

„Harte Arbeit, große Freude“

Eine PRO SCIENTIA

Festschrift für Reinhart Kögerler

Zur Gestaltung der Festschrift

Das Layout der vorliegenden Festschrift folgt den Formatvorgaben eines „Readers“, wie er alljährlich mit Texten der PRO SCIENTIA Stipendiat:innen zum jeweiligen Jahresthema erscheint.

Das von Leonie Licht gestaltete Cover recurriert auf Reinhart Kögerlers Vorliebe für „Schnitten“.

Impressum

August 2025, Wien

Studienstiftung PRO SCIENTIA

Otto Mauer Zentrum, Währinger Str. 2-4/22, 1090 Wien, e-mail: studienstiftung@proscientia.at

Die Verantwortung für den Inhalt der Beiträge liegt bei der Verfasserin/dem Verfasser.

Redaktion und Satz: Lisa Simmel

Cover: Leonie Licht

Druck: Facultas, Stolberggasse 26, 1050 Wien

Bildrechte

Seite 73: Sonntags-Rundschau Nr. 50a, 16. Dezember 2007, S. 31, 2017 © Esther Strauß 2024 (In Auftrag gegeben von TAXISPALAIS Kunsthalle Tirol für Esther Strauß KINDESKINDER. Ausstellungsansicht, TAXISPALAIS Kunsthalle Tirol, 2024. Foto: Günter Kresser)

Seite 75: dreams (yet to dream), 2015 © Esther Strauß

Seite 77: 2012, 2012 © Esther Strauß (Foto: Robert Fleischanderl)

Inhalt

Lisa Simmel

Vorwort

Iris Christine Aue, Graz

Portrait Reinhart Kögerler

Seite 8

Michael Drmota, Wien

Die Rolle von Vermutungen für den Fortschritt der Mathematik

Seite 11

Gabriel Felbermayr, Wien

Ist die Ökonomik eine Art Sozialphysik?

Seite 15

Franz Fischler

Die EU und das Christentum — Braucht Demokratie Religion?

Seite 19

Meinrad Handstanger, Wien/Graz

Triadische Balance —

Anwendungsorientierte Grundlagen in den Rechtswissenschaften

Seite 27

Michael Hofer, Linz

Was ich mit Reinhart Kögerler immer schon besprechen wollte:

Stellenwert und Gestalt der Aufklärung

Seite 33

Christian Mitterer, Leoben

Materialentwicklung im Wandel

Vom Probieren zur wissensbasierten Oberflächenfunktionalisierung auf atomarer Ebene

Seite 39

Stefan Michael Newerkla, Wien

Die erstmals veröffentlichte *Resignatio humillima* des Atanáš Jan Blažej Spurný (1744–1816)

Seite 45

Florian Pausinger, Lissabon

Über das Zählen

Seite 51

Markus Schlagnitweit, Wien

Freundschaft: Kornblume im Ährenfeld

Seite 59

Heinrich Schmidinger, Salzburg

Reflexionen über Hoffnung

Seite 63

Karl W. Steininger, Graz

Regeneratives Wirtschaften

Seite 67

Esther Strauß, Innsbruck/Linz/Wien accepting rides with strangers	Seite 72
Sibylle Trawöger, Aachen Glauben und Wissen im Dialog zwischen Naturwissenschaft und Theologie	Seite 79
Christina M. Tonauer, Innsbruck Über die Wasserstruktur — Dem Leben auf der Spur	Seite 85
Klaus Viertbauer, Weingarten Neuroenhancement: Curse or Blessing?	Seite 91
Dorothea Weber, Salzburg Annäherungen an Lukrez	Seite 97

Christina M. Tonauer, Innsbruck

Über die Wasserstruktur— Dem Leben auf der Spur

Im Rahmen der Vorbereitung auf die zunächst – „ins Wasser gefallene“ (weil wegen der Covid-19 Pandemie abgesagte) – aber dann umso schöner erlebte „Wasser“- PRO SCIENTIA Sommerakademie 2021 war es mir eine ganz besondere Freude und Ehre, als eine der drei Jahressprecher:innen gemeinsam mit Reinhart und den anderen Mitgliedern des Planungskomitees diese mir ganz besonders am Herzen gelegene Sommerakademie vorzubereiten. Ich erinnere mich auch speziell an ein Gespräch mit Reinhart am Ende eines Planungstreffens in Wien, bei dem wir uns über die anormale strukturelle Vielfalt von Wasser und seiner Eisformen und über die Bedeutung von Wasser als „Molekül des Lebens“ austauschten.

In der Tat, aus physikalisch-chemischer Perspektive ist Wasser eine Substanz, die sich in vielerlei Hinsicht anomal verhält, z.B.: aufgrund des außergewöhnlich hohen Schmelz- und Siedepunktes oder des Dichtemaximums bei 4°C. Wasser zeigt eine hohe Tendenz zur Ausbildung von Netzwerken, welche über Wasserstoffbrücken miteinander verbunden sind. Viele dieser Anomalien können als Resultat dieser intermolekularen Wechselwirkung verstanden werden. Durch jeweils zwei H-Donor- und H-Akzeptor-Bindungsstellen pro Wassermolekül resultiert eine außergewöhnlich hohe Vielfalt an unterschiedlich verbrückten Netzwerken. Diese Tatsache zeigt sich vor allem im festen Zustand. Bis zum heutigen Tag sind 20 verschiedene kristalline Formen (*Polymorphe*) (Fuentes Landete et al. 2015; Loerting et al. 2020) und mindestens drei verschiedene amorphe Formen (*Polyamorphe*) (Angell 2004; Loerting and Giovambattista 2006; Loerting et al. 2011) von Eis bekannt. Diese Poly(a)morphe von Eis unterscheiden sich in ihrer H-verbrückten Netzwerktopologie, etwa durch strukturelle Motive wie z.B.: unterschiedlich große Ringe aus Wassermolekülen, Kanäle, Interpenetration von Untergit-

tern oder der Geometrie der Wasserstoffbrückenbindungen (Petrenko and Whitworth 1999; Salzmann et al. 2011; Salzmann 2019).

„Gewöhnliches“ hexagonales Eis I_h , welches bei den Druck- und Temperaturbedingungen auf der Erdoberfläche stabil ist, zeichnet sich strukturell durch offene hexagonale Kanäle aus. Die Bindungswinkel und -längen der Wassermoleküle im Kristall ähneln dabei den Bindungswinkeln und -längen eines freien Wassermoleküls in der Gasphase. Bei Erhöhung des Drucks kollabiert die offene Struktur in Eis I_h und es entsteht, je nach Druck und Temperatur, eine Hochdruckeisphase höherer Dichte (nummeriert mit römischen Zahlen >I). Steigender Druck führt zu erhöhter Verzerrung der Bindungen und Bindungswinkel der Wassermoleküle im Eis. Diese Hochdruckeisformen können im Labor durch Tieftemperatur- und/oder Hochdrucksynthese, d.h. bei Temperaturen bis typischerweise -196°C und Drücken bis 20.000 bar und höher, erzeugt werden.

Wie bereits oben angedeutet, werden Eisformen grundsätzlich in *kristallin* oder *amorph* eingeteilt, je nachdem ob die Sauerstoffatome auf eine lange Reichweite betrachtet periodisch, d.h., geordnet (kristallin) oder ungeordnet (amorph) innerhalb der Eisstruktur vorliegen. Die kristallinen Eisphasen werden weiter unterteilt in Strukturen niedriger und hoher Permittivität. Erstere zeigen ein geordnetes Untergitter der Wasserstoffatome, d.h., die Wassermoleküle zeigen bevorzugte Orientierungen innerhalb der Eisstruktur. Im Gegensatz dazu zeigen kristalline Eisformen hoher Permittivität eine zufällige Ausrichtung der Wasserdipole, wobei die *Bernal-Fowler-Eisregeln* (Bernal and Fowler 1933) sechs mögliche Ausrichtungen zulassen. Die Anordnung der Wasserstoffatome in einem Eis hat in der Folge einen enormen Einfluss auf elektrische Eigenschaften.

ten, z.B.: Ferroelektrizität und Antiferroelektrizität (Whalley et al. 1968; Fukazawa et al. 1998; Parkkinen et al. 2014), sowie mechanische Eigenschaften wie Superplastizität oder Kriechverhalten (Durham et al. 1988; Kubo et al. 2006) von Eisphasen.

Eisformen, welche direkt aus der flüssigen Phase kristallisieren, d.h., eine Koexistenzlinie zur flüssigen Phase im Phasendiagramm zeigen, (vgl. Phasendiagramm in Abb. 2 aus Referenz (Loerting et al. 2020)) sind Wasserstoff-ungeordnete Phasen. Erst bei tieferen Temperaturen, typischerweise unter -100°C , sind Wasserstoff-geordnete Eisformen thermodynamisch bevorzugt, d.h. Wasserstoff-ungeordnete Phasen unterlaufen einen Ordnungsphasenübergang bei einer strukturspezifischen *Ordnungstemperatur*. Bei diesem entropisch-getriebenen Prozess orientieren sich somit die Wasserdipole abhängig vom jeweiligen Eisnetzwerk in bevorzugte Ausrichtungen. Daraus folgt, dass kristalline Phasen meist in Paare/Triplets eingeteilt werden können, die praktisch das gleiche Sauerstoffgitter aber ein unterschiedliches Wasserstoffnetzwerk, also ungeordnet oder geordnet, aufweisen (z.B.: Eis III/IX, Eis I_h /XI, Eis V/XIII etc.). Dass auch mehrere unterschiedliche Wasserstoff-geordnete Phasen bei gleichem Sauerstoffgitter existieren können, wurde erstmalig am Eis VI/XV/XIX-Triplett experimentell bestätigt (Gasser et al. 2021; Yamane et al. 2021). Wasserstoff-ungeordnetes Eis VI wandelt unter -140°C zu Wasserstoff-geordnetem Eis XV um, unter -153°C ist Eis XIX thermodynamisch bevorzugt, welches bei gleichem Sauerstoffgitter eine andere Wasserstoff-Ordnung zeigt als Eis XV.

Zusätzlich zur strukturellen Vielseitigkeit der oben beschriebenen „reinen“ Wassereisphasen bildet Wasser auch feste Einschlussverbindungen, sogenannte *Clathrathydrate*. Bei Temperaturen unter 30°C und mäßigen Drücken (typischerweise > 6 bar (Sloan 2003)) bildet Wasser käfigartige feste Strukturen um kleine *Gastmoleküle* wie Methan, Propan oder CO_2 (Sloan and Koh 2007). Genauer gesagt sind die grundlegenden Bausteine dieser Clathrathydrate pentagonale Dodekaeder (5^{12}) aus H_2O -Molekülen, wobei jede Eckposition von einem

Sauerstoffatom besetzt ist und ein nicht-kovalent gebundenes Gastmolekül im Inneren eingeschlossen ist. Je nach Größe des Gastmoleküls und Anordnung der Bausteine entstehen unterschiedliche Kristallstrukturen, d. h. die kubische Struktur I (CS-I), die kubische Struktur II (CS-II) oder die hexagonale Struktur H. Bei höherem Druck bilden sich verschiedene Arten von sogenanntem *gefüllten Eis*, bei denen die *Wirtsgitter* den Strukturen von reinem Wassereis (Eis I, II) ähneln und die Gäste den Hohlraum innerhalb der Kanäle einnehmen (Vos et al. 1993; Londono et al. 1988).

Die Struktur von Wasser – Eine universelle Sonde

Bei all dem nun aus über 100 Jahren moderner Wasserforschung gesammelten Wissen zur Struktur von Wasser und Eis kann schon einmal die Frage aufkommen: *„Wozu das alles? - Welche Erkenntnisse können aus dieser umfassenden Auseinandersetzung mit Wasser, im Speziellen mit der Vielzahl an Strukturen von Wasser im festen Zustand, gewonnen werden?“*

Die Antwort, die ich persönlich darauf gebe, ist: *„Indem wir Wasser und seine Struktur erforschen, lernen wir etwas über die Umgebung und letztlich über uns selbst“*. Wasser ist ubiquitär, sei es in unserem Körper, auf der Erde oder im Weltraum. Die Präsenz von Wasser eröffnet – aus unserem bisherigen Verständnis - die Möglichkeit von Leben. Zusätzlich ist die Struktur von Wasser sensitiv auf die Bedingungen der Umgebung, d.h., Temperatur und Druck der Gegenwart, sowie im zeitlichen Verlauf. Mit anderen Worten, je nach vorherrschenden Bedingungen einer betrachteten Umgebung bildet Wasser eine entsprechende Struktur aus. Indem wir diese Strukturen identifizieren, lernen wir etwas über die Umgebung, in der wir Wasser beobachten sowie das Potential für die Entstehung von Leben.

Das fundamentalste Beispiel für diese Betrachtung ist - wenn auch trivial anmutend – die Tatsache, dass auf der Oberfläche der Erde Wasser als Gas, Flüssigkeit, sowie festes hexagonales Eis I_h vorkommt. Was bedeutet das? Mit Blick auf das Phasendiagramm von Wasser (vgl. Abb. 2 in (Loerting

et al. 2020)) kann festgestellt werden, dass die Druck- und Temperaturbedingungen auf der Erde in einem Bereich um den Tripelpunkt von Wasser angesiedelt sind, welcher sich für die Entstehung und Evolution von Leben als günstig erwiesen hat. Um derartige Bedingungen und somit das Potential für Leben in extraterrestrischen Umgebungen zu identifizieren, kann die Fernerkundung von Wassereis und der jeweiligen Struktur wesentlich beitragen.

Die Voraussetzung für die Fernerkundung von Eis im Weltraum, z.B.: in/auf den Eismonden des Jupiter, auf Kometen, Saturnringen oder interstellarem Staub, sind umfassende strukturelle Charakterisierungsstudien unter Laborbedingungen, in der Regel unter Verwendung von Beugungsmethoden und Schwingungsspektroskopie (Amann-Winkel et al. 2016; Perakis et al. 2016). Als historisch etabliertes Kriterium für die Entdeckung eines neuen Polymorphs gilt die Bestimmung der Raumgruppe. Diese Tatsache führte zur Notwendigkeit von Röntgen- und/oder Neutronenbeugungsstudien aller bekannten Poly(a)morphe, während Infrarotspektroskopie von Wassereis in den Jahren nach den Pionierarbeiten von Whalley und Mitarbeiter:innen in den 1960er Jahren vernachlässigt wurde (Bertie et al. 1969).

Für die Untersuchung von Eis im Weltraum ist jedoch keine der gängigen Labormethoden anwendbar – mit Ausnahme der Infrarotspektroskopie. In den letzten Jahren hat diese Methode daher wieder an Bedeutung gewonnen. Dies ist zurückzuführen auf mehrere Aspekte: (i) Experimenteller Fortschritt speziell auf dem Gebiet der nicht-linearen, zeitaufgelösten Spektroskopie (Perakis et al. 2016), (ii) Fortschritt bei der Berechnung von *In-silico*-Spektren zur Interpretation (Moberg et al. 2017; 2018) und (iii) der Beginn einer neuen Ära in der Infrarotastronomie, die durch den Start des James-Webb-Weltraumteleskops gekennzeichnet ist.

Angeichts dieser parallelen Entwicklungen ist es nicht überraschend, dass die erstmalige Charakterisierung der kristallinen Eisformen Eis I_c, II, IV, V, VI, IX, XII, XIII sowie der Polymorphe niedriger,

hoher und sehr hoher Dichte (LDA, HDA, VHDA im Vergleich zu porösem amorphem festem Wasser *p*-ASW) im Nahinfrarotbereich (1–2,5 $\mu\text{m}/10000\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$) erst kürzlich berichtet wurde (Tonauer et al. 2021; 2024; 2025). Dabei zeigt sich, dass insbesondere der erste Oberton der OH-Streckungsschwingung (2 *v*OH) ein aussagekräftiger Marker für Dichte, Porosität und Kubizität in kristallinem und amorphem Eis ist (Tonauer et al. 2021; 2024). Vor Kurzem konnte auch erstmalig experimentell bestätigt werden, dass Wasserstoff-geordnetes und Wasserstoff-ungeordnetes Eis mit dieser Methode unterscheidbar ist (Tonauer et al. 2025).

Das Ziel zukünftiger Arbeiten wird es sein, den Einfluss der Korngröße sowie der Temperatur auf die Nahinfrarotspektren verschiedener Poly(a)morphe von Eis zu untersuchen, wobei der Bereich von Temperaturen wie im interstellaren Medium ($\sim 263\text{ °C}$) bis zum Beginn der Umwandlung in hexagonales Eis ($\sim 93\text{ °C}$) abgedeckt werden muss (Tonauer et al. 2023).

Literaturverzeichnis

- Amann-Winkel et al. 2016 = Amann-Winkel, Katrin, Marie-Claire Bellissent-Funel, Livia E. Bove, et al. 2016. "X-Ray and Neutron Scattering of Water." *Chemical Reviews* 116 (13): 7570–89.
- Angell 2004 = Angell, C. Austen. 2004. "AMORPHOUS WATER." *Annual Review of Physical Chemistry* 55 (1): 1.
- Bernal and Fowler 1933 = Bernal, J. D., and R. H. Fowler. 1933. "A Theory of Water and Ionic Solution, with Particular Reference to Hydrogen and Hydroxyl Ions." *The Journal of Chemical Physics* 1 (8): 8.
- Bertie et al. 1969 = Bertie, J. E., H. J. Labbé, and E. Whalley. 1969. "Absorptivity of Ice I in the Range 4000–30 Cm^{-1} ." *The Journal of Chemical Physics* 50 (10): 10.
- Durham et al. 1988 = Durham, W. B., S. H. Kirby, H. C. Heard, L. A. Stern, and C. O. Boro. 1988. "Water Ice Phases II, III, and V: Plastic Deformation and Phase Relationships." *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* 93, B9.

- Fuentes Landete et al. 2015 = Fuentes Landete V., Mitterdorfer C., Handle P.H., et al. 2015. "Crystalline and Amorphous Ices." *Proceedings of the International School of Physics & Enrico Fermi*, 173–208.
- Fukazawa et al. 1998 = Fukazawa, Hiroshi, Susumu Ikeda, and Shinji Mae. 1998. "Incoherent Inelastic Neutron Scattering Measurements on Ice XI; the Proton-Ordered Phase of Ice Ih Doped with KOH." *Chemical Physics Letters* 282 (2): 2.
- Gasser et al. 2021 = Gasser, Tobias M., Alexander V. Thoeny, A. Dominic Fortes, and Thomas Loerting. 2021. "Structural Characterization of Ice XIX as the Second Polymorph Related to Ice VI." *Nature Communications* 12 (1): 1128.
- Kubo et al. 2006 = Kubo, Tomoaki, William B. Durham, Laura A. Stern, and Stephen H. Kirby. 2006. "Grain Size-Sensitive Creep in Ice II." *Science* 311 (5765): 1267–69.
- Loerting et al. 2020 = Loerting, Thomas, Violeta Fuentes-Landete, Christina M. Tonaue, and Tobias M. Gasser. 2020. "Open Questions on the Structures of Crystalline Water Ices." *Communications Chemistry* 3 (1): 1.
- Loerting and Giovambattista 2006 = Loerting, Thomas, and Nicolas Giovambattista. 2006. "Amorphous Ices: Experiments and Numerical Simulations." *Journal of Physics: Condensed Matter* 18 (50): 50.
- Loerting et al. 2011 = Loerting, Thomas, Katrin Winkel, Markus Seidl, et al. 2011. "How Many Amorphous Ices Are There?" *Physical Chemistry Chemical Physics* 13 (19): 19.
- Londono et al. 1988 = Londono, D., W. F. Kuhs, and J. L. Finney. 1988. "Enclathration of Helium in Ice II: The First Helium Hydrate." *Nature* 332 (6160): 141–42.
- Moberg et al. 2018 = Moberg, Daniel R., Peter J. Sharp, and Francesco Paesani. 2018. "Molecular-Level Interpretation of Vibrational Spectra of Ordered Ice Phases." *The Journal of Physical Chemistry B* 122 (46): 10572–81.
- Moberg et al. 2017 = Moberg, Daniel R., Shelby C. Straight, Christopher Knight, and Francesco Paesani. 2017. "Molecular Origin of the Vibrational Structure of Ice I_h." *The Journal of Physical Chemistry Letters* 8 (12): 2579–83.
- Parkkinen et al. 2014 = Parkkinen, P., S. Riikonen, and L. Halonen. 2014. "Ice XI: Not That Ferroelectric." *The Journal of Physical Chemistry C* 118 (45): 26264–75.
- Perakis et al. 2016 = Perakis, Fivos, Luigi De Marco, Andrey Shalit, et al. 2016. "Vibrational Spectroscopy and Dynamics of Water." *Chemical Reviews* 116 (13): 7590–607.
- Petrenko and Whitworth 1999 = Petrenko, Victor F., and Robert W. Whitworth. 1999. *Physics of Ice*. Oxford University Press.
- Salzmann 2019 = Salzmann, Christoph G. 2019. "Advances in the Experimental Exploration of Water's Phase Diagram." *The Journal of Chemical Physics* 150 (6): 6.
- Salzmann et al. 2011 = Salzmann, Christoph G., Paolo G. Radaelli, Ben Slater, and John L. Finney. 2011. "The Polymorphism of Ice: Five Unresolved Questions." *Physical Chemistry Chemical Physics* 13 (41): 18468.
- Sloan 2003 = Sloan, E. Dendy. 2003. "Fundamental Principles and Applications of Natural Gas Hydrates." *Nature* 426 (6964): 353–59.
- Sloan and Koh 2007 = Sloan, E. Dendy, and Carolyn A. Koh. 2007. *Clathrate Hydrates of Natural Gases*. 0 ed. CRC Press.
- Tonaue et al. 2021 = Tonaue, Christina M., Eva-Maria Köck, Tobias M. Gasser, et al. 2021. "Near-Infrared Spectra of High-Density Crystalline H₂O Ices II, IV, V, VI, IX, and XII." *The Journal of Physical Chemistry A* 125 (4): 1062–68.
- Tonaue et al. 2024 = Tonaue, Christina M., Eva-Maria Köck, Raphael Henn, et al. 2024. "Near-Infrared Spectroscopy for Remote Sensing of Porosity, Density, and Cubicity of Crystalline and Amorphous H₂O Ices in Astrophysical Environments." *The Astrophysical Journal* 970 (1): 82.
- Tonaue et al. 2025 = Tonaue, Christina M., Eva-Maria Köck, Raphael Henn, Christoph Kapacher, Christian W. Huck, and Thomas Loerting. 2025. "Near-Infrared Spectroscopic Sens-

- ing of Hydrogen Order in Ice XIII." *Physical Review Letters* 135 (1): 018002. <https://doi.org/10.1103/x2ph-yp2v>.
- Tonauer et al. 2023 = Tonauer, Christina M., Keishiro Yamashita, Leonardo Del Rosso, Milva Celli, and Thomas Loerting. 2023. "Enthalpy Change from Pure Cubic Ice I_c to Hexagonal Ice I_h." *The Journal of Physical Chemistry Letters* 14 (21): 5055–60.
- Vos et al. 1993 = Vos, Willem L., Larry W. Finger, Russell J. Hemley, and Ho-kwang Mao. 1993. "Novel H₂ - H₂O Clathrates at High Pressures." *Physical Review Letters* 71 (19): 3150–53.
- Whalley et al. 1968 = Whalley, E., J. B. R. Heath, and D. W. Davidson. 1968. "Ice IX: An Antiferroelectric Phase Related to Ice III." *The Journal of Chemical Physics* 48 (5): 5.
- Yamane et al. 2021 = Yamane, Ryo, Kazuki Komatsu, Jun Gouchi, et al. 2021. "Experimental Evidence for the Existence of a Second Partially-Ordered Phase of Ice VI." *Nature Communications* 12 (1): 1129.