

# Bunsen-Magazin

Zeitschrift der Deutschen Bunsen-Gesellschaft  
für physikalische Chemie



## Water

Themenschwerpunkt

## Editorial

Eine neue Ära der  
molekularen Wasserforschung

## Gas-water Interface

- Wasser an Grenzflächen: Wo Wasser nicht einfach Wasser ist
- The Ocean's Skin

## Water as a resource

Die Wasserspaltung elektronengenau durchleuchten

## Haben wir bereits Ihre E-Mail-Adresse?

Wir möchten klimafreundlich arbeiten und Sie gerne auf dem neuesten Stand halten und Ihnen aktuelle Informationen und Neuigkeiten zur **physikalischen Chemie und aus der DBG** liefern.

Dafür brauchen wir Ihre E-Mail-Adresse!

Und so funktioniert's:

Schreiben Sie uns eine Mail an [geschaeftsstelle@bunsen.de](mailto:geschaeftsstelle@bunsen.de) oder gehen Sie auf [www.bunsen.de](http://www.bunsen.de) unter [Login](#) und geben Sie Ihre Mitgliedsnummer und Passwort an. Unter [Meine Mitgliedsdaten](#) tragen Sie Ihre E-Mail-Adresse ein.

## Kennen Sie den DBG-Stellenmarkt?

Nutzen Sie für Ihre Stellenausschreibung [bunsen.de](http://bunsen.de) oder das Bunsen-Magazin

Ihre Vorteile sind:

- Gezielte Ansprache von Fachkräften aus der Physikalischen Chemie
- Kostenfreier Online-Stellenmarkt für Promotionen, Postdocs und Nachwuchsgruppenleitungen

Preise und Formate finden Sie auf [www.bunsen.de/stellenmarkt](http://www.bunsen.de/stellenmarkt)

Sprechen Sie uns gerne an – Sie erreichen uns unter [geschaeftsstelle@bunsen.de](mailto:geschaeftsstelle@bunsen.de) oder **069 7917-363**

### IMPRESSUM

#### Bunsen-Magazin

Heft 1 Jahrgang 25

Herausgeber:  
Vorstand der Deutschen  
Bunsen-Gesellschaft  
Ralf Ludwig  
Florian Budde  
Ulrich Ott

Schriftleitung:  
Katharina Al-Shamery  
Institute of Chemistry,  
School of Mathematics and Natural Sciences  
Carl von Ossietzky University Oldenburg  
P.O. Box 2503  
D-26111 Oldenburg, Germany  
Phone (fax): +49-441-798-3853 (-3089)  
Email: [katharina.al.shamery@uol.de](mailto:katharina.al.shamery@uol.de)

Geschäftsführerin der Deutschen  
Bunsen-Gesellschaft  
Elisabeth Kapatsina  
Varrentrappstr. 40-42  
D-60486 Frankfurt  
Tel.: 069 / 79 17 363  
Fax: 069 / 79 17 1363  
E-Mail: [geschaeftsstelle@bunsen.de](mailto:geschaeftsstelle@bunsen.de)

Technische Herstellung:  
die printzen GmbH  
Gewerbepark 21  
D-92289 Ursensollen  
Tel.: +49 9628 / 924 89-0  
Fax: +49 9628 / 924 89-10  
E-Mail: [info@dieprintzen.de](mailto:info@dieprintzen.de)



Zum Titelbild:  
Ice crystals grown in our laboratory experiments on near-infrared spectra of crystalline and amorphous H<sub>2</sub>O ices. See article by Christina M. Tonauer and Thomas Loerting starting on page 20.

Das Bunsen-Magazin  
wurde auf recyceltem  
Papier gedruckt.

Helmut Dosch

# Eine neue Ära der molekularen Wasserforschung

Zwei denkbar einfache Moleküle, bestehend aus zwei Sauerstoffatomen im einen Fall und zwei Wasserstoff- und einem Sauerstoffatom im anderen, haben einen Planeten in unserem Sonnensystem kräftig aufgemischt: Aus dem unwirtlichen glühenden Gesteinsbrocken, der sich vor ca. 4,5 Mrd Jahren - in einem günstigen Abstand zur Sonne - zusammengeballt hat, ist dank Sauerstoff und Wasser der blaue Planet entstanden, in dem es kunterbunt zugeht. Dass es Leben auf unserer Erde ohne ausreichend Sauerstoff und Wasser nicht gäbe, das gehört zum Allgemeinwissen. Dass wir heute aber immer noch nicht gut verstehen, wie Wasser überhaupt auf die Erde kam und warum es so viele essentielle, höchst anomale Eigenschaften hat, das überrascht meist den Zuhörer und Leser.

Ein kleiner Ausschnitt aus der aus mehr als 20 Einträgen bestehenden Liste der Wasser-Anomalien: Wasser ist im Gegensatz zu anderen (auch schwereren) Molekülen bei Zimmertemperatur im flüssigen Aggregatzustand, dehnt sich beim Gefrieren aus und hat bei Normaldruck die höchste Dichte bei 4°C. Die Ursachen schon für diese „Alltags“-Anomalien, die unser Leben und Überleben ermöglichen, haben unmittelbar mit dem detaillierten, mikroskopischen Aufbau des H<sub>2</sub>O-Moleküls und der damit eng zusammenhängenden komplexen Wechselwirkung zwischen den H<sub>2</sub>O-Molekülen zu tun.

Die Verbesserung unseres molekularen Verständnisses der Eigenschaften des Wassermoleküls und seiner Wechselwirkung mit der biologischen und technischen Umgebung ist ebenso entscheidend, um datenbasiert in molekulare Prozesse einzugreifen, in denen Wasser eine Rolle spielt. Dies gilt für die Umwelt- und Klimaforschung, katalytische Prozesse, das Design von Impfstoffen oder neuen umweltfreundlichen Materialien. Wasser ist deshalb ein wichtiger Teil der europäischen Forschungsstrategie.

Unser lückenhafter Wissensstand im Verständnis der Eigenschaften von Wasser hat auch damit zu tun, dass es bislang kaum gelungen ist, detaillierte molekulare Einblicke in flüssige Zustände zu erhalten, wie wir sie von Festkörpern kennen. Dies soll sich mit den neuartigen analytischen Möglichkeiten, die an den Synchrotronstrahlungsquellen der 4. Generation und



an den modernen Röntgenlasern verfügbar sind und noch werden, jetzt ändern und eine neue Ära in der molekularen Wasserforschung ermöglichen.

Dies hat zur Idee der Gründung eines europäischen „Centre for Molecular Water Science“ (CMWS) geführt. Es bringt führende Akteure aller Disziplinen mit ihren komplementären Kompetenzen aus dem experimentellen und theoretischen Umfeld zusammen: für exzellente Grundlagenforschung, aus der Innovationen für unsere Zukunft entstehen.

Die Idee zur Gründung des CMWS wurde 2018 während eines internationalen Workshops in Hamburg entwickelt und hat seitdem überwältigenden Zuspruch erfahren. Mehr als 60 Forschungseinrichtungen und Universitäten aus ganz Europa und weltweit unterstützen die Planungen bereits aktiv. CMWS birgt das herausragende Potenzial einer abgestimmten Zusammenarbeit der besten Köpfe auf nationaler und europäischer Ebene, um wichtige und drängende Fragestellungen zur Sicherung der Ressource Wasser anzugehen. Die Vision des CMWS ist, dass neue, auf molekularen Daten basierte Erkenntnisse wasserbezogene Technologien nachhaltig verbessern und so einen wesentlichen Beitrag zu den Umwelt-, Energie-, Gesundheits- und Klimaschutzzielen leisten können.

Mit der Veröffentlichung des CMWS Whitepapers im Frühjahr 2021 wurde ein weiterer wichtiger Meilenstein für ein paneuropäisches Forschungsprogramm erreicht. Es identifiziert fünf strategische Forschungssäulen, die das Fundament der CMWS-Forschung bilden. Seit 2019 wurden von CMWS-Partnern bereits 20 gemeinsame Pilotprojekte im CMWS- Early Science Programme auf den Weg gebracht.

Die Grundlagenforschung des CMWS stützt sich auf ein breites, analytisches Methodenspektrum. Als paneuropäische Initiative sorgt das CMWS für einen koordinierten Zugang zu relevanten Forschungsinfrastrukturen und deren Weiterentwicklung. Der zukünftige Ausbau des Zentrums bei DESY als wichtiges Projekt der Science City Hamburg, eng verzahnt mit den CMWS-Hubs bei den europäischen Partneereinrichtungen, wird das CMWS langfristig als internationalen Leuchtturm der molekularen Wasserforschung etablieren.

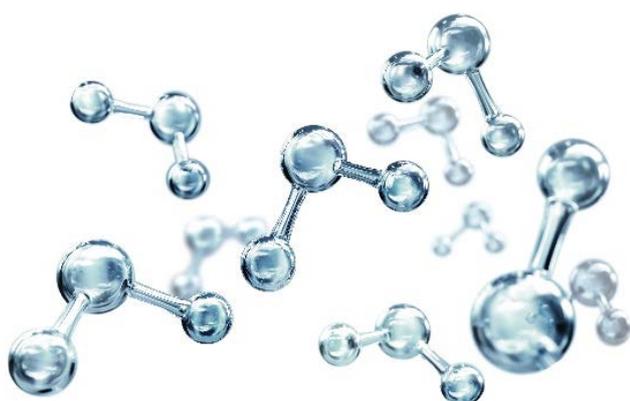
Prof. Dr. Helmut Dosch  
Vorsitzender des DESY Direktoriums  
desy-director@desy.de

<b>Editorial</b> .....	<b>Helmut Dosch</b> Eine neue Ära der molekularen Wasserforschung	<b>1</b>
<b>Molecular water research strategy</b> ....	<b>Klaus Ehret</b> Centre for Molecular Water Science A pan-European research initiative for molecular water research	<b>3</b>
<b>Gas-water Interface</b> .....	<b>Mischa Bonn, Yuki Nagata</b> Wasser an Grenzflächen: Wo Wasser nicht einfach Wasser ist	<b>6</b>
	<b>Oliver Wurl</b> The Ocean's Skin	<b>10</b>
	<b>Annette Pietzsch, Robert Seidel, Alexander Föhlich</b> Synchrotronspektroskopie an Wasser: Lokale und Kollektive Eigenschaften	<b>13</b>
<b>Water-solid Interface</b> .....	<b>Karina Morgenstern</b> Eisstrukturbildung auf der Nanoskala ohne und mit Fremdstoffen	<b>16</b>
	<b>Klaus-Martin Moldenhauer</b> Wasserplanet Erde	<b>18</b>
<b>Water under extreme conditions</b> .....	<b>Christina M. Tonauer, Thomas Loerting</b> Water	<b>20</b>
<b>Water as a resource</b> .....	<b>Jannes Grybat, Antonia Kallage</b> Entsalzen von Wasser: Eine Zukunftsaufgabe für die Menschheit	<b>23</b>
	<b>Simone Techert</b> Die Wasserspaltung elektronengenau durchleuchten	<b>28</b>
<b>Chemical Education</b> .....	<b>Nadja Belova, Moritz Krause</b> Der Kontext „Wasser“ aus chemie- und mediendidaktischer Sicht – das Projekt „H <sub>2</sub> O – das Wasser mit Leitfähigkeitsextrakt“	<b>30</b>
<b>Buchbesprechung</b> .....	<b>Rudolf Holze</b> Buchbesprechung	<b>32</b>
<b>Nachrichten</b> .....	Personalien, DBG-Veranstaltungen, Verschiedenes, Ausschreibungen	<b>35</b>
<b>GDCh</b> .....	Wenn aus Neugier Wissenschaft wird	<b>36</b>
<b>DBG-Mitgliederversammlung</b> .....	Einladung zur DBG-Mitgliederversammlung	<b>U3</b>

Klaus Ehret

# Centre for Molecular Water Science

## A pan-European research initiative for molecular water research



In cooperation with partners from all over Europe and overseas, DESY is establishing the international “Centre for Molecular Water Science”, CMWS. With a thoroughly interdisciplinary approach, the CMWS sheds light on the role of molecular water for a wide range of disciplines. It creates the knowledge base for sustainable technologies of tomorrow.

Water is the basis of life and technology. It is indispensable for life on earth. It influences climate, environment, energy and health. It is essential for technological applications and future developments - provided we understand and utilise its special molecular properties. Climate change, the growing energy consumption through digital technologies, new diseases or the increasing global demand for drinking water - the solutions of crucial societal challenges require a precise understanding of the properties and processes in water on a molecular level.

Our society uses water for key technologies in energy production, materials research and drug development. However, the underlying processes at the molecular level are often still too poorly understood to develop these technologies in a targeted manner. Water molecules form complex networks and thus give water its unique properties. Molecular water science studies these mechanisms - in pure water, in small clusters in the gas phase, in aqueous solutions, at interfaces or on biomolecules. The find-

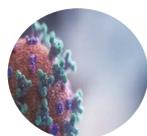
ings are used in numerous scientific disciplines and water-based applications, with some examples given in the following.

### Improved climate models



Aerosol particles, the smallest suspended particles in the atmosphere, influence our daily weather patterns as well as long-term climate development. As condensation nuclei, they set cloud and precipitation formation in motion.

### Knowledge and active substances against viral infections



Viruses like the coronavirus can only survive in water. But how exactly do water molecules interact with the viral envelope or specific protein structures during the infection process?

### Clean drinking water



The worldwide sustainable supply of drinking and process water is one of the major challenges of the coming decades. In the treatment of drinking water, for example, residues of hormones and medicines must be removed from the water.

### Green hydrogen



The photocatalytic splitting of water could significantly surpass current processes for the production of green hydrogen in terms of efficiency. In order to find suitable environmentally friendly catalysts, the processes involved in water splitting are analysed on an atomic scale.

With the help of state-of-the-art large-scale analytical research facilities, ultrafast and precise measurement methods and complex theoretical models, researchers can now analyse and understand molecular processes in and around water in detail. In combination with forward-looking digital data processing technologies and advanced simulation tools, molecular water research is becoming a rapidly growing field of research.

Dr. Klaus Ehret  
Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY  
A Research Centre of the Helmholtz Association  
Notkestr. 85, 22607 Hamburg  
klaus.ehret@desy.de

### CMWS Network

Over the past decade, molecular water research has experienced strong momentum, resulting in the CMWS initiative.

CMWS builds collaborations of leading players and infrastructures in the field of molecular water science into an excellent and agile European network. It combines key competences and brings together the different disciplines of basic research with the diverse challenges of the application fields. Currently, more than 60 research institutions and universities are involved in CMWS, of which over 55 are from Europe [1].

The centre of the CMWS initiative is being established at DESY on the Bahrenfeld research campus in Hamburg, cf. Fig 1. With the world-leading X-ray light sources PETRA III/IV, European XFEL and FLASH, the site offers key technologies for molecular water research. Combined with the interdisciplinary centres and specialised campus partners, the location offers an ideal environment to further develop CMWS into an international flagship for molecular water science. Twelve research groups on the Bahrenfeld research campus are involved in CMWS. In 2020, a coordinating CMWS office and a preparation and analysis laboratory were established, which are available to all CMWS partners. In the future, a new research building will house CMWS research groups and provide specific laboratory infrastructure.



Fig. 1: Aerial view of the DESY campus with the PETRA III ring, FLASH and the first stage of the European XFEL.

### Strategic research areas in the CMWS

The scientific topics of the CMWS initiatives are structured in five strategic research areas. This CMWS research programme forms the foundation for cross-divisional CMWS research and links basic research with the application areas.

#### CMWS Area I: Fundamental Properties of Water



How can the numerous anomalies of water be explained by the complex interplay of water molecules?

Ice floats on water because it has a lower density than the liquid. This density anomaly is just one of many special features of water.

#### CMWS Area II: Water in Climate, Astro and Geo Sciences



What role does water play in the evolution of the Earth, the environment and the atmosphere? What does its chemistry reveal about life in the universe and on distant planets?

Water is ubiquitous in the universe: on Earth, in planets under high pressure conditions and atmospheres, in

the warm gas of star-forming regions to ice grains in diffuse interstellar clouds.

#### CMWS Area III: Water in Energy Research and Technology



How can technologies be made more sustainable? What mechanisms and materials advance green hydrogen technologies?

Measurements at X-ray light sources like PETRA III (and in future PETRA IV) enable insights on a molecular scale, for example to further develop new nanotechnologies and optimise them for the behaviour of water.

#### CMWS Area IV: Chemical Dynamics in Real Time



What exactly happens when substances are dissolved in water? How do chemical reactions take place in detail?

Simulations and ultrafast measurement techniques, for example at the European XFEL free-electron laser, decipher chemical reactions in real time. The image shows the visualisation of the formation of a hydroxyl radical.

#### CMWS Area V: Water in the Molecular Life Sciences



How does water influence processes in cells? And how can these findings help in biomedical applications and drug development?

Water molecules mediate the interactions between biomolecules. Understanding them promotes the development of new active substances.

### Strategic Objectives of CMWS

CMWS promotes excellent science across disciplines by building methodological competencies. It builds bridges between basic research and fields of application and initiates a Europe-wide transfer of knowledge. This is realised through various strategic measures.

#### Interdisciplinary research programme

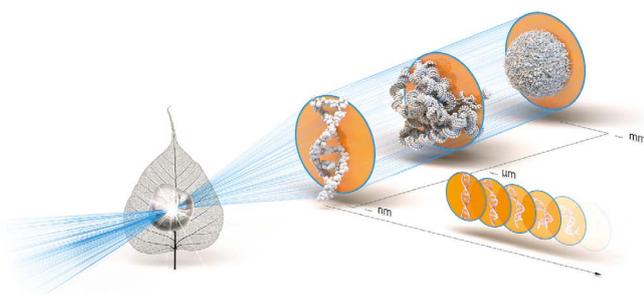
Building on the scientific White Paper [2], scientists from chemistry, physics, biology, medicine or material sciences are developing a long-term science programme. Challenges in molecular water research are tackled in a coordinated manner.

#### Network for competence & cooperation

The CMWS initiative facilitates coordinated, pan-European strategies in molecular water research. CMWS partners exploit synergies, bundle complementary resources and set priorities through coordinated action and planning.

#### Analytical research infrastructures

CMWS facilitates access to central large-scale facilities and research laboratories. Competence and infrastructure hubs are being created within the network. In this way, existing infrastructures are used optimally and needs from research are incorporated into the further development of the infrastructures, cf. Fig. 2.



**Fig. 2:** One key technology is X-ray analysis. Today's and future large X-ray light sources enable highly precise and ultrafast snapshots of the microscopic structures of water molecules. They open up insights into molecular networks even as they dynamically evolve.

### Research Infrastructures and CMWS Hubs

An outstanding feature of CMWS is to complement infrastructure by decentralised hubs within the network. With the hubs, partner institutions provide special expertise, arrange access to research infrastructures and support research projects. In this way, all CMWS partners can optimally exploit the broad spectrum of methods in molecular water research. In addition to the various hubs with X-ray sources at DESY and other laboratories, the KU Leuven in Belgium, for example, provides nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy facilities within the CMWS network.

CMWS has a unique potential for molecular water research: from outstanding basic research to highly relevant fields of application. Therefore CMWS is a new jewel in the European research area. A strong, coordinated research programme, a portfolio of complementary competences and sustainable funding are crucial for the further development of the CMWS. The white paper [2] published in May 2021 lays the foundation for cross-cutting networked research. The signing of the CMWS declaration in the year 2023 marks the next step towards the long-term constitution of the pan-European CMWS network.

### References

- [1] CMWS WEB page [www.cmws-hamburg.de](http://www.cmws-hamburg.de) and Strategy paper – with list of partners <https://www.cmws-hamburg.de/about/strategiepapier/>
- [2] CMWS White Paper, May 2021, DOI: 10.3204/PUBDB-2021-01859

### Image credits

Klima: Zbynek Burival, Unsplash;  
 Coronavirus: Fusion Medical Animation, Unsplash  
 Wasser: Terry Vlisidis, Unsplash;  
 Wasserstoffspeicher: Petmal, iStock Images

Eisberg: Romolo Tavani, iStock Images;  
 Universum: Margarita Balashova, iStock Images;  
 Nanoröhre: Yuliang Zhang and Alex Noy, LLNL;  
 Entstehung Hydroxyl-Radikal (Visualisierung): Caroline Arnold, DESY;  
 Wassermoleküle als Mittler zwischen Biomolekülen: Lars Schäfer und Christopher Päslock, Ruhr-Universität Bochum

Luftbild DESY-Campus und PETRA-III-Ring (Montage): Reimo Schaaf, DESY

Visualisierung Messprinzip von PETRA IV – Science Communication Lab, DESY

### Dr. Klaus Ehret



Klaus Ehret supports the DESY Directorate in the further development and implementation of its strategic goals. He thereby develops and coordinates strategic initiatives and partnerships.

Molecular water research and the strategic development of the CMWS initiative is an exciting and central topic of his work.

Klaus Ehret studied physics at the University of Ulm and the University of Heidelberg, from where he also received his PhD in 1993. As a research associate at the Max Planck Institute for Nuclear Physics in Heidelberg and the University of Dortmund, he worked for more than 10 years in particle physics in the field of heavy quarks, flavor physics and violation of fundamental symmetries. Among others he led the international HERA-B target group at DESY. In the years 2009 to 2012 he joined part-time the ALPS experiment to search for WISPs (Weakly Interacting Slim Particles).

In 2001, he moved to the field of science management and policy advice at the project management agency DESY. Here he organised BMBF funding for basic scientific research at German universities. From 2011 to 2017, he chaired the project management agency before moving to his current position at the DESY Directorate Office.

Contact at CMWS:  
 Prof. Melanie Schnell, [melanie.schnell@desy.de](mailto:melanie.schnell@desy.de)  
 Dr. Claudia Goy, [claudia.goy@desy.de](mailto:claudia.goy@desy.de)

Mischa Bonn, Yuki Nagata

# Wasser an Grenzflächen: Wo Wasser nicht einfach Wasser ist

Wasser ist die wichtigste Ressource auf unserer Erde und steht im Mittelpunkt vieler wichtiger globaler Herausforderungen. Als Molekül hat  $\text{H}_2\text{O}$  eine tückisch einfache Struktur, doch hat ein Kollektiv von Wassermolekülen einzigartige Eigenschaften, welche sich nicht einfach von der molekularen Struktur ableiten lassen. Dies liegt an der sehr starken Wechselwirkung (Wasserstoffbrückenbindung) zwischen Wassermolekülen. Wasserstoffbrückenbindungen sind starke intermolekulare Wechselwirkungen zwischen dem Wasserstoffatom eines Wassermoleküls und dem Sauerstoffatom eines anderen Moleküls. Diese Wasserstoffbrückenbindungen führen zu den vielen anomalen Eigenschaften von Wasser: Wasser hat eine extrem hohe Wärmekapazität, Wärmeleitfähigkeit und latente Verdampfungswärme. Genau diese Eigenschaften ermöglichen Lebewesen, ihre Körpertemperatur zu regulieren. Wasser ist aufgrund seiner geringen molekularen Größe, hohen Polarität und großen Dielektrizitätskonstante ein einzigartiges Lösungsmittel. Wasser hat bei  $4^\circ\text{C}$  ein Dichtemaximum und der feste Aggregatzustand hat eine niedrigere Dichte als die Flüssigkeit, weshalb Eis auf Wasser schwimmt. In natürlichen Gewässern bedeutet dies, dass das Gefrieren von oben nach unten erfolgt, Eis das Sonnenlicht reflektiert und das Wasser vor weiterem Gefrieren schützt. Wasser ionisiert durch Autodissoziation und erleichtert den Protonenaustausch zwischen Molekülen, was für biologische Membranen von entscheidender Bedeutung ist. Aufgrund der im Wasser enthaltenen Wasserstoffatome sind im Wasser nukleare Quanteneffekte wie die Nullpunktsenergie wichtig.

Ein Großteil der Komplexität von Wasser entsteht durch komplexe und kollektive Wechselwirkungen zwischen den Molekülen. Das Vorhandensein einer einzelnen Wasserstoffbrückenbindung beeinflusst die Struktur und Dynamik von Wassermolekülen über die beiden Wassermoleküle, die direkt interagieren, hinaus: Wasser bildet ein Netzwerk. An der Oberfläche von Eis und Wasser und an der Grenzfläche zu anderen Molekülen oder Materialien wird dieses Netzwerk unterbrochen, wodurch weitere faszinierende Eigenschaften entstehen, wie die sehr hohe Oberflächenspannung von Wasser oder das Vorschmelzen einer Doppelschicht von Wassermolekülen an der Eisoberfläche. Letzteres ist teilweise dafür verantwortlich, dass Eis rutschig ist.

Für viele Zwecke können wir Wasser als transparente Flüssigkeit mit einer bestimmten Viskosität und Dichte annähern, indem wir sogenannte Kontinuumsmodelle verwenden. Wenn wir jedoch Wasser an Grenzflächen untersuchen und zu immer kleineren Längenskalen übergehen, bricht diese Beschreibung zusammen. Diese kleinen Längenskalen sind aber sowohl in der Natur als auch in der Technik unentbehrlich, da es viele Situationen gibt, in denen ein Großteil der Wassermoleküle in Kontakt mit einer Oberfläche ist. In der Natur ist nano-begrenztes Wasser allgegenwärtig, zum Beispiel als nahezu einzelne Wasserschichten, die zwischen Mineralschichten in Ton eingeschlossen sind. Ähnliches findet man in der Biologie, wo beispielsweise einzelne Wasserdrähte Membranen in Aquaporin-Proteinen überbrücken. Auch bei der Aufreinigung oder Entsalzung von Wasser muss das Wasser durch Nanoporen in Membranen transportiert werden. Das Aufspalten von Wasser in Wasserstoff und Sauerstoff an einer elektrochemischen Elektrodengrenzfläche ist ebenfalls von Natur aus ein Prozess auf molekularer Ebene. Es ist klar, dass die Kontinuumsmodelle von Wasser in diesen Systemen unzureichend sind. Die Herausforderung, Einblicke in Grenzflächenwasser auf molekularer Ebene zu erhalten, wird durch die (i) typischerweise gering vorhandene Wassermenge und (ii) durch die Problematik, die molekulare Struktur und Dynamik von Wasser an Grenzflächen zu bestimmen, erschwert.

Hier geben wir einen kurzen Überblick über einen wichtigen experimentellen Ansatz, der Zugang zu den molekularen Eigenschaften von Grenzflächenwasser bieten kann und heben die Bedeutung theoretischer Modellierung hervor, nicht nur für das Verständnis, sondern auch für die Gestaltung von Experimenten. In diesem Beitrag beschränken wir uns auf die elementarste Wassergrenzfläche: die Wasser-Luft-Grenzfläche.

## Experimente zur Untersuchung der Wasserstruktur und Wasserdynamik an Grenzflächen

Es ist eine Herausforderung die molekulare Struktur der äußersten Monoschicht aus Wasser an einer Grenzfläche zu charakterisieren. In Anbetracht der subnanometerdünnen Grenzschicht wird deutlich, dass diese Grenzschicht 3 bis 4 Größenordnungen dünner ist als ein typischer „dünner“ Wasserfilm mit einer Dicke von  $1\ \mu\text{m}$  [1]. Infolgedessen ist der Beitrag des Volumens bei den meisten Spektroskopien und Streumethoden wesentlich größer als der Beitrag der Grenzfläche. Dieses Problem kann unter Verwendung von geradzahligem, nichtlinearem optischen Spektroskopien umgangen werden. Wie jede Spektroskopie haben nichtlineare Spektroskopien Auswahlregeln und für geradzahlige Spektroskopien muss die Inversionssymmetrie

---

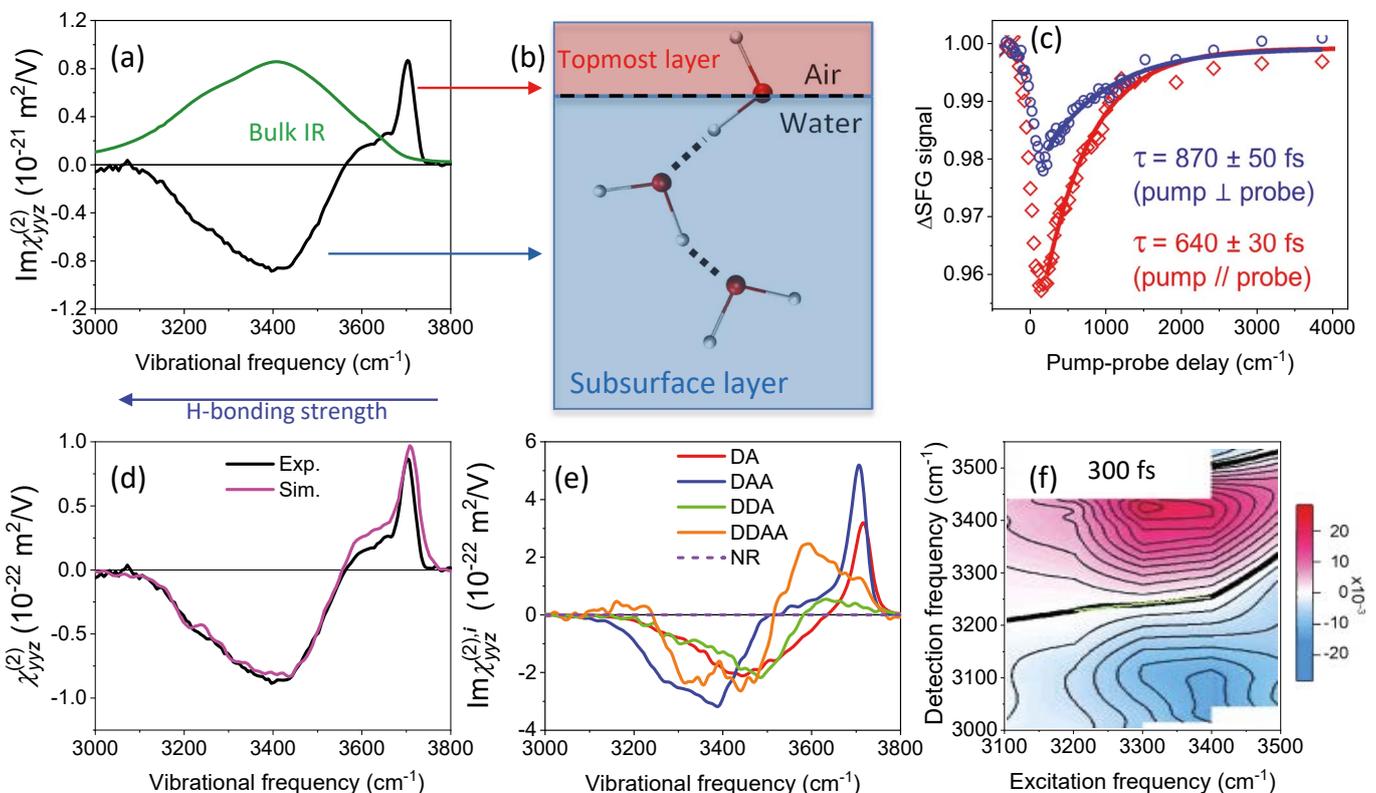
Prof. Dr. Mischa Bonn, Dr. Yuki Nagata  
Max Planck Institut für Polymerforschung  
Department für Molekulare Spektroskopie  
Ackermannweg 10, 55128 Mainz, Deutschland  
bonn@mpip-mainz.mpg.de  
nagata@mpip-mainz.mpg.de  
<http://www.mpip-mainz.mpg.de>

gebrochen werden, damit das Signal erzeugt werden kann. Diese Symmetriebrechung tritt definitionsgemäß an der Grenzfläche auf, da sich hier Wassermoleküle in einer asymmetrischen Umgebung befinden. Durch Kombination von geradzahlig nichtlinearer Spektroskopie mit Schwingungsspektroskopie, z. B. bei nichtlinearer Schwingungsspektroskopie zweiter Ordnung, kann man speziell die Schwingungsantwort der Wassermoleküle an Grenzflächen erhalten. Bei diesem als Summenfrequenzerzeugungsspektroskopie (sumfrequency generation, SFG) bezeichneten Ansatz werden ein infraroter und ein sichtbarer Laserpuls an der Oberfläche kombiniert, und die Summenfrequenz der beiden Pulse wird im Grenzflächenbereich erzeugt. Wenn der Infrarot-Laserpuls mit einem Schwingungsübergang eines Moleküls an der Grenzfläche resonant ist, wird das Summenfrequenzsignal resonant verstärkt, wodurch im Speziellen die Schwingungsantwort von Molekülen an Grenzflächen erhalten werden kann. Die Linienposition und Linienform der O-H-Streckschwingung von H<sub>2</sub>O-Molekülen werden durch die Stärke und Topologie der Wasserstoffbrückenbindungen stark beeinflusst. Insbesondere schwächt eine O-H ··· O-Wasserstoffbrückenbindung die kovalente O-H-Bindung des Wasserstoffbrückendonors, was zu einer Verringerung der Schwingungsfrequenz der O-H-Streckschwingung führt [2]. Daher kann man die durch Wasserstoffbrückenbindungen induzierte Verschiebung der O-H-Streckschwingungsfrequenz direkt mit der Wasserstoff-

brückenbindungsenergie korrelieren. Darüber hinaus kann man durch Bestimmung der Phase des Signals die Orientierung bestimmter O-H-Gruppen bestimmen [3].

Um die Oberflächenempfindlichkeit der SFG-Spektroskopie zu veranschaulichen, zeigt Abb. 1(a) das SFG-Spektrum der Wasser-Luft-Grenzfläche. Die Bande bei 3700cm<sup>-1</sup> fehlt in Schwingungsspektren mit Volumenempfindlichkeit: Diese Bande rührt von freien O-H-Gruppen, welche aus dem Volumen in die Gasphase ragen, her. Dieser Beitrag hat einen positiven Wert, d. h. die O-H Gruppen zeigen nach oben in die Gasphase und gleichzeitig weg vom Volumenwasser. Im Gegensatz dazu zeigen die Wasserstoffbrücken-gebundenen O-H-Gruppen im Bereich von 3200–3550cm<sup>-1</sup> nach unten in Richtung des Volumenwassers und haben dementsprechend ein negatives Signal (Abb. 1(b)). Als Technik, die gepulste Laser verwendet, kann SFG leicht erweitert werden, um zeitaufgelöste Messungen durchzuführen, wie in Abb. 1(c) dargestellt. Solche Messungen können nicht nur Geschwindigkeiten und Mechanismen des Schwingungsenergieflusses, insbesondere an der Grenzfläche, aufklären, sondern auch die Umorientierungsdynamik von O-H-Gruppen an Grenzflächen [7].

Die SFG-Spektren liefern detaillierte, aber Ensemble-gemittelte spektroskopische Informationen von O-H-Gruppen an der



**Abb. 1:** (a) SFG-Spektrum der Wasser-Luft-Grenzfläche, welches die Oberflächenempfindlichkeit der Methode veranschaulicht: etwa 20 % der Wassermoleküle in der obersten Schicht an der Wasser-Luft-Grenzfläche besitzen eine freie O-H Gruppe, welche aus der wässrigen Phase in die Luft ragt, wie in Abb. (b) dargestellt. Diese O-H-Gruppen erscheinen im SFG-Spektrum bei einer Frequenz von 3700 cm<sup>-1</sup>. (c) Ultraschnelle, Polarisations-aufgelöste SFG-Spektroskopie der freien O-H-Gruppen zeigt die Dynamik der ultraschnellen Umorientierung und Schwingungsrelaxation von Wassermolekülen an der Grenzfläche wider [4]. (d) Vergleich der experimentellen und simulierten SFG-Spektren von Wasser an der Wasser-Luft-Grenzfläche. (e) Zerlegung der SFG-Spektren in Beiträge einzelner Wassermoleküle basierend auf den Wasserstoffbrückenbindungen mit umgebenden Wassermolekülen [5]. DAA repräsentiert beispielsweise Wassermoleküle, welche eine Wasserstoffbrücke ausbilden (Donor) und zwei Wasserstoffbrückenbindungen anderer Moleküle akzeptieren. (f) Zweidimensionale Infrarot-Anregung - SFG-Abfrage Spektren von Wasser bei einer Wartezeit von 300 fs. Die Knotenlinie läuft fast parallel zur Pumpfrequenzachse, was zeigt, dass die OH Gruppen fast, aber nicht komplett, ununterscheidbar sind [6].

Grenzfläche, die einen Einblick in die Struktur und Dynamik des Grenzflächenwassers geben. Diese Informationen reichen aber nicht aus, um ein vollständiges Bild der Grenzfläche zu erhalten. Molekulare Simulationen in Kombination mit den experimentellen Spektren sind ein leistungsfähiger Ansatz zur Beantwortung von Fragen wie: Was ist eine typische Geometrie von Grenzflächen-Wassermolekülen, die eine freie O-H-Gruppe besitzen? Was definiert die „Grenzflächenregionen“ und wie groß ist die Detektionstiefe von SFG? Wie können wir komplexe Schwingungsmerkmale auflösen und molekulare Schwingungen den lokalen Umgebungen zuordnen? Durch die Reproduktion der Eigenschaften von Grenzflächenwasser wie der Struktur und Dynamik der freien O-H-Gruppe können wir die Genauigkeit der Strukturen und Dynamiken von Grenzflächenwasser beurteilen, die durch molekulare Simulationstechniken vorhergesagt werden. Dadurch erhalten wir einen umfassenden Einblick in die Struktur des Grenzflächenwassers [1, 8]. Es würde den Rahmen dieses kurzen Beitrags sprengen, Details von Simulationen zu diskutieren, aber im Wesentlichen können die simulierten Spektren verwendet werden, um die individuellen Beiträge einzelner Wasserspezies zu identifizieren.

Beispielsweise kann man mit der momentanen Genauigkeit von Kraftfeld-basierten Simulationsmethoden nicht nur die genaue Linienform der Spektren reproduzieren, sondern auch gute Übereinstimmung mit den Amplituden der experimentellen Spektren erhalten (Abb. 1(d)). Derartige Simulationen sind gut geeignet, um die Beiträge der einzelnen molekularen Spezies zu den SFG-Spektren abzuschätzen. Beispielsweise zeigen Simulationen, dass die Wassermoleküle mit der freien O-H-Gruppe, d. h. DA- und DAA-Spezies, wobei D (A) den Wasserstoffbrückendonator (Akzeptor) bezeichnet, zu der Bande bei  $3700\text{ cm}^{-1}$  beitragen, während die negative Bande bei  $3400\text{ cm}^{-1}$  sich aus Beiträgen aller Arten von Wassermolekülen in inhomogener Weise ergibt; die DA- und DDA-Spezies tragen zu der negativen Bande bei höheren Frequenzen bei, während die DAA- und DDAA-Spezies bei niedrigeren Frequenzen beitragen (Abb. 1(e)). Ein genauerer Blick auf die zerlegten Spektren zeigt, dass der Bereich bei  $3500\text{ cm}^{-1}$  hauptsächlich von Wassermolekülen mit einem einzigen Wasserstoffbrückendonator (DA- und DDA-Spezies) herrührt, während der Bereich bei  $3200\text{--}3400\text{ cm}^{-1}$  von den Wassermolekülen, deren O-H-Gruppen zwei Wasserstoffbrücken ausbilden, dominiert wird. Als solches ist auch die breite Bande der H-Brücken-gebundenen O-H-Gruppen heterogen aufgebaut [5, 9].

Diese inhomogenen Merkmale können nicht allein aus den statischen Spektren experimentell identifiziert werden, wohl aber aus zeitaufgelösten Spektren. Die in Abb. 1(f) gezeigten zweidimensionalen (2D) SFG-Spektren, bei welchen die O-H-Streckschwingungsbande mit einem Infrarotpuls angeregt wird und die resultierende Modulation mit SFG detektiert wird, zeigten die derartige Heterogenität des Grenzflächenwassers auf. Die Schwingungsdynamik im Bereich  $3100\text{--}3400\text{ cm}^{-1}$  ist schneller als bei  $3500\text{ cm}^{-1}$  [6]. Dieses 2D-SFG-Spektrum zeigt einen auffälligen Unterschied zu volumensensitiven 2D-IR-Spektren von Wasser, in welchen die Schwingungsdynamik im gesamten Bereich der H-Brücken-gebundenen O-H-Bande ( $3100\text{--}3600\text{ cm}^{-1}$ ) relativ homogen ist.

Zusammenfassend hoffen wir, den Lesern gezeigt zu haben, dass sowohl das Experiment als auch die Theorie ein Niveau erreicht haben, das es erlaubt, die Anordnung der Wassermoleküle an der Oberfläche sehr detailliert aufzuklären. Dies eröffnet die Möglichkeit, jetzt komplexere Grenzflächen zu untersuchen, wie z. B. wässrige Lösungen in Kontakt mit einer elektrochemischen Elektrode, die für die Wasserspaltung und die Wasserstoffproduktion von Bedeutung sind. Auch die Rolle und das Verhalten von Wasser in komplexen atmosphärischen Systemen kann nun in noch nie dagewesenem Detail untersucht werden.

## Referenzen

- [1] Tang, F.; Ohto, T.; Sun, S.; Rouxel, J. R.; Imoto, S.; Backus, E. H. G.; Mukamel, S.; Bonn, M.; Nagata, Y. Molecular Structure and Modeling of Water-Air and Ice-Air Interfaces Monitored by Sum-Frequency Generation. *Chem. Rev.* 2020, **120**, 3633–3667.
- [2] Rey, R.; Møller, K. B.; Hynes, J. T. Hydrogen Bond Dynamics in Water and Ultrafast Infrared Spectroscopy: A Theoretical Study. *J. Phys. Chem. A* 2002, **106**, 11993–11996.
- [3] Nihonyanagi, S.; Yamaguchi, S.; Tahara, T. Direct Evidence for Orientational Flip-Flop of Water Molecules at Charged Interfaces: A Heterodyne-Detected Vibrational Sum Frequency Generation Study. *J. Chem. Phys.* 2009, **130**, 204704.
- [4] Hsieh, C.-S.; Campen, R. K.; Okuno, M.; Backus, E. H. G.; Nagata, Y.; Bonn, M. Mechanism of Vibrational Energy Dissipation of Free OH Groups at the Air–Water Interface. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2013, **110**, 18780–18785.
- [5] Chiang, K.-Y.; Yu, X.; Yu, C.-C.; Bonn, M.; Nagata, Y. On the Fresnel Factor Correction of Sum-Frequency Generation Spectra of Interfacial Water. *ChemRxiv* 2022.
- [6] Hsieh, C.-S.; Okuno, M.; Hunger, J.; Backus, E. H. G.; Nagata, Y.; Bonn, M. Aqueous Heterogeneity at the Air/Water Interface Revealed by 2D-HD-SFG Spectroscopy. *Angew. Chemie Int. Ed.* 2014, **53**, 8146–8149.
- [7] Hsieh, C.-S.; Campen, R. K.; Vila Verde, A. C.; Bolhuis, P.; Nienhuys, H.-K.; Bonn, M. Ultrafast Reorientation of Dangling OH Groups at the Air–Water Interface Using Femtosecond Vibrational Spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.* 2011, **107**, 116102.
- [8] Tang, F.; Ohto, T.; Hasegawa, T.; Xie, W. J.; Xu, L.; Bonn, M.; Nagata, Y. Definition of Free O-H Groups of Water at the Air–Water Interface. *J. Chem. Theory Comput.* 2018, **14**, 357–364.
- [9] Chiang, K. Y.; Seki, T.; Yu, C. C.; Ohto, T.; Hunger, J.; Bonn, M.; Nagata, Y. The Dielectric Function Profile across the Water Interface through Surface-Specific Vibrational Spectroscopy and Simulations. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2022, **119**, e2204156119.

## ZITATBOX

### Demosthenes (384 v. Chr. - 322 v. Chr.)

„Auch Quellen und Brunnen versiegen, wenn man zu oft und zu viel aus ihnen schöpft.“

Quelle: <https://www.careelite.de/wasser-zitate-wasserknappheit-sprueche/>

**Prof. Dr. Mischa Bonn**

Mischa Bonn, born in 1971 in the Netherlands, serves as Max Planck Director at the Institute for Polymer Research in Mainz, Germany, where he heads the Department of Molecular Spectroscopy since 2011. Previous to that, he held appointments at the Institute for Atomic and Molecular Physics (AMOLF) in Amsterdam, and Leiden University. Following undergraduate studies in Physical Chemistry at the University of Amsterdam, Mischa obtained his PhD from AMOLF / University of Eindhoven for work on ultrafast infrared spectroscopy of zeolite catalysts. Post-doc positions on the topics of ultrafast surface dynamics and Terahertz spectroscopy were held at the Fritz Haber (Max Planck) Institute and Columbia University, respectively. The central theme of Mischa's research is the characterization and control of the structure and dynamics of the electrons and molecules at interfaces, with a particular fondness for water.

**Dr. Yuki Nagata**

Yuki Nagata, born in 1979 in Japan, serves as a group leader at the Institute for Polymer Research in Mainz, Germany, where he organizes the surface spectroscopy group in the Department of Molecular Spectroscopy since 2011. Following undergraduate studies and master degree in Chemical System Engineering at the University of Tokyo, Yuki obtained his PhD from Kyoto University for theoretical modeling of the two-dimensional spectroscopy. Subsequently, he worked in BASF SE and did a post-doc in University of California, Irvine. The central theme of Yuki's research is the computational and experimental understanding of the structure and dynamics of aqueous interfaces.

## Publish in PCCP and thus strengthen your DBG!

*Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)* is an international journal for the publication of cutting-edge original work in physical chemistry, chemical physics and biophysical chemistry. The paper appears in 48 issues per year. In 2020 PCCP had the second largest market share of international journals for physical chemistry.

PCCP was founded in 1999 by the Bunsen Society together with 18 other European specialist societies and is published by the Royal Society of Chemistry (RSC). As a co-owner, the DBG benefits from the publications by German authors in the magazine.

Current articles and information on submission can be found at [www.rsc.li/pccp](http://www.rsc.li/pccp)



Deutsche Bunsen-Gesellschaft  
für physikalische Chemie

PCCP



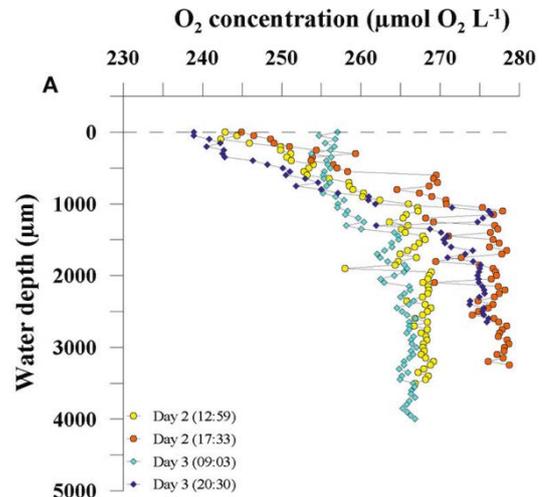
Oliver Wurl

## The Ocean's Skin

The ocean's skin layer – scientifically termed the sea-surface microlayer (SML) – is inconspicuous, but nevertheless at the centre of ocean and climate research. The SML forms the boundary layer between the ocean and the atmosphere with a thickness of typically less than 1 mm. The layer is enriched with organic matter, and serves as a unique habitat for microbes, but also for fish eggs and larvae as nursery. The existence of the SML is a global phenomenon and due to its unique position, all material and energy exchanged between the ocean and atmosphere has to pass through this boundary layer. Research in the field of SML is not new. In fact, a scientific description by Benjamin Franklin (1774) of oil films calming water surfaces can be considered as pioneer work on monolayers, followed by work by Raleigh (1890) and Langmuir (1917). Modern science on monolayers started in the 1960's, for example by Levich (1962) investigating the effect of elastic organic films on hydrodynamics. Research on the monolayers and the SML – also termed surface films or skin layer – continued, for example as research focuses in Germany, e.g. in the 1970s and 1980s at the University of Hamburg.

Nevertheless, the SML has remained in a niche in the field of oceanography for two reasons. First, it was assumed that such thin surface films cannot last under typical conditions. Nowadays, we know that the SML indeed exist at typical oceanic conditions. Although temporarily disrupted by breaking waves, rising air bubble plumes scavenge dispersed organic material during their ascent and quickly reform the SML. The second problem was and has remained until today that the representative sampling of the SML is extremely difficult. The paradox is that handheld sampling devices are very simple and made of a glass plate with a handle. The plate is immersed and withdrawn while the SML adheres to the plate by the adhesive forces. Intriguingly simple, but comes with the facts that it has to be done from a small boat on the open ocean, and little volume is collected with each withdrawal. Chemical and biological analysis with high demand on volume is not possible unless with tedious sampling for hours, which would mask any temporal and spatial heterogeneity. Submersible sensors are simply out of question due to their sizes. However, we have started to use micro-electrodes in laboratory tanks to investigate the effect of different types of surface-active organic matter on the surface tension and gradients of oxygen, temperature and pH across the SML [1]. A clear point of sudden change in these properties near the surface can be seen by moving the electrode from the bottom

to the surface and across it (Figure 1). Another field has shaped the research on the SML: engineering and more recently marine robotics. Radio-controlled catamarans for continuous sampling appeared first at Woods Hole Oceanographic Institution (USA) in the beginning of the 2000s with rotating glass drums partially immersed in the water, and with the availability of new technology, the state-of-the-art catamarans have the capability of autonomous operation, long-distance transmission, flow-through sensors on board for real-time data, and an endurance of at least 12 hours (Figure 2). After two decades, we are now



**Fig. 1:** Oxygen gradients in the upper 5000 µm of unfiltered seawater filled in an 800 liter tank. Colour represents different days of measurement (time in brackets). Figure from Rahlff, J., Stolle, C., Giebel, H. A., Ribas-Ribas, M., Damgaard, L. R., & Wurl, O. (2019). Oxygen profiles across the sea-surface microlayer—effects of diffusion and biological activity. *Frontiers in Marine Science*, 6, 11.



**Fig. 2:** Research catamaran HALOBATES (University Oldenburg, Institute for Chemistry and Biology of the Marine Environment, Wilhelmshaven) in operation during the first field study in BASS (19-23 September 2022). In the background the research vessels Senckenberg and Littorina, and in the foreground a drifter to track water masses. Photo: Lisa Gassen.

Prof. Dr. Oliver Wurl  
Carl von Ossietzky Universität Oldenburg  
Arbeitsgruppe Prozesse und Sensorik mariner Grenzflächen  
Ammerländer Heerstraße 114-118, 26129 Oldenburg  
oliver.wurl@uol.de

capable to map the sea surface, i.e., the upper 1 mm, and resolve its spatial and temporal heterogeneity.

Why are we putting much efforts into the study of the SML? The enrichment of naturally occurring organic material modifies the chemical, biological and physical properties of the sea surface to form the SML, which hinders air–sea exchange processes of gases, heat, and momentum. The SML is a laminar layer with reduced turbulence, and gas and heat transport are dominated by slow molecular diffusion as a limiting step. For example, cyanobacteria – a photosynthetic bacteria blooming right at the surface in a slimy matrix – can reduce the uptake rate of atmospheric CO<sub>2</sub> by the ocean by 60 % [2]. And, these blooms are not small, they can be seen from space! It is not the global relevance only, but under low sea states these biofilm-like patches and streaks are hotspots of microbial life with a hardly surpassing complexity. Harsh conditions at the sea surface like extreme temperature fluctuations and exposure to UV radiation seems contradictory for microbial hot spots, but seen at other places with seemingly hostile conditions, like hot springs, subsea thermal vents and sea ice.

As a smaller community of chemical and physical oceanographers, microbiologist, atmospheric scientists and theoretical physicist from Germany and Austria, we have raised the question to what extent photochemical reactions and microbial communities in the SML process organic matter in unique, hitherto unknown ways, and control the net flux of gases and energy to both the underlying bulk water and the overlying atmosphere. The community of 22 principal investigators has been funded since July 2022 by the German Research Foundation and Austrian Science Fund with the research unit *Biogeochemical processes and Air–sea exchange in the Sea-Surface microlayer* (BASS). Details of the working programmes and involving institutions can be found on the website <https://uol.de/en/bass>.

Overall, the BASS group will gain novel knowledge of the marine carbon cycle. Although the total volume of the SML is small compared to the ocean's volume, interfacial reactions in the SML play likely a crucial role [3], because these reactions may not occur in underlying water. For example, it can include the unfolding of proteins, hindered molecular orientation or exposing reactive sites and thus undergo unique interactions with neighbouring molecules not occurring in the bulk water. Vibrational sum frequency generation spectroscopy and Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry are core facilities in BASS to investigate the chemical composition on a molecular level and interfacial reactivity of the SML. Specific photochemical reactions, in consort with microbial remineralisation in

the SML, can represent new modes for the recycling of organic compounds and deliver new knowledge for the climate-relevant marine carbon cycle. Biofilms represent a diverse and complex mode of life, and the SML with its re-occurring biofilm-like matrices has been recognized in an Earth's inventory analysis of biofilm abundance [4]. With meta-transcriptomics, -proteomics, -genomics analyses, BASS will foster the understanding of the marine microbial loop by exploring microbial metabolism at the surface of the ocean with potentially undiscovered metabolic processes, survival strategies and organic matter transformation.

In the field of air-sea interactions, the main impacts of the research unit are providing mechanistic understanding of physical processes at millimetre scales or smaller, and providing an understanding of the capabilities of the SML to act as a source or sink of trace gases. As the SML is in direct contact with the atmosphere, future climate change will inevitably modify the SML's role in air-sea interaction. The research unit will provide seminal knowledge at scales overlooked in the past, i.e. scales in micro- and millimeter range including modelling and theoretical approaches. Beside sea-going experiments and mesocosm studies, a wind-wave tank at the University of Hamburg is another core facility in the BASS project. The facility was built in the 1970s in the course of the research focus at that time, and recently upgraded with particle image velocimetry and laser-induced fluorescence to visualize wind and turbulent fields at the water surface influenced by monolayers. Aforementioned microelectrodes will be applied to investigate vertical profiles of temperature and salinity to determine small-scale convection as transport vector between the actual surface and underlying bulk water.

The BASS group plans several joint experiments, including sea-going campaigns offshore Helgoland, an outdoor mesocosm study at the SURF facility (University of Oldenburg; Figure 3), and the wind-wave tank at the University of Hamburg (Figure 4). It covers both observations in controlled experiments to gain a mechanistic understanding and on sea to quantify these processes under natural conditions on local scales. In a second stage, BASS intend to understand spatial variability and global relevance of SML processes to the ocean and climate system.



**Fig. 3:** Sea-Surface Facility (SURF) for mesocosms studies (University Oldenburg, Institute for Chemistry and Biology of the Marine Environment, Wilhelmshaven). Photo: Lutz ter Hell.



**Fig. 4:** Wind-wave tunnel facility at the University of Hamburg.  
Photo: Martin Gade.

## References

- [1] Adenaya, A., Haack, M., Stolle, C., Wurl, O., & Ribas-Ribas, M. (2021). Effects of Natural and Artificial Surfactants on Diffusive Boundary Dynamics and Oxygen Exchanges across the Air–Water Interface. *Oceans* **2** (4), 752–771.
- [2] Mustafa, N. I. H., Ribas-Ribas, M., Banko-Kubis, H. M., & Wurl, O. (2020). Global reduction of in situ CO<sub>2</sub> transfer velocity by natural surfactants in the sea-surface microlayer. *Proceedings of the Royal Society A*, **476** (2234), 20190763.
- [3] Carlson, D. J. (1993). The early diagenesis of organic matter: Reaction at the air-sea interface. In M. H. Engel & S. A. Macko (Eds.), *Topics in Geobiology: Vol. 11. Organic Geochemistry: Principles and Applications* (pp. 255–268).
- [4] Flemming, H.-C., & Wuertz, S. (2019). Bacteria and archaea on earth and their abundance in biofilms. *Nature Reviews. Microbiology*, **17**(4), 247–260.

### Prof. Dr. Oliver Wurl



After school, I started studying environmental engineering at the University of Applied Sciences in Hamburg. It was not until I attended the lectures of Prof. Dr. Elsholz that I became interested in science. I decided to write my diploma thesis under his supervision and developed a technique for the automatic mercury analysis for a monitoring station along the Elbe river. Through his contacts, Prof. Dr. Elsholz managed to get a berth for me on the research vessel Alexander von Humboldt. Already as a young man I had thoughts to work on sea, and oceanography was an option. Two weeks of storm in January 2000 on the Baltic Sea quickly showed me the reality. After the return from the Baltic Sea, I first went into industry for two years, but the sale of the company to an American corporation did not fit very well into my plans of a professional career. Now or never... I packed two suitcases and started my PhD at the Tropical Marine Science Institute at the National University of Singapore under the supervision of Prof. Dr. Obbard. I was fortunate to get a scholarship and a supervisor who opened up a new research direction for me, for which I have been very grateful until today. I was investigating the distribution and transport pathways of persistent organic pollutants in the marine environment of Southeast Asia and decided to involve the SML in this research. After three years, I had my PhD certificate in the bag and was married – my wife managed the research funds for

my PhD at the same institute. I received a DFG scholarship and spent 2.5 years as a postdoc at the Institute of Ocean Sciences (Sidney, BC, Canada) to work on the question whether the SML exists under typical oceanic conditions. There, I deepened my knowledge of chemical and physical oceanography through my mentors Dr. Lisa Miller and Dr. Svein Vagle, who were instrumental in my later scientific career. I spent a lot of time at sea to have sufficient data to answer my research questions, and several weeks at a base camp near the magnetic North Pole. An exciting time in which I learned a lot, but after two more years at Old Dominion University (Norfolk, VA, USA), I took a DFG scholarship to return to Germany after 10 years. I used the time to write an ERC Starting Grant proposal – after failing twice with an Emmy-Noether group proposal, I learned that rejections are part of being a scientist, but also that you have to be persistent and do better next time. In the meantime, and with DFG funding, I was able to continue my work on the SML at the Institute for Baltic Sea Research Warnemünde and demonstrated its biofilm-like properties. In the end, the ERC application was successful and I decided to establish a research group at the Institute for Chemistry and Biology of the Marine Environment (University of Oldenburg). The ERC grant gave me and my group the opportunity to quantify the influence of the SML on the global oceanic uptake of atmospheric CO<sub>2</sub>. Since 2019, I am a full professor at the University of Oldenburg and spokesperson of the DFG research group BASS. Many people around me have contributed to the fact that I am able to pursue new and exciting research tasks on the topic of ocean and climate sciences, and to pass on the knowledge to the younger generation. I am very grateful for this.

Annette Pietzsch, Robert Seidel, Alexander Föhlisch

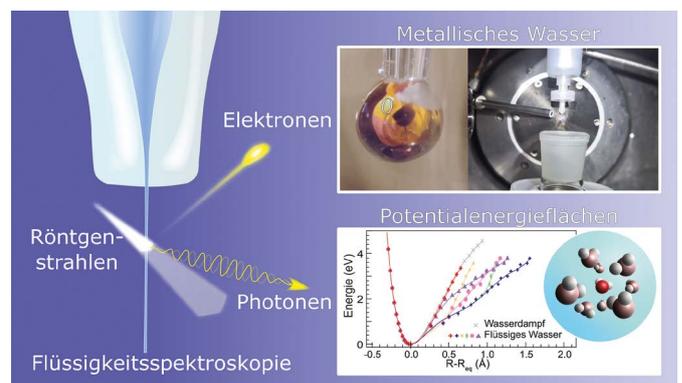
# Synchrotronspektroskopie an Wasser: Lokale und Kollektive Eigenschaften

Die scheinbare Einfachheit eines einzelnen  $\text{H}_2\text{O}$  Moleküls alleine lässt kaum erahnen, welche erstaunlichen Eigenschaften viele Wassermoleküle gemeinsam, über die bloße Summe hinaus, annehmen können. Daraus entsteht zum einen die Vielzahl an flüssigen und festen Phasen mit den bekannten thermodynamischen Anomalien und zum anderen entspringt kollektives Verhalten aus den lokalen Wechselwirkungen auf atomarer Ebene.

Die Forschung mit Synchrotronstrahlung hat einzigartige Stärken darin, herauszufinden, wie der Bindungscharakter von Orbitalen ist und wie sie besetzt sind. Diese Bestimmung der elektronischen Struktur mit röntgenspektroskopischen Verfahren erlaubt eine Brücke zu schlagen zwischen den atomaren Aspekten auf der einen Seite und den kollektiven Eigenschaften des fluktuierenden Netzwerks der Wasserstoffbrückenbindungen auf der anderen Seite. Zwei hochspezialisierte weichröntgenspektroskopische Verfahren an Wasser machen sichtbar, wie sich kollektive Eigenschaften aus den Wechselwirkungen im flüssigen Wasser ergeben: Vibrationsaufgelöste, resonante inelastische Röntgenstreuung und Röntgenabsorptionsspektroskopie zeigen die Veränderung der molekularen Potentialenergieflächen der  $\text{H}_2\text{O}$  Moleküle von der Gasphase zur Flüssigkeit. Photoelektronenspektroskopie etabliert, dass Wasser sogar unter Umgebungsbedingungen metallisch werden kann. Dies wird durch die Injektion von Elektronen in das Netzwerk der Wasserstoffbrücken verursacht.

Da das dreiatomige  $\text{H}_2\text{O}$  Molekül die symmetrische Streckschwingung, die anti-symmetrische Streckschwingung und die Biegebewegung erlaubt, kann vibrationsaufgelöste resonante inelastische Röntgenstreuung die Vibrationsanregungen auf der molekularen Grundzustandspotentialenergiefläche entlang dieser Koordinaten vermessen. Sobald sich die Moleküle über Wasserstoffbrückenbindungen miteinander vernetzen, verändern sich die Grundzustandspotentialflächen und die darauf stattfindenden Schwingungen. Somit erlauben unsere spektralen Daten eine Rekonstruktion der Grundzustandspotentialenergieflächen der verschiedenen Phasen des Wassers. Flüssiges Wasser bei Raumtemperatur und Umgebungsdruck

hat im statistischen Mittel 3.48 Wasserstoffbrückenbindungen pro Molekül [1], was tetrahedralearer Koordination nahe kommt. Darunter liegt eine graduelle Verteilung von Bindungssituationen – angefangen von beinahe ungestörten, gasähnlichen bis hin zu stark modifizierten molekularen Potentialen [2]. In Summe ergeben sich daraus dann die makroskopischen Eigenschaften des flüssigen Wassers.



**Abb. 1:** Eine etablierte Technik in der Flüssigkeitsspektroskopie ist die Bestrahlung eines sehr feinen, wenige Mikrometer dünnen Flüssigkeitsstrahls im Vakuum mit weichem Röntgenlicht. Die dabei freiwerdenden, detektierbaren Elektronen und Photonen geben komplementäre Informationen über die elektronische Struktur in der untersuchten Probe preis. Für die elektronenspektroskopische Untersuchung von metallischem Wasser (rechts oben) wurde Wasserdampf auf Tröpfchen aus flüssigem Natrium und Kalium kondensiert. Elektronen aus dem Metall-Tröpfchen gehen in den dünnen Flüssigkeitsfilm über und bilden ein quasi-freies Elektronengas, das charakteristische, metallische Eigenschaften aufweist. Mit Hilfe der detektierten Photonen (rechts unten) können Schnitte durch die Grundzustandspotentialenergieflächen extrahiert werden. Dazu werden in den Wassermolekülen in Gas oder Flüssigkeit verschiedene Schwingungsmoden selektiv und lokal angeregt und die resultierende Vibrationsprogression detektiert. Aus diesen Vibrationsenergien lässt sich nun die Form der Grundzustandspotentialenergiefläche entlang der angeregten Koordinate rekonstruieren.

Auch wenn die Moleküle über Wasserstoffbrückenbindungen miteinander vernetzt sind und dabei ihre Potentialenergieflächen teils stark verändert werden, so ist reines Wasser doch ein nahezu perfekter Isolator - die Valenzelektronen bleiben gebunden und sind nicht mobil. Um ein Leitungsband mit frei beweglichen Elektronen zu erzeugen, müsste man Wasser so stark unter Druck setzen, dass sich die Orbitale der Außenelektronen überlappen. Eine Berechnung zeigt jedoch, dass dieser Druck allenfalls im Inneren von großen Planeten wie Jupiter vorhanden ist. Tatsächlich ist es auch möglich durch die Injektion von Elektronen aus Alkalimetallen metallisches Wasser auf der Erde herzustellen. Der Nachweis erfolgt über die zwei „Fingerabdrücke“ einer metallischen Phase, der Plasmonenfrequenz und dem Leitungsband, welche mit optischer Reflexionsspektroskopie und Synchrotron-Photoelektronenspektro-

Dr. Annette Pietzsch  
Dr. Robert Seidel  
Prof. Dr. Alexander Föhlisch  
Helmholtz Zentrum Berlin für Materialien und Energie  
Albert-Einstein-Straße 15, D-12489 Berlin  
Annette.Pietzsch@helmholtz-berlin.de  
Robert.Seidel@helmholtz-berlin.de  
Alexander.Foehlich@helmholtz-berlin.de

skopie ermittelt wurden. Während die Plasmonenfrequenz der goldfarbenen, metallischen „Wasserhaut“ bei etwa 2,7 eV liegt (also im blauen Bereich des sichtbaren Lichts) besitzt das Leitungsband eine Breite von ungefähr 1,1 eV mit einer scharfen Fermikante. Beides zusammen erzeugt einen schönen goldenen Metallglanz [3].

Die demonstrierten Fähigkeiten der Synchrotronspektroskopie erweitern sich zwanglos in die Untersuchung wässriger Lösungen. Hier sind Moleküle, funktionale Komplexe sowie kolloidale Nanopartikel und Grenzflächen von zentraler Bedeutung. Das molekulare Wechselspiel zwischen Wasser als Lösungsmittel hat lokale Aspekte und zugleich eine Reorganisation des Wassers selbst zur Folge. Hier leisten die aufgezeigten synchrotronspektroskopischen Verfahren Einblicke auf allen relevanten Skalen, wobei Edukte und Produkte separat sowie deren zeitliche Entwicklung und Umwandlung zugänglich werden.

## Referenzen

- [1] Johannes Niskanen, Mattis Fondell, Christoph J. Sahle, Sebastian Eckert, Raphael M. Jay, Keith Gilmore, Annette Pietzsch, Marcus Dantz, Xingye Lu, Daniel E. McNally, Thorsten Schmitt, Vinicius Vaz da Cruz, Victor Kimberg, Faris Gel'mukhanov, and Alexander Föhlisch: Compatibility of quantitative X-ray spectroscopy with continuous distribution models of water at ambient conditions, *Proceedings of the National Academy of Sciences* 2019 **116** (10), 4058 - 4063.
- [2] Annette Pietzsch, Johannes Niskanen, Vinicius Vaz da Cruz, Robby Büchner, Sebastian Eckert, Mattis Fondell, Raphael M. Jay, Xingye Lu, Daniel McNally, Thorsten Schmitt, Alexander Föhlisch: Cuts through the manifold of molecular H<sub>2</sub>O potential energy surfaces in liquid water at ambient conditions, *Proceedings of the National Academy of Sciences* 2022 **119** (28), e2118101119.
- [3] Philip E. Mason, H. Christian Schewe, Tillmann Buttersack, Vojtech Kostal, Marco Vitek, Ryan S. McMullen, Hebatallah Ali, Florian Trinter, Chin Lee, Daniel M. Neumark, Stephan Thürmer, Robert Seidel, Bernd Winter, Stephen E. Bradforth, and Pavel Jungwirth: Spectroscopic evidence for a gold-coloured metallic water solution, *Nature* 2021 **595**, 673 - 676.

### Dr. Annette Pietzsch

Dr. Annette Pietzsch forscht mit röntgenspektroskopischen Methoden an molekularen Systemen; diese reichen von freien Molekülen in der Gasphase über Flüssigkeiten und Lösungen bis hin zu interkalierten Molekülen in Schichtsystemen. Sie promovierte 2008 am Deutschen Elektronen Synchrotron und der Universität Hamburg unter der Betreuung von Prof. Wilfried Wurth zum Thema Raumladungseffekte in der Photoelektronenspektroskopie an Freie Elektronen Lasern. Dort sammelte sie erste Erfahrungen in Pilotexperimenten mit hochauflöser Röntgenspektroskopie an Flüssigkeiten. Danach verbrachte sie 4 Jahre als PostDoc am Synchrotron MAX-lab in Lund, Schweden, wo sie zwei Röntgenspektroskopie-Strahlrohre betreute und die dortigen Experimente zu Röntgenspektroskopie an Flüssigkeiten und feuchten Systemen weiter ausbaute. 2012 wechselte sie zum Helmholtz-Zentrum Berlin und ist seit 2020 stellvertretende Abteilungsleiterin der Abteilung PS-ISRR. Hier forscht sie an grundlegenden Eigenschaften von Wasser und Systemen in wässriger Lösung sowohl statisch als auch dynamisch und baut ein Strahlrohr und Experiment mit einem neuartigen hochauflösenden Röntgen-Emissions-Spektrometer auf, welches dediziert molekulare gasförmige und flüssige Proben untersuchen soll.



### Dr. Robert Seidel

Dr. Robert Seidel ist Gruppenleiter in der Abteilung PS-ADLU am Helmholtz-Zentrum Berlin unter der Leitung von Prof. Renke van der Veen. Sein fachlicher Schwerpunkt liegt auf der Röntgen-photoelektronen-spektroskopischen Untersuchung von Flüssigkeiten und Fest-Flüssig-Grenzflächen. Nach Erlangung des Diploms in Physik an der Humboldt-Universität zu Berlin im Jahr 2008, promovierte Robert Seidel 2012 im Bereich Flüssigkeitsspektroskopie am BESSY II Synchrotron und der Technischen Universität Berlin in Physik unter der Betreuung von Dr. Bernd Winter und Prof. Wolfgang Eberhardt. Es folgte ein 2,5-jähriger Postdoc-Aufenthalt in der Gruppe von Prof. Stephen E. Bradforth an der University of Southern California in Los Angeles, bei dem er zeitaufgelöste UV-Spektroskopie an wässrigen Lösungen durchführte. 2014 kehrte er nach Berlin als Postdoc ans HZB zurück, wo er dann von 2017 bis 2022 eine Emmy-Noether Nachwuchsgruppe zur operando-spektroskopischen Untersuchung von Elektrolyt-Elektroden-Grenzflächen leitete.



**Prof. Dr. Alexander Föhlisch**

Prof. Dr. Alexander Föhlisch untersucht die Wechselwirkung von Röntgenlicht mit Materie mit dem Ziel Wirkprinzipien funktionaler Materialien und molekularer Prozesse zu etablieren. Er forscht zu Struktur und Dynamik des Wassers, sowie (photo)chemischen Reaktionsschritten. Seit 2009 leitet er das Institut Methoden und Instrumentierung für Forschung mit Synchrotronstrahlung des Helmholtz-Zentrum Berlin und ist als Professor der Universität Potsdam tätig. Nach dem Studium der Physik an den Universitäten Tübingen, Stony Brook und Hamburg, erfolgte ein Forschungsaufenthalt an der Advanced Light Source des Lawrence Berkeley National Laboratory und die Promotion an der Universität Uppsala, gefolgt von der Habilitation an der Universität Hamburg. Hierbei ist die Faszination für Licht-Materie Wechselwirkung eine Konstante: Diplomarbeit zur Röntgenmikroskopie, Dissertation zur Röntgenspektroskopie, Habilitation zur Ultrakurzzeitphysik. Aktuell wurden mit Unterstützung der Helmholtz Gemeinschaft sowie des European Research Council z. B. das "Uppsala-Berlin joint Laboratory on next generation electron spectroscopy" bei BESSY II aufgebaut, sowie die "Heisenberg-RIXS Anlage für resonante inelastische Röntgenstreuung am Transform-Limit" des European XFEL innerhalb des von ihm initiierten gleichnamigen internationalen Nutzer Konsortiums. Alle Infrastrukturen haben den Anspruch im Nutzerbetrieb für die Forschungsgemeinschaft zu dienen.

**Why to go to the Bunsen meeting**

Bunsen-Tagung 2022 was a very enriching experience for me. After the pandemic years it was really nice to meet such a huge group of people working in vivid areas and getting to know a lot of people in person who's science we have been following. Looking forward to such great networking events and enlightening discussions in the future.

Bunsen-Tagung is always a great opportunity to visit a conference with students of our group of all ages. It's always organized well and gives lots of insight to the latest progress in physical chemistry.

Bunsen-Tagung ist die perfekte Möglichkeit, um besser die Welt der Wissenschaft kennenzulernen. Ich finde es besonders gut und hilfreich für Bachelor, wie ich. Diese besondere Erfahrung zeigt, wie wichtig es ist, begeistert von eigenen Projekten zu sein und wie interessant und hilfreich es ist, eigene Ergebnisse zu präsentieren und Meinungen von anderen ausgebildeten Profis zu hören. Dank solcher Veranstaltungen kann man auch sehr gut Karriereperspektiven erkennen. Und natürlich kann man Lust haben noch mehr zu arbeiten und noch mehr zu forschen.

„The Bunsen-Tagung 2022 in Gießen, in my opinion, was a great success. I experienced great hospitality. There was a lot of fascinating and excellent work displayed. The sight of Gießen and its university was really enjoyable.“

At this year's Bunsen Conference, it once again impressed me how broad and diverse the field of physical chemistry is. At the same time, compared to my last visit, I was able to see that an oral presentation can reach more people than a poster and still lead to interesting discussions.

The 2022 Bunsen-Tagung in Giessen was my first conference in persona and I was very impressed with the well-organized event and the great location. The pleasant social evenings completed the stay quite nicely.

There were two points that impressed me as follows.

1. since Bunsen-Tagung is a very big event with talks on different topics going on at the same time, the conference program is pretty important! Be sure to look into detail. Then you will know which talk or which poster is interesting. We need to target to listen, to communicate, I think.

2. I brought a poster to the meeting, afterwards I found out not be afraid to do an oral, and the speaker should not read to the ppt. If there are some animation effects, it would be better to guide the audience.

I very appreciated the opportunity to participate in this conference, and I do hope I am able to attend it next time giving an oral.

**ZITATBOX****Leonardo da Vinci (1452 - 1519)**

„Geniale Menschen beginnen große Werke, fleißige Menschen vollenden sie.“

„In der Natur ist kein Irrtum, sondern wisse, der Irrtum ist in dir.“

„Wer sich in der Diskussion auf eine Autorität beruft, gebraucht nicht den Verstand, sondern sein Gedächtnis.“

„Wer das Böse nicht verurteilt, lässt zu, dass es geschieht.“

Quelle: <https://gutezitate.com/autor/leonardo-da-vinci>

Karina Morgenstern

# Eisstrukturbildung auf der Nanoskala ohne und mit Fremdstoffen

Wasser hat für den Menschen eine weit größere Bedeutung als die einer chemischen Verbindung mit vielen Anomalien, wie der größten Dichte oberhalb des Schmelzpunkts [1]. Dies zeigt beispielsweise die häufige Verwendung des 'Wassers des Lebens' als Mythen-, Märchen- und Kunstmotiv. In Sibirien glaubte man an die Lebensquelle am Fuße des Weltenbaums, in Babylonien galt Wasser als kostbare Gabe der Götter an ihre Lieblinge und zahlreiche Wassergöttheiten und -geister verkörpern in vielen religiösen Vorstellungen Gewalt und Kraft des Wassers. Dies ist angesichts der 70% Bedeckung des 'blauen Planeten' Erde mit Wasser nicht verwunderlich [1].

Ein Großteil dieses Wassers ist in Schnee und Eis gebunden. In der festen Phase beeinflusst es die Meteorologie und damit unser Klima. Die sehr unterschiedlichen Strukturen (Abb. 1a bis c) hängen einerseits von der Morphologie des Untergrunds, andererseits von den Wetterbedingungen, wie Temperatur und Windstärke, ab, sowohl während der Bildung als auch danach. Morphologisch ähnliche nanoskalige Strukturen sind auf Metalloberflächen durch Variation der Wachstumsbedingungen erzeugbar (Abb. 1 d bis f). In den letzten 25 Jahren ist die Strukturbildung von Eis auf diversen (Metall-)Oberflächen unterschiedlicher Symmetrie umfassend mittels direkter Abbildung durch Rastertunnelmikroskope (RTM) bei kryogenen Temperaturen untersucht worden, um die molekularen Prozesse hinter dieser Eisbildung zu verstehen und damit auch das Verständnis der Eisnukleation auf makroskopischer Ebene zu erweitern [2]. Auf allen Größenskalen werden die unterschiedlichen Eisformen von Wasserstoffbrücken stabilisiert, von denen jedes Wassermolekül bis zu vier ausbilden kann. In größeren Agglomeraten ergeben sich so eine Vielzahl isoenergetischer Strukturen, was die starke Abhängigkeit der Eisstrukturen von ihrer Entstehungsgeschichte erklärt. Aus diesem Grunde ist in jüngerer Zeit die Kinetik der Eisnukleation in den Fokus unserer Forschung gerückt, von der Diffusion einzelner Wassermoleküle über Oberflächen, über die Bildung von Oligomeren bis zu deren Diffusion (Abb. 2) [4].

Anders als bei diesen Modellsystemen, die mit ultrareinem Wasser unter UHV-Bedingungen erzeugt und dann zur Abbildung auf

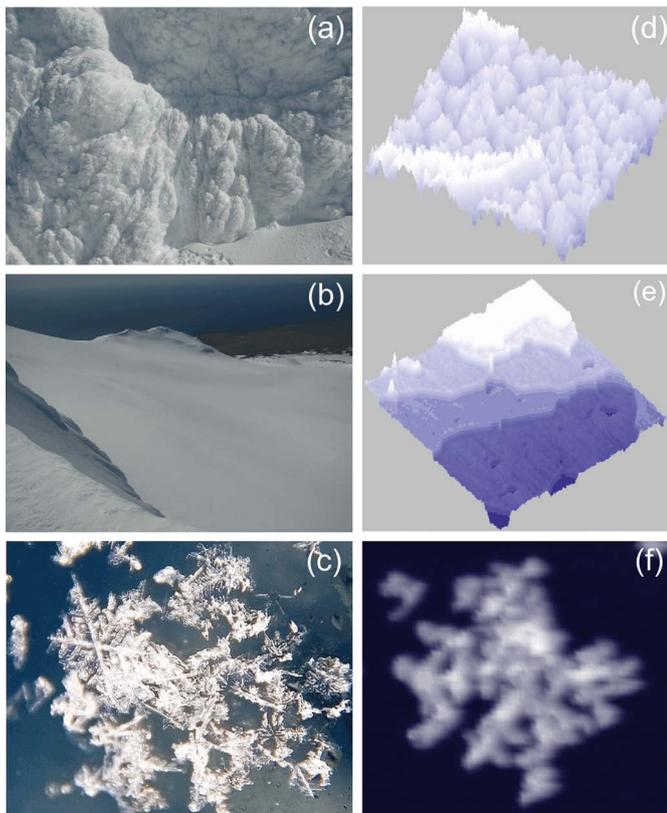


Abb. 1: Makroskala versus Nanoskala: (a-c) Fotos von Eisstrukturen (d-f) RTM Bilder auf Ag(111), adaptiert aus [3]: (d, e) 189 nm x 189 nm (f) 45 nm x 45 nm.

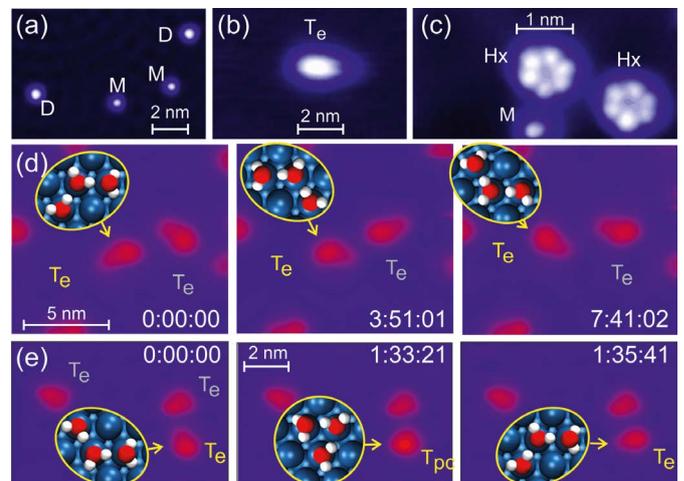


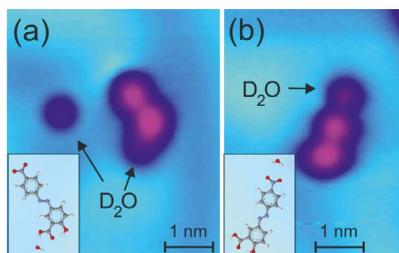
Abb. 2: Oligomere und deren Bewegung, adaptiert aus [4,5]: (a-c) RTM-Bilder mit Monomeren (M), Dimeren (D), Trimer ( $T_e$ ) und Hexameren (H<sub>x</sub>); (d) Bewegung von länglichen Trimeren ( $T_e$ ); (e) Wechsel zwischen länglichem und pseudozyklischem Trimer ( $T_{pc}$ ) mit DFT-berechneten Strukturen; weiss: Wasserstoff, rot: Sauerstoff, blau: Cu; Strukturen auf(a,c-e) Cu(111) (b) Ag(111); Zeit in H:min:s.

Prof. Dr. Karina Morgenstern  
 Lehrstuhl für Physikalische Chemie I  
 Ruhr-Universität Bochum  
 Universitätsstr. 150, D-44801 Bochum  
 karina.morgenstern@rub.de  
<https://www.ruhr-uni-bochum.de/pc1/index.html.de>

unter 10 K eingefroren werden, befinden sich in den Eissystemen der Natur zahlreiche Fremdkörper, die die Wasserstoffbrücken und damit die Strukturbildung beeinflussen. Fremdkörper reichen von elementaren Ionen, beispielsweise gelösten Salzen aus den Ozeanen, über antropogene anorganische und organische Moleküle bis zu mikroskopischer Biomaterie, wie Zellen und Bakterien. Ein Verständnis der Wechselwirkung einzelner Wassermoleküle mit solchen Fremdkörpern ist für eine Vielzahl wasserdominierter Prozesse an (Eis-)Oberflächen wesentlich. Dazu zählen industrielle Prozesse in der Elektrochemie genauso wie Reaktionen auf Eispartikeln in der Atmosphäre und Desolvatisierungsprozesse an biologischen oder industriellen Membranen.

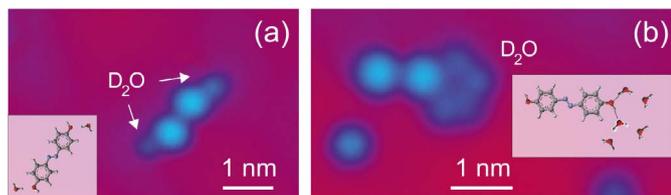
Für ein fundamentales Verständnis des Einflusses von Fremdkörpern auf die Strukturbildung haben wir darum unsere Modellsysteme in jüngster Zeit erweitert und die Eisbildung auf Oberflächen untersucht, die mit elementaren Kationen,  $\text{Na}^{\delta+}$ ,  $\text{Li}^{\delta+}$ ,  $\text{Cs}^{\delta+}$ , oder  $\text{Rb}^{\delta+}$  [6], oder Azobenzolen verschiedener polarer Endgruppen [7, 8] vorbedeckt werden. Durch sukzessive Zugabe einzelner Wassermoleküle wird die Ausbildung der ersten Hydrathülle Schritt für Schritt abgebildet, wodurch das Zusammenspiel der involvierten Wechselwirkungen, Ion/Molekül-Wasser, Wasser-Wasser, Ion/Molekül-Oberfläche und Wasser-Oberfläche bestimmt wird.

Beispielsweise binden einzelne Wassermoleküle zunächst an die Carboxylat- oder Nitrogruppe der Nitrophenylazosalicylsäure, aber nicht an die Hydroxy- oder Azogruppe (Abb. 3). An ähnlichen Endgruppen bilden sich dann bei zunehmender Wassermenge Wasseroligomere,



**Abb. 3:** Anfängliche Hydratierung von 5-(4-Nitrophenylazo)-Salicylsäure, adaptiert aus [7]: (a, b) RTM-Bilder mit strukturellen Modellen in gleicher Orientierung; grau: Kohlenstoff, rot: Sauerstoff, weiß: Wasserstoff, blau: Stickstoff.

wie für ein Wasserhexamer an Dihydroxy-Azobenzol demonstriert (Abb. 4). Dessen Symmetrie unterscheidet sich von der des reinen Wassers (vgl. Abb. 2c). Eine Erweiterung solcher Studien auf weitere Fremdstoffe gewährt über das konkrete fundamentale Verständnis der Eisbildung auch Einblicke in die Wasserstoffbrückenbildung in verschiedensten Umgebungen, wie in der Atmosphäre oder der Astrophysik sowie in fluiden Umgebungen, wie Zellen oder der Elektrochemie, in denen Wasser denselben Wechselwirkungen unterliegt.



**Abb. 4:** Hydratierung von Dihydroxyazobenzol, adaptiert aus [8]: (a, b) RTM-Bilder mit strukturellen Modellen in gleicher Orientierung; Farben wie in Abb. 3.

## Referenzen

- [1] V.F. Petrenko und R.W. Whitworth, *Physics of Ice*, Oxford University Press New York, 1999.
- [2] A. Hodgson und S. Haq, *Surf. Sci. Rep.* **64**, 381 (2009).
- [3] S.-C. Heidorn, C. Bertram, K. Morgenstern, *Chem. Phys. Lett.* **665**, 1 (2016); S.-C. Heidorn, C. Bertram, K. Morgenstern, *J. Phys. Chem. C* **122**, 15304 (2018); S.-C. Heidorn, K. Lucht, C. Bertram, K. Morgenstern, *J. Phys. Chem. B* **122**, 479 (2018).
- [4] A. Michaelides, K. Morgenstern, *Nature Mat.* **6**, 597 (2007); S.-C. Heidorn, C. Bertram, P. Cabrera-Sanfeliu, K. Morgenstern, *ACS Nano* **9**, 3572 (2015); C. Bertram, K. Morgenstern, P. Pedevilla, A. Michaelides, *Nano Lett.* **19**, 3049 (2019); W. Fang, K. Meyer auf der Heide, C. Zaum, A. Michaelides, K. Morgenstern, *Nano Lett.* **22**, 340 (2022).
- [5] A. Michaelides, *Faraday Discuss.* **136**, 287 (2007).
- [6] I. Weber, L. Chenfang, A. Hodgson, K. Morgenstern, *J. Phys. Chem. C* **123**, 6861 (2019).
- [7] K. Lucht, I. Trosien, W. Sander, K. Morgenstern, *Angew. Chem. Int. Ed.* **57**, 16334 (2018); K. Lucht, D. Loose, G. Dyker, K. Morgenstern, *Angew. Chem. Int. Ed.* **57**, 1266 (2018); K. Lucht, K. Morgenstern, *J. Chem. Phys.* **154**, 014701 (2021).
- [8] J. Henzl, K. Boom, K. Morgenstern, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 13341 (2014); J. Henzl, K. Boom, K. Morgenstern, *J. Chem. Phys.* **142**, 101920 (2015).

### Prof. Dr. Karina Morgenstern



Karina Morgenstern ist Inhaberin des Lehrstuhls für Physikalische Chemie I der Ruhr-Universität Bochum. Seit 2018 leitet Sie dort auch die DFG-finanzierte Graduiertenschule zum Thema

„Confinement-Controlled Chemistry“. Sie hat Physik und Informatik an den Universitäten in Bonn und Knoxville, Tennessee, USA studiert. Ihr Physikdiplom erhielt sie 1993 (Forschungszentrum Jülich und Universität Bonn), das Informatikdiplom 1994 (GMD-Forschungszentrum Informationstechnik GMD Sankt Augustin und Universität Bonn). Die Promotion in Oberflächenphysik folgte 1996 (Forschungszentrum Jülich und Universität Bonn), die Habilitation in Experimentalphysik 2002 (Freie Universität Berlin). 2003 erhielt sie die Lehrbefugnis für Experimentalphysik. Von 2005 bis 2021 war sie Professorin für Festkörperphysik (W3) an der Universität Hannover. Ihre Forschung in den Bereichen Oberflächen- und Solvationswissenschaften basiert hauptsächlich auf Realraumabbildungen auf Einzelmolekülebene. Derzeit sind die wichtigsten Unterthemen „Photoinduzierte Oberflächenprozesse“, „Solvationsgesteuerte Reaktionen“ und „Umgrenzungsgesteuerte Chemie“.

Klaus-Martin Moldenhauer

## Wasserplanet Erde

Innerhalb unseres Sonnensystems gehört die Erde zu den so genannten tellurischen Planeten. Diese sonnennahen erdähnlichen Planeten unterscheiden sich von den sonnenfernen, aus leichten Elementen hervorgegangenen Gasplaneten dadurch, dass sie im Wesentlichen aus Mineralen und Gesteinen bestehen. Für die Erde lässt sich ein Schalenbau erkennen, bei der ein schwerer Eisen-Nickel-Kern von der eisen- und magnesiumreichen Asthenosphäre, dem Erdmantel, umhüllt wird, den wiederum die silikatische Erdkruste umschließt [1].

Im gesamten Sonnensystem ist der Steinplanet Erde gegenwärtig der einzige, der über so viel freies Wasser verfügt, dass man zwischen Lithosphäre und Atmosphäre noch eine Hydrosphäre definiert. Es ist vor allem diese Wasserhülle, die dafür verantwortlich ist, dass die Oberfläche der Erde aus dem Weltall betrachtet blau erscheint.

Anders als der Begriff vermuten lässt, kommt das Wasser auf der Erde aber nicht in einer zusammenhängenden Sphäre vor, sondern ist auf verschiedene Reservoirs verteilt. So befindet sich Wasser in der Erdkruste, auf der Erdoberfläche und in der Atmosphäre. Diese Reservoirs unterscheiden sich nicht nur durch die in ihnen gespeicherten Mengen, sondern auch durch jeweils spezifische Verweilzeiten des Wassers. Sieht man von den in Organismen oder Kristallen gebundenen Wassermolekülen einmal ab, so beläuft sich das bewegliche irdische Wasser nach aktuellen Schätzungen auf ein Gesamtvolumen von 1.385.984.610 km<sup>3</sup>. Von dieser gewaltigen Menge befinden sich allein 1.338.000.000 km<sup>3</sup> in den Ozeanbecken [2].

Da wir uns solche großen Zahlen in der Regel sehr schlecht vorstellen können, soll ein Vergleich mit bekannten Alltagsgefäßen helfen, die Relationen der Wassermengen in den verschiedenen Reservoirs zu veranschaulichen. Würde man die irdischen Wasservorräte dem Volumen eines 10 Liter fassenden Eimers gleichsetzen, so wären 9,65 Liter davon das Salzwasser der Weltmeere und nicht trinkbar. Die Menge des verbleibenden Süßwassers auf den Festländern und in der Atmosphäre entspräche in diesem Beispiel mit 0,35 l in etwa einer Dose Bier. Würde man nun deren Inhalt sparsam auf zwei Gläser Kölsch verteilen, so würden 0,17 l in dem einen Glas den irdischen Grundwasservorräten entsprechen. Davon ist jedoch etwas mehr als die Hälfte sogenanntes tiefes Grundwasser, an das man nur mit sehr großem technischen Aufwand gelangen

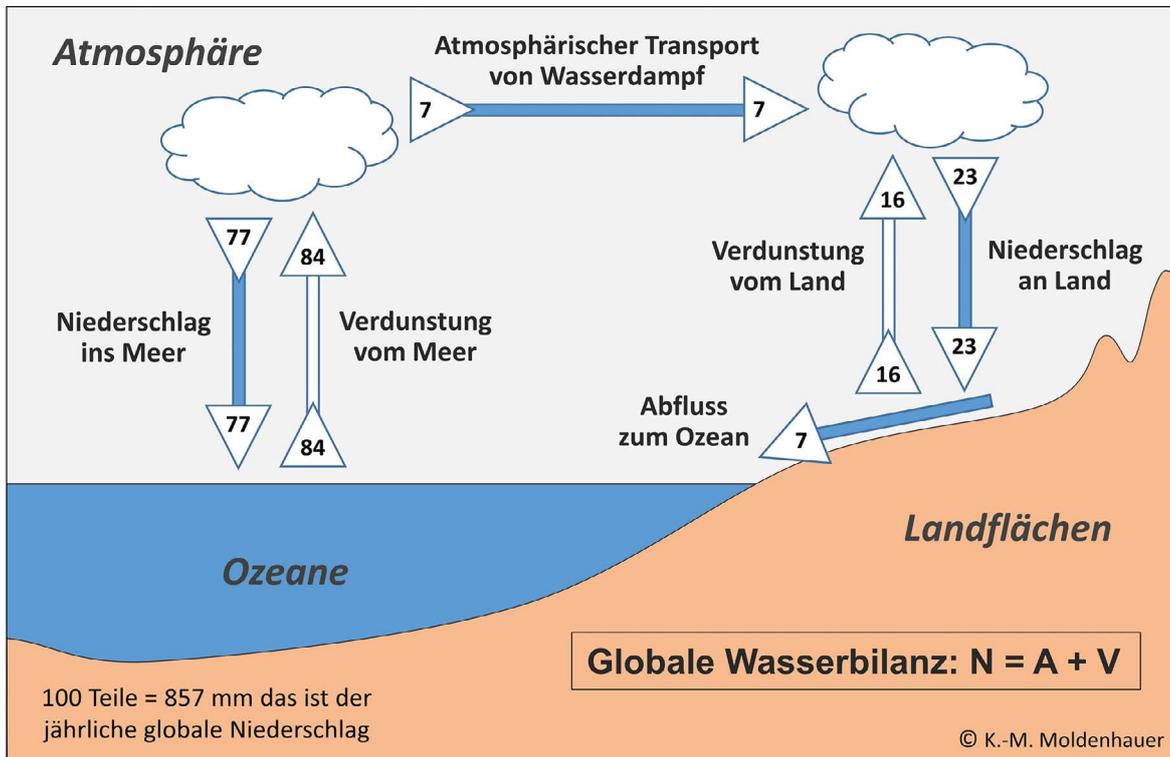
kann [3]. Die 0,17 l, die sich im anderen Glas befinden, spiegeln das Eis der Polargebiete sowie das in Gebirgsgletschern und in Dauerfrostböden gebundene Wasser wieder. Käme es infolge eines globalen Temperaturanstiegs zum vollständigen Abschmelzen des dort gefrorenen Wassers, würde das den Meeresspiegel weltweit um etwa 66 m ansteigen lassen.

Der verbleibende Rest aus der Bierdose füllt mit rund 0,01 l in etwa einen Fingerhut. Diese Menge entspräche in unserem Gedankenexperiment dem Süßwasser, das sich in Oberflächengewässern wie Flüssen und Seen befindet. Die im Boden und in der Atmosphäre enthaltenen Wassermengen sind gemessen am gesamten irdischen Wasservolumen mit jeweils nur rund 13.000 km<sup>3</sup> schließlich so verschwindend gering, dass sie in unserem Beispiel nicht mehr überzeugend darstellbar sind. Aber in der Realität spielen sie natürlich eine große Rolle für die Pflanzenwelt oder die klimatischen Abläufe in der Atmosphäre.

Insgesamt nehmen von den 10 Litern aus unserem Eimer lediglich 0,08 l am globalen Wasserkreislauf teil. Das ist das Mengenäquivalent eines knapp zur Hälfte gefüllten Schnapsgläschens. Angetrieben von der Strahlungsenergie der Sonne wird dieses verhältnismäßig geringe Wasservolumen jedoch in einem permanenten Kreislauf aus Niederschlag, Verdunstung und Abfluss umgesetzt. Wie in Abbildung 1 verdeutlicht, kann dabei in einen globalen, über den Weltmeeren stattfindenden Wasserkreislauf und einen regionalen auf den Landflächen unterschieden werden. Durch lateralen atmosphärischen Wasserdampftransport, den Niederschlägen über dem Land und den Abfluss zum Meer stehen beide Teilkreisläufe miteinander im Austausch. Da auf der Erde kein Wasser verloren geht, lässt sich die globale Wasserhaushaltsgleichung bei längerfristiger Betrachtung zu  $N = A + V$  formulieren. Hierin steht N für den Niederschlag, V für die Verdunstung und A für den Abfluss.

Zwar werden die größten Wassermengen im globalen Kreislauf direkt zwischen der Atmosphäre und den Ozeanen ausgetauscht, jedoch ist das auf dem Festland abfließende Wasser, das in Form von Bächen und Flüssen schließlich ins Meer strömt, aufgrund seiner kinetischen Energie in der Lage, Arbeit in Form von Erosion zu verrichten. Sobald ein Bereich der Erdkruste durch vulkanische oder tektonische Prozesse über den Meeresspiegel hinausgehoben wird, unterliegt er der Verwitterung und Abtragung. Aber neben der geomorphologischen Wirkung von Wind und Eis sind es vor allem die fluvialen Erosionsprozesse, die dafür verantwortlich sind, dass die Erdoberfläche eine fortwährende Umgestaltung erfährt. Auch dies unterscheidet die Erde von ihren planetarischen Nachbarn in unserem Sonnensystem.

PD Dr. Klaus-Martin Moldenhauer  
LS Geomorphologie  
Universität Bayreuth  
Universitätsstr. 30, 95447 Bayreuth  
moldenhauer@uni-bayreuth.de



**Abb. 1:** Vereinfachtes Schema des globalen Wasserkreislaufs (nach [4], verändert). Der global gemittelte Niederschlag beläuft sich auf 857 l/m<sup>2</sup> (= mm Niederschlagshöhe). Davon fallen 77% über den Ozeanen, aus denen 84% verdunsten. Mit dem atmosphärischen Horizontaltransport gelangen 7% davon über die Landflächen. Gemeinsam mit der dort verdunsteten Wassermenge von 16% führt dies zu Niederschlägen von 23%, von denen 7% zurück zum Ozean fließen und so den irdischen Wasserkreislauf zu 100% schließen.

**Referenzen**

- [1] Bahlburg, H.; Breitzkreuz, C. Grundlagen der Geologie. 4. Aufl. 2012, Elsevier.
- [2] Baumgartner, A.; Liebscher, H.-J. Lehrbuch der Hydrologie - Bd. 1. 2. Aufl. 1996, Borntraeger.
- [3] Hölting, B.; Coldewey, W. Hydrogeologie. 7. Aufl. 2008, Spektrum.
- [4] Zepp, H. Geomorphologie. 7. Aufl. 2017, UTB.

**PD Dr. rer. nat. habil.  
Klaus-Martin Moldenhauer**

Klaus-Martin Moldenhauer ist Geowissenschaftler. Er hat an der Universität Frankfurt am Main Geologie, Geographie und Botanik studiert und über den Sedimenthaushalt von kleinen Fließgewässern im bewaldeten Mittelgebirge promoviert. In seiner Habilitationsschrift beschäftigte er sich mit dem Problemfeld der Hydrologischen Degradation in der Savanne Westafrikas. Heute forscht und lehrt er als Geomorphologe an der Universität Bayreuth.



**ZITATBOX**

**Mehmet Murat İldan (1965 - )**

*„Für jeden Wassertropfen, den Sie verschwenden, müssen Sie wissen, dass irgendwo auf der Erde jemand verzweifelt nach einem Wassertropfen sucht!“*

**Albert Szent-Györgyi (1893 - 1986)**

*„Wasser ist die Materie und Matrix des Lebens, Mutter und Medium. Ohne Wasser gibt es kein Leben.“*

**Leonardo da Vinci (1452 - 1519)**

*„Wasser ist die treibende Kraft der gesamten Natur.“*

**Mahatma Gandhi (1869 - 1948)**

*„Die Erde, die Luft, das Land und das Wasser sind kein Erbe unserer Väter, sondern Leihgaben unserer Kinder. Sie müssen ihnen also zumindest so übergeben werden, wie sie uns übergeben wurden.“*

Quelle: <https://www.careelite.de/wasser-zitate-wasserknappheit-sprueche/>

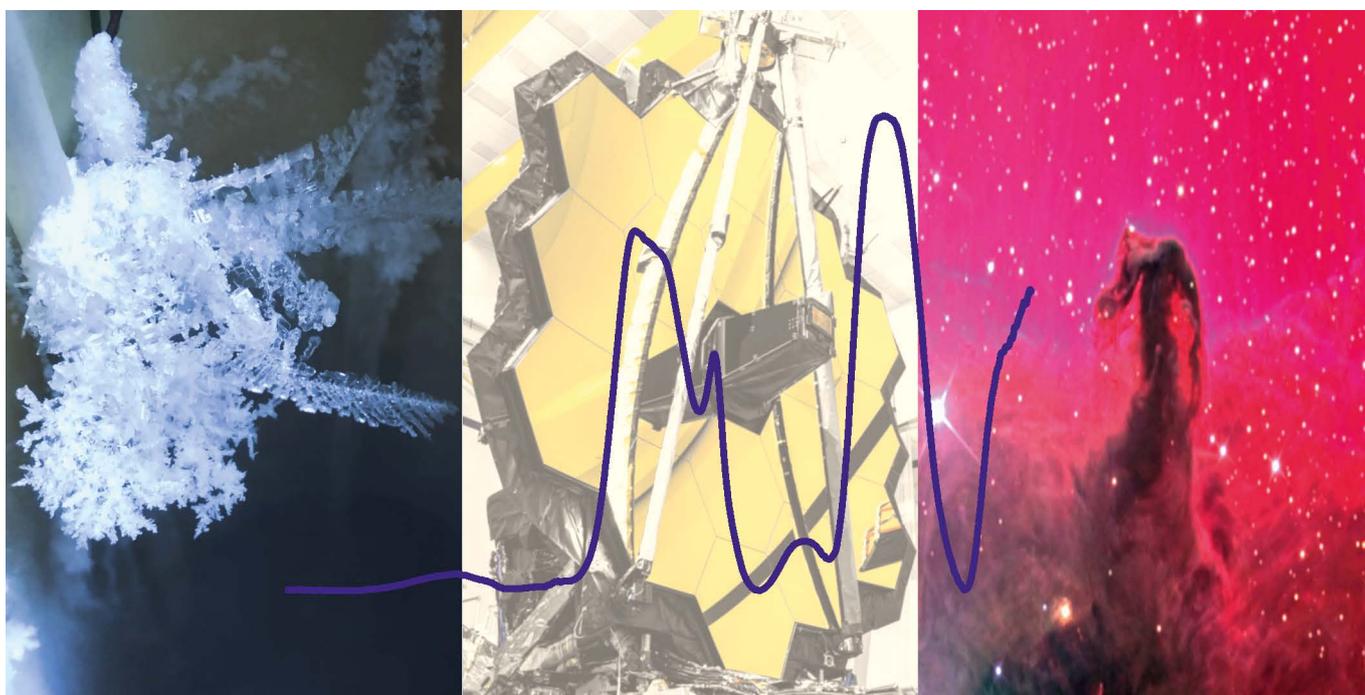
Christina M. Tonauer, Thomas Loerting

## Water

### Water, water, everywhere

Water is the molecule of life, without which metabolism or reproduction is impossible. To the chemist water is the most widely used solvent, which may even be turned from a polar to an apolar solvent in its supercritical state [1]. Water is found almost everywhere, either as a gas in the atmosphere, as a liquid in the hydrosphere or as one of its many solid forms in the cryosphere. While two thirds of Earth's surface is covered by oceans, water in Earth's interior exists in the form of two solid high-pressure ices, called ice VI and ice VII. Bizarrely, these phases are stable at temperatures up to 600 °C - without melting - and need pressures of at least 10 kbar to form. Via tectonic processes such ices emerge to Earth's surface as diamond inclusions and may hence be termed minerals [2]. In space, water is even more ubiquitous, where most of the water

in our universe is found as an amorphous solid in molecular interstellar dust clouds. Siliceous or carbonaceous particles are covered in a non-crystalline, highly porous form of ice termed amorphous solid water (ASW) [3]. These dust clouds, such as the Horsehead Nebula (cf. Figure, right) are the starting point for the evolution of both molecules themselves and solar systems. An understanding of the chemical reactions taking place for molecules trapped in the micropores of ASW under the influence of heavy radiation (UV-irradiation, X-ray, electron bombardment) is still lacking largely, in spite of its importance. For example, the answer to the question as to why we find naturally L-, but not D-amino acids might reside in the micropores of ASW. Very recently the James Webb Space Telescope (JWST, cf. Figure, middle) has reached its final position and has started to rewrite astrochemistry based on pictures that make use of near



**Figure:** Left: Ice crystals grown in our laboratory experiments on near-infrared spectra of crystalline and amorphous H<sub>2</sub>O ices. Middle: The James Webb Space Telescope overlaid with the near infrared spectrum of ice IX (blue line) from our work in ref. [4]. Right: The Horsehead Nebula (Orion constellation) as an example for an interstellar dust cloud, where water exists as porous amorphous solid water (ASW). Picture credits: Left: Christina M. Tonauer. Middle: NASA/Chris Gunn (CC.BY.2.0). Right: Ken Crawford (CC.BY.3.0). Pictures (Middle, Right) were cropped and the contrast was altered.

Christina M. Tonauer, MSc & Prof. Dr. Thomas Loerting  
 Institut für Physikalische Chemie  
 Universität Innsbruck  
 Innrain 52c, 6020 Innsbruck, Österreich  
 thomas.loerting@uibk.ac.at  
<https://www.loerting.at/>

infrared (NIR) light. Part of its mission will also be to explore icy bodies in space. In our lab we have made 20 different types of crystalline and amorphous ices and collected their NIR spectra to support this mission and to allow for ice phase identification [4, 5]. The Figure shows as an example the NIR spectrum of ice IX, which might be present in icy moons of Jupiter.

### Ice polymorphism

H<sub>2</sub>O seems like a simple molecule. One might think that all secrets of a substance of such importance have been revealed through research. Yet, spectacular properties of water keep being discovered. In the last 25 years we have witnessed the era of ice polymorphism, in which ices XII - XX have been discovered [6]. For instance ice XVIII was reported in 2019, which is a form of ice that shows superionic properties [7]. In metals the high electric conductivity is caused by an electron gas, i.e., electrons that are delocalized in the lattice of metal cations. In superionic ice the hydrogen atoms are delocalized and float around freely in the lattice of oxygen atoms. That is, the molecular nature of water breaks down, only the stoichiometry of H<sub>2</sub>O is retained. This is only possible at extremes of temperature and pressure, where typically several thousand °C and Mbar of pressure are required to reach the superionic state. At milder temperatures, but still in the Mbar regime, the hydrogen atoms stop floating around and are localized exactly at the midpoint between two oxygen atoms. This form of ice is known as ice X and can be called an atomic ice crystal, which might be present in the interior of the ice giants Uranus and Neptune [8]. In the very rich kbar pressure regime ice forms a large range of polymorphs, all of which are molecular in nature. That is, they form a hydrogen bond network, where each water molecule is tetrahedrally surrounded by four water molecules – a motif known as the Walrafen pentamer. Different ice phases differ in terms of their oxygen atom network, where not only six-membered rings (such as in common hexagonal ice, cf. Figure, left), but also smaller and larger rings of sizes 4 to 12 are known [8]. In some cases even ring threading, similar to the situation in the Olympic rings is known [8]. Currently, 13 such ice polymorphs are known in this regime, where the first ones, ices II and III, were discovered by Gustav Tammann in Göttingen and Percy Bridgman in Harvard about 120 years ago. Ice XIX was only discovered in 2018 in our own research group [9], and its crystal structure was reported simultaneously by a research group in Tokyo [10] and again by our research group in 2021 [11]. In terms of its oxygen atom network ice XIX is almost exactly identical to ice VI and ice XV. The difference between these ices relates to the subnetwork of hydrogen atoms, which is fully disordered in ice VI and partly ordered in ices XV and XIX, such that the latter two carry anti-ferroelectric properties. In a recent computational study about 50 different ice polymorphs have been suggested [12], i.e., we are experimentally less than halfway.

### Anomalous liquid water: a tale of two liquids

In the liquid state, particularly in the supercooled liquid state, water is even more fascinating, and probably even less well understood than ice polymorphs. More than 70 anomalies,

distinguishing water from almost every other substance, have been collected. They can be grouped into phase anomalies (see paragraph above), thermodynamic anomalies, dynamic anomalies and density anomalies, where the density maximum at 4 °C is probably the most appreciated anomaly of water. Interestingly, thermodynamic response functions such as the isobaric heat capacity seem to diverge near a temperature of -50 °C upon cooling. One possibility to explain this is a two-liquid model of water, an idea that was first brought up by Wilhelm C. Röntgen in the late 19<sup>th</sup> century. In this model the single component substance H<sub>2</sub>O can spontaneously decompose into two distinct liquids, both of composition H<sub>2</sub>O. These liquids are then distinguished by means of their mass density, where a low- and a high-density liquid of densities 0.92 g/ml and 1.15 g/ml exist [13]. Ambient temperature water is then regarded as a mixture composed of two thirds of the low- and one third of the high-density liquid. At room temperature these two liquids experience density fluctuations that are so fast that H<sub>2</sub>O is not separable. It is called “supercritical” by some researchers then, where this refers to a second critical point that is hard to verify experimentally. Some experiments have provided hints for this second critical point to be located at -50 °C and at slightly elevated pressures [14]. Only below -50 °C the fluctuations mixing the two liquids are slow enough so that a spontaneous phase separation into two liquids, with a clear phase boundary between the two is possible. This resembles the process of separating oil and water in the separatory funnel in an organic chemistry lab. The only difference is that H<sub>2</sub>O is a one-component system that separates into two liquids, whereas oil/water is a two-component system that separates into two liquids. In our research group we have devoted a few years of experiments to find experimental ways how to prepare and how to characterize these two liquids. Our best way is to produce two distinct types of amorphous ice first and then heat them beyond their glass transition temperatures located at -137 °C for the low-density liquid and at -157 °C for the high-density liquid [15]. Above this temperature the amorphous solid turns into a liquid that is even more viscous than honey and called “ultraviscous” and “deeply supercooled”. The observation of (pure) liquid water in its bulk state at -157 °C in fact represents a world record for the observation of water in its liquid form [15]. Previously, it was thought that supercooling of water, without crystallization occurring, is only possible down to temperatures of -38 °C at ambient pressure and -90 °C at elevated pressures, where the homogeneous nucleation temperature limits its existence. This homogeneous nucleation limit is bypassed in our experiments either by hyperquenching [16] or by pressure-amorphization of ice [17]. Both techniques lead to non-crystalline (solid) ice at liquid nitrogen temperature, which upon heating slowly get less viscous. Both the low- and the high-density liquid ultimately do crystallize upon continued heating at the cold-crystallization temperature. Yet, we have identified a window of about 20 °C broadness, in which the ultraviscous low- and high-density liquids can be kept stable for hours or even weeks [15]. Generations of chemists have studied water as a solvent at room temperature, filling textbooks with chemical reactions in aqueous solution. It is now of great interest how chemical reactions differ in these two types of liquid water – a research field called “cryo-chemistry”, which is mostly unexplored territory. Most definitely, water will also reveal more of its surprising properties in future and will keep exciting us.

## References

- [1] Stanley, H. Eugene (1987). Introduction to phase transitions and critical phenomena. New York: Oxford University Press. ISBN 0-19-505316-8
- [2] O. Tschauer et al.: Ice-VII inclusions in diamonds: Evidence for aqueous fluid in Earth's deep mantle. *Science* 2018 **359**, 1136–1139.
- [3] Christian Mitterdorfer, Marion Bauer, Tristan G. A. Youngs, Daniel T. Bowron, Catherine R. Hill, Helen J. Fraser, John L. Finney, Thomas Loerting; Small-angle neutron scattering study of micropore collapse in amorphous solid water. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2014 **16**, 16013–16020.
- [4] Christina Tonauer et al.: Near Infrared Spectra of High-Density Crystalline H<sub>2</sub>O Ices II, IV, V, VI, IX & XII., *J. Phys. Chem. A* 2021 **125**, 1062-1068.
- [5] Aigerim Karina et al.: Infrared Spectroscopy on Equilibrated High-Density Amorphous Ice, *J. Phys. Chem. Lett.* 2022 **34**, 7965-7971.
- [6] Thomas Loerting, Violeta Fuentes Landete, Christina M. Tonauer, Tobias M. Gasser; Open questions on the structure of crystalline water ices. *Commun. Chem.* 2020 **3**, 109.
- [7] Millot, M. et al. Nanosecond X-ray diffraction of shock-compressed superionic water ice. *Nature* 2019 **569**, 251–255.
- [8] Petrenko, V. F. & Whitworth, R. W. Physics of Ice. (Oxford University Press, 1999)
- [9] Tobias M. Gasser, Alexander V. Thoeny, Lucie J. Plaga, Karsten W. Köster, Martin Etter, Roland Böhmer, Thomas Loerting; Experiments indicating a second hydrogen ordered phase of ice VI. *Chem. Sci.* 2018 **9**, 4224 - 4234.
- [10] Yamane, R.; Komatsu, K.; Gouchi, J.; Uwatoko, Y.; Machida, S.; Hattori, T.; Ito, H.; Kagi, H. Experimental evidence for the existence of a second partially-ordered phase of ice VI. *Nature Commun.* 2021 **12**, 1129.
- [11] Tobias M. Gasser, Alexander V. Thoeny, A. Dominic Fortes, Thomas Loerting; Structural characterization of ice XIX as the second polymorph related to ice VI. *Nature Commun.* 2021 **12**, 1128.
- [12] Engel, E. A., Anelli, A., Ceriotti, M., Pickard, C. J. & Needs, R. J. Mapping uncharted territory in ice from zeolite networks to ice structures. *Nature Commun.* 2018 **9**, 2173.
- [13] Paola Gallo, Katrin Amann-Winkel, C. Austen Angell, Mikhail Anisimov, Frédéric Caupin, Charusita Chakravarty, Erik Lascaris, Thomas Loerting, Athanassios Panagiotopoulos, John Russo, Jonas A. Sellberg, H. Eugene Stanley, Hajime Tanaka, Carlos Vega De Las Heras, Limei Xu, Lars Pettersson; Water: a Tale of Two Liquids. *Chem. Rev.* 2016 **116**, 7463–7500.
- [14] Osamu Mishima, Liquid-Liquid Critical Point in Heavy Water, *Phys. Rev. Lett.* 2000 **85**, 334.
- [15] Katrin Amann-Winkel, Catalin Gainaru, Philip H. Handle, Markus Seidl, Helge Nelson, Roland Böhmer, Thomas Loerting; Water's second glass transition. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2013 **110**, 17720–17725.
- [16] Ingrid Kohl, Luis Bachmann, Erwin Mayer, Andreas Hallbrucker, Thomas Loerting; Liquid-like relaxation in hyperquenched water at < 140 K. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2005 **7**, 3210–3220.
- [17] Thomas Loerting, Christoph Salzmann, Ingrid Kohl, Erwin Mayer, Andreas Hallbrucker; A second distinct structural "state" of high-density amorphous ice at 77 K and 1 bar. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2001 **3**, 5355–5357.

**Christina Maria Tonauer, Msc.**

Christina Maria Tonauer (\*1993) ist Doktorandin in der Gruppe von Thomas Loerting, Universität Innsbruck. In ihrem von der Österr. Akademie der Wissenschaften (ÖAW) finanzierten DOC-Projekt beschäftigt sie sich u. a. mit Nahinfrarot-Spektroskopie verschiedener amorpher und kristalliner Eisformen. In einem Projekt im Rahmen des Centers for Molecular Water Sciences (CMWS) arbeitet sie in Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Melanie Schnell am DESY in Hamburg an einem Verständnis der photochemischen Prozesse in amorphen Eisformen. 2022 wurde sie mit dem Agnes-Pockels Dissertationspreis der Bunsen-Gesellschaft ausgezeichnet.

**Prof. Dr. Thomas Loerting**

Thomas Loerting (\*1973) studierte und promovierte an der Universität Innsbruck und ist ebendort seit 2008 Professor für Physikalische Chemie. Hauptforschungsgebiete sind Wasser und Eis sowie wässrige Lösungen und Clathrat-Hydrate unter extremen Bedingungen. Er absolvierte Auslandsaufenthalte im Labor des Nobelpreisträgers Mario J. Molina am M.I.T. (2001-2003) sowie von Roland Böhmer an der TU Dortmund (2014). Seine Forschungen wurden unter anderem mit dem Bessel-Preis der Alexander von Humboldt Stiftung, dem Nernst Haber Bodensteinpreis der Bunsen-Gesellschaft sowie dem Starting Grant des Europäischen Forschungsrats ERC ausgezeichnet.



Jannes Grybat, Antonia Kallage

# Entsalzen von Wasser: Eine Zukunftsaufgabe für die Menschheit

## 1 Einleitung

Wasser ist auf der Erde eine kritische Ressource. Die Reserven der Erde belaufen sich auf 1,4 Trillionen Kubikmeter Wasser, von denen gerade einmal 2,5 % Süßwasser und nur 0,3 % zugänglich für den Menschen sind. Bei steigender Bevölkerung, steigendem Konsum und dementsprechend steigender Nachfrage an Wasser reichen diese 0,3 % bald nicht mehr aus [1]. Tatsächlich haben schon heute eine Milliarde Menschen keinen Zugang zu sauberem Trinkwasser und fast vier Millionen Menschen sterben pro Jahr aufgrund von Wassermangel [2]. Bis 2030 sollen bis zu 50 % der Menschen von Wasserknappheit betroffen sein [3]. Abhilfe könnte hier die Entsalzung von Meerwasser schaffen, die sowohl von biologischer als auch wirtschaftlicher, bzw. industrieller Bedeutung ist. Das in Fülle auf der Erde verfügbare Meerwasser ist für Menschen und die meisten anderen Lebewesen weitestgehend unverträglich. Abgesehen vom Trinkwasser wird entsalztes Wasser aber auch in großen Mengen für diverse Industrieprozesse genutzt [4].

Die Meerwasserentsalzung eröffnet die Möglichkeit, auf die größten Wasserreserven der Erde zurückzugreifen und diese durch verschiedene Verfahren für die Bevölkerung nutzbar zu machen. Schon heute sind knapp 300 Millionen Menschen von Wasserentsalzungsanlagen abhängig, deren Zahl sich durch die zuspitzende Wasserknappheit in der Zukunft in jedem Fall steigern wird [2].

## 2 Arten von Wasserentsalzung

Die Möglichkeiten zur Wasserentsalzung lassen sich in thermische und mechanisch-membranbasierte Verfahren aufteilen. Thermische Verfahren nutzen den Effekt des Verdampfens von Meerwasser, während mechanisch-membranbasierte Verfahren sich poröse Membranen und Elektroden zunutze machen, um ein salzfreies Produkt zu erhalten. Mit einer Häufigkeit von 64% ist die Umkehrosmose (RO) das bisweilen am häufigsten eingesetzte Verfahren (Abbildung 1) [5].

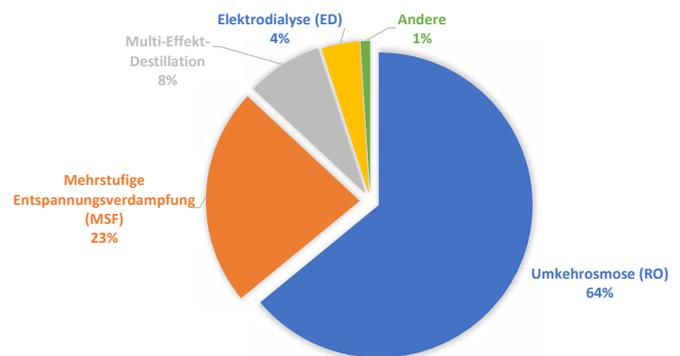


Abb. 1: Darstellung der Häufigkeit der verschiedenen Verfahren (2019), nach [5].

### 2.1 Umkehrosmose

Beim membran-mechanischen Verfahren der Umkehrosmose (RO) ist eine Kammer mit salzhaltigem Wasser durch eine spezielle Membran von einer weiteren Kammer mit reinem Wasser getrennt. Während des gewöhnlichen Vorgangs der Osmose würden die Moleküle des reinen Wassers nun in die Kammer des Konzentrats diffundieren. Stattdessen erreicht das Einstellen eines bestimmten osmotischen Druckes auf die Kammer des Konzentrats eine Diffusion der Wassermoleküle in die Kammer des reinen Wassers, sodass das Konzentrat an Wasser verarmt und in der anderen Kammer ein gereinigtes Produkt entnommen werden kann [6].

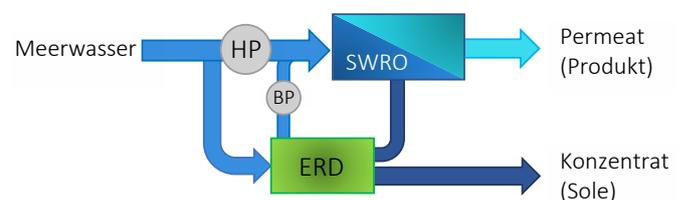


Abb. 2: Schema einer einfachen Meerwasser-Umkehrosmose-Anlage, nach [7].

In der Industrie wird das Meerwasser in einen Kreislauf eingespeist, in dem es mittels Hochdruck- (HP) und Boosterpumpen (BP) abwechselnd durch eine Membran, an der die Meerwasser-Umkehrosmose (SWRO) stattfindet, und einen Drucktauscher (ERD) geleitet wird, hinter denen Permeat bzw. Konzentrat entnommen werden können (Abbildung 2) [7].

Der Energieverbrauch einer gesamten RO-Anlage ist stark von der eingesetzten Membran-Technologie, dem Salzgehalt und der gewünschten Rückgewinnung des reinen Wassers abhängig, konnte jedoch zwischen 1972 und 2016 um beinahe 75 % reduziert werden (Abbildung 3) [7].



Abb. 3: Energieverbrauch der Meerwasser-Umkehrosiose über die Jahre, nach [7].

Ein Vorteil der RO sind deshalb die stetig sinkenden Betriebskosten, die sich momentan noch durchschnittlich gestalten. Außerdem sind RO-Anlagen äußerst modular und können ausschließlich mit elektrischer Energie betrieben werden, sind also sehr adaptiv für erneuerbare Energien. Mit einer durchschnittlichen Produktionsrate von bis zu 320 000 m<sup>3</sup> an entsalztem Wasser pro Tag ist die Osmose heute ein sehr ertragreiches Verfahren [8].

In der Umkehrosiose sind die Korrosion und das Bio-Fouling der eingesetzten Membranen eine große Hürde, die die Laufzeit der Membranen reduzieren und dadurch hohe Kosten hervorrufen können. Das Fouling kann einsetzen, wenn die im Meerwasser gelösten Mikroorganismen und organische Materie einen Biofilm bilden, der langfristig die Durchflussmenge und Lebenszeit der Membran verringert. Um den reduzierten Fluss zu kompensieren, muss der externe Druck auf die Lösung erhöht werden, was einen erhöhten Energieverbrauch und damit höhere Betriebskosten für die Anlage nach sich zieht. Um die Membran vor dem Fouling zu schützen, kann das Meerwasser vor der Einspeisung in die Membraneinheiten desinfiziert werden. Hier ist jedoch die Anfälligkeit der selektiven Polyamid-Schicht der Membran gegenüber stark oxidierenden Spezies sehr problematisch. Die Schicht ist sehr empfindlich für Reaktionen mit chlorhaltigen Verbindungen, welche grundlegende strukturelle Veränderungen und damit einen Verfall der strukturellen Integrität bewirken können [7].

## 2.2 Elektrodialyse

Das Prinzip der Elektrodialyse (ED) ist es, ionische Bestandteile einer wässrigen Lösung durch den Einsatz ionenselektiver Membranen von nicht-ionischen Teilchen zu trennen [9].

Eine ED-Einheit besteht aus nebeneinander zwischen Anode und Kathode angeordneten Zellen, in denen die Ionen der Rohlösung durch abwechselnd gestaffelte Anionen- und Kationenaustauscher-Membranen angezogen werden und dadurch alternierend in den Zellen verarmen und angereichert werden. In den ionenarmen Zellen kann dann die entsalzene Lösung entnommen werden (Abbildung 4) [9].

Vorteile der ED stellen die vielfältigen Anwendungsmöglichkeiten, der geringe Energieverbrauch zwischen 1 und 12 kWh/m<sup>3</sup>

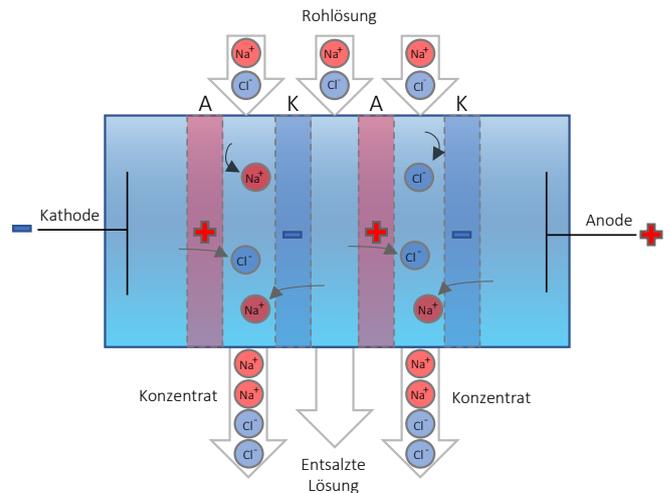


Abb. 4: Schematische Darstellung einer Elektrodialyse-Einheit, nach [9].

und die relativ hohen durchschnittlichen Wassererträge des Verfahrens von bis zu 145 000 m<sup>3</sup> pro Tag und Anlage dar. Außerdem befindet sich die ED verhältnismäßig im tieferen Preissegment. Zwar ist die ED prinzipiell nicht auf eine chemische Vorbehandlung des ihr zugeführten Wassers angewiesen, doch auch hier kann eine zu hohe Belastung an ionisch-organischem Material im Wasser das Leistungspotenzial der Membranen verringern. Die ED befindet sich allerdings insgesamt noch eher in der Entwicklungsphase als die Umkehrosiose, da sie nur ungefähr 4 % der gesamten Wasserentsalzungsanlagen ausmacht und ansonsten eher auf Labor-Niveau verwendet wird [5, 8].

## 2.3 Mehrstufige Entspannungsverdampfung

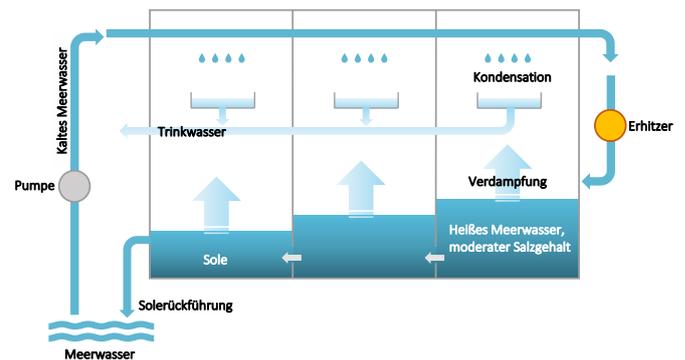


Abb. 5: Prinzip der mehrstufigen Entspannungsverdampfung, nach [10].

Eine Möglichkeit zur thermischen Wasserentsalzung stellt die mehrstufige Entspannungsverdampfung (MSF) (Abbildung 5) dar. Das Meerwasser wird durch die Kammern in einen Erhitzer geleitet, der es auf eine Temperatur von 115 °C erhitzt. Nun wird das Wasser in den Kammern durch Evakuieren verdampft und kondensiert in reiner Form an den kalten Wasserleitungen, wo es separat aufgefangen werden kann. In den folgenden Kammern wird dieser Vorgang wiederholt, bis die resultierende Sole in das Meer abgeführt oder erneut in den Kreislauf eingespeist wird [10, 11].

Im weltweiten Durchschnitt liegt der Ertrag an entsalztem Wasser bei der MSF zurzeit zwischen 50 000 und 70 000 m<sup>3</sup> pro Tag. Im Laufe der Zeit können die Rohre, durch die das Wasser geleitet wird, korrodieren und müssen ausgetauscht werden. Während solcher Wartungen muss dann allerdings die gesamte Entsalzungsanlage heruntergefahren werden. Außerdem ist die MSF eine sehr teure Methode, trinkbares Wasser herzustellen, da vorwiegend fossile Brennstoffe genutzt werden, um die für die Erhitzung benötigten Temperaturen zu erreichen. Obwohl durch Wärmerückgewinnung ein Großteil der benötigten Energie im System verbleibt, werden trotzdem 14 - 25 kWh/m<sup>3</sup> Energie verbraucht [5, 8, 11].

#### 2.4 Wasserentsalzung in der Zukunft

Die Deutsche MeerwasserEntsalzung (DME) GmbH hat einige Verfahren zur Meerwasserentsalzung vorgestellt, die in Zukunft durch Einsparung von Energie und Material von Vorteil sein könnten [12].

Bei der Membran-Destillation (MD) geht es hauptsächlich darum, dass Wasserdampf durch eine hydrophobe mikroporöse Membran transportiert wird. Aufgrund des Partialdruckunterschieds zwischen einer flüssigen Oberfläche und einem Luft- oder Gasstrom wird das Meerwasser unterhalb seines Siedepunktes verdampft. Die eingesetzte Membran trennt dann das flüssige Salzwasser vom salzfreien Wasserdampf und verhindert den Weitertransport des flüssigen Wassers. Der Wasserdampf wird dann in einer weiteren Kammer wieder kondensiert und kann so als Trinkwasser genutzt werden. Die häufig parallele Anordnung mehrerer Membranen lässt mehrstufige Prozesse im Verlauf der MD zu. So kann zum Beispiel auf einer Stufe der erzeugte Dampf kondensiert und die daraus entstehende Wärme zur Beheizung eines Zufuhrkanals einer anderen Stufe genutzt werden. Ein Vorteil des Verfahrens ist die geringe Maximaltemperatur von 100 °C. Außerdem können kostengünstige Baumaterialien wie Kunststoffe verwendet werden und der Platzbedarf ist durch kompakte Aufbauten recht gering. Allerdings beläuft sich der Energiebedarf zurzeit auf 22 - 67 kWh/m<sup>3</sup> und die Membran ist sehr korrosionsanfällig und bedarf einer chemischen Vorbehandlung des zugeführten Salzwassers [5, 8].

Eine anderes mögliches thermisches Verfahren bietet die mehrstufige Befeuchtung (MEH oder HDH), die ebenfalls auf dem Prinzip der Verdunstung und anschließenden Kondensation basiert.

Ein Luftstrom wird durch die beiden Hauptkammern (Befeuchter, Entfeuchter) des Systems geleitet und transportiert das durch die Heizanlage erhitzte Wasser in Form von Wasserdampf vom Befeuchter zum Entfeuchter, wo das Wasser kondensiert und als entsalztes Wasser abgeführt wird (Abbildung 6). Damit stellt dieses Verfahren die technische Version des natürlichen Wasserkreislaufes dar. Vorteile dieser Methode sind die einfache Durchführung und die verschiedenen Möglichkeiten der Nutzung von Energie, die zum Beispiel aus Solar- oder Geothermie oder aus Abwärme des Betriebsprozesses gewonnen werden kann. Jedoch zeigt das Verfahren bisher schlechte Produktionsgeschwindigkeiten und der thermodynamische Zyklus

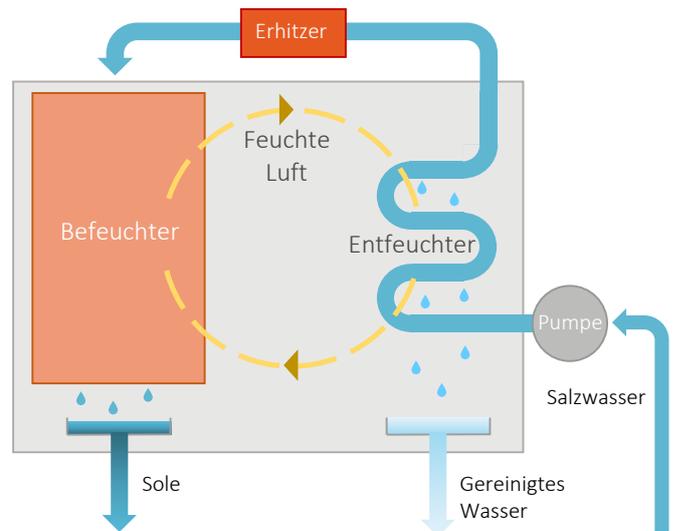


Abb. 6: Schematische Darstellung der HDH, nach [13].

ist noch ausbaufähig [8]. Außerdem sind die als Kühlmittel verwendeten Freone bedenklich, da sie maßgeblich an der Zerstörung der Ozon-Schicht beteiligt sind [14].

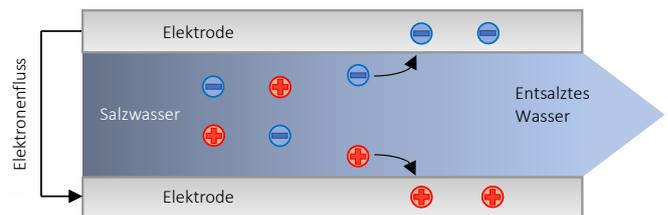


Abb. 7: Schematische Darstellung der Entsalzungsphase bei der kapazitiven Deionisierung, nach [15].

Das letzte Verfahren nennt sich kapazitive Deionisierung (CDI), bei der die Anionen und Kationen ähnlich der ED durch das Anlegen einer elektrischen Spannung aus dem Meerwasser entfernt werden. Im System befinden sich zwei unterschiedlich geladene Elektroden, die durch Anlegen einer geringen Spannung (1-1,4 V) die Ionen des Salzwassers anziehen und es damit während des Durchflusses entsalzen (Abbildung 7). Wird die angelegte Spannung umgepolt oder kurzgeschlossen, werden die sich an den Elektroden befindenden Ionen wieder freigesetzt und in einen Salzstrom geleitet. In dieser Regenerationsphase können Probleme auftreten, da die Ionen bei der Umpolung von der anderen Elektrode angezogen werden können und bei einem Kurzschluss nur die Diffusion als treibende Kraft bleibt. Vorteil dieser Methode ist aber die Effektivität bei niedrigen Konzentrationen. Außerdem ist sie nicht auf hohe Temperaturen und Drucke angewiesen [12].

### 3 Entwicklung zukunftsorientierter Membranen

Die Standard-Membran der industriell genutzten Umkehrosmose, die sog. Thin-Film-Composite-Membran (TFC-Membran), besteht aus drei Schichten (Abbildung 8). Eine Schicht aus Polyester-Gewebe sichert die strukturelle Integrität der Membran.

Sie nimmt mit einer Dicke von ca. 120 µm gleichzeitig den größten Teil der gesamten Membran in Anspruch. Darüber befindet sich eine mikroporöse, ca. 50 µm dicke Bodenschicht, meist aus Polysulfon zur Stabilisation. Die oberste und gleichzeitig dünnste Schicht (ca. 200 nm) ist die selektive Schicht (meist aus Polyamiden). Der resultierende Aufbau lässt gute Filtrationsraten und effektive Abstoßung der herauszufilternden Salze zu [7]. Allerdings sind die Eigenschaften dieser und auch vieler anderer kommerzieller Membranen unter realen Bedingungen noch ausbaufähig.

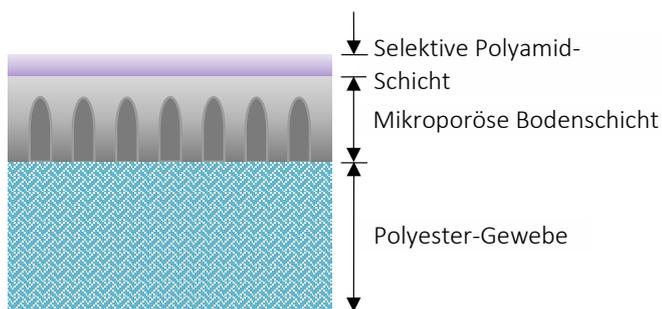


Abb. 8: Schematische Darstellung des Aufbaus einer TFC-Membran, nach [7].

Das Problem der Instabilität bei hohen und niedrigen pH-Werten soll mit einem neuen Kunststoff, dem Saloplast, umgangen werden, der in großen pH-Bereichen stabil und resistent gegen chlorhaltige Verbindungen ist. Außerdem erreicht er bis in den Nanobereich eine hohe Integrität und Transparenz. Auch ist die Herstellung weniger aufwendig, da hierbei auf organische Lösungsmittel verzichtet wird. Gerade bei der Meerwasserentsalzung ist von Vorteil, dass der Saloplast bei Zugabe von Salzwasser selbstheilend ist [16].

Eine weitere Möglichkeit ist der Einsatz von 2D-Membranen. Hierbei werden Nanoblätter oder schichtförmige Membranen von atomarer Dicke verwendet, um hochleistungsfähige Membranen herzustellen. Ein Beispiel für ein solches Nanoblatt ist Graphen, das durch das „Bohren“ von Löchern in eine nanoporöse Membran umgewandelt wird, die für das Salz undurchlässig ist. Eine andere Möglichkeit ist Graphenoxid (GO), welches aus aufeinandergestapelten Schichten atomarer Größenordnung aufgebaut ist, durch die die Wassermoleküle geleitet werden, um den gewünschten Filterungsgrad zu erhalten. Die funktionellen Gruppen an den Kanten der Nanoblätter erleichtern zusätzlich den Entsalzungsvorgang. Bisher können allerdings nur GO-Nanoblätter in größeren Stückzahlen produziert werden und die Techniken zur Reparatur beider Membran-Prototypen sind begrenzt [17].

Als Option zum Einsatz leistungsstarker und effizienter Membranen eignen sich auch sog. Mixed-Matrix-Membranen. Die Kombination organischer oder polymerer Bestandteile mit anorganischen Materialien gewährt die Nutzung beider Materialeigenschaften. Kohlenstoffbasierte Mixed-Matrix-Membranen erlauben durch den Einsatz von Kohlenstoffnanoröhren bis hin zu Graphen eine hohe Selektivität und äußerst variable Porengrößen unter 1 nm bis über 100 nm [18].

#### 4 Fazit und Ausblick

Es existieren mittlerweile einige Methoden zur Wasserentsalzung, die sich jeweils durch verschiedene Vor- und Nachteile auszeichnen. Insgesamt unterscheiden sich die etablierten Verfahren preislich nur geringfügig, weshalb die Kosten ohne Informationen über den Vertrieb oder sonstiges nur von begrenzter Aussagekraft sind. Allerdings zeigen mechanisch-membranbasierte Verfahren wie die RO, aber auch die ED größeres Zukunftspotential als thermische Verfahren wie die MSF. Das liegt vor allem daran, dass die Membranwissenschaft stetig daran arbeitet, leistungsstärkere und langlebigere Membranen zu entwickeln, die die chemische Vorbehandlung des Wassers langfristig reduzieren und die ohnehin recht geringen Kosten der Anlagen insgesamt senken könnten. Thermische Verfahren sind zwar einigermaßen zuverlässig, aber bei geringerer Modularität und Fortentwicklung energieaufwendiger und schlechter für erneuerbare Energien adaptierbar. Neue Verfahren wie MD, HDH und CDI sind zwar vielversprechende Alternativen, müssen jedoch in vielerlei Hinsicht und insbesondere im Hinblick auf Energieverbrauch und Produktionsrate optimiert werden.

Insgesamt wird deutlich, dass die mechanisch-membranbasierten Methoden zur Wasserentsalzung einen größeren Spielraum für Weiterentwicklung zulassen. Folglich stellt die Entsalzung von Meerwasser definitiv eine Zukunftsaufgabe für die Menschheit dar. Die Bevölkerung ist langfristig auf die Beschaffung reinen Wassers angewiesen und muss sich deshalb zukünftig auf effiziente Verfahren der Wasserentsalzung verlassen können. Auf diesem Gebiet und insbesondere beim Thema der mechanisch-membranbasierten Methoden empfiehlt es sich also, weiter Forschung zu betreiben und die bereits aktiven Anlagenkapazitäten zu steigern.

#### 5 Literaturverzeichnis

- [1] L. Schwenner, „Quarks,“ 24. Mai 2019. [Online]. Available: <https://www.quarks.de/umwelt/faq-so-viel-wasser-gibt-es-auf-der-erde/>. [Zugriff am 08. Juli 2022].
- [2] O. Klempert, „Welt,“ 17. Juli 2014. [Online]. Available: <https://www.welt.de/wirtschaft/webwelt/article130214530/Kuenftig-kommt-unser-Trinkwasser-aus-dem-Meer.html>. [Zugriff am 08. Juli 2022].
- [3] [Online]. Available: <https://wiki.bildungsserver.de/klimawandel/index.php/Wassernutzung>. [Zugriff am 11. Juli 2022].
- [4] „trinkwasser-wissen,“ 2022. [Online]. Available: <https://www.trinkwasser-wissen.net/fakten/preis>. [Zugriff am 13. Juli 2022].
- [5] A.-A. Sajjad, M. Y. B. M. Yunus, A. A. M. Azoddein, D. G. Hassell, I. H. Dakhil und H. A. Hasan, „Electrodialysis Desalination for Water and Wastewater: A Review,“ *Chemical Engineering Journal*, Bd. **380**, 15. Januar 2020.
- [6] P. W. Atkins, J. de Paula und J. J. Keeler, *Physikalische Chemie*, 6. Auflage Hrsg., Weinheim: WILEY-VCH, 2022.
- [7] Y. J. Lim, K. Goh, M. Kurihara und R. Wang, „Seawater desalination by reverse osmosis: Current development and future challenges in membrane fabrication- A review,“ *Journal of Membrane Science*, pp. 1-27, 29. März 2021.

- [8] D. Curto, V. Franzitta und A. Guercio, „A Review of the Water Desalination Technologies,“ *applied science*, pp. 27-31, 12. Januar 2021.
- [9] H. Strathmann und H. Chmiel, „Die Elektrodialyse - ein Membranverfahren mit vielen Anwendungsmöglichkeiten,“ *Chemie Ingenieur Technik*, Bd. **56**, Nr. 3, pp. 214-220, 1984.
- [10] C. Behrens, „Süddeutsche,“ 22. August 2017. [Online]. Available: <https://www.sueddeutsche.de/wissen/meerwasserentsalzung-wie-dubai-dem-meer-trinkwasser-abringt-1.3630919>. [Zugriff am 06. Juli 2022].
- [11] I. Frerk, „Wayback Machine,“ 01. März 2005. [Online]. Available: [https://web.archive.org/web/20110124084720/http://www.hydrology.uni-kiel.de/lehre/seminar/ws04-05/frerk\\_meerwasserentsalzung.pdf](https://web.archive.org/web/20110124084720/http://www.hydrology.uni-kiel.de/lehre/seminar/ws04-05/frerk_meerwasserentsalzung.pdf). [Zugriff am 09. Juli 2022].
- [12] Desalination Institute DME (Deutsche MeerwasserEntsalzung) GmbH, 2021. [Online]. Available: <https://www.di-dme.de/desalination-technology/future-technology/>. [Zugriff am 06. Juli 2022].
- [13] M. Spinnler, „www.desalchallenge.com,“ 5. Mai 2019. [Online]. Available: <http://www.desalchallenge.com/index.php/en/desalwiki-en/technology-en/humidification-dehumidification-hd-en>. [Zugriff am 04. Oktober 2022].
- [14] M. Dameris, „Abbau der Ozonschicht im 21. Jahrhundert,“ *Angewandte Chemie*, Nr. 122, pp. 499-501, 2010.
- [15] J. Dykstra, „ResearchGate,“ [Online]. Available: [https://www.researchgate.net/figure/Operation-of-a-Capacitive-Deionization-cell-for-water-desalination-During-the-charging\\_fig1\\_325794700](https://www.researchgate.net/figure/Operation-of-a-Capacitive-Deionization-cell-for-water-desalination-During-the-charging_fig1_325794700). [Zugriff am 10. Juli 2022].
- [16] M. Hafemann, „Die Linde,“ 14. März 2021. [Online]. Available: <https://dielinde.online/12303/auf-dem-weg-zur-nachhaltigen-membrane-der-zukunft/>. [Zugriff am 09. Juli 2022].
- [17] G. Liu, W. Jin und N. Xu, „Membranen aus zweidimensionalen Materialien: eine neue Familie hochleistungsfähiger Trennmembranen,“ *Angewandte Chemie*, 01. Juli 2016.
- [18] A. G. Fane, R. Wang und M. X. Hu, „Synthetische Membranen für die Wasseraufbereitung: aktueller Stand und Perspektiven,“ *Angewandte Chemie*, pp. 3427-3447, 22. Januar 2015.

### Jannes Grybat



Jannes Grybat wurde 2001 in Oldenburg geboren und hat 2021 sein Abitur gemacht. Schon während seiner Kindheit wurde sein Interesse für die Naturwissenschaften, insbesondere für Chemie, geweckt. Schließlich begann er 2021 Chemie an der Carl von Ossietzky Universität in Oldenburg zu studieren.

### Antonia Kallage



Antonia Kallage wurde im Jahr 2002 in Varel geboren und hat 2021 ihr Abitur erlangt. Während ihrer Schulzeit, besonders in der Oberstufe, wurde ihre Begeisterung für die Naturwissenschaften geweckt. Deshalb fing sie 2021 ihr Chemiestudium an der Carl von Ossietzky Universität in Oldenburg an.

### Zu Seite 28/29

### Prof. Dr. Simone Techert



Simone Techert studierte an der Universität Gießen Chemie und promovierte 1997 am Max-Planck-Institut für Biophysikalische Chemie in Göttingen. Bis 2000 war sie Postdoktorandin an der European Synchrotron Radiation Facility, ESRF, in Grenoble. Danach forschte sie in ihrer Emmy-Noether Nachwuchsgruppe am Max-Planck-Institut für Biophysikalische Chemie. 2006 erhielt sie eine Minerva-Professur der Max-Planck-Gesellschaft. 2013 wurde sie zur Helmholtz-Recruitment Professorin der Physik-Fakultät der Universität Göttingen, und des Deutschen Elektronen-Synchrotrons berufen.

In ihrer Forschungsarbeit beschäftigt sich Simone Techert und ihre Arbeitsgruppe mit der Entwicklung zeitaufgelöster Röntgenmethoden an Synchrotron- und Freie-Elektronen Laser für die Untersuchung komplexer chemischer Reaktionen in Echtzeit. Während hierfür die Entwicklung ultraschneller Röntgen-Experimente seit 1998 vorangetrieben werden, widmet sich die Arbeitsgruppe seit einiger Zeit der Untersuchung chemischer Reaktionen unter änderbaren Realbedingungen (und an Funktionsmaterialien), was zu einer Erweiterung der Arbeiten um den Energieforschungsaspekt geführt haben. Die allermeisten ehemaligen Mitglieder ihrer Arbeitsgruppe setzen eine Forscherkarriere entweder an Forschungsgroßgeräten oder in der Akademie fort. Sie war und ist Mitglied vieler Synchrotron- und FEL-Photon-Science Kommissionen und Gremien und steht momentan der internationalen Gesellschaft für VUVX-Photonenforschung und derer Konferenzen vor.

Simone Techert

# Die Wasserspaltung elektronengenau durchleuchten

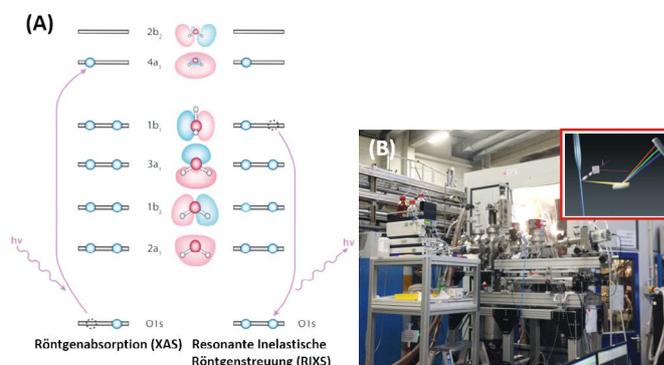
Die Wasserspaltung an katalytischen Oberflächen zählt zu einer der Hoffnungsträger-Reaktionen in Hinblick auf die bevorstehende Energiewende. Aus physikochemischer Sicht sind die quantitativen Untersuchungen der zur Wasserspaltung gehörenden Reaktionen allerdings auch heute noch schwierig, weil eine genaue mechanistische Charakterisierung sehr genaue Orts-, Energie- und Zeitaufösungen in den jeweiligen Experimenten erfordert: die die Wasserspaltung charakterisierenden Signale müssen in die Beiträge Wasser als Lösungsmittel, benetzendes Wasser, Wasser, das mit dem Katalysator interagiert, und Wasser, das gespalten wird, etc. auflösbar sein. Hinzu kommen komplexe Reaktionsmechanismen, wie zum Beispiel der 4-Stufenprozess der Sauerstoffbildungsreaktion.

Synchrotron- wie auch Freie-Elektronen-Laser-Röntgenstrahlung lassen sich wegen ihrer Eigenschaften (i) der hohen Flussdichten, (ii) der sehr genauen Energie-Durchstimmbarkeiten, (iii) ihrer ultraschnellen Röntgenpulse, (iv) ihrer hohen Repetitionsfrequenzen, (v) ihrer durchstimmbaren Polarisations-eigenschaften und (vi) ihrer (bis zu 100 % transversalen) Kohärenz sehr spezifisch für die Forschung an und mit Wasser einsetzen. Wasser besteht aus den leichten Elementen Wasserstoff und Sauerstoff. Die niedrige Sauerstoff-K-Schalen-Anregungsenergie erfordert die Entwicklung neuartiger hochauflösender Röntgenspektroskopiemethoden im weichen Röntgenbereich, die es ermöglicht, Sauerstoff und seine Komplexe und Verbindungen in den verschiedenen Umgebungen (auf der Oberfläche oder in der Flüssigkeit) zu unterscheiden. Neben der Element- und Oxidationszustands-Selektivität ist somit auch eine Sensitivität bezüglich seiner chemischen und physikochemischen Umgebung gefordert und dies, da wir an der Mechanismenaufklärung interessiert sind, zeitaufgelöst, zumindest während des Reaktionsablaufs.

Neuere experimentelle Entwicklungen unter Ausnutzung der oben genannten Eigenschaften der Synchrotronstrahlung erlaubten es gerade in jüngster Zeit, neue Einblicke in die Chemie des Wassers zu gewinnen. Dazu gehörten z.B. genauere Bestimmungsmethoden der elektronischen und nuklearen Struktur von Wasser, Solvationsverhalten von Ionen, Strukturen an Grenzflächen etc. Unter der Vielzahl der erfolgreichen Methoden [1, 2] findet man die neusten Generationen der

Röntgenphotoelektronenspektroskopie oder der Röntgenabsorptionsspektroskopie, um einige Beispiele zu nennen.

Weiterentwicklungen der Röntgenspektroskopie in die sogenannte multidimensionale Röntgenspektroskopie, auch „Photon-in/Photon-out“ Röntgenspektroskopie genannt, wie der Röntgenemissionsspektroskopie oder auch die sogenannte „Resonante Inelastische Röntgenstreuung“ (RIXS) haben in den letzten Jahren Auflösungsgrenzen verschoben, so dass sie differenzierte Charakterisierungen bis hin zu dem Hybridcharakter von Orbitalelektronen, die in Solvationsprozessen direkt involviert sind, ermöglichten (Figur 1A) [3]. Und auch für die Untersuchung der Wasserspaltungsreaktion an Katalysatoroberflächen durch RIXS-Röntgenspektroskopie galt, dass, je genauer der Einblick in die Reaktionsmechanismen der Wasserspaltung erfolgte, umso höher der Grad der Komplexität der weiterzuentwickelnden RIXS Methode war.



**Fig. 1:** (A) Das Prinzip der Resonanten Inelastischen Röntgenstreuung (RIXS) im Termschema des molekularen Wassers. (B) Die ChemRIXS-Apparatur am DESY zur Entwicklung von RIXS-Methoden zur Echtzeit-Untersuchung katalytischer Wasserspaltungsreaktionen. Copyright: DESY.

Figur 1B zeigt eine solche apparative Entwicklung zur Untersuchung der katalytischen Wasserspaltung mittels RIXS Spektroskopie. In der in der Arbeitsgruppe gebauten Chemie-Kammer („ChemRIXS“), welche für den variablen Einsatz an Synchrotron- und FEL-Strahlquellen und für die Untersuchung von Reaktionen entwickelt wurde [4], können sowohl verschiedene Typen von Spektrometern verschiedener Auflösung modular eingebaut werden, wie auch die *Betriebsbedingungen* der Kammer variiert werden - *in situ*, *operando*, zeitaufgelöst oder kombiniert. *In situ* bedeutet die Untersuchung der Wasserspaltung am Katalysator unter Anlegung von Strom und mit Wasserbenetzung durch einen eingekoppelten Wasserstrahl, unter *operando* Bedingungen kann ein kleines Massenspektrometer an die Kammer angeschlossen werden, welches die Katalyseaktivität bestätigt und mitverfolgt; und in den zeitaufgelösten

Prof. Dr. Simone Techert  
Deutsches Elektronen-Synchrotron und Göttingen Universität,  
Institut für Röntgenphysik  
simone.techert@desy.de  
[https://photon-science.desy.de/research/research\\_teams/structural\\_dynamics\\_in\\_chemical\\_systems\\_fs\\_scs/index\\_eng.html](https://photon-science.desy.de/research/research_teams/structural_dynamics_in_chemical_systems_fs_scs/index_eng.html)

Experimenten wird ein bestimmter Mechanismus-Ausschnitt der Wasserspaltungsreaktion mit der Röntgen-Puls- und Röntgen-Aufnahmesequenz synchronisiert; bei ultraschnellen Experimenten wird ein ultraschneller optischer Laser mit der Synchrotron- oder der FEL-Quelle synchronisiert und eingekoppelt.

Für die Untersuchung der Wasserspaltung ergeben sich zwei Extreme der „modi operandi“: verwendet man die einfach zu handhabenden Zonenplatten mit geringer spektraler Auflösung, lassen sich Oxidationszustandsänderungen sowohl im Wasser/am Wasseradsorbat, wie auch im Katalysator, beispielsweise während der Wasserspaltung, verfolgen [5], und sich Rückschlüsse über die Bildung von -OH, -OOH oder -O und anderer Spezies ziehen. Unter Verwendung der höherauflösenden Gitterspektrometern erhält man zusätzlich Informationen darüber, welche Elektronen aus welchen Orbitalen des angelagerten Wassers welche Orbitale und welche Hybridbänder in dem Wasserspaltungskatalysator durch Wasser-Adsorbate und Charge-Transfer Bildungen stabilisieren - und wie sich diese Stabilisierung während der Wasserspaltung während fortschreitender Reaktion ändert oder - womöglich sogar - durch Gitterdynamiken des Katalysators selbst zerstört wird.

Da wir insbesondere an der Aufklärung der Sauerstoffbildungsmechanismen der Wasserspaltung auf Perowskit-Elektrokatalysatoren interessiert sind, erlauben uns unsere systematischen RIXS Studien (a) Ringelektroden-Charakterisierungen zu bestätigen und zusätzlich (b) Perowskit-charakteristische Elektronenwechselwirkungs-basierte Mechanismen (Charge Transfer-Bildungen) des Katalysators mit dem Wasser zu ermitteln und dadurch die spezifischen Eigenschaften und Aktivierungsmechanismen der Perowskit-Katalysatoren während der Wasserspaltung zu erklären [6].

Obwohl technisch schwieriger zu handhaben, befinden sich im weichen Röntgenbereich sowohl die Röntgenabsorptionskanten von Sauerstoff, wie auch viele L-Absorptionskanten der Übergangselemente, aus denen die uns interessierenden Wasserspaltungs-Katalysatoren aufgebaut sind. Weiterhin ist es möglich, höchstauflösende RIXS-Spektrometer so zu bauen, dass sich mit ihnen beispielsweise vibronische Wechselwirkungen bis in den 2-stelligen meV Bereich (bei 1000 eV Röntgenenergien) untersuchen lassen. Für die Untersuchung der katalytischen Wasserspaltung bedeutet das, dass niedrigfrequente Schwingungen im Katalysator, auf der Oberfläche und im Wasser mit RIXS unterscheidbar untersuchbar sind. Solche schwingungsaufgelösten Experimente lassen sich limitiert mit kompakten Röntgengitterspektrometern realisieren. Sehr präzise Untersuchungsmöglichkeiten ergeben sich aus Röntgenspektroskopischer Sicht hingegen mit Großgeräte-Apparaturen wie beispielsweise der HeisenbergRIXS Apparatur (h-RIXS) am European XFEL [7]. h-RIXS, welches eine spektral und zeitlich höchstauflösende Röntgenspektroskopie-Apparatur darstellt und für Festkörper- wie Chemie-Experimente zur Verfügung steht, wurde gerade dieses Jahr technisch charakterisiert und es konnte gezeigt werden, dass die vorhergesagten technischen Spezifikationen getroffen werden [8].

Da RIXS eine Elektronenrumpfloch-Rekombinations-Spektroskopie ist, und im Sauerstoff des Wassers die Rekombination über die HOMO Elektronen erfolgt, sind die niedrigfrequenten Schwingungen, die man mit RIXS untersuchen kann, solche, die gerade die vibronischen Kopplungen nahe am Fermi-Band des Katalysators bzw. mit den HOMO-Elektronen des Wassers eingehen. Vereinfachend gesagt, lassen sich mit hochauflösender RIXS-Röntgenspektroskopie schwingungsaufgelöst elektronische Übergänge während der katalytischen Wasserspaltung untersuchen - und je nachdem, welches Röntgenlicht man anschaltet, kann man sich selektiv die Elektronen des Katalysators, der Charge Transfer Zustände zwischen Wasser und Katalysator, oder des Wassers selber während der Wasserspaltung/Sauerstoffproduktion anschauen und darüber präzise Informationen über die Elektronenbewegung während der katalytischen Wasserspaltung gewinnen - sei es im Rahmen der Born-Oppenheimer Näherung oder darüber hinaus.

Die vorgestellten Arbeiten wurden im Rahmen der DFG, SFB 1073 *Kontrolle von Energiewandlung auf atomaren Skalen*, und der *Helmholtz-Recruitment Initiative* finanziert. Die Arbeiten wurden durch ein *Early Science Project* des *Centers for Molecular Water Science - CMWS* am DESY begleitet. Projekt-Bereiche wurden in enger Kollaboration mit den Arbeitsgruppen Jooss (Materialphysik, Göttingen Universität), Föhlisch (HZB, Potsdam Universität) und Scherz (European XFEL) entwickelt.

## Literatur

- [1] [https://www.helmholtz-berlin.de/forschung/unsere-forschung/photonenforschung/index\\_de.html](https://www.helmholtz-berlin.de/forschung/unsere-forschung/photonenforschung/index_de.html) (abgerufen am 14.12.2022)
- [2] <https://photon-science.desy.de/> (abgerufen am 14.12.2022)
- [3] Z. Yin, L. Inhester, S. Thekku Veedu, W. Quevedo, A. Pietzsch, P. Wernet, G. Groenhof, A. Föhlisch, H. Grubmüller, S. Techert, *Cationic and Anionic Impact on the Electronic Structure of Liquid Water*, *J. Phys. Chem. Lett.* **8**, 3759-3764 (2017).
- [4] (a) Z. Yin, H. B. Peters, U. Hahn, M. Agaker, A. Hage, F. Scholz, R. Reininger, F. Siewert, J. Nordgren, J. Viehhaus, S. Techert, *A New Compact VUV-Spectrometer for RIXS Studies at DESY*, *Rev. Sci. Instr.* **86**, 093109-1-5 (2015); (b) F. Marschall, Z. Yin, M. Beye, J. Buck, F. Döring, V. A. Guzenko, K. Kubicek, J. Rehanek, D. Raiser, B. Rösner, A. Rothkirch, S. Thekku Veedu, J. Viehhaus, C. David, S. Techert, *Transmission Zone Plates as Analyzers for Efficient Parallel 2D RIXS-mapping*, *Nat. Sci. Rep.* **7(1)**, 8849-8857 (2017).
- [5] P. Busse, Z. Yin, D. Mierwaldt, J. Scholz, B. Kressdorf, E. Ronge, L. Glaser, S. Deinert, J. Viehhaus, C. Jooss, S. Techert, M. Risch, *Probing the Surface of  $La_{0.6}Sr_{0.4}MnO_3$  in Water Vapor by In-situ RIXS: Interpretation of the Fluorescence Yields*, *J. Phys. Chem. C* **124**, 7893-7902 (2020).
- [6] T. Reuss, S. Sreekantan Nair Lalithambika, C. David, F. Döring, C. Jooss, M. Risch, S. Techert, *Advancements in liquid jet technology and X-ray spectroscopy for understanding energy conversion materials during operation*, *Acc. Chem. Res.*, *in press* (2023).
- [7] HeisenbergRIXS User Consortium am EuropeanXFEL: [https://www.xfel.eu/organization/cooperation/user\\_consorcia/index\\_eng.html](https://www.xfel.eu/organization/cooperation/user_consorcia/index_eng.html) (abgerufen am 14.12.2022).
- [8] SCS Beamline am European XFEL: [https://www.xfel.eu/facility/instruments/scs/index\\_eng.html](https://www.xfel.eu/facility/instruments/scs/index_eng.html) (abgerufen am 14.12.2022)

Nadja Belova, Moritz Krause

# Der Kontext „Wasser“ aus chemie- und mediendidaktischer Sicht – das Projekt „H<sub>10</sub>O – das Wasser mit Leitfähigkeitsextrakt“

## Hintergründe

Getränke sind ein beliebter Kontext für den Chemieunterricht [1, 2], wobei hier gerade Wasser in der chemiedidaktischen Literatur seit vielen Jahrzehnten eine sehr prominente Rolle spielt. So schlugen Pfeifer, Sommer und Schminke [3] vor über 20 Jahren beispielsweise ein Stationenlernen zu diversen chemischen Aspekten rund ums Mineralwasser (Kohlensäure, Mineralisierung etc.) vor. Von Borstel, Böhm und Hahn [2] hinterfragten in ihrem Beitrag aus dem Jahr 2006 das vermeintliche „Wunderwasser“ Active O2, welches Verbraucher\*innen durch einen erhöhten Sauerstoffgehalt Vitalität verleihen sollte. Hier wurden die Lernenden dazu aufgefordert, Werbeversprechen aus naturwissenschaftlicher Sicht kritisch zu hinterfragen. Einen ähnlichen medienkritischen Weg gingen kürzlich Dittmar & Eilks [4] mit einem Unterrichtsgang zum Vergleich von Mineral- und Leitungswasser am Beispiel von Beiträgen aus Internetforen.

Generell kommen im Bereich von Mineralwasser sowie sog. „Near-Water-Getränken“ (also leicht aromatisiertem Wasser, welches manchmal auch mit Vitaminen o. Ä. versetzt wird) immer mehr vermeintliche Innovationen auf den Markt. Hierbei sind gerade Jugendliche eine empfängliche Zielgruppe für Werbeversprechen, die auch durch die sozialen Medien verbreitet werden. Aufgrund der durch den Siegeszug der sozialen Medien ausgelösten erheblichen Veränderungen in unserer Medienlandschaft und der damit verbundenen Freiheit, Inhalte ohne Gatekeeping-Mechanismen zu verbreiten, kommt es immer häufiger zur Streuung von Fehlinformationen [5, 6, 7]. Darunter versteht man „falsche oder irreführende Informationen, die sich als legitime Informationen tarnen“ (Allen et al. [8]). Hierbei stufen Wardle und Derakhshan [9] jede Art von „irreführendem Inhalt“ (S. 44) als Fehlinformation ein, denn neben der Verwendung tatsächlicher Fehlinformationen, die bis hin zu Verschwörungsideen reichen können [7], verwenden sowohl private als auch kommerzielle Nutzer\*innen in sozialen Medien eine Reihe von Strategien, um naturwissenschaftsbasierte Inhalte seriöser und damit glaubwürdiger erscheinen zu lassen [10]. Dazu gehören zum Beispiel

die folgenden häufig verwendeten Strategien [10, 11, 12, 13]: bewusst emotionale Behauptungen (sowohl positiv als auch negativ), Unterstellung von Schaden (z. B. in Bezug auf chemisch-biologische Prozesse), manipulierte Abbildungen (z. B. Diagramme), sprachliche Übertreibungen („beste Wirksamkeit“), vage sprachliche Mittel („hilft bei“, „ein Gefühl von...“), Erzeugen eines Gefühls von einfachen, zufriedenstellenden Antworten, Verwendung naturwissenschaftlicher Fachbegriffe und des entsprechenden Inventars (Laborgeräte, Kitte) - um nur die wichtigsten zu nennen.

## Das Unterrichtsmodul „H<sub>10</sub>O – das Wasser mit Leitfähigkeitsextrakt“

Um die Verwendung solcher Strategien sowie irreführender Inhalte anhand eines relevanten und greifbaren Beispiels zu demonstrieren, haben wir, in Anlehnung an die oben exemplarisch dargestellten didaktischen Vorarbeiten, ein Unterrichtsmodul zu einem imaginären Getränk namens „H<sub>10</sub>O – das Wasser mit Leitfähigkeitsextrakt“ entwickelt. Eine solche Intervention zielt darauf ab, die Schüler\*innen in die Lage zu versetzen, Informationen, die sie online sehen, zu bewerten [14]. Bei der Entwicklung haben wir darauf geachtet, dass es sich um ein Produkt mit einem chemisch-biologisch basierten Wirkmechanismus handelt, der logisch erscheint und mit Wissen aus dem Schulunterricht erklärt werden kann. So sind wir auf „H<sub>10</sub>O - das Wasser mit Leitfähigkeitsextrakt“ gekommen. Dabei handelt es sich um ein mit „Leitfähigkeitsextrakt“ angereichertes Trinkwasser. Dieses sorgt dafür, dass die Leitfähigkeit im Gehirn erhöht wird, wodurch Nervenimpulse besser weitergeleitet werden, was letztlich die kognitive Leistung erhöht. Das klingt natürlich nur vermeintlich logisch, entbehrt aber jeder seriösen Grundlage. Wir bestellten speziell etikettierte Flaschen (s. Abb. 1), wobei hierbei auch gewöhnliche Flaschen verwendet werden können, die mit einer Vorlage entsprechend umetikettiert werden müssen. Für dieses Produkt entwickelten wir eine Internetpräsenz mit einem Instagram-Account im Zentrum (s. Abb. 1). In diesem Account „beparben“ wir das Produkt, wobei wir die oben genannten Manipulationsstrategien nutzten. So zeigten wir Einblicke in die Arbeit im Labor, in (angebliche) Studien oder wissenschaftliche aussehende Graphiken. Wir haben uns aus mehreren Gründen für Instagram als Hauptplattform entschieden: Erstens ist es ein beliebtes soziales Netzwerk bei jungen Erwachsenen, sodass dort, wo sich die Lernenden aufhalten, auch gelernt wird; zweitens

Dr. Nadja Belova\* und Dr. Moritz Krause  
Universität Bremen  
Leobener Str. NW2, 28359 Bremen  
\*n.belova@uni-bremen.de  
<http://www.chemiedidaktik.uni-bremen.de/>



Abb. 1: Einblick in den Instagram-Account.

kombiniert es verschiedene Ansätze, Inhalte zu präsentieren - es gibt Möglichkeiten, Fotos, Texte und Videos einzubinden. Zu Beginn unserer Intervention wurden die Lernenden gebeten, sich mit dem Produkt und dem Social-Media-Account vertraut zu machen und die Glaubwürdigkeit zu bewerten, wobei viele von ihnen dem Produkt und den damit verbundenen Versprechungen zunächst vertrauten. Diese ersten Eindrücke wurden gesammelt und über ein kollaboratives Online-Tool geclustert. Anhand des Instagram-Accounts beschrieben die Lernenden dann die Strategien, die ihrer Meinung nach eingesetzt wurden, um dem Produkt und der Website Seriosität und Glaubwürdigkeit zu verleihen. Dabei gelang es den Lernenden, die meisten der implizit verwendeten Strategien herauszuarbeiten. Neben der Entwicklung dieser Strategien und der entsprechenden Bewertung des Produkts stand hier auch eine naturwissenschaftliche Betrachtung im Vordergrund (Leitfähigkeit, Ionen, Verstoffwechslung). Dann wurde der „Fake“ aufgedeckt. Im nächsten Schritt verglichen sie die erarbeiteten Strategien mit Hilfe der von uns erstellten „digitalen Karteikarten“, auf denen die im Bericht verwendeten Strategien benannt und kurz erläutert wurden. Außerdem gab es eine FAQ-Rubrik zum Nachlesen. Das Ende der Unterrichtssequenz spielt eine wichtige Rolle bei der Sicherung und Verinnerlichung des Gelernten. So formulierten die Lernenden am Ende ein Fazit, das ihr Nutzungsverhalten und ihre Wahrnehmung wissenschaftlicher Informationen beschreibt und reflektiert und auf das zukünftige Verhalten in sozialen Medien abzielt. Die Schlussfolgerung beinhaltete oft, sich nicht vorschnell blenden zu lassen und genau zu prüfen, ob ein Produkt oder eine Information, die sie finden, seriös ist. Das Modul wurde mit 106 Schüler\*innen aus Bremen und Niedersachsen (Jahrgang 10 bis Q-Phase) erprobt und evaluiert, wobei diese Schüler\*innen eine bessere kritische Reflexionsfähigkeit [15] zeigten als eine Kontrollgruppe. Die von uns entwickelte Unterrichtssequenz und die dazugehörige Studie sind unseres Wissens nach die ersten ihrer Art (d.h. Kontext des naturwissenschaftlichen Unterrichts, immersiver „Trigger“ in Form des fiktiven Produkts, Fokus auf authentische soziale Medien) sowohl in Deutschland als auch weltweit. Generell besteht ein Bedarf an mehr Unterrichtsvorschlägen dieser Art, insbesondere in den Naturwissenschaften, sowie an mehr Belegen für deren Wirksamkeit. Die uns bisher vorliegenden Studienergebnisse legen nahe, solche Lernsequenzen am besten alle paar Monate zu wiederholen, da die positiven Effekte nach wenigen Monaten nachlassen [16].

Weitere Informationen sowie die Materialien können auf [www.digilep.schule/lernumgebungen](http://www.digilep.schule/lernumgebungen) eingesehen werden.

## Danksagung

Wir bedanken uns bei der Joachim Herz Stiftung für die Förderung des Projekts sowie bei der Stiftung Polytechnische Gesellschaft für die Auszeichnung des Konzepts 2022 mit einem Sonderpreis des Polytechnik-Preises.

## Referenzen

- [1] Lutz, B., & Pfeifer, L. (1998). Getränke - ein Thema mit klaren Perspektiven für den Chemieunterricht. *Naturwissenschaften im Unterricht - Chemie*, **9**(43), 4-9.
- [2] von Borstel, G., Böhm, A. & Hahn, O. (2006). „Powerstoff mit Sauerstoff?“ - Kontextnahe Erarbeitung der Löslichkeit von Gasen durch kritisches Hinterfragen von Werbeaussagen. *Der Mathematische und Naturwissenschaftliche Unterricht*, **59**(7), 413-415.
- [3] Pfeifer, P., Sommer, K., & Schminke, M. (2000). Mineralwasser - Lernen an Stationen. *Naturwissenschaften im Unterricht - Chemie*, **58/59**(11), 50-60.
- [4] Dittmar, J., & Eilks, I. (2022). Cooperative learning with and about Internet Forums: a case study on a unit on the consumption and chemistry of mineral water vs. tap water. *Frontiers in Education*, **6**, 742497.
- [5] Barzilai, S., & Chinn, C. A. (2020). A review of educational responses to the “post-truth” condition: Four lenses on “post-truth” problems. *Educational Psychologist*, **55**(3), 107-119.
- [6] Moran, P. (2020). Social media: A pandemic of misinformation. *The American Journal of Medicine*, **133**(11), 1247.
- [7] Tseng, A. S., Bonilla, S., & MacPherson, A. (2021). Fighting “bad science” in the information age: The effects of an intervention to stimulate evaluation and critique of false scientific claims. *Journal of Research in Science Teaching*, **58**(8), 1152-1178.
- [8] Allen, J., Howland, B., Mobius, M., Rothschild, D., & Watts, D. J. (2020). Evaluating the fake news problem at the scale of the information ecosystem. *Science Advances*, **6**(14), eaay3539.
- [9] Wardle, C., & Derakhshan, H. (2018). Thinking about ‘information disorder’: formats of misinformation, disinformation, and malinformation. In Ireton, C., and Posetti, J. (eds.), *Journalism, ‘fake news’ and disinformation*. Paris, France: UNESCO, pp. 43-54.
- [10] Kotsalas, I. P., Antoniou, A., & Scoullou, M. (2017). Decoding mass media techniques and education for sustainable development. *Journal of Education for Sustainable Development*, **11**(2), 102-122.
- [11] Danciu, V. (2014). Manipulative marketing: persuasion and manipulation of the consumer through advertising. *Theoretical and Applied Economics*, **21**(2), 591.
- [12] Guerris, M., Cuadros, J., González-Sabaté, L., & Serrano, V. (2020). Describing the public perception of chemistry on twitter. *Chemistry Education Research and Practice*, **21**(3), 989-999.
- [13] van Prooijen, J. W., & Van Vugt, M. (2018). Conspiracy theories: Evolved functions and psychological mechanisms. *Perspectives on Psychological Science*, **13**(6), 770-788.
- [14] Lazer, D. M., Baum, M. A., Benkler, Y., Berinsky, A. J., Greenhill, K. M., Menczer, F., ... & Zittrain, J. L. (2018). The science of fake news. *Science*, **359**(6380), 1094-1096.

[15] McGrew, S., Breakstone, J., Ortega, T., Smith, M., & Wineburg, S. (2018). Can students evaluate online sources? Learning from assessments of civic online reasoning. *Theory & Research in Social Education*, **46**(2), 165-193.

[16] Roozenbeek J., & van der Linden S. (2019). Fake news game confers psychological resistance against online misinformation. *Palgrave Communications*, **5**(1), 65.

#### Dr. Nadja Belova

Dr. Nadja Belova ist seit 2017 akademische Rätin am Institut für Didaktik der Naturwissenschaften (Abteilung Chemiedidaktik) an der Universität Bremen. Neben ihrem zentralen Forschungsschwerpunkt kritische Medienbildung im Chemieunterricht befasst sie sich mit Gamification sowie der Bildung für nachhaltige Entwicklung.



#### Dr. Moritz Krause

Dr. Moritz Krause ist seit 2016 Lehrer für die Fächer Chemie und Biologie am Schulzentrum Geschwister Scholl (GyO) Bremerhaven und teilabgeordnete Lehrkraft am Institut für Didaktik der Naturwissenschaften an der Universität Bremen. Sein Schwerpunkt ist die Entwicklung digitaler Unterrichtskonzepte.



## BUCHBESPRECHUNG

Rudolf Holze

# Buchbesprechung

Christian Synwoldt und David Novak: **Wasserstoff: Technik – Projekte – Politik**, WILEY-VCH, Weinheim 2022, 519+XXVII Seiten, ISBN: 978-3-527-34988-3, 79,90 €

Selten erscheint ein so knapper, wie Missverständnisse und Fehldeutungen ausschließender Titel wie der des hier vorzustellenden Buches, allenfalls H<sub>2</sub> wäre noch knapper, aber wohl unpraktischer gewesen. Jeglicher längere, wenn auch vor dem Hintergrund der technischen wie wirtschaftlich-gesellschaftli-

chen Entwicklungen, die zu diesem Buch geführt haben, naheliegende Titel würde das Buch in seiner inhaltlichen Breite allerdings nur unvollständig beschreiben.

Nach fünf Geleitworten (vermutlich sehr selten, der Breite des Gegenstandes aber sicher angemessen), einem umfangreichen Abkürzungsverzeichnis und Übersichten zu Größen und Einheiten wird der Gegenstand in einer 24 Seiten umfassenden Einleitung zu Teil I des Buches (betitelt Technik) aus verschiedenen, vor allem technisch-wirtschaftlichen Blickwinkeln, beleuchtet. Die Häufigkeit des Begriffs „Energie“ deutet dabei bereits einen, vermutlich den, Schwerpunkt des Buches an: Wasserstoff als Sekundärenergieträger in der Energiewirtschaft und in der Mobilität. Ob der Begriff „Hydrogen Economy“

Prof. Dr. Rudolf Holze  
Technische Universität Chemnitz  
D-09107 Chemnitz  
rudolf.holze@chemie.tu-chemnitz.de

tatsächlich von J. O'M. Bockris [1] 1970 geprägt wurde oder ob der allerdings unbelegte Hinweis von Beckmann [2] zutrifft, dass seit über 40 Jahren, mithin seit den 1950igern, über Wasserstoff als „Energieträger“ (gemeint war wohl Energieträger, die etwas erstaunliche Begriffswahl hält sich allerdings hartnäckig [3]) diskutiert wurde, zutrifft, sei dahingestellt. Immerhin weist Bockris darauf hin, dass bereits F. Lawaczek sich in den 1930igern zu einer Wasserstoffwirtschaft geäußert hat [4]. Zweifelsohne stand für Bockris Wasserstoff als Möglichkeit der Energieübertragung mit seinerzeit wesentlich geringeren Leitungsverlusten als elektrische Übertragung im Vordergrund [5]; seine stoffliche Nutzung als Reaktand, vor allem als Reduktionsmittel, ist erst in jüngerer Zeit hinzugetreten. Im hier vorliegenden Buch wird letzterer Aspekt allerdings fast ausgeblendet – eine bedauerliche Schwachstelle. Wer diese und andere Lücken schließen möchte, wird zu zwei weiteren „Wasserstoff-Büchern“ greifen [6, 7].

Vielmehr werden in der Einleitung einige Themen der folgenden Kapitel, aktuelle und künftige Anwendungen wie Bedarfe angesprochen. Dabei werden „im Vorbeigehen“ wichtige Begriffe wie Heizwert, Brennwert, Regelleistung (etwas verwirrend, da gängig meist von Regelleistung mit allgemein akzeptierten Definitionen die Rede ist) vorgestellt. Sach- und Hintergrundinformationen zu Stadtgas/Leuchtgas oder Flächenbedarf und Flächeneffizienz werden eingestreut.

In Kapitel 2 wird die Herstellung von Wasserstoff behandelt. Unter den aktuell eingesetzten Verfahren nimmt die Elektrolyse mit nur 2 % der hergestellten Wasserstoffmenge nur eine marginale Rolle ein, dies wird sich zukünftig erheblich, wenn nicht sogar dramatisch, verändern. Chemisch, physikalisch-chemisch und gar elektrochemisch Vorbelastete werden an Details hängenbleiben: Warum als typisches Beispiel der alkalischen Elektrolyse ausgerechnet die Chlor-Alkali-Elektrolyse benannt wird, bleibt rätselhaft, und warum die Elektrolyse nach dem Membrel<sup>®</sup>-Verfahren (heute oft als PEM-Elektrolyse bezeichnet) eine saure Elektrolyse ist, erschließt sich erst nach kurzem Nachdenken. Während Sauerstoff als „Nebenprodukt“ meist ignoriert wird, widmen die Autoren ihm einen eigenen „Kasten“ mit wichtigen Hinweisen. Dagegen ist die Beschreibung des Amalgamverfahrens (S. 35) schlicht falsch. Von Details abgesehen, stellen die Autoren die Herstellungsverfahren umfassend und vor allem um Details, die Chemiker\*innen leicht entgehen könnten, bereichert dar. Neben den hauptsächlich verwendeten Verfahren, die auf Erdgas und Erdöl basieren, gibt es noch weitere Verfahren, die erwähnt werden. Sie werden ausreichend detailliert dargestellt. Dies trifft auch auf ihre vermutlich mäßigen Perspektiven zu.

Zur umfassenden Betrachtung der Herstellungsverfahren gehört auch ein Blick auf die bei den aktuell vor allem genutzten Verfahren wie bei den Hochtemperatorelektrolysen benötigten Wärmequellen, Flächenbedarfe und Emissionen, hier vor allem von CO<sub>2</sub>. Ob dazu auch ein Abschnitt zur stofflichen Verwendung von CO<sub>2</sub> als Rohstoff gehört, mag bezweifelt werden, vermutlich haben die Autoren hier einen angemessenen Platz gefunden. Das Kapitel beschließen Betrachtung zu den „Farben“ des Wasserstoffs [8] und zur Lebenszyklusanalyse traditioneller wie neuer Verfahren zur Wasserstoffproduktion.

Kapitel 3 in Teil I stellt Möglichkeiten des Transportes und der Speicherung von Wasserstoff umfassend vor. Etablierte, wie unterschiedlich weit erforschte und/oder entwickelte Verfahren werden umfassend und um wichtige, zumindest interessante, Details angereichert, vorgestellt. Wie im Vorkapitel werden Vergleiche und Überlegungen eingestreut, die überaus erhellend sind: Die an einer Zapfsäule pro Zeiteinheit durch Umpumpen eines Treibstoffes übertragene Energiemenge beträgt ein Vielfaches (bis zum Zehnfachen) der beim Umpumpen von Wasserstoff, sie ist weit höher als die Leistungsaufnahme einer Elektrolokomotive oder selbst eines ICE-Zuges. Dies mag trivial oder irrelevant erscheinen; es verdeutlicht aber, was wir als selbstverständlich hinnehmen und nun ggfs. in Frage gestellt sehen. Es verdeutlicht allerdings auch, wie diese Besonderheit den mangelnden Wirkungsgrad von Verbrennungsmotoren zumindest teilweise kompensiert.

Leider fehlt in diesem Kapitel ein Vergleich der Energieübertragung durch elektrischen Strom mit der Übertragung unter Verwendung von Wasserstoff als Sekundärenergieträger. Ein solcher Vergleich mag kompliziert und von vielen Einflussgrößen abhängig sein, immerhin scheint er am Anfang der Überlegungen zur Wasserstoffwirtschaft (s.o.) gestanden zu haben. Anderenorts, so mit der Feststellung, dass die Beimischung von Wasserstoff zum Erdgas im aktuell betriebenen Netz eine Sackgassentechnologie ist (S. 145), schrecken die Autoren auch nicht vor deutlichen Aussagen zurück.

Teil II des Buches behandelt in sechs Kapiteln die Nutzung von Wasserstoff in der Mobilität (Kap. 5), seine Berücksichtigung in der Politik in staatlichen Aktivitäten und deren Grundlagen (Kap. 4), den ökonomischen Rahmen der Wasserstoffnutzung (hier taucht im Abschnitt 6.8 die oben auf den ersten Blick als fehlend monierte Nutzung von Wasserstoff außerhalb der Mobilität auf, in anderen Abschnitten werden weitere Aspekte dazu erwähnt), den juristisch-regulatorischen Rahmen der Wasserstoffnutzung sowie politische Handlungsfelder. Ein kurzes Kapitel mit den Ergebnissen einer von den Autoren zur Thematik durchgeführten Befragung sowie ein Fazit schließen diesen Buchteil ab.

In Kapitel 4 werden nationale (auf Bundes- wie Landesebene) wie internationale Konzepte, Pläne und Programme mit bemerkenswertem Detailreichtum vorgestellt. Bekanntes und bislang wenig Wahrgenommenes werden umfassend beschrieben, die Details werden von den Autoren in der inzwischen unverblühten Weise von Zeit zu Zeit auf realistisches Maß gebracht.

In Kapitel 5 wird die den Autoren offenbar besonders wichtige Anwendung von Wasserstoff im Transportwesen behandelt. Betrachtet man die übrigen Sektoren der Energiewirtschaft, mag dies etwas überraschen, zweifelsohne ist dieser Aspekt aber sehr interessant und durch technische Details ausgezeichnet, was anderen Sektoren (z.B. in der Gebäudeheizung) fehlt. Neben der erwarteten Darstellung von aus Brennstoffzellen versorgten Fahrzeugen werden batterieversorgte Fahrzeuge wie solche mit Verbrennungsmotoren, die nach entsprechender Modifizierung ihrer benzin- oder dieselverbrennender Vorläufer bereits seit Jahren verfügbar sind, vorgestellt. Wiederum zeigen zahlreiche Beispiele aus dem In- und Ausland den Stand

der Technik und künftige Perspektiven auf. Neben landgebundenen Fahrzeugen werden Schiffe und Flugzeuge behandelt.

Der ökonomische Rahmen, in dem sich eine/die Wasserstoffwirtschaft entwickelt, wird in Kapitel 6 umfassend beleuchtet. Bereits in den ersten Zeilen findet sich ein an anderer Stelle vermisster Vergleich: Bis 1500 km Entfernung sind Pipelines ökonomischer, darüber hinaus Seetransport, vermutlich in verflüssigter Form (Stand 2021). Leider fehlt im Vergleich wieder die elektrische Energieübertragung. Die Vielfalt ökonomischer Gesichtspunkte aus Sicht der zahlreichen Akteure auf nationaler wie internationaler Ebene wird eindrucksvoll dargestellt, immer wieder angereichert um kritische Hinweise.

Der rechtliche Rahmen der Wasserstoffnutzung vor allem auf nationaler Ebene sowie der aktuelle regulatorische Rahmen wie dessen sinnvolle Weiterentwicklung werden knapp in Kapitel 7 abgehandelt.

In Kapitel 8 werden politische Handlungsfelder auf nationaler wie internationaler Ebene identifiziert. Programme in Bundesländern tauchen ebenso auf wie Programme in Chile. Erneut haben die Autoren mit bemerkenswerter Umsicht Beispiele zusammengetragen ohne dabei den Anspruch auf Vollständigkeit zu erheben. Spätestens in diesem Kapitel wird der Wunsch nach einem wirklich vollständigen Verzeichnis nebst Aufschlüsselung der verwendeten Akronyme wieder laut. Sicher sind viele aus der täglichen Zeitungslektüre vertraut, und vermutlich ist es nur ein dummer Zufall, dass der Rezensent an NOW hängen geblieben ist. Im E-book könnte eine Suche abhelfen, im vorliegenden Druckexemplar ist dieser Weg versperrt. Das Register hilft auch nicht weiter (es wäre auch Unsinn gewesen, alle Akronyme dort nochmal aufzulisten. Warum es einige dennoch geschafft haben, bleibt schleierhaft.)

Mit einer kleinen (wirklich kleinen) Umfrage haben die Autoren versucht, einige Ideen, Konzepte und Eindrücke bei Akteuren der Wasserstoffanwendung etc. zu verifizieren. Das recht heterogene Bild, das zudem zur Skepsis Anlass bietet, ist im sehr kurzen Kapitel 9 zusammengetragen.

Unter eigener Kapitelnummer 10 finden sich 51 Sätze/Feststellungen, mit denen die Autoren das knappe Fazit ihres umfangreichen Werkes ziehen.

Das Buch ist sorgfältig hergestellt, der Text weitgehend frei von Fehlern. Wenn eine Verkleinerung um den Faktor 3 (S. 12) konstatiert wird, bewegen sich die Autoren im Bereich gängiger Sprachverunstaltung. Abbildungen werden sparsam eingesetzt (offenbar waren die Autoren dem auch bei namhaften Wissenschaftsverlagen bestehenden Druck „mehr Bilder!“ nicht ausgesetzt), allerdings sind sie nicht beispielhaft. Achsenbeschriftungen (so in Abb. 1.3) müssen mitunter erraten werden. Immer wieder in den Text eingestreute Hinweise, Anmerkungen und Kommentare der Autoren verwundern zunächst etwas, man gewöhnt sich beim Lesen an sie und die erfrischende Direktheit. Teilweise handelt es sich offenbar um Aktualisierungen kurz vor Drucklegung, teilweise will man sich nach der ausgiebigen Wiedergabe fremder Äußerungen mit eigener Meinung von ihnen absetzen.

Das Register hilft bei der Erschließung des umfangreichen Werkes. Warum sich einige, aber nicht alle, Bundesländer dort wiederfinden, bleibt unklar. Der einigermaßen feste kritische Eindruck von den „Freistaaten“ verändert sich damit nicht.

Das Buch ist ein willkommener, unverblümt-realistischer Beitrag zur aktuellen Diskussion. Zusammen mit anderen Monographien, die das detailreiche Buch um weitere, wesentliche und nötige Aspekte ergänzen, bildet es eine gute Diskussionsgrundlage.

## Referenzen

- [1] J.O'M. Bockris, *Science* **176** (1972) 1323.
- [2] G. Beckmann *Nachr. Chem.* **39**(5) (1991) 503.
- [3] F. Ausfelder, A. Förster, *Nachr. Chem.* **70**(9) (2022) 48.
- [4] J. O'M. Bockris: The Hydrogen Economy. In: *Environmental Chemistry* (J. O'M. Bockris Hrsg.) Plenum Press, New York 1977, 549.
- [5] J. O'.M. Bockris *Int. Hydrogen Energy* **38** (2013) 2579.
- [6] *Wasserstofftechnologien* (R. Neugebauer Hrsg.) Springer Vieweg, Wiesbaden 2022.
- [7] M. Klell, H. Eichseder, A. Trattner: *Wasserstoff in der Fahrzeugtechnik*, Springer Vieweg, Wiesbaden 2018.
- [8] Y. Wu, R. Holze, *Bunsen-Magazin* **22**(3) (2020) 50.

## ZITATBOX

### Leonardo da Vinci (1452 - 1519)

„So wie das Essen ohne Lust der Gesundheit schädlich wird, so verdirbt das Lernen ohne Wissbegier das Gedächtnis und behält nichts von dem, was es auffängt.“

„Wenn du meinst, dass im Alter die Weisheit dich nähren soll, dann eigne sie dir in deiner Jugend an, sodass dir im Alter die Nahrung nicht fehle.“

„So wie das Eisen außer Gebrauch rostet und das still stehende Wasser verdirbt oder bei Kälte gefriert, so verkommt der Geist ohne Übung.“

„Wer die Praxis übt, ohne sich vorher mit der Theorie beschäftigt zu haben, gleicht einem Steuermann, der sein Schiff ohne Kompass und Steuer besteigt und nun nicht weiß, wohin er fährt.“

Quelle: <https://gutezitate.com/autor/leonardo-da-vinci>

**Auszeichnungen und Ehrungen**

Frank Schreiber, Prof. Dr. Dr. h.c., Institut fuer Angewandte Physik, Universität Tübingen, wurde von der Slowakischen Akademie der Wissenschaften die Auszeichnung **Ehrendoktor** verliehen.

Karl-Heinz Ernst, Prof. Dr., Eidgenössische Materialprüfungs- und Forschungsanstalt (Empa), wurde von der Japan Society of Vacuum and Surface Science der **Microbeam Analysis Award** verliehen.

**Geburtstage im Februar 2023**

Franz-Josef Bock, Dr.

Werner Richtering, Dr.

Ulrich K. Deiters, Prof. Dr.

Wolfgang Domcke, Prof. Dr.

Dieter Distler, Dr.

Wolfgang Grünbein, Prof. Dr.

Horst Brodowsky, Prof. Dr.

**Geburtstage im März 2023**

Ralf Zuber, Dr.

Gregor Hoogers, Prof. Dr.

Ingo Fischer, Prof. Dr.

Thomas Klink, Dr.

Klaus Rademann, Prof. Dr.

Uwe K. A. Klein, Prof. Dr.

Hans-Heinrich Limbach, Prof. Dr.

Wolfram Schröer, Prof. Dr.

Bruno Boddenberg, Prof. Dr.

Wolfgang Witschel, Prof. Dr.

Dietmar Möbius, Prof. Dr.

Joshua Jortner, Prof. Dr.

Das Bunsen-Magazin dokumentiert Geburtstage der DBG-Mitglieder in Fünfjahresschritten – beginnend mit dem 60. Geburtstag. Mitglieder, die keine Veröffentlichung ihres Geburtstags wünschen, teilen dies bitte der DBG-Geschäftsstelle mit: [geschaeftsstelle@bunsen.de](mailto:geschaeftsstelle@bunsen.de).

**Neuanmeldungen zur Mitgliedschaft**

Dr. Ellen Adams

Dr. Peter Kraus

**Veranstaltungen****Deutsche Bunsen-Gesellschaft**

yPC meets Industry: Artificial Intelligence  
25. Januar 2023, online  
<https://www.bunsen.de/ypc-events>

yPC meets Industry: Optical Industry  
22. Februar 2023, online  
<https://www.bunsen.de/ypc-events>

49th German Liquid Crystal Conference 2023  
22.-24. März 2023, Stuttgart  
<https://www.ioc.uni-stuttgart.de/en/research/ak-laschat/GLCC2023/>

**Bunsen-Tagung 2023**

Physical Chemistry of the Energy Transition  
5.-7. Juni 2023, Berlin  
[www.bunsentagung.de](http://www.bunsentagung.de)

**Weitere Veranstaltungen**

GDCh-Wissenschaftsforums Chemie: Rethinking Chemistry  
4.-6. September 2023, Leipzig  
[www.wifo2023.de](http://www.wifo2023.de)

**Ausschreibungen****Preise befreundeter Gesellschaften**

Akademiepreis der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften 2024  
Einsendeschluss: 15. Januar 2023  
[www.bunsen.de/ausschreibungen](http://www.bunsen.de/ausschreibungen)



## yPC meets Industry online



Deutsche Bunsen-Gesellschaft  
für physikalische Chemie

**25.01.2023, 16 Uhr**  
**Artificial Intelligence in Industry**

Dr. Jan Sperrhake  
Co-founder & CSO, Xsight Optics

Dr. Frank Nussbaum  
Data Scientist, Jenoptik

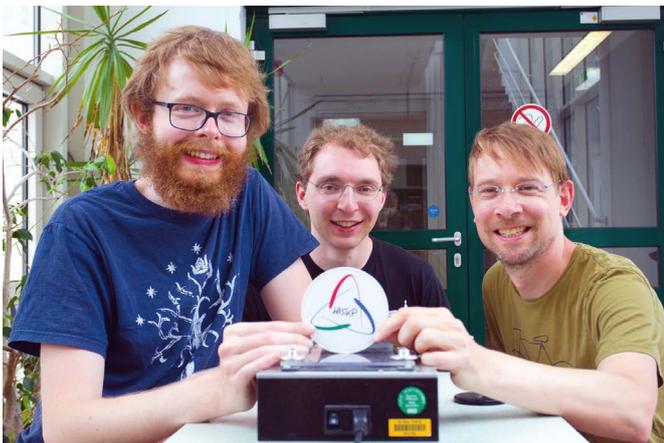
Anmeldung auf [www.bunsen.de/ypc-events](http://www.bunsen.de/ypc-events)

# Wenn aus Neugier Wissenschaft wird

In den meisten Fällen sind wissenschaftliche Erkenntnisse das Ergebnis langfristiger Planung. Lange wird ein Fach studiert, Forschungsliteratur gelesen und sich dem Thema genähert, um schließlich eine schlüssige Hypothese zu erstellen und diese experimentell zu erproben. In einigen Fällen läuft es jedoch anders: Eine spontane Beobachtung oder Idee weckt die wissenschaftliche Neugier und eine kurze Recherche ergibt, dass weder Google noch die wissenschaftliche Literatur eine Antwort auf diese Frage kennen. Wenn dies nun zufällig Wissenschaftlern oder Wissenschaftlerinnen geschieht, die nicht nur die nötigen Kenntnisse, sondern auch die experimentellen Möglichkeiten haben, diese Frage selbst zu erforschen, kann aus Neugier Wissenschaft werden.

Genau hier setzt eine neue Auszeichnung der GDCh an. Mit dem neuen Mario-Markus-Preis für ludische Wissenschaft (lat. *ludere* bedeutet *spielen*) zeichnet die GDCh wissenschaftliche, „spielerische“ Arbeiten aus dem Bereich der Naturwissenschaften aus. Damit sind Entdeckungen gemeint, die nicht mit einem konkreten Anwendungsbezug erforscht wurden, sondern das Resultat von wissenschaftlicher Neugier sind.

Als erste erhalten den mit 10 000 Euro dotierten Preis Dr. Johann Ostmeier, Universität Liverpool, UK, Christoph Schürmann, Universität Bonn, und Prof. Dr. Carsten Urbach, Universität Bonn, für ihre Publikation, in der sie das Flugverhalten von Bierdeckeln wissenschaftlich untersuchten. Sie überzeugten die Auswahlkommission mit ihrem spielerischen Ansatz, sich einem komplexen Thema zu nähern, um dabei spannende Erkenntnisse zu gewinnen.



Christoph Schürmann, Dr. Johann Ostmeier und Prof. Dr. Carsten Urbach (v.l.)  
(Foto: Universität Bonn/Gunar Peters).

Die Preisträger, damals alle an der Universität Bonn, stellten sich bei einem gemeinsamen Brauhausbesuch die Frage, warum Bierdeckel, wenn sie geworfen werden, nicht wie Frisbees geradeaus fliegen, sondern „kippen“ und zu Boden fallen. Ihre wissenschaftliche Neugier war geweckt und so widmeten sich die drei Forscher der wissenschaftlichen Untersuchung des Phänomens. Dabei zeigte sich, dass die Ursache für die besonderen Flugeigenschaften aus einem Zusammenspiel von Gravitation, Auftrieb und Drehimpulserhaltung resultieren: Der Bierdeckel kippt kurz nach dem Wurf aufgrund der Schwerkraft nach hinten. Dadurch

erhält er einen Anstellwinkel, ähnlich dem eines landenden Flugzeugs. Dieser Winkel erzeugt Auftrieb in der Luftströmung. „Allerdings wirkt die Auftriebskraft nicht in der Mitte des Bierdeckels, sondern im vorderen Drittel“, erklärt Ostmeier, der die Idee für die Studie hatte. Um zu diesen Ergebnissen zu gelangen, bauten die Wissenschaftler eigens eine Bierdeckelwurfmaschine und zeichneten die Flüge mit einer Hochgeschwindigkeitskamera auf. Die Ergebnisse veröffentlichten sie unter dem Titel „Beer Mats make bad Frisbees“ (zu deutsch. „Bierdeckel sind schlechte Frisbees“) in der Zeitschrift „The European Physical Journal Plus“. Eine konkrete Anwendung für ihre Forschung gibt es nicht. Mit ihrer Arbeit veranschaulichen die Preisträger aber den gesamten Prozess des naturwissenschaftlichen Erkenntnisgewinns – von der Beobachtung über die Theorie und ihre experimentelle Überprüfung bis hin zu ihrer Anpassung und Weiterentwicklung. Dabei zeigen sie eindrucksvoll, wie man sich auf spielerische Weise einem komplexen Thema nähern und dabei neue Erkenntnisse erlangen kann.

Der Mario-Markus-Preis für ludische Wissenschaften wird von Prof. Dr. Mario Markus, Dortmund, finanziert, der sich der ludischen Wissenschaft verschrieben und diesen Begriff geprägt hat.

## Stipendien für Chemiestudierende

Die bei der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) eingerichtete August-Wilhelm-von-Hofmann-Stiftung vergibt zum Sommersemester 2023 erneut Stipendien. Studierende können ab April 2023 ein Stipendium in Höhe von 300 Euro pro Monat für bis zu 18 Monate erhalten. Bewerbungen müssen bis zum 1. Februar 2023 über das Online-Portal eingereicht werden.

Bachelor-, Diplom- oder Examensstudierende der Chemie und angrenzender Gebiete mit sehr guten Studienleistungen können sich um eines der etwa zwanzig Stipendien der August-Wilhelm-von-Hofmann-Stiftung bewerben. Auch die wirtschaftliche Situation der Bewerbenden und das Engagement außerhalb des Studiums sind Kriterien für die Vergabe. Um ein Stipendium zu erhalten, müssen die Studierenden sich zu Beginn des Sommersemesters 2023 im vierten oder fünften Fachsemester ihres Studiums befinden. Die Förderung endet spätestens mit Abschluss des sechsten Semesters.

Die August-Wilhelm-von-Hofmann-Stiftung ist nach dem ersten Präsidenten der 1867 gegründeten GDCh-Vorläuferorganisation Deutsche Chemische Gesellschaft benannt. Bei dem Stifter handelt es sich um ein 2010 verstorbenes, langjähriges GDCh-Mitglied, das den Großteil seines Vermögens der GDCh vermachte, um begabte Studierende der Chemie zu fördern.

Weitere Informationen und Bewerbung unter [www.gdch.de/hofmannstiftung](http://www.gdch.de/hofmannstiftung)



Deutsche Bunsen-Gesellschaft  
für physikalische Chemie

## Einladung zur DBG-Mitgliederversammlung

Gemäß § 10 der DBG-Satzung berufe ich hiermit die diesjährige Mitgliederversammlung  
unserer Gesellschaft für

**Montag, 5. Juni 2023, 13.30 Uhr**

nach Berlin ein.

Die Mitgliederversammlung findet statt im bcc Berlin Congress Center,

Raum B05/B06, Alexanderstr. 11, 10178 Berlin.

### **Tagesordnung**

1. Bericht des Vorstandes über das abgelaufene Geschäftsjahr
2. Feststellung der Jahresrechnung, Bericht des Schatzmeisters über den Jahresabschluss und über das laufende Geschäftsjahr
3. Entgegennahme und Genehmigung des Berichts der Rechnungsprüfer:innen
4. Entlastung des Vorstandes und der Geschäftsführung
5. Vornahme der erforderlichen Wahlen
6. Festsetzung des Jahresbeitrages
7. Beschlussfassung über Ort und Zeit der nächsten Hauptversammlungen (Bunsen-Tagungen)
8. Beschlussfassung über Satzungsänderungen und Ermächtigung des Vorstandes zu Satzungsanpassungen entsprechend behördlicher Vorgaben
9. Beschlussfassung über eingegangene Anträge
10. Verschiedenes

Diese Einladung richtet sich nur an Mitglieder der DBG.

Anträge aus der Mitgliedschaft (TOP 9) müssen gemäß § 10 Abs. 4 der DBG-Satzung einschließlich einer kurzen Begründung mindestens vier Wochen vor der Mitgliederversammlung, d.h. spätestens am **8. Mai 2023**, dem 1. Vorsitzenden vorliegen.

Anträge sind mit entsprechender Begründung an Prof. Dr. Ralf Ludwig, [geschaeftsstelle@bunsen.de](mailto:geschaeftsstelle@bunsen.de), zu senden.

Prof. Dr. Ralf Ludwig  
Erster Vorsitzender der DBG 2023/2024

