

Die Chemie und Kinetik der Wasserpolymerisation

von **Reinhard Nitzsche** und **Stefan Nitzsche**

Einführung

Das lebenswichtige Wasser und seine Eigenschaften haben seit undenklichen Zeiten die Gedanken der Menschen beschäftigt. Besonders das flüssige Wasser unter Normalbedingungen beschäftigt die Wissenschaft bis heute und war und ist immer außerdem ein Quell esoterischer Vorstellungen. Das liegt daran, dass sich das flüssige Wasser nicht in seine Bestandteile fraktionieren lässt, aber durchaus durch die in ihm gelösten Bestandteile und durch seine Strukturen Informationen über seine Vergangenheit speichert. Allgemein ist heute Stand des Wissens, dass das flüssige Wasser Cluster unterschiedlicher Zusammensetzung enthält.

Wilhelm Conrad RÖNTGEN [1] hat bereits 1892 auf Basis seiner Untersuchungen postuliert, dass flüssiges Wasser eine Mischung aus zwei Flüssigkeiten ist, also ein flüssiges Zweiphasensystem ist, einer Phase mit niedriger Dichte und einer mit hoher Dichte, ohne sie jedoch isolieren zu können.

In letzter Zeit wird verstärkt an der Aufklärung der Struktur des flüssigen Wassers geforscht. Eine gute Zusammenfassung des Standes der Forschung auf diesem Gebiet ist die Arbeit von BRINI et al. [2]. Die molekularen Strukturen des Eises und des Wasserdampfes sind anders als beim flüssigen Wasser weitgehend aufgeklärt. Die messbaren Eigenschaften des Wassers und die Forschungsergebnisse für flüssiges Wasser wurden durch physikalische Messungen oder Modellierungen gewonnen. Die Betrachtung der chemischen Vorgänge und ihrer Kinetik ist dagegen weniger erforscht, da sich das flüssige Wasser klassischen chemischen Untersuchungsmethoden entzieht.

BURNHAM et al. [3] haben als Ergebnis einer Kraftfeldmodellierung 1999 in flüssigem Wasser größere polymere Strukturen mit bis zu einigen hundert Wassermolekülen ermittelt.

Die neuere Arbeit von NASERIFAR und GODDARD [4] stellt Modellierungsergebnisse zur Struktur des flüssigen Wassers auf der Basis der RexPoN Kraftfeldmethode auf quantenmechanischer Grundlage vor. Die Ergebnisse erbringen den theoretischen Nachweis, dass die Struktur des reinen flüssigen Wassers durch polymere Strukturen bestimmt wird. Die Ergebnisse der Modellierung werden dadurch gestützt, dass sie auch die physikalischen Kenndaten des Wassers sehr gut modellieren. Die Wasserstoffbrückenbindungen in den polymeren Strukturen haben danach eine geringe Le-

bensdauer von ca. 90 fs ($1\text{fs} = 10^{-15}\text{ s}$) wodurch auch die Lebensdauer der polymeren Strukturen in reinem Wasser nicht groß sein dürfte. Thermodynamisch hat aber die Lebensdauer der Moleküle keinen Einfluss auf die chemischen Gleichgewichte, denn auch bei sehr schnellen Reaktionen gelten die Gesetze der Thermodynamik. In der Diskussion stellen die Autoren die Frage, warum alle Theoretiker die Fragen der polymeren Natur des Wassers bisher nicht untersucht hätten und welche Physik diese dynamische Natur des Wassers bewirkt.

Die Chemie und die Kinetik der Wasserpolymerisation

Mit den Modellierungen [4] werden die Gleichgewichtszustände in reinem Wasser charakterisiert, aber es bleiben die Fragen offen, welche chemischen Reaktionen zu diesen Gleichgewichten führen, welche Reaktionskinetik dabei vorliegt und welchen Einfluss die Dissoziation des Wassers und gelöste Salze auf die Struktur im realen Wasser haben. Durch die Arbeit wird jedoch theoretisch eindeutig bestätigt, dass im flüssigen Wasser polymeres Wasser, also ‚Polywasser‘ enthalten ist.

Im Folgenden wird versucht, auf der Basis dieser Arbeit, der bekannten Eigenschaften des Wassers und aus neuen Erkenntnissen aus den Ergebnissen der Wasserbehandlung nach dem MOL[®]LIK Verfahren [5-7] ein Modell des Reaktionsmechanismus und der Kinetik der Wasserpolymerisation zu erarbeiten und vorzustellen.

Flüssiges reales Wasser ist thermodynamisch eine flüssige Mischphase mit den Bestandteilen:

- Polywassercluster,
- Oxonium- und Hydroxylionen als Dissoziationsprodukte des Wassers,
- gelöste Ionen mit ihren Hydrathüllen,
- gelöste Gase und
- niedermolekulares Wasser mit den kurzlebigen Wasserstoffbrückenbindungen.

Alle Bestandteile dieses Mischphasensystems sind thermodynamisch Flüssigkeitsbestandteile und weder Kristalle, Gase, Salze oder Dämpfe. In längerer Zeit ruhendem Zustand befindet sich das Wasser unter isothermen und isobaren Bedingungen in einem thermodynamischen Gleichgewichtszustand aller Inhaltsstoffe des Wassers. Das bedeutet, dass die Hin- und Rückreaktionsgeschwindigkeiten des Verbrauchs und der Bildung des molekularen Wassers der Einzelreaktionen im reinen Wasser, der Polymerisation, der Dissoziation und der Hydratation jeweils gleich sein müssen. Das trifft auch zu für die Hydrathüllen gegebenenfalls gelöster Stoffe. Dadurch stellen sich bestimmte, das Gleichgewicht charakterisierende Konzentrationen an polymeren Was-

sermolekülen, der Hydrathüllen, den Dissoziationsprodukten des Wassers und molekularem Wasser ein. Dieses Gleichgewicht wird im Folgenden als komplexes Gleichgewicht des flüssigen Wassers bezeichnet. Das Gleichgewicht ist jedoch sehr leicht zu beeinflussen. Das zeigt sich an den makroskopischen Eigenschaften des Wassers, denn bereits bei geringem Energieeintrag, wie z.B. beim Schütteln, wird das Gleichgewicht offensichtlich etwas verschoben, was sich aber nach Beseitigung der Störung nach einer gewissen Zeit wieder in einen, den thermodynamischen Bedingungen entsprechenden Zustand einstellt.

Die makroskopischen Eigenschaften des Wassers und die Wirkungen des MOL[®]LIK-Verfahrens zur technischen Wasserbehandlung zeigen, dass andererseits das polymere Wasser bei konkreten Bedingungen relativ stabil ist. Bei Zustandsänderungen werden zur Einstellung des entsprechend den Bedingungen neuen Gleichgewichtes die Konzentrationen seiner Bestandteile erst nach einer gewissen Zeit neu eingestellt. Das gilt für die Gleichgewichtseinstellung bei Veränderungen der Reaktionsbedingungen wie der Temperatur. Nach FEDYAKIN [8] gelingt es unter spezifischen Bedingungen, die kinetischen Bedingungen durch die Gestaltung des Reaktionsraumes so einzustellen, dass in einer Langzeitreaktion stabiles hochmolekulares Polywasser gebildet und isoliert werden kann. Das ist wie auch z.B. der Mpembaeffekt mit der unter [4] angegebenen kurzen Lebensdauer der Wasserstoffbrückenbindungen nicht erklärbar. Es muss also im realen – im Gegensatz zum idealisierten reinen Wasser – eine höhere Stabilität und damit längere Lebensdauer der Wasserstoffbrückenbindungen im gebildeten Polywasser geben. Das kann nur erklärt werden, wenn die Polymerisation des Wassers durch einen Initiator ausgelöst wird, der gleichzeitig eine stabilisierende Wirkung auf die Wasserstoffbrückenbindungen des Polywassers ausübt. Als Initiatoren kommen beim realen Wasser Kationen der gelösten Salze oder der Dissoziation des Wassers in Frage.

Ergebnisse der quantenmechanischen Modellierung der Wasserstrukturen

Die ersten dazu vorliegenden Ergebnisse [3] einer Kraftfeldmodellierung 1999 in flüssigem Wasser haben größere polymere Strukturen mit bis zu einigen hundert Wassermolekülen ermittelt. Auf der Basis einer quantenmechanischen Modellierung der Struktur des flüssigen Wassers mit der RexPoN Kraftfeldmethode wurde das theoretische Ergebnis erbracht, dass das flüssige Wasser ein dynamisches polydisperses verzweigtes Polymer ist, also Polywasser enthält [4]. Die Modellierungen des flüssigen

Wassers basieren auf der Quantenmechanik. Einige Ergebnisse dieser Arbeit, die für die Klärung der kinetischen Vorgänge wichtig sind, sind in Tabelle 1 aufbereitet und zusammengefasst (die Daten der Tabelle sind für die weiteren Betrachtungen wichtig, da sie die Tendenzen der Gleichgewichte im Wasser darstellen).

Tabelle 1 Zusammensetzung des Wassers nach den theoretischen Berechnungen (mit einer Menge von 216 Wassermolekülen als Berechnungsgrundlage nach [4])

T °C	Maximaler Polymerisa- tionsgrad	Max. H ₂ O Anzahl in Hauptkette	Anzahl Seiten- ketten	H ₂ O Gehalt im Polymeren in %	H ₂ O Gehalt mit <10 H ₂ O in %	SHB je H ₂ O Molekül	Polywasser mit >10 H ₂ O in %
-123	216			100	0	3,14	100
0	177			82	18	2,28	82
25	151	39	15	70	30	2,14	70
77	72			33	67	1,85	33
127	36			17	83	1,63	17

Die Ergebnisse für -123 °C wurden ebenfalls für theoretisch angenommenes flüssiges, also in diesem Fall unterkühltes, nicht kristallisiertes Wasser berechnet. Die Ergebnisse mit der Erniedrigung des Gehaltes an polymerem Wasser von 70% bei 25 °C auf ca. 25% bei 100 °C und die entsprechende Erhöhung des Gehaltes niedermolekularem Wassers mit <10 H₂O bestätigen das Postulat von RÖNTGEN aus dem Jahr 1892, dass Wasser aus zwei Bestandteilen besteht, einem mit höherer und einem mit niederer Dichte. Sie zeigen auch, dass zwar mit steigender Temperatur die Polymerisationsreaktionsgeschwindigkeit infolge der höheren Konzentration an niedermolekularem Wasser gesetzmäßig zunehmen muss. Infolge der thermodynamischen Gleichgewichtsbedingung muss jedoch die Depolymerisationsgeschwindigkeit in höherem Maße zunehmen.

NASERIFAR und GODDARD [4] haben für die Wasserstoffbrückenbindungen im flüssigen Wasser feste Wasserstoffbrückenbindungen, so genannte SHBs (Strong Hydrogen Bonds) definiert, bei denen der Abstand der verbundenen Sauerstoffatome <0,93 nm beträgt. Die mittlere Lebensdauer der SHB wird mit 90,3 fs (1 fs = 10⁻¹⁵s) angegeben. Die Anzahl der SHB je Wassermolekül ermöglicht eine Aussage über die Bindungsverhältnisse im Wasser:

- 3 SHB = Verzweigung durch jeweils drei verbundene Wassermoleküle,
- 2 SHB = Polymerenkette durch jeweils zwei verbundene Wassermoleküle,
- 1 SHB = Kettenende des Polymermoleküls oder bimolekulares Wasser.

Die SHB-Werte der Tabelle 1 beziehen sich auf die gesamten 216 Wassermoleküle. Die Sauerstoffatome in einem Eiskristall sind über 4 SHB miteinander verbunden, so-

dass nach der Modellierung offensichtlich erst bei sehr tiefen Temperaturen zum Teil eiskristallähnliche Strukturen mit 4 SHBs im flüssigen Wasser vorliegen können. Nach den Modellierungen für flüssiges Wasser ist auch bei -123 °C keine Eisstruktur mit vier SHBs vorhanden, da das Wasser ja auch als unterkühltes Wasser, also als Flüssigkeit angenommen wurde.

Für 100 °C kann aus den Werten der Tabelle 1 ein maximaler Polymerisationsgrad von 53 und ein SHB-Wert von 1,75 je H_2O -Molekül abgeschätzt werden, das heißt also, dass das Wasser bei 100 °C zu 25 % aus Polymerketten und zu 75 % aus niedermolekularem Wasser besteht. Das niedermolekulare Wasser muss also zu einem relativ hohen Anteil aus bimolekularem Wasser bestehen.

Die SHB-Zahlen von 2,28 bis 1,75 je H_2O -Molekül zwischen 0 und 100 °C (Tab.1, Spalte 7) zeigen, dass die Wassermoleküle in diesem Bereich vorwiegend kettenförmig miteinander verbunden sind. Eiskristallähnliche Strukturen gibt es in diesem Bereich nicht.

Die Quantenmechanik ermöglicht es, die physikalischen Eigenschaften der Materie im Größenbereich der Atome zutreffend zu beschreiben. Damit werden im chemischen Sinn Gleichgewichtszustände beschrieben, ohne jedoch die Wege zum Gleichgewicht, die Kinetik der dahin führenden chemischen Reaktionen beschreiben zu können. Auch sind einzelne Ergebnisse der Autoren durch die Wahl der Bedingungen natürlich quantitativ nur für den modellierten Bereich gültig [4]. Durch die Probengröße von 216 Ausgangswassermolekülen sind Aussagen zu den realen Polymerisationsgraden der Polymermoleküle für größere Probemengen und damit reales Wasser nicht möglich. Dafür sind die unter [3] genannten Ergebnisse mit Kettenlängen von einigen hundert Wassermolekülen realistischer. Die Anteile an Polywasser, die Temperaturabhängigkeit der Polymerisationsgrade und die Gehalte an niedermolekularem Wasser mit Polymeren mit $<10\text{ H}_2\text{O}$ sind jedoch plausibel und eine gute Basis für das Verständnis der Wasserstrukturen des realen Wassers in Abhängigkeit von der Temperatur.

Die Temperaturabhängigkeit des maximalen Polymerisationsgrades, des Gehaltes an Polywasser und niedermolekularem Wasser mit Polymerisationsgraden unter 10 und der Anzahl der SHB je H_2O -Molekül ist so zu erwarten gewesen. Die errechneten Ergebnisse zu den maximalen Polymerisationsgraden und den Seitenketten sind nur für die Probengröße von 126 Wassermolekülen zutreffend. Es kann nicht sein, dass das Wasser bei 25 °C zu 70 % aus einem einzigen Polymermolekül mit 15 Seitenketten besteht und zu 30 % aus niedermolekularen Polymeren und Monomeren. Es kann nur

so sein, dass eine zu erwartende Molmassenverteilung im Polywasser vorhanden ist. Für größere Probenmengen müssen die maximalen Polymerisationsgrade höher sein. Richtig ist die Schlussfolgerung, dass das Wasser ein dynamisches, polydisperses verzweigtes Polymeres ist.

Die von den Autoren in [4] gestellte Frage ist noch zu beantworten, welche Physik die dynamische Natur des Wassers bewirkt. Diese Frage kann nur mit Hilfe weiterer Erkenntnisse der Chemie und der makroskopischen Eigenschaften des Wassers erklärt werden. Dazu zählen auch die Fragen, wie stabil die Polywassermoleküle sind (da ja nach den Lebensdauern der SHBs im fs-Bereich nur kurzlebige Polymere zu erwarten wären) und ob es Unterschiede zu natürlichem Wasser gibt (was selbst als hoch gereinigtes Wasser niemals ohne Fremdstoffe verfügbar ist). Für die Beantwortung dieser Fragen gibt es bereits hilfreiche bekannte Wassereigenschaften.

Bekannte Wassereigenschaften

Ausgehend davon, dass die Ergebnisse der quantenmechanischen Modellierung, wie unter [4] dargestellt, das Gleichgewicht in reinem Wasser ohne Anwesenheit gelöster Salze abbilden, sind kinetische Betrachtungen und makroskopische Ergebnisse der realen Wassereigenschaften zur Aufklärung der Wasserstrukturen erforderlich.

Die Dichteanomalie des Wassers mit ihrem Maximum bei 4 °C weist darauf hin, dass sich die Wasserstrukturen des flüssigen Wassers beim Abkühlen unter 4 °C bereits in Richtung Eiskristallstrukturen ändern. Diese Reaktion benötigt offensichtlich eine gewisse Zeit. Ein Beweis dafür ist, dass ein vorher über 4 °C warmes Wasser durch Schockkühlung weit unter 0 °C gekühlt, nicht zu Eis kristallisiert, sondern bei -40 °C in einen nicht kristallinen festen Glaszustand übergeht, da die polymeren Wassermoleküle offensichtlich ‚eingefroren‘ werden, wenn nicht genügend Zeit für die erforderlichen Strukturänderungen als Voraussetzung für die Eiskristallbildung im Wasser vorhanden war. Die Dichteanomalie des Wassers ist eindeutig ein Beweis dafür, dass das Wasser bei langsamer Abkühlung von 4 °C auf 0 °C seine physikalische Struktur ändert. Das ist eine langsame Zeitreaktion.

Nach dem Mbempaeffekt [9], 1963 von einem tansanischen Schüler wiederentdeckt, gefriert zuvor heißes Wasser schneller als bereits lange kaltes Wasser. Eine endgültige wissenschaftliche Erklärung dieses Effektes gab es noch nicht. Dieser Effekt kann, wie gezeigt werden wird, mit Hilfe der Kinetik und der Thermodynamik erklärt werden. Es kann nur so sein, dass sich bei schneller Abkühlung des Wassers auf niedrige Temperaturen das komplexe Gleichgewicht des Wassers analog Tabelle 1 wegen langsam

ablaufender Reaktionen noch nicht für die niedrigen Temperaturen eingestellt hat und sich dieses erst in einer Zeitreaktion bei langsamer Abkühlung einstellen kann. Die Strukturen des heißen Wassers mit ihrem höheren Gehalt an niedermolekularem Wasser sind offensichtlich ‚gefrierfreudiger‘ als die Strukturen eines bereits seit längerer Zeit kalten Wassers mit dem nach Tabelle 1 höheren Gehalt an Polywasser, die sich vor dem normalen Gefrieren und der Eiskristallbildung erst ändern müssen. Nach der Modellierung von NASERIFER und GODDARD [4] ist im heißen Wasser eine wesentlich höhere Konzentration molekularen Wassers als in kaltem Wasser vorhanden, während die Konzentration an Polywasser und der Polymerisationsgrad wesentlich geringer sind. Der Mbempaeffekt beweist, dass die Gleichgewichtseinstellung der Strukturen im Wasser bei Temperaturänderungen eine Zeitreaktion und kinetisch bedingt ist.

Das wird ebenfalls bewiesen durch den Effekt, dass kochendes Wasser in sehr kalte Luft geschüttet, sofort gefriert, während kaltes Wasser dafür längere Zeit benötigt und andere Eisstrukturen ergibt (so hat mit Schneekanonen erzeugter technischer Schnee nicht dieselbe Struktur wie normaler Schnee).

FEDYAKIN [8] hat 1962 entdeckt, dass sich bei der Kondensation von Wasser in dünnen Kapillaren mit Durchmesser $<0,1$ mm und Lagerung des Wassers in den Kapillaren über einen Zeitraum von einigen Wochen „*Wasser mit besonderen Eigenschaften*“ bildet. Es bildeten sich zwei Schichten. Die untere Schicht ist bei Normaltemperatur sirupartig, ‚siedet‘ quasi erst bei 150 °C bis 250 °C und wird erst bei -30 °C bis -60 °C fest. Es hat eine Dichte von $1,1$ bis $1,4$ g/cm³. Die obere Schicht war normales Wasser geblieben. Aus der Sicht der Polymerenchemie ist das sirupartige Wasser ein Polywasser, das eine Zersetzungstemperatur von 150 °C bis 250 °C und eine Glas-temperatur von -30 °C bis -60 °C hat. Die unterschiedliche Dichte bestätigt RÖNTGENs Postulat [1] von zwei Wasserbestandteilen (das heißt: von zwei flüssigen Phasen unterschiedlicher Dichte). An der Universität von Maryland wurde 1969 die molekulare Struktur dieses Polywassers als verzweigte Polymerketten erkannt. Die dort dargestellte Struktur entspricht der von NASERIFER und GODDARD [4] modellierten. Damit ist die Struktur des Polywassers nochmals bestätigt. Nachdem lange Zeit mit hohem Aufwand auf dem Gebiet des FEDYAKINschen Polywassers geforscht wurde und mit steigender Wasserreinheit die Reproduktion der Ergebnisse immer schwieriger wurde, führte man seine Ergebnisse auf ‚Wasserunreinigungen‘ zurück. Es wurde gefunden, dass die ursprünglichen Verunreinigungen des kondensierten Wassers (Natrium-, Kalium-, Karbo-

nat- und Chloridionen-Verunreinigungen) sich im Polywasser konzentriert hatten. Seit über 20 Jahren wird auf diesem Gebiet nicht mehr geforscht.

Die Ergebnisse sind jedoch immer noch von Interesse, da sie zum einen zeigen, dass offensichtlich in genügend dünnen Kapillaren die Kinetik der Reaktionen im Wasser durch die Behinderung der Brownschen Molekularbewegung der Wassermoleküle in Querrichtung so beeinflusst wird, dass die Polymerisation zu hochmolekularem nicht mehr wasserlöslichem Polywasser und dessen isolierte Gewinnung möglich sind. Die Behinderung der Brownschen Molekularbewegung führt durch die Wandeffekte zu einer Verringerung der kinetischen Energie der Wassermoleküle und damit zur Verringerung der Depolymerisationsgeschwindigkeit des Polywassers. Andererseits ist gerade das Ergebnis, dass sich die Verunreinigungen des eingesetzten Wassers im Wasserpolymerisat konzentriert haben, ein Beweis dafür, dass diese an der Wasserpolymerisationsreaktion direkt beteiligt sein müssen, denn die leicht löslichen Alkalisalze sollten sich nach dem allgemeinen Verständnis eines Chemikers im niedermolekularen Wasser anreichern und nicht in dem niedermolekularen Wasser unlöslichen Polywasser. Sie sind also offensichtlich direkt chemisch im Polywasser gebunden und ein eindeutiger Hinweis auf die Kinetik der Wasserpolymerisationsreaktion, die im Folgenden diskutiert wird.

Polymerisationsreaktionen bei der radikalischen, der kationischen oder der Polykondensation werden alle durch Startinitiatoren ausgelöst. Wenn es mit steigender Wasserreinheit immer schwieriger wurde, die Ergebnisse von FEDYAKIN [8] zu reproduzieren, kann das nur daran gelegen haben, dass die Ionen als Initiator der Wasserpolymerisation wirken mit der Konsequenz, dass bei fehlenden Ionen keine Bildung langzeitstabiler, nicht in niedermolekularem Wasser löslicher Polywassermoleküle stattfinden kann. Andererseits gilt auch der Schluss, dass durch den Initiator die Wasserstoffbrückenbindungen in der Polymerenkette stabilisiert werden und eine höhere Lebensdauer als 90 fs haben.

Neue Erkenntnisse zur polymeren Struktur des Wassers

Ein technisches Verfahren, das MOL[®]LIK Verfahren zur katalytischen Wasserbehandlung [5,6] mit einem oxidierten Chrom-Nickelstahlkatalysator, angewandt z.B. zur Eliminierung von Biofilmen und zur Verhinderung der Ausfällung anorganischer Stoffe in wasserführenden Systemen gestattet weitgehende Rückschlüsse auf die Chemie des flüssigen Wassers. Durch dieses Verfahren wird das Wasser bei Normaltemperatur

behandelt. Eine wissenschaftlich begründete Erklärung für die dabei erzielten Ergebnisse haben die Erfinder bisher nicht gefunden.

Die Autoren sind der Meinung, dass die katalytische Wirkung eine Depolymerisation von Polywassermolekülen ist und dadurch die Konzentration des niedermolekularen Wassers gegenüber dem natürlichen komplexen Gleichgewicht unter den entsprechenden Bedingungen erhöht wird. Da die in dem Polywassermolekül gebundenen Wassermoleküle nicht an der Dissoziation teilnehmen können, muss bei einer Erhöhung der Konzentration an dissoziationsfähigem, niedermolekularem Wasser der pH-Wert fallen. Das ist tatsächlich der Fall. Er sinkt bei Normaltemperatur von 7 etwa um 0,2 auf 6,8 [10]. Die Konzentration der Oxoniumionen steigt so von 10^{-7} auf $10^{-6,8}$ Mol/l. Das entspricht einer Erhöhung der Konzentration des molekularen Wassers um etwa 60%. Auf der Grundlage der Ergebnisse der Tabelle 1 kann dadurch die Konzentration des niedermolekularen Wassers bei 25 °C von 30 % auf 48 % gestiegen sein. Das Wasser bleibt auch neutral, da die Hydroxylionenkonzentration in gleichem Maße wie die Oxoniumionenkonzentration steigt. Das beweist die Wirkung der Wasserbehandlung nach dem MOL[®]LIK-Verfahren und auch das Vorhandensein von Polywasser mit höherer Lebensdauer im Wasser. Die nach dem Verfahren angewandte Wasserbehandlung wird zwar keine vollständige Depolymerisation bewirken. Das ist auch nicht notwendig, da die Wirkung des behandelten Wassers eindeutig und die Konzentrationserhöhung des niedermolekularen Wassers um 60% beachtlich ist. Offensichtlich ist sie für die ‚Antiscaling‘- und ‚Antifouling‘-Wirkung ausreichend.

Wie kommt es nun durch den Katalysator zu dieser Depolymerisation? Eine heterogene Katalyse ist die Beschleunigung einer chemischen Reaktion an einem festen Katalysator durch Verringerung der Aktivierungsenergie. Die Reaktionsschritte sind dabei vereinfacht gesagt, Chemisorption eines Reaktanten an einem katalytisch aktiven Zentrum des Katalysators und anschließende Reaktion. Zur heterogen katalysierten Depolymerisation des Wassers gibt es zwei Fragen zu klären: „*Was wird chemisorbiert?*“ und „*Was ist die chemische Reaktion?*“

Dass es eine echte heterogene Reaktion ist, zeigt sich daran, dass bei einem im Dunklen angeordneten Katalysator des MOL[®]LIK-Verfahrens die Wirkung nach einer gewissen Zeit nachlässt und der Katalysator danach wieder aktiviert werden muss. Die Aktivierung geschieht einfach durch Bestrahlung mit sichtbarem Licht [10]. Die heterogene Reaktion ist zumindest eine partielle Depolymerisation des Polywassers. Das Wasser wird durch diese Reaktion aus dem komplexen natürlichen Gleichgewicht ge-

bracht und die heterogene Reaktion wirkt in Richtung eines den Reaktionsbedingungen entsprechenden, jedoch nicht bekannten anderen Gleichgewichtes. Die Reaktion am Katalysator ist eine heterogene Reaktion, für deren Kinetik noch eine Klärung notwendig ist.

Die Kinetik der Polymerisation und Depolymerisation des Wassers

Mit den Untersuchungsergebnissen von NASERIFAR und GODDARD [4] wurde die Frage nach der Chemie und der Kinetik der Wasserpolymerisation nicht beantwortet. Die Frage nach der Kinetik der Polymerisation war noch offen und es besteht ein gewisser Widerspruch zwischen den Lebensdauern der SHBs im fs-Bereich und den durch den Mbempaeffekt [9], das Polywasser von FEDYAKIN [8] und die anderen, auf langlebigere Strukturen im Wasser hinweisenden Wassereigenschaften. Hier müssen Kinetik, Thermodynamik und klassische physikalisch-chemische Überlegungen helfen. Die Modellierungsergebnisse entsprechend Tabelle 1 sind auch bei dieser Suche hilfreich. Im gesamten Temperaturbereich von 0-100 °C sind nach [4] ansteigend 18% bis weit über 75% niedermolekulares Wasser mit <10 H₂O-Molekülen, das sich im komplexen thermodynamischen Gleichgewicht mit den Polywassermolekülen der unterschiedlichen Polymerisationsgrade, den hydratisierten Ionen und den Dissoziationsprodukten des Wassers befindet.

Die Suche nach dem chemisorbierten Reaktanden führt automatisch zur Suche nach einer funktionellen Gruppe am polymeren Wassermolekül und damit zur Frage nach dem Reaktionsmechanismus der Polymerisation. Da sich das FEDYAKINSche Polywasser mit absolut reinem Wasser anscheinend nicht reproduzieren lässt und die ‚Verunreinigungen‘ des bei FEDYAKIN kondensierten Wasserdampfes, die Natrium-, Kalium-, Karbonat- und Chloridionen sowie weiterer Substanzen an der Wasserpolymerisation beteiligt sein müssen, ist die Annahme berechtigt, dass der Polymerisationsinitiator das Kation eines der als ‚Verunreinigung‘ gelösten Salzes ist.

Als Initiator der Wasserpolymerisation wird daher ein Kation angenommen. Da es konkret nicht bekannt ist, wird es mit I⁺ bezeichnet. Die Polymerisation kann nun schrittweise nach der Formel (Gl.1) angenommen werden:



An der wachsenden Kette kann durch Reaktion mit Wassermolekülen auch noch der Start von Seitenketten erfolgen, welche die Modellierung entsprechend Tabelle 1 ausweist. So werden die verzweigten Polywassermoleküle entsprechend Tabelle 1 gebil-

det. Im Gegensatz zu einer irreversiblen radikalischen Polymerisation (wie z.B. der Hochdruckethylenpolymerisation) ist die Wasserpolymerisation reversibel. Das bedeutet, dass der Polymerisationsgrad und die Polymerstrukturen sich entsprechend den Reaktionsbedingungen reversibel einstellen.

Durch die positive Ladung des Startinitiators werden offensichtlich die Wasserstoffbrückenbindungen in den Polymermolekülen verstärkt und stabilisiert, wodurch sie eine weit höhere Lebensdauer als ca. 90 fs haben bis hin zu dem stabilen FEDYAKINschen Polywasser. In den Polywassermolekülen nimmt der Einfluss der positiven Ladung mit der Kettenlänge sicher ab, wodurch die Wasserstoffbrückenbindungen schwächer werden. Kettenendreaktionen, wodurch die Polymerisation abgeschlossen würde, gibt es bei diesen reversiblen Reaktionen nicht, sondern die Wasserstoffbrückenbindungen des Kettenendes erreichen das energetische Niveau des nicht polymerisierten Wassers entsprechend den Gleichgewichtsbedingungen, so dass Polymerisations- und Depolymerisationsgeschwindigkeiten gleich werden. Die Ketten stehen dann entsprechend den Reaktionsbedingungen im thermodynamischen Gleichgewicht mit ihrer Umgebung. So wird sich dann im Wasser entsprechend den jeweiligen Reaktionsbedingungen nach den erforderlichen Reaktionszeiten das entsprechende komplexe thermodynamische Gleichgewicht einstellen.

Im Gleichgewicht findet bevorzugt an den Kettenenden der Hauptkette und der Seitenketten eine ständige Polymerisation und Depolymerisation mit gleichen Geschwindigkeiten der Bildung und des Verbrauchs an molekularem Wasser statt, wodurch es nicht zur Bildung des durch den Reaktionsraum bedingten, hochmolekularen ‚wasserunlöslichen‘ FEDYAKINschen Polywassers kommen kann sondern zu der bekannten Clusterbildung im Wasser. Bei Temperaturerhöhung nimmt die Depolymerisationsgeschwindigkeit zu, bis der Polymerisationsgrad soweit abgesunken ist, dass das entsprechende Gleichgewicht durch die Erhöhung der Konzentration an molekularem Wasser und die ebenfalls temperaturbedingte Erhöhung der Polymerisationsgeschwindigkeit wieder entsprechend den Reaktionsbedingungen erreicht ist. Damit verbunden sind zwei Effekte. Die Konzentration des Polywassers und seine Kettenlänge fallen im Gleichgewicht mit steigender Temperatur und die Konzentration des Wassers mit <10 H₂O Molekülen steigt an wie in Tabelle 1 dargestellt.

Andererseits gibt es jedoch, bedingt durch das breite Spektrum der Bindungskräfte, auch bei geringem Energieeintrag merkliche Gleichgewichtsveränderungen, die z.B. beim Schütteln anders sind als beim Rühren eines Getränkes, ohne jedoch das Wasser so weit aus dem natürlichen Gleichgewicht zu bringen wie mit dem MOL[®]LIK-Verfahren.

Nun muss nur noch der Mechanismus der heterogenen Reaktion ermittelt werden. Nach der Offenlegungsschrift von JENTSCH et al. [6] haben die metalloxidischen Katalysatoren eine Spinellstruktur. Spinelle sind farbig und so ist auch der Katalysator an der Oberfläche braun. Er absorbiert also einen Teil des sichtbaren Lichtes, dessen Energie eine Erhöhung des Energieniveaus der negativen Ladungen an der Oberfläche des Spinellkristalls bewirkt, und zwar der Elektronen der Sauerstoffatome. Das ist ein photoelektrischer Effekt, der auch zur Herstellung einer Solarzelle genutzt werden kann [11].

Offensichtlich wird das Wasserpolymermolekül $\Gamma^+ - n (H_2O)_n$ mit der funktionellen Γ^+ -Gruppe an einem aktiven negativen Zentrum des Katalysators chemisorbiert. Dabei wird die positive Ladung der Γ^+ -Gruppe durch die negative Ladung des Katalysators neutralisiert. Durch diese Ladungsneutralisierung, die mit hoher Geschwindigkeit auf das gesamte Polymermolekül wirkt, werden die Wasserstoffbrückenbindungen in der Kette geschwächt, so dass die Bindungsverhältnisse in den Ketten so ähnlich wie in dem Wasseranteil mit <10 Wassermolekülen sind. Kinetisch wird durch die Chemisorption die Aktivierungsenergie der Depolymerisationsreaktion entsprechend den Gesetzen der heterogenen Katalyse erniedrigt, dementsprechend die Depolymerisationsgeschwindigkeit erhöht und das polymere Wasser ohne die stabilisierende Wirkung der positiven funktionellen Initiatorgruppe mit der Geschwindigkeit entsprechend der Lebensdauer der SHBs von ca. 90 fs sehr schnell abgebaut.

Bei Einsatz des MOL[®]LIK-Katalysators im Dunkeln verliert der Katalysator mit der Zeit seine Wirksamkeit, wird also im Sinne der heterogenen Katalyse vergiftet, das heißt, dass die für die Katalysatorwirksamkeit verantwortlichen aktiven negativen Zentren entladen wurden. Durch Beleuchtung mit sichtbarem Licht wird der Katalysator wieder aktiviert und kann dann eine gewisse Zeit wieder im Dunkeln betrieben werden. Die Erfindungen der Nutzung des Katalysators durch Beleuchtung als Photozelle [11] und durch Beleuchtung in Kontakt mit einer wässrigen Lösung zur Wasserstoffherzeugung [12] zeigen, dass auf der Katalysatoroberfläche die Lichtenergie Elektronen photoelektrisch energetisch anregt. In wässriger Lösung wird die Katalysatoroberflä-

che im elektrochemischen Sinn dadurch eine Kathode, an der Wasserstoffionen zu Wasserstoff reduziert werden. Dadurch werden einerseits die angeregten Elektronen am Katalysator verbraucht und damit für die Chemisorption der positiv geladenen Polymermoleküle unwirksam. Durch nicht angeregte Elektronen werden sie entsprechend dem photoelektrischen Effekt der Spinelle [11] aus der Trägermetallfolie ersetzt und der Katalysator wird quasi ‚vergiftet‘. Der bei der ‚Vergiftung‘ erzeugte wenig lösliche Wasserstoff bildet offensichtlich Bläschen im Wasser. Diese Bläschen sind die Ursache für die Trübung [10] des nach dem MOL[®]LIK-Verfahren behandelten Wassers. Das ist sowohl ein Beweis für die Wirkungsweise des Katalysators durch dessen angeregte negative Ladungen in dem durch sichtbares Licht aktivierten Zustand wie auch dafür, dass die Wasserpolymerisation durch ein positives Startion initiiert wird.

Eine angenommene Bildung von Wasserdampfbläschen [10] unter den Temperatur- und Druckbedingungen des MOL[®]LIK-Verfahrens ist dagegen thermodynamisch und auch praktisch nicht möglich, da im Wasser auch bei unterkühltem Dampf immer genügend Kondensationskeime vorhanden sind. Flüssige monomere Wassermoleküle und dampfförmige Wassermoleküle gehorchen zwar den gleichen thermodynamischen Gesetzen, haben aber thermodynamisch völlig unterschiedliche Eigenschaften.

Das Wasser behält den Zustand mit der höheren Konzentration an niedermolekularem Wasser auch nach der Behandlung mit dem Katalysator längere Zeit bei, ehe sich der komplexe Gleichgewichtszustand des Wassers entsprechend den herrschenden Reaktionsbedingungen wieder eingestellt hat. Diese nicht exakt messbare Zeit liegt bei Normaltemperatur im Stundenbereich, da die Wirkung des behandelten Wassers im großtechnischen Einsatz nach dem Transport in einer 8 km langen Rohrleitung noch nach über 30 Minuten vorhanden ist [13]. Danach ist wegen nachlassender Wirksamkeit eine neue Katalysatorbehandlung des Wassers notwendig [10]. Wird der Katalysator unter Tageslichtbeleuchtung eingesetzt, bleibt er zeitlich unbegrenzt aktiv, während er bei Anwendung im Dunkeln nach einer gewissen Zeit beim Nachlassen der Aktivität durch eine Beleuchtung wieder auf volle Leistung aktiviert wird.

Alle unter [5,6] beschriebenen Wirkungen des nach dem MOL[®]LIK-Verfahren behandelten Wassers sind auf die Wirkung der erhöhten Konzentration des molekularen Wassers zurückzuführen. Die erhöhte Konzentration des molekularen Wassers erhöht z.B. die Löslichkeit von Stoffen und deren Lösegeschwindigkeit und erniedrigt den Energieverbrauch bei Umkehrosmose und Druckfiltrationen.

Zur bioziden Wirkung des behandelten Wassers haben die Autoren des Verfahrens noch keine befriedigende Erklärung gefunden. Für die biozide Wirkung gibt es eine plausible Erklärung: Zur Stabilisierung des Kreislaufs eines Menschen bei hohem Blutverlust darf kein destilliertes Wasser verwendet werden sondern nur eine isotonische Lösung, da sonst die roten Blutkörperzellen infolge des osmotischen Druckes platzen. Dasselbe geschieht bei einem Regen mit reifen Süßkirschen.

Nach van 't HOFF gilt für den osmotischen Druck einer Lösung Gleichung 2:

$$P = i \times c \times R \times T \quad \text{Gl.2}$$

c = die Konzentration der gelösten Stoffes

Unter isothermen Bedingungen steigt der osmotische Druck linear mit der Konzentration der gelösten Stoffe. Für den osmotischen Druck der wässrigen Lösungen sind aber offensichtlich nur die im molekularen Wasser gelösten Stoffe verantwortlich. Das Polywasser hat daran keinen Anteil. Die Konzentration des molekularen Wassers steigt (wie auf Seite 347 dargestellt) um etwa 60 %. Damit sinken die Konzentration der gelösten Stoffe im molekularen Wasser und der osmotische Druck um etwa 40 %. Wie unter [14] dargestellt, sinkt dementsprechend der notwendige Druck bei der Ultrafiltration mit behandeltem Wasser um 50-70 %.

Die biozide Wirkung des behandelten Wassers beruht mit Sicherheit auf dem Abtöten der Bakterien durch Platzen der Zellen infolge der dadurch erhöhten Diffusion des molekularen Wassers und den dadurch erhöhten Druck in den Zellen. Damit ist auch verständlich, dass bei der technischen Anwendung bereits längere Zeit gebildete „Fouling“-Beläge in technischen Anlagen beseitigt werden und auch dass dies längere Zeit dauert, da die Diffusionsvorgänge nicht schnell sind.

Die unter Berücksichtigung der Wirkungen des MOL[®]LIK-Verfahrens abgeleiteten Ergebnisse sind sowohl eine Bestätigung des bereits 1999 erarbeiteten Strukturmodells des Polywassers [3] und der Modellierung von NASERIFAR und GODDARD [4], dass das flüssige Wasser ein „*dynamisches poldisperses verzweigtes Polymer*“ ist. Das Polywasser ist ein relativ stabiles Polymeres mit einer relativ hohen Lebensdauer, das sich im Wasser durch die Wirkung eines Polymerisationsinitiators bildet und die bekannten Cluster als zweite Flüssigphase im Wasser bildet. Wenn das Polywasser wie bei dem FEDYAKIN-Experiment unter speziellen kinetischen Bedingungen isoliert hergestellt wird, ist es bei Normaltemperatur eine chemisch stabile Verbindung.

Der Einfluss gelöster Stoffe und Ionen außer ihrer Initiatorwirkung wurde nicht explizit betrachtet. Sie nehmen natürlich auch Einfluss auf die Wasserstrukturen. Durch die

Hydrathüllen stehen sie im Gleichgewicht mit der Konzentration des molekularen Wassers und nehmen somit Einfluss auf das komplexe Gleichgewicht des Wassers. Mit steigender Konzentration an gelösten Salzen muss daher die Konzentration an Polywasser im Wasser abnehmen. So sind auch die durch das nach dem MOL[®]LIK-Verfahren behandelten Wassers bewirkten Löslichkeitsverbesserungen, erhöhten Löseseigenschaften und der Verhinderung von Scaling-Prozessen durch die erhöhte Konzentration molekularen Wassers erklärbar.

Mit diesem Modell des Wassers werden einige bisher offene Fragen der Chemie des Wassers im Zusammenhang mit dem makroskopischen Verhalten des flüssigen Wassers beantwortet. Das ergibt sich vor allem aus der Erkenntnis, dass flüssiges Wasser einerseits ein sehr reaktives Medium ist, aber andererseits kinetisch bedingt ein doch recht träges Medium bei der Einstellung der thermodynamischen Gleichgewichte bei Zustandsänderungen unter Normalbedingungen ist.

Zum 30-jährigen Jubiläum des SCI

Was kann die 30-jährige Arbeit des Fördervereins ‚Sachzeugen der chemischen Industrie e.V.‘ (SCI) besser würdigen als das geschaffene **Deutsche Chemie-Museum (DChM)** in Merseburg, die monatlichen, vielseitigen Kolloquien und die periodisch erscheinenden **„Merseburger Beiträge zur Geschichte der chemischen Industrie Mitteldeutschlands“**. Daher seien unseren eher wissenschaftlichen Betrachtungen zum Wasser einige Anmerkungen zum 30-jährigen Jubiläum des SCI hinzugefügt.

Betrachten wir die Fotos auf dem Einband der **„Merseburger Beiträge ...“** so ist auf dem Titelbild ein Glanzstück des DChM zu sehen: der Neubau mit dem Herzstück der musealen Sammlung, einer Hochdruckammoniaksyntheseanlage aus den Leuna-Werken mit der Kolbenstange eines Synthesegasverdichters im Vordergrund, der eigentlichen Reaktorkammer mit dem stehenden Hochdruckreaktor aus dem Jahr 1917 in der Mitte und der Kompressorenhalle mit einem Gaskompressor mit Dampfmaschinenantrieb im Hintergrund.

Der Synthesereaktor, erkennbar an den dicken Flanschen in der Mitte und oben am Reaktor, war 1917 absolut der modernste Stand der Hochdrucktechnik für Drücke bis zu 30 MPa und Temperaturen bis etwa 500 °C. Der Flansch in der Mitte des Reaktors war notwendig, weil es mit den damaligen Methoden der Fertigungstechnik nicht möglich war, solche Hochdruckausrüstungen mit einer Länge von mehr als 5 m zu fertigen. Auf dem Bild nicht zu erkennen, aber in der Nähe sichtbar, ist der Reaktor von einem Netz kleiner Bohrungen überzogen. Bei der Entwicklung des Haber-Bosch-Verfahrens zur Ammoniaksynthese im kleintechnischen Maßstab mussten die Erfinder feststellen, dass der eingesetzte damals verfügbare Kohlenstoffstahl den Synthesebedingungen nicht standhielt, sondern nach kurzer Zeit versagte. Es wurde festgestellt, dass der Kohlenstoffstahl unter den Bedingungen hohen Druckes und hoher Temperatur durch den Wasserstoff des Synthesegases entkohlt wurde und dadurch seine Festigkeit verlor. Eine geniale Erfindung schaffte dann die Möglichkeit, auch mit Hochdruck-

reaktoren aus Kohlenstoffstahl das Haber-Bosch-Verfahren großtechnisch zu realisieren. Die bereits genannten von außen sichtbaren Löcher im Reaktor sind Teil dieser Erfindung. Der Hochdruckteil des Reaktorrohres wurde mit Löchern versehen und anschließend ein kohlenstoffarmes Weicheisenkernrohr in den Hochdruckteil eingeschrumpft. Das nicht drucktragende Weicheisen wird in seiner Struktur nicht verändert, aber bei den herrschenden Synthesebedingungen diffundiert doch eine gewisse Wasserstoffmenge durch das Eisen. Dieser Wasserstoff konnte nun durch die Bohrungen im drucktragenden Reaktormantel in die Atmosphäre entweichen ohne dessen Struktur negativ zu beeinflussen. Der im Museum aufgebaute, so gefertigte Reaktor hat über sieben Jahrzehnte Betriebszeit in Leuna hinter sich.

Bereits sechs Jahre nach der Inbetriebnahme der Ammoniaksynthese wurde 1923 die erste großtechnische Hochdruckmethanolanlage in Leuna realisiert. Hier gab es ein anderes Materialproblem, das gelöst werden musste. Das Synthesegas ist bei der Methanolsynthese ein Gemisch aus Kohlenmonoxid und Wasserstoff. Hier bestand nicht die Gefahr der Entkohlung sondern im Gegenteil die Gefahr der Versprödung des Stahls durch Kohlenstoffbildung an der Reaktorwand. Dieser Gefahr wurde durch Auskleidung des Reaktors mit Kupfer begegnet, das die Diffusion des Kohlenmonoxids verhinderte. Die großtechnische Realisierung der Methanolsynthese erfolgte in Leuna, da dort wegen der damaligen Wirtschaftskrise Hochdruckraum zur Verfügung stand. Es ist anzunehmen, dass dafür ein umgerüsteter Ammoniakreaktor der oben genannten Bauart eingesetzt wurde. Die Entwicklung der Hochdrucktechnik ging in den 1920er Jahren bis heute rasant mit der Entwicklung wasserstoffbeständiger Chrom-Molybdänstähle weiter, so dass bereits Ende der 1920er Jahre Reaktoren für die Kohlehydrieranlagen in Leuna mit einer Länge von über 10 m aus einem Stück eingesetzt werden konnten. Das zeigt uns, dass chemisch-technologische Entwicklungen immer ein breites Feld boten, das Wissen um die Chemie von Reaktionen der Stoffe zu erweitern.

Literaturverzeichnis

- [1] W.C. Röntgen: ‚Ueber die Constitution des flüssigen Wassers‘, Ann. Phys. 1892, 281, S.91-97
- [2] E. Brini, et al.: ‚How Water’s Properties Are Encoded in Its Molecular Structure and Energies‘, Chem. Rev. 2017, 117, 12385-12414
- [3] C.J. Burnham, J. Li, S.S. Xantheas, M.J. Lesli: ‚The Parametrization of a Thole Type All-Atom polarizable Water Model‘, J. Chem.Phys. 1999 110, 4566-4581
- [4] S. Naserifar, W.A. Goddard: ‚Liquid water is a Dynamic polydisperse branched polymer‘, PNAS, February 5.2019, vol. 116, no. 6, 1998-2003
- [5] J. Koppe, et al.: DE 10 2008 036 369 B4. 2017.03.30
- [6] H. Jentsch, et al.: DE 10 2018 133 086 A1 2019.06.27
- [7] Reinhard Nitzsche: ‚Nachgehende Betrachtungen zur Wirkungsweise der MOL*LIK-Katalysatoren‘, in: ‚Merseburger Beiträge ...‘, Heft 44, 2/2021, S.139-146
- [8] N.N. Fedyakin: ‚Change in the structure of Water during Condensation in Capillaries‘, Kolloid Zhournal, 24, 1962, 497
- [9] E.B. Mpemba, D.G. Osborne: Physics Education. Band 4, Nr. 3 IOP Publishing, 1.5.1969
- [10] Jürgen Koppe: Persönliche Mitteilung
- [11] J. Koppe, et al.: DE 10 209 004 966 A1 2009.07.23

- [12] C. Kopp, et al: DE 10 2008 028 143 A1 2009.12.24
[13] A.Becker, et al.: ‚Mikrobiologisch einwandfrei‘, Verfahrenstechnik 05/2020, S.2
[14] Jürgen Koppe: ‚Merseburger Ansichten zum Wasser‘, in: ‚Merseburger Beiträge zur Geschichte der chemischen Industrie Mitteldeutschlands‘ (Hrsg.: SCI), 25.Jg., Heft 41, 1/2020, S.95



Dr. Reinhard Nitzsche: 1936 geboren in Neukirchen/Kreis Merseburg, 1950-54 Oberschule und Abitur an der August-Hermann-Francke-Oberschule in Halle/Saale, 1954-60 Studium an der TH Chemie Leuna-Merseburg, 1960-64 Assistent und Promotion bei Prof. Dr. Rolf LANDSBERG (1920-2003), 1965-76 tätig in der Forschungsabteilung Hochpolymere der Leuna-Werke, Mitentwickler des Leunaer ‚Polymir‘/‚Mirathen‘-Verfahrens, 1976-80 Abteilungsleiter Polyolefinsynthese in der Betriebsdirektion Caprolactam und Plaste der Leuna-Werke, 1981-84 Forschungsdirektor, 1985-90 Produktionsdirektor und Stellvertretender Generaldirektor des VEB Leuna-Werke ‚Walter Ulbricht‘, 1988-90 Vorsitzender der Chemischen Gesellschaft der DDR, 1991 Abteilungsleiter Miramid der Leuna-Werke, seit 1992 im Ruhestand.



Dipl.-Ing. Stefan Nitzsche: geboren 1968 in Weißenfels, Berufsausbildung mit Abitur Leuna, 1989-1994 Studium von Maschinenbau und Elektrotechnik, Dipl.-Ing. für Glas- und Keramiktechnologie, mehrere Arbeitsaufenthalte in den USA (Halbleiterindustrie, Technische Keramik), seit 1994 verschiedene Vertriebs- und Managementpositionen in Keramik-, Photovoltaik- und Elektroindustrie.

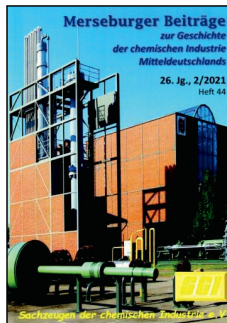
Dr. Reinhard Nitzsche ist seit 24.5.2012 Mitglied des SCI.

Beiträge in dieser Reihe: „*Die historische Entwicklung der Hochdruckhomo- und –copolymerisation des Ethylens in Leuna*“, Heft 32_1/2012, S.5-57 / „*Über Geschichte und Hydrologie der Auen um Hohenweiden*“, Heft 35_1/2015, S.34-50 / „*Leuna-Werk und Umwelt 1917-90*“, Heft 36_1/2016, S.118-133 / unter der Rubrik ‚Zeitzeugen berichten‘: „*Die Entwicklung der Wasserstoffherzeugung in den Leuna-Werken von 1917- bis 1990*“, Heft 44_2/2021, S.131-138 / „*Die Leuna-Werke und die Tagebaue des Geiseltals*“, Heft 46_2/2022, S.49-54 / unter ‚Wortmeldung‘: „*Nachgehende Betrachtungen zur Wirkungsweise der MOL*LIK-Katalysatoren*“, Heft 44_2/2021, S.139-146

Plan der Kolloquien für das Jahr 2023

255. 19.1.2023 (ursprünglich als 248. Kolloquium für den 20.1.2022 *geplant*)
Dr. Ralf SCHADE, Archivar der Stadt Leuna, Leuna
„Die erste Straßenbahn kam zum 15.2.1919 auf dem Haupttorplatz in Leuna an“
bereits durchgeführt: 55 Teilnehmer
256. 16.2.2023 (ursprünglich als 250./249. Kolloquium für den 18.12.2021 bzw. 17.2.2022 *geplant*)
Dr. Christoph MÜHLHAUS, Netzwerksprecher Chemie, Vorstand HYPOS E.V., Halle
„Strukturwandel als Chance für die Chemieindustrie im mitteldeutschen Revier“
bereits durchgeführt: 56 Teilnehmer
257. 16.3.2023
Dipl.-Phys. Peter Michael RAINER, Leuna
„Mit 250 bar zum Ammoniak-Die Gaskompressoren im Leuna-Werk 1916-1997“
258. 20.4.2023
Dr. Almut VOGT, Halle
„Das Schülerprojekt „Chemie zum Anfassen“ – eine Erfolgsgeschichte“
259. 25.5.2023
Michael EILE, Bad Langensalza
„Die Schifffahrt als Verkehrsträger im Raum Merseburg von 1795-1945“
260. 15.6.2023
Dr. Jürgen KOPPE, MOL Katalysatortechnik GmbH Merseburg, Schkopau
„Die Geschichte der Luftbefeuchtung“
261. 21.9.2023
Dipl.-Ing. Eberhard M. LEUCHT, Merseburg
„Bau eines Wasserkraftwerkes auf der Merseburger Königsmühle-Insel“
262. 19.10.2023
Dipl.-Ing. Thomas NOBKE, Schkopau
„Abenteuer Nordatlantik“
263. 16.11.2023
Thomas BEHREND, Geschäftsführer TotalEnergies Raffinerie Mitteldeutschland GmbH, Leuna
„Zukunftschancen im Kontext von Energiewende und Strukturwandel“

Die bisher erschienenen Hefte der SCI-Schriftenreihe
„Merseburger Beiträge zur Geschichte der chemischen Industrie Mitteldeutschlands“



- Heft 1 (1/1996)*** Von der Kohle zum Kautschuk I**
 Heft 2 (2/1996) Von der Kohle zum Kautschuk II
 Heft 3 (3/1996) Von der Kohle zum Kautschuk III
 Heft 4 (4/1996) Von der Kohle zum Kautschuk IV
 Heft 5 (1/1997) Energie für die Chemie
 Heft 6 (2/1997) Vom Steinsalz zum PVC-Fenster I
 Heft 7 (3/1997) Vom Steinsalz zum PVC-Fenster II
 Heft 8 (4/1997) Vom Steinsalz zum PVC-Fenster III
 Heft 9 (1/1998) Technik und Chemie I
 Heft 10 (2/1998) Technik und Chemie II
 Heft 11 (3/1998) Vom Erdöl zu Kraft- und Schmierstoffen
 Heft 12 (4/1998) Zeitzeugnisse I
 Heft 13 (1/1999) Technik und Chemie III
 Heft 14 (2/1999) Bergbau und Chemie I
 Heft 15 (3/1999) Zeitzeugnisse II
 Heft 16 (4/1999) Bergbau und Chemie II
Heft 17 (1/2000) Schmieröle aus dem Geiseltal
 Heft 18 (2/2000) Qualität und Dispersionen
 Heft 19 (1/2001) Gummi und Reifen
 Heft 20 (2/2001) Polystyrol
 Heft 21 (1/2002) Bomben auf die Chemieregion
 Heft 22 (2/2002) Verkehrsinfrastruktur und Logistik
 Heft 23 (1/2003) 10 Jahre Sachzeugen der Chemischen Industrie e.V.
 Heft 24 (1/2004) 50 Jahre Hochschule in Merseburg
 Heft 25 (1/2005) Technik und Chemie IV
 Heft 26 (1/2006) Propylenoxid
 Heft 27 (1/2007) Braunkohleveredlung
 Heft 28 (1/2008) Kunst und Chemie
 Heft 29 (1/2009) Von der Kohle zum Kautschuk V
 Heft 30 (1/2010) Zeitzeugnisse III
 Heft 31 (1/2011) Energie für Mitteldeutschland
 Heft 32 (1/2012) Hochdruckpolyethylen
 Heft 33 (1/2013) Zeitzeugnisse IV
 Heft 34 (1/2014) Caprolactam
 Heft 35 (1/2015) Schkopau und sein Umfeld
 Heft 36 (1/2016) 100 Jahre Chemiestandort Leuna
 Heft 37 (1/2017) Rheologie und Verarbeitungstechnik
Heft 38 (1/2018) 25 Jahre „Sachzeugen der chemischen Industrie e.V.“ (SCI)
 PVC
 Heft 39 (1/2019) Die Leuna-Werke – gestern und heute
 Heft 40 (2/2019) Wasser und Chemie
 Heft 41 (1/2020) Die Buna-Werke – gestern und heute
 Heft 42 (2/2020) Das BSL-Veränderungsprojekt
 Heft 43 (1/2021) Strukturwandel und Wasserstoff
Heft 44 (2/2021) Leuna Harze
 Heft 45 (1/2022) Geiseltal und Chemieindustrie
 Heft 46 (2/2022)

* Die durchgängige Heft-Nr. ist erst ab dem Heft 26 aufgedruckt worden

**Der Hefttitel repräsentiert die Inhalte themenübergreifend. Die Themen und Autoren der einzelnen Beiträge der Hefte 1-25 sind in Heft 26 ab Seite 122, die der Hefte 26-35 im Heft 36 ab Seite 190, die der Hefte 36-39 in Heft 40 ab Seite 172 zusammengefasst.

siehe auch: www.dchm.de/Publikationen

Wir danken allen unseren **Autoren** für ihre Beiträge.
Ohne ihre engagierte, ehrenamtliche Mitarbeit
könnten wir unsere Hefte nicht so gut und interessant gestalten.

**Wir danken für die finanzielle Unterstützung
bei der Herausgabe dieses Heftes**



der **TotalEnergies Raffinerie Mitteldeutschland GmbH**

der **Dow Olefinverbund GmbH**



der **InfraLeuna GmbH**

Seek Together™

INFRALEUNA

der **VNG AG**



der **Addinol Lube Oil GmbH**

sowie

Thomas Keindorf

(Schornsteinfegermeister,
Mitglied des Landtags Sachsen-Anhalt)
und

Sven Czekalla

(Mitglied des Landtags Sachsen-Anhalt)



Danksagung an Mitarbeiter

Das Jubiläum zum 30. Jahrestag der Gründung unseres Vereins gibt uns erneut Anlass, neben den Grußworten prominenter Persönlichkeiten, den Beiträgen der großen Chemiebetriebe Mitteldeutschlands sowie den sachlichen Darlegungen unserer Mitglieder, Sympathisanten und Förderer zur Entwicklung der chemischen Industrie Mitteldeutschlands und des SCI auch denjenigen Mitarbeitern zu danken, ohne deren Engagement und Leistungsbereitschaft Vieles nicht zustande gekommen wäre.

Wir danken unseren ehrenamtlichen MitarbeiterInnen:

Dipl.-Ing. Gerd SEELA (Technikpark-Verantwortlicher),
Dr. Jochen GERECKE (Mitarbeiter Technikpark),
Dr. Rainer HUSCHENBETT (Organisator/Museumsführer für PSE),
Prof. Dr. Hans Joachim HÖRIG (Redaktionsteam/Organisation Kolloquien),
Dr. Dieter SCHNURPFEIL (Redaktionsteam/Organisation Schriftenreihe)
Detlef GEBHARDT (Organisation der Arbeiten im Technikpark),
Michael HOCHMUTH, Horst PILSING, Jörg MARR,
Beate HAUG (Arbeiten im Technikpark),
den MuseumsführerInnen Dipl.-Chem. Astrid ROCKSTUHL,
Mstr. Margot HERZIG, Dipl.-Ing. Gerd STÖBE
und Dipl.-Ing. Helmar KRIESTER,
den KassenprüferInnen: Dipl.-Betriebsw. Heidemarie SCHMIDT
und Dr. Fabian BONK.

Der Verein freut sich immer über weitere ehrenamtliche HelferInnen.
Eine aktive Mitarbeit, auch der Mitglieder, wird immer gerne gesehen.

Der Vorstand des Fördervereins ,Sachzeugen der chemischen Industrie e.V.'

Prof. Dr. Thomas MARTIN, Vorsitzender
Dipl.-Ing. Udo HEILEMANN, stellvertretender Vorsitzender
Brigitte BAMMLER, Schatzmeisterin
Lothar TESCHNER, Schriftführer/Öffentlichkeitsarbeit
Dipl.-Ing. Hans SCHMIDT, Prof. Dr. Klaus KRUG, Prof. Dr. Ulf SCHUBERT

Quellenverzeichnis der Bilder

Die Quellen der Umschlagbilder sind vorn auf Seite 3 im Impressum angegeben.

Grußwort Sven Schulze (Seiten 4/5)

Bild Fraunhofer Gesellschaft (IMWS), Pressestelle

Zum Geleit (Editorial), Seiten 9-13)

Bild 1 SCI

Beitrag Werner Popp (Seiten 14-20)

Bild 1 SCI

Bild 2 InfraLeuna GmbH, Öffentlichkeitsarbeit

Bilder auf Seite 20 Fotograf: Dr. Dieter Schnurpfeil

Beitrag Dr. Christoph Mühlhaus (Seiten 26-54)

Bild 1 TotalEnergies Raffinerie Mitteleuropa GmbH (Fachbereich Kommunikation)

Bilder 2+3 Fraunhofer IWES (Bild 2 Fotograf: Max Niemann)

Bild 4 Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung

Bilder 5-7 HYPOS e.V.

Beitrag Thomas Behrends (Seiten 55-62)

Bilder 1+4 InfraLeuna GmbH, Öffentlichkeitsarbeit

Bilder 2,3,5 TotalEnergies Raffinerie Mitteleuropa GmbH, Kommunikation (3_Foto: Schunke)

Beitrag Dr. Christof Günther (Seiten 63-70)

Bilder 1-5 InfraLeuna GmbH, Öffentlichkeitsarbeit

Beitrag Dr. Michael Duetsch (Seiten 71-82)

Bilder 1,4b,5,6,7b+c UPM Biochemicals GmbH, Leuna (Autor und Pressestelle)

Bilder 2,3a UPM Biochemicals GmbH, Leuna (UPM BIOFORE BEYOND FOSSIES, Broschüre ‚Nachhaltige Nutzformen für Ihr Holz‘, Bild 2 S.7, 3a S.5,

Bilder 3b,7a <https://www.upmbiochemicals.com/de/uber-upm-biochemicals/bioraffinerie-leuna/>

Bilder 4a <https://de.wikipedia.org/wiki/Stichwort>

Beitrag Carlo de Smet und Oliver Borek (Seiten 83-86)

Bilder 1+2 Dow Olefinverbund GmbH, Public Affairs/Öffentlichkeitsarbeit

Beitrag Andreas Dietrich (Seiten 95-97)

Bild 1 <https://www.linde-gas.de/shop/de/de-ig/clean-energy-und-wasserstoff>

auf Seite 97 InfraLeuna GmbH (Lageplan des Chemiestandortes Leuna, Öffentlichkeitsarbeit)

Beitrag Dr. Philipp Hauser, Maximilian Schwarz und Cornelia Müller-Pagel (S. 98-108)

Bilder 1-4 VNG (eigene Darstellungen der Autoren)

Beitrag Frank Pollack (Seiten 131-137)

Bild 1 Fraunhofer IMWS (Dr. Patrick Hirsch, im Auftrag von RUBIO)

Bild 2 Fraunhofer IAP (i. A. RUBIO)

Bild 3 Exipnos GmbH (Annika Ollikainen, i. A. RUBIO)

Bild 4 Polykum e.V. (Fotograf: Uwe Köhn)

Bild 5 Exipnos (Fotograf: Claudia Bröschke, s.a. <https://www.exipnos.de/unternehmen>)

Bilder auf Seite 137 SCI (Peter Büsching und Udo Heilemann)

Beitrag Dr. Kathrin Schaper-Thoma und Karin Menzel (Seiten 138-148)

Bilder 1-3 MITZ GmbH

Bilder auf Seite 147 SCI (Fotograf: Martin Thoss)

Beitrag Dr. Jürgen Koppe (Seiten 149-151)

Bilder 1+3 Autor

Bild 2 MOL Katalysatortechnik GmbH

Fortsetzung: **Quellenverzeichnis der Bilder**

Beitrag Jürgen Jankofsky (Seiten 152-154)

Bilder 1a+b SCI (Quellenangabe siehe Bildunterschrift)

Beitrag Prof. Dr. Hans Joachim Hörig (Seiten 155-162)

Bilder 1-4 SCI (3+4_Fotograf: Martin Thoss)

Beitrag Dr. Klaus-Dieter Weißenborn (Seiten 165-170)

Bild 1 BUNA AG (jetzt im Besitz des Autors)

Beitrag Obering. Heinz Rehmann (Seiten 171-186)

Bilder 1, 4-9 in Text und Bildunterschriften jeweils durch Literaturzitate belegt

Bild 2 BASF Unternehmensarchiv Ludwigshafen/Rhein, zur Verfügung gestellt von Pressestelle
InfraLeuna GmbH (s.a. Heft 36_1/2016, Seite 9)

Bilder 3a+b im Besitz des Autors

Beitrag Lothar Teschner (Seiten 187-197)

Bilder 1-13 SCI (Fotograf: Lothar Teschner)

Beitrag Martin Thoss (Seiten 198-207)

Bild 1 SCI (Fotograf: Dr. Wolfgang Späthe)

Bilder 2-10 SCI (Fotograf: Martin Thoss)

Bild 11 Kartenausschnitt Kreiskarte Landkreis Merseburg-Querfurt, 2. Aufl., 2003

Beitrag Astrid Rockstuhl (Seiten 208-210)

Bilder SCI (Fotograf: Lothar Teschner)

Beitrag Anja Krause, Dr. Ivonne Reichmann und Prof. Dr. Thomas Martin (S. 211-231)

Bild 1 in Text und Bildunterschrift durch Literaturzitat belegt

Bild 2 SCI (Fotograf: Lothar Teschner)

Bilder 3-5, QR-Codes 1-7 SCI/Autoren

Bilder auf Seite 229 Fotograf: Dr. Dieter Schnurpfeil

Beitrag Dr. Rainer Huschenbett (Seiten 232-238)

Bilder 1-8 in Text und Bildunterschriften jeweils durch Literaturzitate belegt

Bilder 9a+b SCI (Fotograf: Peter Schönberg, s.a. Heft 38_1/2018, S.127/128)

Beitrag Dr. Jürgen Dunkel und Dr. Dieter Schnurpfeil (Seiten 239-246)

Bilder 1,2,5,6 Autoren

Bilder 3,4a,b,d Fotograf: Dr. Dieter Schnurpfeil

Bild 4c Chemiepark Bitterfeld-Wolfen, Pressemitteilung v. 25.9.2019

Beitrag Peter Büsching und Udo Heilemann (Seiten 250-258)

Bilder 1-10 Fotografien: Peter Büsching

Beitrag Dietmar Onnasch (Seiten 259-266)

Bild 1 SCI (rotes Heft 2, 1994, S. 29)

Bilder 2-10 LMBV (Luftbilder: Peter Radke)

Beitrag Dr. Günter Matter (Bitterfeld, Seiten 267-277)

Bilder 1,2,5,7 in Text und Bildunterschriften jeweils durch Literaturzitate belegt

Bilder 3+6 Archiv Industrie- und Filmmuseum Wolfen (AIFM)

Bilder 4+8 Stadtarchiv Bitterfeld (STAB), Bildarchiv BG EKB

Bild 9 Fotograf: Autor

Beitrag Dr. Günter Matter (Piesteritz, Seiten 278-287)

Bilder 1-4 in Text und Bildunterschriften jeweils durch Literaturzitate belegt

Bild 5 Archiv des Autors

Fortsetzung: **Quellenverzeichnis der Bilder**

Beitrag Ehrhard Finger (Seiten 288-299)

- Bild 1 Bayer Firmenarchiv (Adolf Leubner: ‚Geschichte der Agfa Berlin-Wolfen‘)
Bilder 2,3,8-13 Industrie- und Filmmuseum Wolfen (IFM)
Bild 4 in Text und Bildunterschrift durch Literaturzitat belegt
Bild 5 Heimatverein Wolfen
Bild 6 ChemiePark Bitterfeld-Wolfen
Bild 7 Stadtarchiv Bitterfeld

Beitrag Erich Gadde (Seiten 300-315)

- Bilder 1-4,6,7 ehemaliges Betriebsarchiv des VEB Plastwerk Ammendorf (jetzt im Besitz des Autors, Bild 2_Fischer/Franke)
Bilder 5a-c BStU (Bundesbeauftragter für die Stasi-Unterlagen)
Bilder 8-14 in Text und Bildunterschriften jeweils durch Literaturzitate belegt (Bild 8_Fotograf: Lutz Sebastian, Bild 13_Steffen Schellhorn)

Beitrag Rolf Arnold (Seiten 316-332)

- Bilder 1-3,5-9,12 VEB Chemische Werke Buna (jetzt im Besitz des Autors)
Bilder 4,10,11 im Besitz des Autors (Fotoalbum zum 25-jährigen Dienstjubiläum)
Bild 13 Dow Olefinverbund GmbH (Hrsg.): ‚10 Jahre Dow in Mitteldeutschland‘, Gehrig Verlagsgesellschaft mbH, Merseburg 2005, S. 9



VNG

Gemeinsam im Konzernverbund setzen wir bei VNG alles daran, mit grünen Gasen und einer modernen Infrastruktur zukunftsorientierte Lösungen für ein klimaneutrales Energiesystem zu entwickeln. Dabei verstehen wir uns als aktiver Gestalter der Energiewende mit speziellem Fokus auf Mittel- und Ostdeutschland.

Mehr Infos: [vng.de](https://www.vng.de)

TRANSFORMATION MIT SYSTEM UND WEITBLICK