dreidimensionales Objekt gilt

$$V \propto d^3,$$

wobei d eine charakteristische lineare Abmessung, etwa ein effektiver Durchmesser, ist. Daraus ergibt sich

$$d \propto M^{1/3}.$$

Eine Verzehnfachung des Molekulargewichts führt somit lediglich zu einer etwa

$$10^{1/3} \approx 2.15$$

fachen Zunahme der linearen Molekülausdehnung. Grosse Unterschiede im Molekulargewicht äussern sich daher nur in relativ kleinen Unterschieden der effektiven Molekülgrösse. Zusätzlich zur geometrischen Skalierung spielt die Molekülform eine entscheidende Rolle. Disaccharide sind kompakte, relativ starre Moleküle mit geringer konformationeller Freiheit. Peptide hingegen bestehen aus flexiblen Ketten mit mehreren Freiheitsgraden, die in wässriger Lösung unterschiedliche Konformationen einnehmen können.

Diese Flexibilität erlaubt es Peptiden, sich im Strömungsfeld oder beim Durchtritt durch enge Poren zu orientieren und ihre effektive Querschnittsfläche zu reduzieren. Dadurch kann ein Peptid trotz höherem Molekulargewicht eine ähnlich geringe oder nur moderat höhere sterische Behinderung verursachen als ein kompakteres Molekül geringerer Molmasse.

Die schwache Skalierung der effektiven Molekülgrösse mit dem Molekulargewicht erklärt, weshalb Moleküle mit deutlich unterschiedlicher Molmasse in der Ultrafiltration ein ähnliches Rückhalteverhalten zeigen können. Insbesondere Peptide können Ultrafiltrationsmembranen teilweise noch passieren, obwohl ihr Molekulargewicht oberhalb des nominalen Molecular Weight Cut-Off liegt.

Der MWCO beschreibt daher keinen scharfen Trennpunkt, sondern einen empirischen Übergangsbereich, in dem Molekülgrösse, Form und Flexibilität gemeinsam über Durchtritt oder Rückhalt entscheiden.

Das Molekulargewicht skaliert mit dem Volumen eines Moleküls, der Rückhalt in der Ultrafiltration jedoch mit einer linearen geometrischen Abmessung. Eine starke Zunahme des Molekulargewichts führt daher nur zu einer unterproportionalen Zunahme der effektiven Molekülgrösse.

1.2 Was bedeutet die Grösse eines Moleküls?

Der Begriff der Molekülgrösse ist weniger eindeutig, als er zunächst erscheint. Moleküle besitzen keine feste geometrische Abmessung wie starre Kugeln. Insbesondere in wässriger Lösung treten mehrere Effekte auf, die eine eindeutige Definition erschweren.

Zum einen sind viele relevante Moleküle nicht kugelförmig, sondern besitzen komplizierte Strukturen. Proteine können globulär oder langgestreckt sein, Polymere liegen häufig als flexible Ketten vor. Zum anderen sind Moleküle in Lösung hydratisiert. Die umgebenden Wassermoleküle bilden eine dynamische Hydrathülle, die zur effektiven Grösse des gelösten Teilchens beiträgt.

Je nach Betrachtungsweise lassen sich verschiedene Grössen definieren, etwa der van-der-Waals-Durchmesser, der hydrodynamische Radius oder der Stokes-Radius. Diese Grössen sind kontextabhängig und hängen vom Messverfahren sowie von den Strömungs- und Lösungsbedingungen ab. Eine einzelne, universell gültige Molekülgrösse existiert daher nicht.

1.3 Praktische Vorteile des Molekulargewichts

Ein entscheidender Grund für die Verwendung des Molekulargewichts liegt in seiner experimentellen Zugänglichkeit. Das Molekulargewicht kann mit etablierten Methoden wie Gelpermeationschromatographie, Massenspektrometrie oder anhand gut charakterisierter Referenzsubstanzen bestimmt werden. Für zahlreiche Proteine und Polymere sind zuverlässige Molmassen bekannt.

Membranhersteller können ihre Ultrafiltrationsmembranen mit standardisierten Testmolekülen charakterisieren und reproduzierbare Angaben machen. Die Angabe einer Porengrösse wäre demgegenüber problematisch, da reale Membranen keine einheitlichen Poren besitzen, sondern eine Verteilung von effektiven Durchmessern. Zusätzlich verändern sich diese Poren unter Betriebsbedingungen durch Druck, Quellung oder Fouling.

1.4 Das Konzept des Molecular Weight Cut-Off

Der MWCO ist definiert als jenes Molekulargewicht, bei dem eine Membran unter definierten Bedingungen etwa 90 Prozent Rückhalt zeigt. Es handelt sich dabei nicht um eine scharfe Trennlinie, sondern um einen statistischen Kennwert. Moleküle mit geringerem Molekulargewicht können teilweise zurückgehalten werden, während grössere Moleküle unter Umständen noch teilweise permeieren.

Der MWCO ist daher als praxisorientierte Orientierungsgrösse zu verstehen, nicht als exakte physikalische Grenze. Unterschiede in Molekülform, Ladung und Flexibilität können dazu führen, dass zwei Stoffe mit gleichem Molekulargewicht ein sehr unterschiedliches Rückhalteverhalten zeigen.

1.5 Warum die Porengrösse keine bessere Alternative ist

Die direkte Angabe einer Porengrösse scheint auf den ersten Blick physikalisch korrekter. In der Praxis erweist sie sich jedoch als noch schwieriger zu definieren als das Molekulargewicht. Ultrafiltrationsmembranen besitzen keine klar abgegrenzten, zylindrischen Poren, sondern ein komplexes, oft tortuoses Netzwerk von Durchtrittspfaden.

Messmethoden zur Bestimmung von Porengrössen liefern unterschiedliche Ergebnisse abhängig vom verwendeten Modell und Medium. Zudem verändern sich die effektiven Porengrössen im Betrieb durch Adsorption, Kompression oder chemische Wechselwirkungen. Eine einzelne Porengrösse wäre daher ebenso irreführend wie eine einzelne Molekülgrösse.

1.6 Grenzen der Beschreibung über das Molekulargewicht

Trotz seiner praktischen Vorteile ist das Molekulargewicht kein universell gültiger Parameter. Besonders problematisch wird die MWCO-Beschreibung bei stark asymmetrischen Molekülen, hochflexiblen Polymeren oder geladenen Makromolekülen, bei denen elektrostatische Effekte den Rückhalt dominieren können.

Auch bei Stoffgemischen kann die alleinige Betrachtung des Molekulargewichts zu Fehlinterpretationen führen. In solchen Fällen sind experimentelle Rückhaltecurves oder ergänzende Charakterisierungsmethoden notwendig.

2 Dalton (Da) und Kilodalton (kDa)

Das Dalton (Symbol Da) ist eine Einheit für die Masse von Atomen und Molekülen. Ein Dalton ist definitionsgemäss gleich der einheitlichen atomaren Masseneinheit u. Formal gilt, dass $1 \text{ Da} = 1 \text{ u}$ ist und beide Einheiten einem Zwölftel der Masse eines ^{12}C -Atoms entsprechen. Numerisch beträgt die Masse von $1 \text{ Da} = 1.660\,539\,066\,60 \times 10^{-27} \text{ kg}$. Damit beschreibt Da die Masse eines einzelnen Teilchens und eignet sich besonders für die Angabe sehr kleiner Massen im molekularen Bereich.

Das Kilodalton (Symbol kDa) ist ein Vielfaches des Dalton. Es gilt exakt, dass $1 \text{ kDa} = 1\,000 \text{ Da}$ entspricht. Die Einheit kDa wird verwendet, um die Masse grösserer Moleküle, insbesondere von Proteinen und Polymeren, kompakter darzustellen. Ein Protein mit einem Molekulargewicht von 14.2 kDa besitzt beispielsweise eine Teilchenmasse von $14\,200 \text{ Da}$.

In der Praxis wird das Molekulargewicht häufig auch als molare Masse in g mol^{-1} angegeben. Für numerische Werte besteht dabei die direkte Entsprechung, dass 1 Da einem Molekulargewicht von 1 g mol^{-1} entspricht. Daraus folgt, dass 10 kDa einem Molekulargewicht von $10'000 \text{ g mol}^{-1}$ entsprechen. Diese Beziehung ist insbesondere im Kontext der Membrantechnik hilfreich, da Prozessdaten oft in g mol^{-1} angegeben werden, während Membranspezifikationen üblicherweise auf kDa basieren.

2.1 Umrechnung zwischen g/mol und Dalton

Zwischen der molaren Masse in g mol^{-1} und der Teilchenmasse in Dalton besteht eine direkte numerische Entsprechung. Ein Molekulargewicht von 1 g mol^{-1} entspricht einer Teilchenmasse von 1 Da. Daraus folgt, dass ein Molekül mit einer molaren Masse von $M \text{ g mol}^{-1}$ eine Teilchenmasse von $M \text{ Da}$ besitzt. Diese Beziehung gilt definitionsgemäss, da das Dalton der einheitlichen atomaren Masseneinheit entspricht.

$$1 \text{ Da} \hat{=} 1 \text{ g mol}^{-1} \quad (1)$$

3 Molecular Weight Cut-Off (MWCO)

Der *Molecular Weight Cut-Off* (MWCO) ist eine Kenngrösse zur Beschreibung der Trennschärfe von Ultrafiltrationsmembranen. Er gibt an, welche Molekülgrösse unter definierten Standardbedingungen zu mindestens 90 % von der Membran zurückgehalten wird. Moleküle mit einem geringeren Molekulargewicht können die Membran teilweise oder vollständig passieren. Grössere Moleküle werden hingegen überwiegend zurückgehalten. Ein MWCO von 10 kDa bedeutet beispielsweise, dass Moleküle mit einem Molekulargewicht von etwa $10'000 \text{ g/mol}$ zu 90 % zurückgehalten werden.

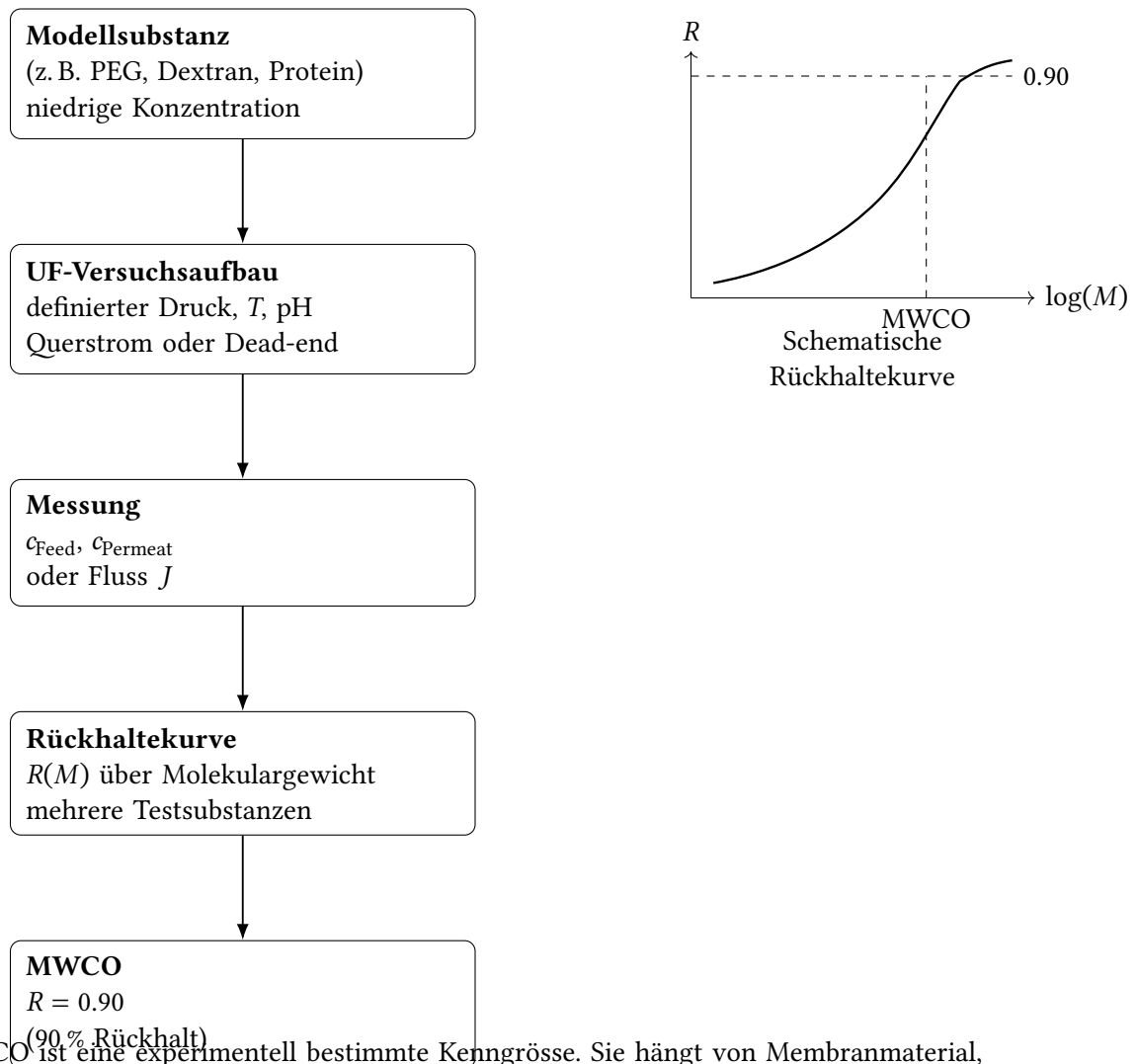
Der MWCO wird experimentell bestimmt und basiert nicht auf einer rein geometrischen Porengrösse. Zur Bestimmung werden Modellsubstanzen wie Polyethylenglykole, Dextran-Fractionen oder definierte Proteine, etwa Rinderserumalbumin, eingesetzt. Die Messungen erfolgen in der Regel bei niedrigen Konzentrationen, um Wechselwirkungen zwischen den Molekülen zu minimieren. Der ermittelte MWCO-Wert ist daher immer an die verwendete Testsubstanz gebunden.

Der MWCO stellt keine alleinige Materialeigenschaft der Membran dar. Vielmehr ergibt er sich aus dem Zusammenspiel zwischen Membran, gelöstem Stoff und den jeweiligen Betriebsbedingungen. Parameter wie Transmembrandruck, Temperatur, pH-Wert und Ionenstärke beeinflussen die effektive Rückhaltung erheblich. Auch die Molekülform und -flexibilität spielen eine wichtige Rolle. Daher können Moleküle mit identischem Molekulargewicht unterschiedlich stark zurückgehalten werden.

Vergleiche von MWCO-Werten zwischen verschiedenen Membranherstellern sind nur eingeschränkt möglich. Sie sind nur dann sinnvoll, wenn identische Modellösungen unter exakt gleichen Versuchsbedingungen eingesetzt wurden. Aus diesem Grund sollten MWCO-Angaben immer zusammen mit den verwendeten Testbedingungen interpretiert werden. Ohne diese Zusatzinformationen besitzt der MWCO-Wert nur eine begrenzte Aussagekraft. In der Praxis dient der MWCO als wichtige Orientierungshilfe bei der Auswahl von Ultrafil-

trationsmembranen. Er ersetzt jedoch keine anwendungsspezifischen Versuche. Membranen mit ähnlichem MWCO können sich im realen Betrieb deutlich in Rückhaltung, Foulingverhalten und Durchfluss unterscheiden. Eine sorgfältige Auslegung des Membranprozesses erfordert daher stets experimentelle Validierung unter praxisnahen Bedingungen.

4 Bestimmung des MWCO



MWCO ist eine experimentell bestimmte Kenngröße. Sie hängt von Membranmaterial, Testsubstanz und den Versuchsbedingungen ab, insbesondere von Druck, Temperatur, pH-Wert, Ionenstärke, Strömungsführung und Konzentration.

Abbildung 1. Schematischer Ablauf zur Bestimmung des Molecular Weight Cut-Off (MWCO) einer Ultrafiltrationsmembran. Der MWCO ist definiert als das Molekulargewicht, bei dem unter festgelegten Bedingungen ein Rückhalt von 90 % erreicht wird.

5 Hinweise zu typischen Fehlinterpretationen

5.1 Dalton und molare Masse

Die numerische Gleichheit von Dalton (Da) und g mol^{-1} darf nicht zu der Annahme führen, dass es sich um identische physikalische Grössen handelt. Das Dalton beschreibt die Masse eines einzelnen Moleküls oder Atoms, während g mol^{-1} die molare Masse eines Stoffes angibt. Die Übereinstimmung betrifft ausschliesslich den Zahlenwert, nicht jedoch die Dimension oder den physikalischen Bezug.

5.2 Annahme, Membran trennt bei MWCO im Datenblatt

Ein weiterer häufiger Fehler besteht darin, den Molecular Weight Cut-Off (MWCO) als scharfe Trennschwelle zu interpretieren.

In der Praxis wird der im Datenblatt angegebene MWCO-Wert häufig als objektive und allgemeingültige Trennschwelle interpretiert. Diese Interpretation ist methodisch nicht haltbar. Für die Bestimmung des MWCO existieren keine normierten Prüfverfahren, sodass Hersteller unterschiedliche Modellsubstanzen, Konzentrationen und Messbedingungen verwenden.

Der gemessene Rückhalt ist stets das Ergebnis einer spezifischen Wechselwirkung zwischen Membran, Testsubstanz und Versuchsführung. Ein einzelner MWCO-Wert verschleiert daher die tatsächliche Bandbreite des Trennverhaltens. Ohne vollständige Angaben zu Messsubstanzen und Prozessparametern besitzt der MWCO lediglich eine begrenzte vergleichende Aussagekraft.

Der MWCO beschreibt eine experimentell ermittelte Rückhalterate unter definierten Bedingungen und stellt keine feste Porengrösse dar. Daher können Moleküle mit einem Molekulargewicht unterhalb des angegebenen MWCO teilweise zurückgehalten werden, während grössere Moleküle nicht zwingend vollständig zurückgehalten werden müssen.

Der Molecular Weight Cut-Off (MWCO) darf nicht als scharfe Trennschwelle interpretiert werden. Er beschreibt eine experimentell ermittelte Rückhalterate unter definierten Bedingungen und stellt keine feste Porengrösse dar.

5.3 Vergleich MWCO Angaben verschiedener Hersteller

Schliesslich ist zu beachten, dass MWCO-Werte verschiedener Hersteller nur dann vergleichbar sind, wenn identische Modellsubstanzen und Versuchsbedingungen verwendet wurden. Ohne diese Informationen ist die Aussagekraft eines MWCO-Werts stark eingeschränkt.

MWCO-Werte verschiedener Hersteller sind nur bei identischen Modellsubstanzen und Versuchsbedingungen vergleichbar. Ohne diese Angaben ist die Aussagekraft eines MWCO-Werts stark eingeschränkt.

6 Moleküle in Lebensmitteln

Nachfolgende Tabelle zeigt verschiedene, für die Lebensmitteltechnologie und Membranverfahren relevante Moleküle, geordnet nach zunehmendem Molekulargewicht. Die Werte sind typische Richtwerte und dienen der technischen Einordnung, insbesondere im Zusammenhang mit Ultrafiltration und MWCO-Konzepten.

Die Tabelle verdeutlicht die enorme Spannweite der Molekulargewichte in Lebensmitteln, die von einfachen, niedermolekularen Verbindungen bis hin zu sehr grossen Polymeren reicht. Diese Bandbreite erklärt den Einsatz verschiedener Membranverfahren mit abgestuften Trenneigenschaften in der Lebensmittel- und Bioprozesstechnik.

Name	Molekulargewicht [g/mol]	Kommentar
Ammoniak	17	Abbauprodukt in Fermentation und Verderb
Wasser	18	Lösungsmittel, Referenzsubstanz
Kohlendioxid	44	Gärungsprodukt, relevant für Getränke
Ethanol	46	Alkoholisches Gärungsprodukt
Natriumchlorid	58.4	Kochsalz, relevant für Osmose
Essigsäure	60	Essig, Säuerungsmittel
Harnstoff	60	Relevant in Milch und Fermentation
Milchsäure	90	Fermentationsprodukt, pH-regulierend
Glycerin	92	Bestandteil von Fetten, Feuchthaltemittel
Vitamin C (Ascorbinsäure)	176	Antioxidans
Glucose	180	Einfachzucker, Referenzsubstanz
Fructose	180	Einfachzucker mit hoher Süßkraft
Citronensäure	192	Säuerungs- und Komplexierungsmittel
Saccharose	342	Disaccharid, Haushaltszucker
Lactose	342	Milchzucker, UF/NF-relevant
Maltose	342	Disaccharid, Stärkeabbauprodukt
Cholesterin	386	Sterol in tierischen Lebensmitteln
Triacylglyceride	~850	Hauptbestandteil von Fetten und Ölen
Vitamin B ₁₂	1'350	Grösstes wasserlösliches Vitamin
Oligosaccharide	1'000–3'000	Präbiotisch wirksame Kohlenhydrate
Peptide (kurzkettig)	1'000–5'000	Proteinabbauprodukte
Inulin	5'000–10'000	Fructan, Ballaststoff
α -Lactalbumin	14'200	Molkenprotein
β -Lactoglobulin	18'000	Molkenprotein
Casein	~24'000	Hauptmilchprotein
Ovalbumin	45'000	Hauptprotein im Eiklar
Sojaproteine	50'000–100'000	Pflanzliche Speicherproteine
Pektin	50'000–150'000	Pflanzliches Polysaccharid
Gelatine	50'000–300'000	Kollagenhydrolysat
Stärke (Amylose)	100'000–1'000'000	Lineares Polysaccharid
Stärke (Amylopektin)	1'000'000–10'000'000	Hochverzweigtes Polysaccharid

Tabelle 3. Moleküle in Lebensmitteln, geordnet nach Molekulargewicht