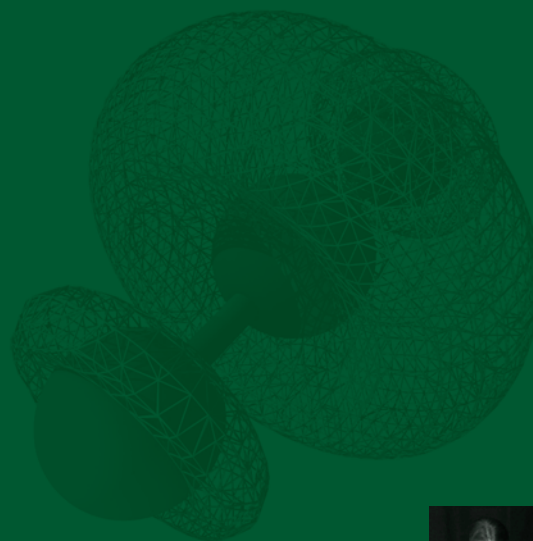


# Jahresbericht 2005 | 2006

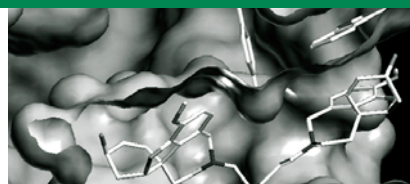
Fakultät für Naturwissenschaften  
Universität Paderborn



DEPARTMENT  
CHEMIE



DEPARTMENT  
SPORT & GESUNDHEIT



# Vorwort

Sehr geehrte Leserinnen und Leser,

eine vornehmliche Aufgabe einer Fakultät ist es, die Zukunft ihrer Hochschule durch ihre Aktivitäten mit zu gestalten. Einen geeigneten Anlass über diese Aktivitäten zu berichten, bietet der Zweijahresbericht unserer Fakultät, auf den ich Sie einstimmen möchte. Der schnelle Wandel in der Wirtschaft und im Bildungssektor, dem wir einerseits unterliegen und den wir andererseits selber mit bewirken, erfordert couragiertes, zeitnahes aber gleichermassen wohlbedachtes Handeln. Dementsprechend hat die Fakultät sowohl in der Lehre als auch in der Forschung neue Konzepte erarbeitet und umge-



Podiumsdiskussion zur FIFA-WM 2006 (v. l.): Moderiert von Prof. Dr. Wolf-Dietrich Brettschneider stellen sich FIFA-Präsident Joseph S. Blatter und Innenminister Dr. Wolfgang Schäuble den kritischen Fragen der angereisten Journalisten (15. Mai 2006)

Freuen sich über das neue Instituts-Gebäude für Optoelektronik, Photonik und Integrierte Optik (v.li.): Festredner Prof. Dr. Dieter Bimberg, TU Berlin, Prof. Dr. Klaus Lischka, Department Physik, NRW-Innovationsminister Prof. Dr. Andreas Pinkwart, Uni-Rektor Prof. Dr. Nikolaus Risch, Prof. Dr. Ulrich Hilleringmann, Institut für Elektrotechnik und Informationstechnik sowie Uni-Kanzler Jürgen Plato (15. September 2006)



## Inhalt

### 4 Fakultät für Naturwissenschaften

- 4 Fakultätsleitung
- 5 Struktur und Lehre
- 5 Studierendenzahl
- 6 Forschung
- 6 Drittmittel
- 7 Internationalisierung
- 8 Nachwuchswerbung

### 9 Department Chemie

- 10 Forschungsschwerpunkte
- 11 Studium
- 12 SGU (Sicherheit – Gesundheit – Umwelt)
- 13 Qingdao University of Science and Technology
- 14 Alumni Chemie Paderborn e.V.

#### Anorganische und Analytische Chemie

- 15 Anorganische, Bioanorganische und Analytische Chemie  
Prof. Dr. Gerald Henkel
- 16 Metallorganische Chemie und Materialwissenschaften  
Prof. Dr. Stephan Schulz

- 17 Analytik im Gesundheitlichen Verbraucherschutz  
apl. Prof. Dr. Manfred Grote
- 18 Allgemeine und Anorganische Chemie  
Prof. Dr. Gernot Reiningner
- 18 Computeranwendungen in der Chemie  
Prof. Dr. Volker Schubert
- Organische Chemie**
- 19 Synthetische Organische Chemie, Naturstoffchemie, Chemie der Zucker  
Prof. Dr. Karsten Krohn
- 20 Präparative organische Chemie  
Prof. Dr. Nikolaus Risch
- 21 Biologische Makromoleküle und Umweltchemie  
Prof. Dr. Gregor Fels
- 22 Asymmetrische Katalyse und Naturstoffsynthese  
PD Dr. Karamali Khanbabae
- Physikalische Chemie**
- 23 Flüssigkristalle  
Prof. Dr. Heinz-S. Kitzerow
- 24 Struktur und Dynamik  
Prof. Dr. Claudia Schmidt
- 25 Physikalische Chemie der Weichen Materie  
Prof. Dr. Klaus Huber

#### Technische Chemie

- 26 Chemie und Technologie der Beschichtungsstoffe  
Prof. Dr. Wolfgang Bremser
- 27 Technische und Makromolekulare Chemie  
Prof. Dr.-Ing. Guido Grundmeier
- 28 Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik  
Prof. Dr.-Ing. Hans-Joachim Warnecke
- Didaktik der Chemie**
- 29 Systematik und chemiedidaktische Lehre  
Prof. Dr. Hans-Jürgen Becker

### 30 Department Physik

- 31 Studium
- 32 Experimenteller Forschungsschwerpunkt
- 33 DFG-Forschergruppe „Integrierte Optik in Lithiumniobat – neue Bauelemente, Schaltkreise und Anwendungen“
- 34 Theoretischer Forschungsschwerpunkt
- 35 DFG-Forschergruppe „Molecular Mechanisms of Retinal Protein Action: A Combination of Theoretical Approaches“
- Angewandte Physik**
- 36 Integrierte Optik  
Prof. Dr. Wolfgang Sohler

setzt, auf die an entsprechender Stelle im Bericht eingegangen wird. Ziel- und Leistungsvereinbarungen mit konkreten Vorgaben zur Ausrichtung unserer Departments Chemie, Physik sowie Sport & Gesundheit sind geschlossen worden und werden zielführend umgesetzt.

Die Fakultät und ihre Mitglieder haben in den Berichtsjahren mannigfaltige Aktivitäten ausgeführt, die sowohl regional als auch überregional und international Beachtung gefunden haben, zum einen durch Veranstaltungen und international besetzte Tagungen, zu denen die Fakultät eingeladen hatte, zum anderen durch die Veröffentlichungen der Mitglieder und ihre Vor-

träge auf nationalen und internationalen Tagungen und Kongressen.

Ich würde mich freuen, wenn dieser Bericht und die dargelegten Aktivitäten zu fachlichen Verknüpfungen mit anderen Arbeitskreisen führen.

Falls Sie weitere Informationen wünschen, zögern Sie bitte nicht, uns zu kontaktieren. Ich wünsche Ihnen bei der Lektüre dieses Berichtes die Informationen zu erhalten, die Sie erhoffen und bedanke mich herzlich bei allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern, die bei der Erstellung dieses zweiten Zweijahresberichtes mitgewirkt haben.



Prof. Dr. Hans-Joachim Warnecke  
Dekan der Fakultät für Naturwissenschaften

<b>Experimentalphysik</b>		
37 Physik und Technologie optoelektronischer Halbleiter		
Prof. Dr. Klaus Lischka		
38 Experimentalphysik		
Prof. Dr. Artur Zrenner		
39 Hochdruck-Festkörperspektroskopie		
Prof. Dr. Gerhard Wortmann		
40 Materialien für die Optoelektronik und Photonik		
apl. Prof. Dr. Siegmund Greulich-Weber		
41 Nanophotonische Materialien		
Prof. Dr. Ralf B. Wehrspohn		
42 Optoelektronische Halbleiter – Gruppe III-Nitride		
apl. Prof. Dr. tech. Donat Josef As		
43 Optisch aktive Glaskeramiken		
PD Dr. Stefan Schweizer		
<b>Theoretische Physik</b>		
44 Festkörpertheorie		
Prof. Dr. Wolf Gero Schmidt		
45 Molekulare Modellierung von Materialien		
Prof. Dr. Thomas Frauenheim		
46 Elektronische Eigenschaften von Halbleitern		
Prof. Dr. Harald Overhof (†)		
47 Computergestütztes Materialdesign		
Prof. Dr. Jörg Neugebauer		
48 Theoretische Biophysik		
Jun.-Prof. Dr. Marcus Elstner		
<b>Didaktik der Physik</b>		
49 Wirkung der Lehrausbildung, neue Medien im Physikunterricht		
Prof. Dr. Peter Reinhold		
<b>50 Department Sport &amp; Gesundheit</b>		
51 Aktivitäten		
52 Wissenschaftliche Lehre		
53 Gesundheitsförderung durch Ernährung und Verbraucherbildung		
54 Sportwissenschaft und Sportmedizin		
55 Forschungszentrum für Bürgerliches Engagement		
<b>Ernährung &amp; Verbraucherbildung</b>		
56 Ernährungswissenschaft		
Prof. Dr. Helmut Hesecker		
57 Haushaltswissenschaft		
Prof. Dr. Kirsten Schlegel-Matthies		
<b>Sportmedizin</b>		
58 Analytik und Diagnostik		
Prof. Dr. Michael Weiß		
59 Prävention und Leistung		
Prof. Dr. Heinz Liesen		
<b>Sportwissenschaft</b>		
60 Sport und Erziehung		
Prof. Dr. Wolf-Dietrich Brettschneider		
61 Bewegungs- und Trainingswissenschaft		
Prof. Dr. Norbert Olivier		
62 Sport und Gesellschaft		
Prof. Dr. Dr. Sebastian Braun		
63 Festveranstaltung der Fakultät für Naturwissenschaften – Verleihung der Abschlussurkunden		
64 <b>Anhang</b>		
65 Preisverleihungen, Auszeichnungen, Ehrungen		
66 Personalien – Professuren		
Personalien – Promotionen		
69 Department Chemie		
78 Department Physik		
93 Department Sport & Gesundheit		
99 Impressum		

# Fakultät für Naturwissenschaften – Eine Einführung

Die Naturwissenschaften bilden einen wichtigen Eckpfeiler moderner Industrie- und Hochtechnologie-Gesellschaften. Gemeinsam mit den technischen Anwendungsdisziplinen fällt Ihnen eine Schlüsselrolle für den technologischen und gesellschaftlichen Wandel zu: Die Ergebnisse naturwissenschaftlicher Forschung und ihre vielfältigen Anwendungen schaffen die Grundlage für Innovationen, die alle Lebensbereiche unserer Gesellschaft berühren. Auf diese Weise tragen sie wesentlich zur Sicherung der Lebensgrundlage unserer Gesellschaft bei.

Die verantwortungsvolle Teilhabe an diesem gesellschaftlichen und technologischen Wandel erfordert eine umfassende naturwissenschaftliche Bildung. Sie umfasst nicht nur die Vermittlung naturwissenschaftlicher Kenntnisse und Methoden bis hin zum Stand aktueller Forschungsergebnisse. Hinzu kommt auch die Bereitschaft und die Fähigkeit,

sich mit den Möglichkeiten und Grenzen naturwissenschaftlicher Erkenntnisse kritisch auseinander zu setzen und sie in technologischen Anwendungen verantwortungsbewusst zu nutzen. Indem Fragen nach den Zukunftsperspektiven menschlicher Gesellschaften gestellt und thematisiert werden, kann naturwissenschaftliche Bildung zur Weiterentwicklung unserer Gesellschaft beitragen. Der Aufbau fundamentaler Kompetenzen im naturwissenschaftlich-technischen Bereich ist daher von herausragender Bedeutung in einer Gesellschaft des 21. Jahrhunderts.

Die im Herbst 2002 gegründete Fakultät für Naturwissenschaften der Universität Paderborn vereint die Aktivitäten der Departments Chemie, Physik und Sport & Gesundheit. Durch thematische sowohl intra- als auch interfakultative Verknüpfung der Departments in Forschung und Lehre werden Synergiepotenziale genutzt und die Ausstrahlung

der Fakultät für den Hochschulstandort Paderborn nachhaltig intensiviert.

Innerhalb der Universität Paderborn stärkt und unterstützt die Fakultät für Naturwissenschaften durch ihre Aktivitäten das Profil der Universität als „Universität der Informationsgesellschaft“. Diesen Aktivitäten liegt als Leitidee zugrunde, auf der Basis naturwissenschaftlicher Grundlagen und Erkenntnisse zur Gestaltung einer modernen Informationsgesellschaft und zum Fortschritt der Wissenschaft in Grundlagen und Anwendung beizutragen, die wissenschaftlichen Erkenntnisse verantwortungsvoll umzusetzen, die Gesundheit des Menschen zu schützen und zu fördern, in Lehre und Weiterbildung die notwendigen Kenntnisse und Fähigkeiten vermitteln und die Entwicklung auf diesen Gebieten – auch in der Region – voranzutreiben.

## Fakultätsleitung

### Dekanat



Studiendekan:  
Prof. Dr.  
Peter Reinhold



Dekan:  
Prof. Dr.  
Hans-Joachim  
Warnecke



Prodekanin:  
Prof. Dr.  
Kirsten  
Schlegel-Matthies



Geschäftsführung:  
Dr. Christian Hennig



Geschäftsführung:  
Dr. Frank Lohse

### Department Chemie



Sprecher:  
Prof. Dr.  
Gerald Henkel

### Department Physik



Sprecher:  
Prof. Dr.  
Klaus Lischka

### Department Sport & Gesundheit



Sprecher:  
Prof. Dr. Dr.  
Sebastian Braun



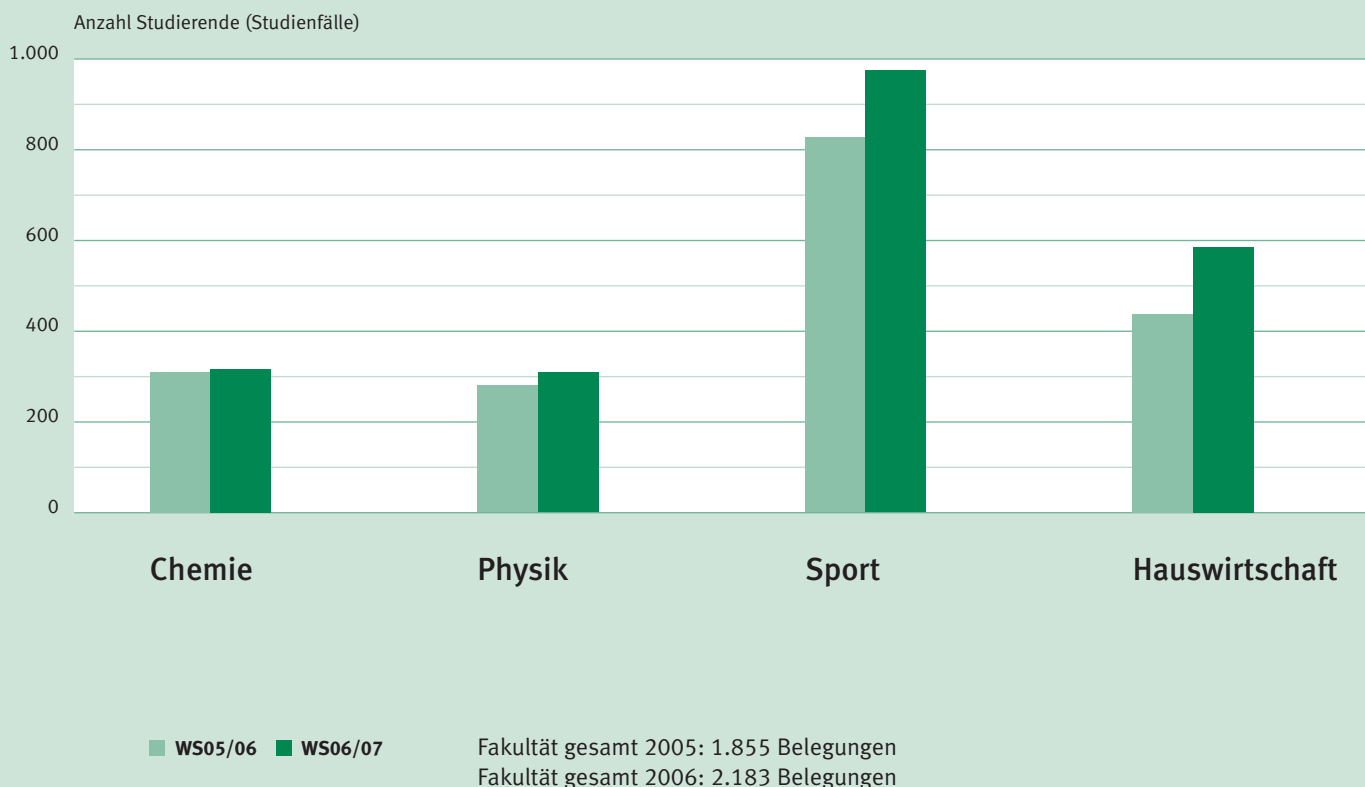
# Fakultät für Naturwissenschaften – Struktur und Lehre

Zum Ende des Berichtszeitraums waren in den Studiengängen der Fakultät für Naturwissenschaften insgesamt 2183 Studierende (Belegungen) eingeschrieben. Für deren Ausbildung stehen 36 Professorinnen und Professoren (einschl. Privatdozenten und Hochschuldozenten und Juniorprofessuren), 51 wissenschaftliche und 47 technische Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter bereit. Diese werden durch ca. 50 weitere wissenschaftliche und technische, aus Drittmitteln finanzierte Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern unterstützt. Durch ihre Strukturierung in jeweils 3–5 departmentsspezifische Fachdisziplinen steht eine Fächerbreite zur Verfügung, die speziell für interdisziplinäre, fach- und fakultätsübergreifende Verflechtungen in Forschung und Lehre von großer Bedeutung ist. Zudem verfügen die Departments über die notwendige Basis für die Konzentrierung auf zukunftsweisende Arbeitsfelder mit hohem Innovationspotenzial und die Etablierung von

Alleinstellungsmerkmalen in Forschung und Lehre. Im Bereich der Lehre hat die Fakultät für Naturwissenschaften auf die allgemein geringe Nachfrage in den naturwissenschaftlichen Grundlagenfächern und auf die Anforderungen an die Hochschulen zur Entwicklung moderner Studiengänge mit international ausgerichteten Abschlüssen reagiert. Den Studierenden werden (Departments Chemie und Physik ab WS 2004/2005, Department Sport und Gesundheit ab 2007) moderne, curricular modularisierte Kombinationsstudiengänge angeboten, die mit studienbegleitenden Prüfungen, kumulativen Abschlüssen sowie mit einem ECTS-kompatiblen Kreditpunktesystem versehen sind. Durch ihre interdisziplinäre Ausrichtung sind sie bedarfsgerecht auf neue, zukunftssträchtige Berufsfelder abgestimmt. Die fundierte Fachausbildung wird dabei ergänzt durch die Entwicklung persönlicher, überfachlicher Qualifikationen (Kommunikations-, Moderations-, Team-, Medien-, Projekt-, Führungskompetenz etc.).

Leitlinie der curricularen Modernisierung und Modularisierung ist zudem die Etablierung eines sich auf qualifizierte Beratung und systemische Evaluation stützenden Konzeptes zur Sicherung und Weiterentwicklung der Qualität in der Lehre, eines Mentorenprogramms zur individuellen Studienberatung und -betreuung sowie einer Alumni-Betreuung. Neben den (akkreditierten) Bachelor-/Master-Studiengängen gibt es zudem das Angebot einer differenzierten, schultypspezifischen Lehrerbildung in den Fachdisziplinen der jeweiligen Departments. Die modularisierten Lehramtsstudiengänge sind grundständig organisiert und an den professionellen Kompetenzen des künftigen Berufsfelds Schule ausgerichtet. Sie wurden an die neue Lehramtsprüfungsordnung in NRW angepasst.

## Studierendenanzahl (Belegungen)



# Fakultät für Naturwissenschaften – Forschung

Die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler der Fakultät für Naturwissenschaften sind in zahlreichen instituts- und fakultätsübergreifenden Einrichtungen sowie nationalen wie auch internationalen Forschungsprojekten involviert.

In vielzähligen Drittmittelprojekten (DFG, BMBF sowie z.T. bedeutenden Wirtschaftsunternehmen) werden sowohl grundlagen- als auch anwendungsorientierte Fragestellungen bearbeitet. Das dadurch erzielte Drittmittelvolumen betrug im Jahr 2006 3,786 Millionen EURO.

Hinzu kommen nicht drittmittelaktive Forschungsförderungen für Grundlagen- bzw. angewandte Forschung und Entwicklung von Seiten öffentlicher und gemeinnütziger Projektträger (Fachministerien, Stiftungen etc.).

Das **Center for Optoelectronics and Photonics Paderborn**, kurz „CeOPP“ ist seit September 2006 zentrale wissenschaftliche Einrichtung der Universität Paderborn. Das CeOPP bietet derzeit zehn Forschungsgruppen aus den Departments Chemie und Physik und dem Institut für Elektrotechnik und Informationstechnologie die Möglichkeit, Ressourcen und wissenschaftliche Kompetenzen gemeinsam zu nutzen. Ziel ist es, zukunftsweisende Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der optischen Technologien gemeinschaftlich zu betreiben. Dieses zentrale Forschungsthema ist auch ein überaus attraktives Ausbildungsfeld für die Paderborner Studierenden aus den Bereichen Naturwissenschaften und Elektrotechnik. Im Rahmen der „Graduate Lectures“ werden daher regelmäßig interessante Themen aus der universitären und industriellen Forschung präsentiert.

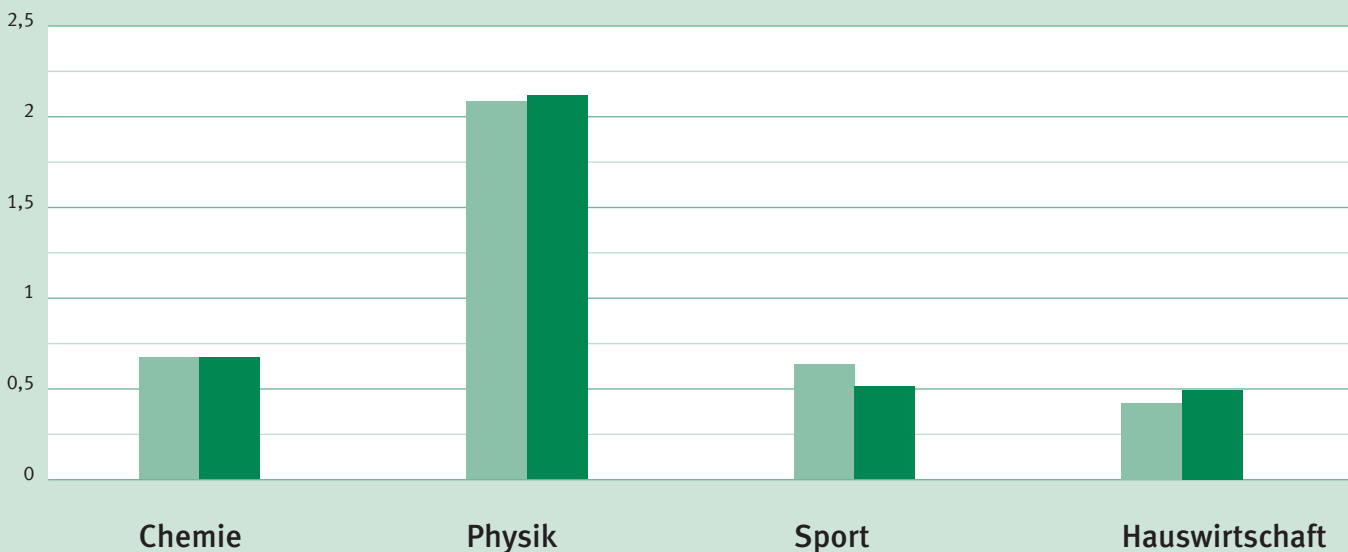
[www.ceopp.de](http://www.ceopp.de)

Das **Forschungszentrum für Bürger-schaftliches Engagement** setzt sich in einer multidisziplinär zusammengesetzten Gruppe von Soziologen, Sozial- und Sportwissenschaftlern auf wissenschaftlicher Basis mit freiwilligen Aktivitäten von Individuen jenseits der Erwerbsarbeit und der Privatsphäre (z.B. in Vereinen, Schulen und Bürgerinitiativen) und mit dem gesellschaftlichen Engagement von Unternehmen und Nonprofit-Organisationen auseinander. In diesem Forschungskontext wird vor allem der Frage nachgegangen, welches Potential das bürgerschaftliche Engagement als Ressource bietet, um die Herausforderungen des sozialen, ökonomischen, politischen und ökologischen Wandels im nationalen und globalen Kontext nachhaltig zu lösen. Das Forschungszentrum ist auch beratend tätig und gibt auf diese Weise Impulse für die öffentliche Diskussion über das bürgerschaftliche Engagement.

[forschungszentrum-be.upb.de](http://forschungszentrum-be.upb.de)

## Drittmittel der Fakultät

in Mio. EUR



■ 2005 ■ 2006

Gesamt 2005: 3.802.320 EUR

Gesamt 2006: 3.785.558 EUR

# Fakultät für Naturwissenschaften – Internationalisierung

Die drei Departments der Fakultät Naturwissenschaften pflegen seit Jahren einen intensiven Kontakt mit ausländischen Hochschulen auf der Basis des Studierenden- und Dozentenaustausches sowie im Bereich der Forschungsaktivitäten.

Austauschprogramme bestehen

im Department Sport und Gesundheit mit

- der University of Otago (Dunedin, Neuseeland)
- dem Shanghai Institute of Physical Education (Shanghai, China)
- dem Zinman College for Physical Education (Netanya, Israel)
- der Universidad Rio Grande do Sul (Santa Maria, Brasilien)
- der Vilnius Paedagoginis Universitetas (Litauen)

Forschungsaktivitäten gibt es zudem noch mit zahlreichen weiteren ausländischen Hochschulen,

im Department Physik mit

- den Universitäten von Santander und Zaragossa (Spanien)
- den Universitäten von Budapest (Ungarn) und St. Petersburg (Russland)
- den Universitäten von Wellington und Canterbury (Neuseeland) sowie seit neuerem auch mit der Universität von Exeter (England)
- den Universitäten von Belo Horizonte und Minas Gerais (Brasilien)

Mit all diesen Hochschulen gibt es auch wissenschaftliche Kontakte und Zusammenarbeiten,

im Department Chemie mit

- der Universität von Waterloo (Kanada)

- der Universität von Mersin (Türkei)
- den Universitäten von Le Mans und Montpellier (Frankreich)
- der Universität von Debrecen (Ungarn)

Darüber hinaus werden vielzählige Kooperationen mit ausländischen Forschergruppen gepflegt, mit denen z.T. auch ein personeller Austausch im Rahmen von Diplom- oder Doktorarbeiten stattfindet.

Durch internationale Bewerbung von Bachelor-/Masterstudiengängen, die Einführung fremdsprachiger Lehrangebote und die Ausweitung von Austauschpartnerschaften (speziell im osteuropäischen Raum) strebt die Fakultät für Naturwissenschaften eine Intensivierung ihrer Internationalisierungsaktivitäten an. Ein herausragendes Beispiel hierfür ist die Einrichtung eines gemeinsamen Studienprogramms Chemie mit der Qingdao University, China (s. S.13).



Oben: Austauschstudierende im Dialog  
(Foto: Jan Braun)

Unten: Deutsch-Französischer Workshop „Fußball und Identität“ auf Einladung des Deutsch-Französischen Jugendwerks, Paris (2006)



Rechts: Ehrendoktorwürde der Universität Zaragossa für Prof. Dr. Johann-Martin Spaeth, Department Physik (Januar 2005)

# Fakultät für Naturwissenschaften – Nachwuchswerbung

Bedingt durch die seit einigen Jahren anhaltende geringe Nachfrage nach einem natur- oder ingenieurwissenschaftlichen Studium ist die Fakultät für Naturwissenschaften mit hohem Engagement bestrebt, durch vielfältige Veranstaltungen und Aktionen frühzeitig das Interesse für naturwissenschaftliche Fachdisziplinen zu wecken und die Schülerinnen und Schüler für ein naturwissenschaftliches Studium zu motivieren.

Dabei sind besonders zu nennen:

- Populärwissenschaftliche Vorträge
- Tag der offenen Tür
- Schüler-Informationstage
- „Girls’Day“
- Schnupperstudium „Studentin auf Probe“/„Studium live“
- „Support“ (<http://thet.upb.de/support>)
- Praktika für Schülerinnen und Schüler
- Schülerakademie
- „SchülerUni Paderborn“

Wichtig sind hierbei stets die persönlichen Gespräche mit Studierenden, Professorinnen und Professoren und der Studienberatung, bei denen umfassende Informationen über Studienablauf und Studieninhalte sowie Informationen über Berufsfelder, in denen Absolventinnen und Absolventen dieser Studiengänge tätig werden können, übermittelt werden. Durch die Veranstaltungen wird zudem die Vielfältigkeit von naturwissenschaftlichem Studium und Beruf auch anhand praktischer Erfahrungen vermittelt.

## Modellprojekt „SchülerUni Paderborn“

Im WS04/05 wurde zunächst in Kooperation mit dem Mauritius-Gymnasium Büren das Modellprojekt „SchülerUni Paderborn“ gestartet. Es eröffnet ausgewählten Schülern die Möglichkeit, sich in einer „privilegierten Partnerschaft“ für ein ganzes Semester offiziell zum Studium anzumelden und dabei regelmäßig an Lehrveranstaltungen der

Departments Chemie oder Physik teilzunehmen. Die Jungstudierenden können dafür teilweise vom Schulunterricht befreit werden. An der Uni werden sie den regulären Studierenden weitgehend gleichgestellt. So können sie alle Einrichtungen unserer Uni (wie z.B. Mensa, Bibliothek und Rechenzentrum) nutzen und auch an den zu den gewählten Lehrveranstaltungen gehörigen Prüfungen teilnehmen und Leistungsnachweise erwerben. In einem späteren Studium werden diese Nachweise angerechnet. Somit können sich naturwissenschaftlich besonders begabte Schülerinnen und Schüler schon während ihrer Schulzeit gründlich mit ihrem Fachgebiet auseinandersetzen und das Uni-Leben kennen lernen. Aufgrund der guten Erfahrungen und des Interesses wird das Projekt „SchülerUni Paderborn“ ab dem WS06/07 für Schülerinnen und Schüler aller Schulen im Umkreis angeboten.



WDR-Kinderhochschulwoche: Wie produzieren Äpfel Strom? (Oktober 2005)



„So werden wir Weltmeister – Die Physik des Fußballspiels“ – Prof. Dr. Metin Tolan, Universität Dortmund erklärt im Rahmen des Physikalischen Kolloquiums, wie wir Weltmeister werden können (Mai 2006)



Schnupperstudium 2006 „Studentin auf Probe“: Workshop Lackchemie – Funktion und Design am Beispiel Nagellack



„Alles nano?! Nano4girls!“ – Großer Nano-Schnuppertag: Workshops mit praktischen Experimenten, Talkrunden, eine Unternehmensmesse und der Nano-Truck des Bundesministeriums für Bildung und Forschung liefern Einblicke in die Welt des Nanoversums (November 2005)



„Chemische Experimente rund um Weihnachten und Silvester“ – Eine bei der jungen Paderborner Bevölkerung sehr beliebte Experimentalvorlesung im Rahmen des Chemischen Kolloquiums (Dezember 2006)

# Department Chemie

Die chemische Industrie hat für die Beschäftigung, für die Wirtschaftsstruktur und für die Innovationskraft des Standorts Deutschland seit jeher einen herausragenden Stellenwert. Sie ist zudem eine der drei großen Schlüsselindustrien mit Querschnittsbedeutung für die gesamte Wirtschaft, da neue Erfindungen und Produkte die Entwicklung in anderen Industriezweigen (Automobiltechnik, Medizintechnik, Chipindustrie) wesentlich beeinflussen.

Die deutsche Chemieindustrie befindet sich seit einigen Jahren in einem fundamentalen strukturellen Wandel. Durch die Globalisierung von Chemieforschung und -produktion erfolgt eine zunehmende Fokussierung auf chemisch-technische Geschäftsfelder sowie auf neue, zukunftsrelevante Themen wie Prozessintensivierung, Sustainable Development, Informationstechnologie, Neue Materialien und Neue Energieträger.

Durch den steigenden Stellenwert, den speziell verfahrenstechnische Prozesse für diese Branche einnehmen werden, sind Chemie und Technik im Verbund als zukünftige Garanten für den wirtschaftlichen Erfolg und Wohlstand unserer Gesellschaft zu werten. Der Strukturwandel der Chemiebranche verändert auch das Berufsbild des Chemikers. Die Konzentration der Geschäftsbereiche und die innovativen Arbeitsfelder erfordern einen Fachkräftebedarf mit über die unverzichtbare, fundierte Chemieausbildung hinausgehenden Qualifikationen in Spezialgebieten und anderen Fachdisziplinen. Zudem werden Schlüsselqualifikationen (Softskills) wie soziale Kompetenz, Handlungskompetenz und Dialogfähigkeit als Grundlage für ein erfolgreiches Agieren in diesem zunehmend interdisziplinär geprägten Berufsumfeld erwartet.

Das Department Chemie der Universität Paderborn hat die veränderten wirtschaftlichen und strukturellen Rahmenbedingungen frühzeitig erkannt und in seiner Profilbildung und Spezialisierung in Forschung und Lehre berücksichtigt.

chemie.upb.de

DEPARTMENT CHEMIE

9

## Arbeitsgruppen des Departments Chemie

Anorganische und Analytische Chemie	Organische Chemie	Physikalische Chemie	Technische Chemie	Didaktik der Chemie
<p><b>Prof. Dr. Gerald Henkel</b> Anorganische, Bioanorganische und Analytische Chemie</p> <p><b>Prof. Dr. Stephan Schulz</b> Metallorganische Chemie und Materialwissenschaften</p> <p><b>apl. Prof. Dr. Manfred Grote</b> Analytik im Gesundheitlichen Verbraucherschutz</p> <p><b>Prof. Dr. Gernot Reininger</b> Allgemeine und Anorganische Chemie</p> <p><b>Prof. Dr. Volker Schubert</b> Computeranwendung in der Chemie</p>	<p><b>Prof. Dr. Karsten Krohn</b> Naturstoffchemie, Chemie der Zucker</p> <p><b>Prof. Dr. Nikolaus Risch</b> Präparative organische Chemie, Naturstoffchemie</p> <p><b>Prof. Dr. Gregor Fels</b> Biologische Makromoleküle und Umweltchemie</p> <p><b>PD Dr. Karamali Khanbabaee</b> Asymmetrische Katalyse und Naturstoffsynthese</p>	<p><b>Prof. Dr. Heinz-S. Kitzerow</b> Flüssigkristalle</p> <p><b>Prof. Dr. Claudia Schmidt</b> Struktur und Dynamik</p> <p><b>Prof. Dr. Klaus Huber</b> Physikalische Chemie der Weichen Materie</p>	<p><b>Prof. Dr. Wolfgang Bremser</b> Chemie und Technologie der Beschichtungsstoffe</p> <p><b>Prof. Dr. Guido Grundmeier</b> Technische und Makromolekulare Chemie (berufen zum 01.12.2006)</p> <p><b>Prof. Dr. Hans-Joachim Warnecke</b> Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik</p> <p><b>HD Dr. Dieter Bothe</b> Modellierung, Analysis und Simulation (bis November 2005)</p>	<p><b>Prof. Dr. Hans-Jürgen Becker</b> Systematik und Forschung in der Lehre</p>



# Department Chemie – Forschungsschwerpunkte

Zur nachhaltigen Profilierung der Chemie sind die Maßnahmen zur Fokussierung der Forschungsaktivitäten auf gemeinsame Schnittmengen mit dem Ziel der Etablierung von Alleinstellungsmerkmalen weitergeführt worden. Der sich aus dieser Strategie ergebende Forschungsschwerpunkt **Funktionale Materialien** hat eine chemisch-technologische und eine physiko-chemische Ausrichtung.

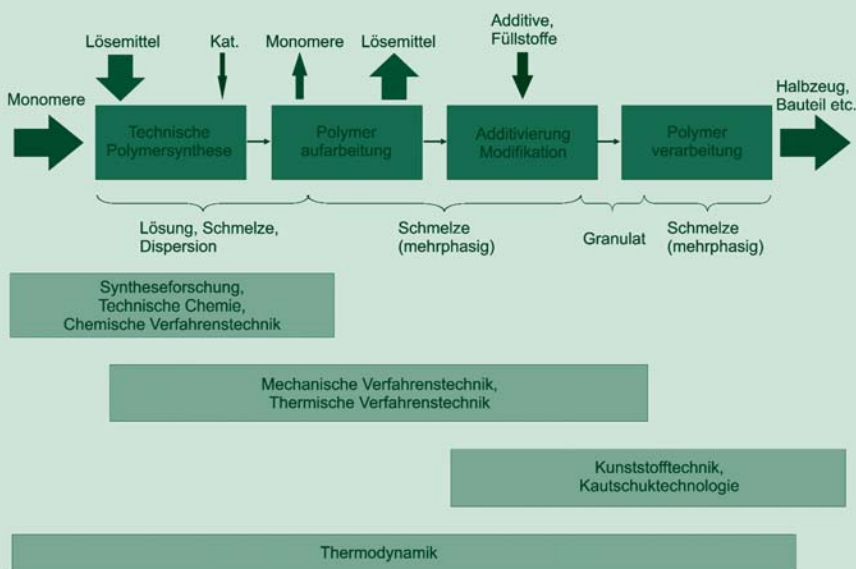
Der chemisch-technologische Fokus lässt sich durch den Begriff „**Polymer Engineering**“ prägnant fassen. Darunter fallen Synthesen komplexer technischer Materialien auf Polymer- und Kompositbasis sowie deren Applikation in Grenzflächenprozessen, ihre physiko-chemische Charakterisierungen (Polymeranalytik), die Entwicklung bioinspirierter Polymerisationsverfahren, die Übertragung der Herstellungsprozesse in den technischen Maßstab unter optimierten Prozessbedingungen sowie deren Modellierung und Simulation. Dieses

Portfolio im Department Chemie ist komplementär zu wichtigen Fachgebieten des Maschinenbaus und ermöglicht Erfolg versprechende Kooperationen auf den Gebieten Materialwissenschaften, Kunststofftechnik, Kleb- und Fügetechnik sowie Mechanische Verfahrenstechnik. Durch die Neuausrichtung der Organischen und Makromolekularen Chemie wird ein ambitionierter organisch-synthetischer Zugang zu polymeren Werkstoffen geschaffen.

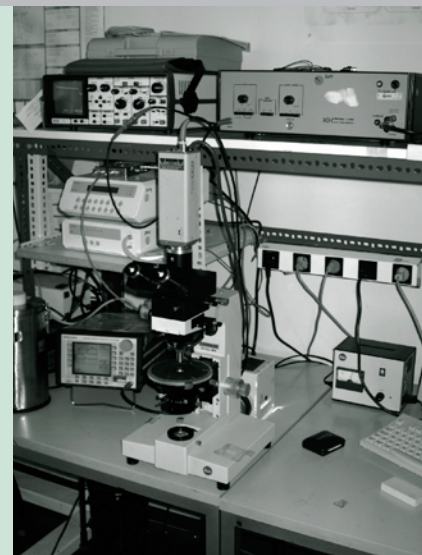
Im Rahmen des interdisziplinären Schwerpunkts „**Optoelektronik und Photonik**“ werden am Department Chemie Themen aus den Bereichen der physikalischen, organischen, makromolekularen und anorganischen Chemie bearbeitet. Im Mittelpunkt stehen neue funktionale Materialien mit interessanten elektronischen und optischen Eigenschaften, und zwar insbesondere Polymere, Kolloide und Photonische Kristalle, Flüssigkristalle und Ausgangsver-

bindungen zur Herstellung von Verbindungshalbleitern und Thermoelektrika (Filme, Nanopartikel). Diese Materialien besitzen ein hohes Potenzial für Anwendungen im Bereich der Elektronik sowie der Erzeugung und Detektion von Licht, der integriert-optischen und opto-optischen Signalverarbeitung, der optischen Datenspeicherung und der Darstellung von Informationen (Displays).

Die erzielbare fachliche Breite für das kompetente Vertreten sowohl der Chemie als auch der Technologie der Polymere in Forschung und Lehre ist bundesweit derzeit an keiner Universität gegeben. Die Verzahnung von Chemie und Maschinenbau auf diesem Gebiet ist eines der Alleinstellungsmerkmale der Paderborner Universität. Mit dem Themenbereich „**Optoelektronik und Photonik**“ leistet die Fakultät für Naturwissenschaften entscheidende Beiträge zum Leitbild der Universität der Informationsgesellschaft.



„**Polymer Engineering**“: Positionierung der Technischen Chemie, der Verfahrenstechnik und der Kunststofftechnik entlang einer typischen Prozesskette in der Polymertechnologie



„**Optoelektronik und Photonik**“  
Elektrooptischer Messplatz zur Untersuchung von organischen Materialien für die Photonik (Bereich Physikalische Chemie / CeOPP)

# Department Chemie – Studium

Bereits zum WS2001/2002 wurde das traditionelle Ausbildungskonzept zum Diplomchemiker durch ein modularisiertes, konsekutives, internationales Standards genügendes Bachelor-/Master-Studienmodell abgelöst. Dieses setzt verstärkt auf innovative Fächerkombinationen und entspricht den heutigen Ausbildungsanforderungen, ohne die grundlegenden chemischen Kompetenzen zu vernachlässigen. Die Bachelor- und Masterstudiengänge des Departments Chemie sind seit Juli 2004 von der Akkreditierungsagentur ASIIN akkreditiert und damit mit einem Gütesiegel versehen.

Der sechssemestrige Bachelorstudiengang „Chemie“ bietet nach einem gemeinsamen zweijährigen Basisstudium im letzten Studienjahr zwei Vertiefungsrichtungen. Neben der klassischen Richtung „Chemie“ wird eine stärker anwendungsorientierte Spezialisierung auf dem Gebiet „Chemie und Technolo-

gie der Beschichtungsstoffe“ angeboten.

Der weiterführende, viersemestrige Masterstudiengang stützt sich auf anerkannte und attraktive Schwerpunkte des Universitätsstandorts Paderborn. In diesem Studiengang besteht die Wahl zwischen den Schwerpunkten „Optoelektronik und Photonik“, „Kunststofftechnik“ sowie „Chemie und Gesundheit“.

- Die Studienrichtung „Optoelektronik und Photonik“ baut auf Schwerpunkten in der Physik und der Physikalischen Chemie auf. Zielsetzung ist die Vermittlung von Grundkenntnissen der Herstellung, Charakterisierung und Anwendung der wichtigsten Materialien der Informationstechnologie (optisch nichtlineare Materialien, photonische Kristalle, Halbleiter, Flüssigkristalle).

- Die „Kunststofftechnik“ wird in Kooperation mit der Fakultät für Maschinenbau durchgeführt. Neben präparativ-chemischen und physikalischen-chemischen Aspekten der Polymerwissenschaft werden insbesondere auch verfahrenstechnische Kenntnisse vermittelt.

- In den Wahlbereich „Chemie und Gesundheit“ fließen Erfahrungen in Lehre und Forschung aus der Sportmedizin, dem Verbraucherschutz, der Organischen und Anorganischen Chemie ein.

Die nach Schultypen differenzierten Lehramtsstudiengänge (Grund-, Haupt-, Real-, Gesamtschulen und Gymnasien sowie Berufskollegs) sind praxis- und somit auch schülerorientiert. Sie akzentuieren auf das Berufsfeld „Chemieunterricht“ bezogene Aktivitäten.

[chemie.upb.de/studium](http://chemie.upb.de/studium)

DEPARTMENT CHEMIE  
STUDIUM  
11

Anwendungsnahes praktisches Studium  
(Foto: Adelheid Rutenburgs)



Moderne Lehre in akkreditierten Bachelor- und Masterstudiengängen (Foto: Jan Braun)



Austausch in Theorie und Praxis  
(Foto: Jan Braun)

# Sicherheitsmanagementsystem SGU (Sicherheit – Gesundheit – Umwelt)

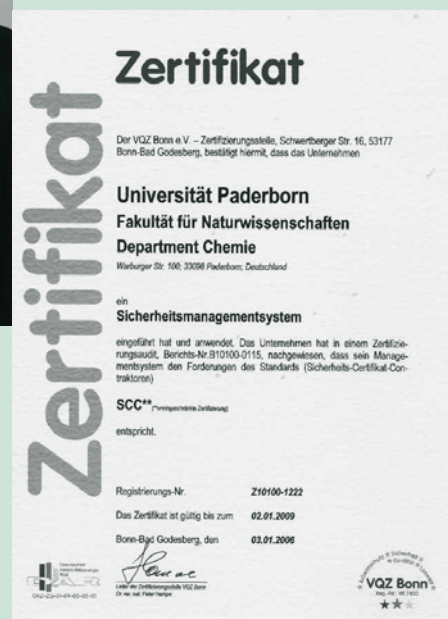
Während die Einführung von Sicherheitsmanagementsystemen für Sicherheit, Gesundheit und Umwelt (SGU) in der chemischen Industrie bereits vor Jahren zur Selbstverständlichkeit geworden ist, wurde dieser Thematik an Universitäten und sonstigen Forschungseinrichtungen bislang kaum Beachtung geschenkt. Das Department Chemie der Universität Paderborn stellte sich bereits vor einigen Jahren dieser Herausforderung und führte im Jahr 2002 als erster Chemie-Bereich einer deutschen Universität ein von der unabhängigen Prüfstelle „Verband für Qualität und Zertifizierung“ (VQZ) nach SCC\*-Norm zertifiziertes Sicherheitsmanagementsystem für Sicherheit, Gesundheit und Umwelt (SGU) ein. Im Dezember 2005 wurde dieses Sicherheitsmanagementsystem durch das VQZ erfolgreich rezertifiziert und dem Department Chemie der Universität Paderborn wurde ein vorbildliches Verhalten in diesen sensiblen Bereichen bescheinigt.

Mit der Einführung des Sicherheitsmanagementsystems SGU verpflichtete sich das Department Chemie zur Einhaltung, Überwachung und Dokumentation sicherheitsrelevanter Bestimmungen innerhalb der Forschung und der Ausbildung. Ein vorrangiges Ziel war von Beginn an, den Studierenden sicherheits-, gesundheits- und umweltschutzrelevante Abläufe und Zusammenhänge, die für das spätere Berufsleben in der Industrie von hoher Relevanz sind, zu vermitteln, sie für diese Thematik zu sensibilisieren und ihnen beim Aufbau von Verhaltenskompetenzen zu helfen. Regelmäßig durchgeführte Mitarbeiterschulungen zu unterschiedlichen sicherheitsrelevanten Themenstellungen tragen maßgeblich zur Akzeptanz und zur Umsetzung dieser Sicherheitsphilosophie bei. Ausführliche Informationen zu den Leitlinien und Zielen des Managementsystems SGU sind im Internet abrufbar.

**SGU-Managementteam**  
 Prof. Dr. Stephan Schulz (Sprecher)  
 Thomas Arens  
 Gisela Jünemann  
 Martin Samusch  
 Matthias Schmidt  
 Dr. Heinz Weber  
 Martin Hohrath, Dez. 5.3  
 Diana Riedel, Dez. 5.3



Schreiben Sicherheit im Department Chemie ganz groß: Uni-Rektor Prof. Dr. Nikolaus Risch, Prof. Dr. Stephan Schulz, Prof. Dr. Hans-Joachim Warnecke, Diana Riedel und Prof. Dr. Gerald Henkel (v. links) vom Department Chemie der Universität Paderborn mit dem Zertifikat der VQZ Bonn



Zertifikat der VQZ Bonn



# Studienprogramm Chemie der Universität Paderborn und der Qingdao University of Science and Technology, Qingdao, China

Das Department Chemie der Universität Paderborn richtet mit der Chinesisch-Deutschen Technischen Fakultät (CDTF) der Qingdao University of Science and Technology (QUST) ein gemeinsames Studienprogramm Chemie ein. Zwischen den beiden Universitäten besteht bereits eine langjährige Partnerschaft, in deren Rahmen im Jahr 2001 die CDTF zum Aufbau eines Maschinenbau-Studiengangs (BSc) gegründet worden ist. Dieses Programm wird nun durch die Chemie ergänzt, wobei jedoch kein deutscher Bachelorstudiengang Chemie an der QUST eingerichtet werden soll, sondern es wird chinesischen Studierenden die Möglichkeit eröffnet, einen Teil ihres Bachelorstudiums in Paderborn zu absolvieren. Für die Paderborner Chemiestudierenden bietet sich in diesem Programm die Chance, im Rahmen von Projekt-, Bachelor- und/oder Masterarbeiten für einige Monate an die QUST zu gehen.

Das Studienprogramm für die chinesischen Studierenden besteht aus drei Programmphasen:

Phase 1 (ein Jahr): Erlernen der deutschen Sprache mit einem Zeitaufwand von 24 Stunden je Woche in einer Sprachschule der CDTF.

Phase 2 (zwei Jahre): Grundstudium der Chemie an der QUST (1.-4. Fachsemester). Abhaltung von Kursen in chinesischer Sprache, begleitet von Blockkursen Paderborner Lehrender, in denen spezifische Inhalte des jeweils zurückliegenden Semesters in deutscher Sprache wiederholt werden.

Phase 3 (zwei Jahre): Nach erfolgreichem Abschluss der ersten beiden Programmphasen Fortsetzung des Chemiestudiums im Department Chemie der Universität Paderborn. Die Studierenden der QUST werden an der Universität Paderborn in das zweite Studien-

jahr des Bachelorprogramms Chemie und Chemietechnik eingestuft und erhalten nach Abschluss des Studiums den Grad "Bachelor of Science".

Es ist geplant, dass maximal 30 Chemiestudierende pro Jahr von der QUST zur Universität Paderborn wechseln. Die ersten Studierenden werden zum Wintersemester 2008/09 erwartet. Die in diesem Programm ebenfalls vorgesehenen mehrmonatigen Aufenthalte deutscher Studierender im Rahmen von wissenschaftlichen Arbeiten an der QUST werden bereits in 2007 mit vier Bachelorstudierenden des 6. Semesters in einem Pilotprojekt erstmalig durchgeführt. Für die Zukunft ist geplant, Bachelor- und Masterarbeiten sowie auch studienbegleitende Projektarbeiten im Masterstudium an der QUST oder auch in chemischen Firmen vornehmlich in Qingdao regelmäßig anzubieten. Projektverantwortlicher auf deutscher Seite ist Prof. Dr. Gregor Fels.

chemie.upb.de

DEPARTMENT CHEMIE  
QINGDAO UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

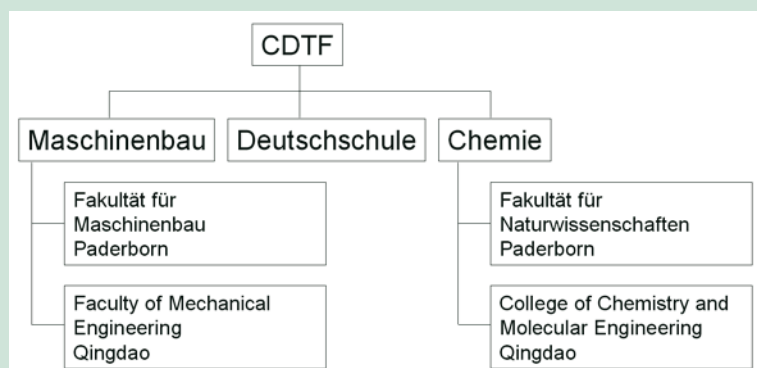
13



Werbeplakat für das Maschinenbau- und Chemiestudium an der CDTF



Fakultätsgebäude der CDTF in Qingdao



Organisationsstruktur der CDTF

# Alumni Chemie Paderborn e.V.

## Verein aktiver Freunde der Paderborner Chemie

Im Verein Alumni Chemie Paderborn (AlChemPB) e.V. finden ehemalige und gegenwärtige Mitglieder des Departments Chemie sowie alle aktiven Freunde und Förderer der Chemie ein Forum für Gespräche um und über die Chemie in Paderborn. Ziel des Vereins ist die Förderung eines lebendigen, persönlichen, gesellschaftspolitischen und fachlichen Meinungsaustausches untereinander. Zudem sollen ehemalige Mitglieder des Departments sowie ehemalige Studierende die Möglichkeit erhalten, auch nach ihrem Ausscheiden aus dem aktiven Dienst bzw. nach dem Ende ihres Studiums weiterhin an der Paderborner Chemie teilzuhaben. Der Verein möchte eine Brücke zwischen seinen Mitgliedern und dem Department Chemie der Universität Paderborn schlagen, den Dialog zwischen dem Department Chemie, der Berufswelt und der Gesellschaft zu verbessern und auf diesem Weg die Forschung und Lehre

des Departments Chemie in Paderborn aktiv zu fördern.

Die Aktivitäten des am 9. April 2005 gegründeten Vereins fokussieren sich insbesondere auf

- die Förderung des Ansehens der Universität Paderborn und des Departments Chemie in der Öffentlichkeit,
- die Unterstützung des Departments Chemie in seinen Aufgaben in der Lehre, der Forschung und der Weiterbildung,
- Stärkung der Verbundenheit der Chemiker untereinander und zur Universität Paderborn,
- Förderung des Meinungs- und Erfahrungsaustausches zwischen aktiven und ehemaligen Mitgliedern des Departments Chemie,
- Verbesserung des Praxisbezuges der Ausbildung, indem Kontakte zu den im Berufsleben stehenden Chemikern intensiviert werden,

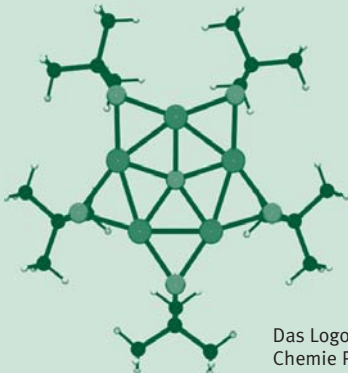
- Öffentlichkeitsarbeit und Spendengenerierung,
- finanzielle und materielle Unterstützung der Chemieausbildung von Studierenden des Departments Chemie.

Mitglied im Verein zu sein bedeutet, den Kontakt mit der Universität Paderborn nicht abreißen zu lassen, gut informiert zu bleiben, in ein Netzwerk für berufliche und private Zwecke eingebunden zu sein und die Möglichkeit zu haben, die eigenen Erfahrungen in die Universität einzubringen - und umgekehrt an den aktuellen wissenschaftlichen Entwicklungen teilzuhaben.

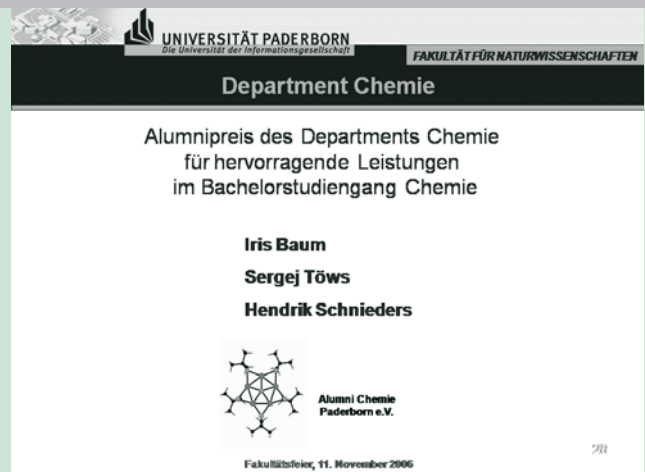
Nähere Informationen erhalten Sie vom Vorsitzenden des Vereins, Prof. Dr. Stephan Schulz.



Arbeiten am Alumni-Netzwerk in der Fakultät NW: (von links) Prof. Dr. Gerald Henkel (AlChemPB e.V.), Alexandra Dickhoff (Alumni Paderborn e.V.), Reinhard Schnittker (VeSPa e.V.) und Prof. Dr. Stephan Schulz (AlChemPB e.V.)



Das Logo von Alumni Chemie Paderborn e.V.



Vergabe von Alumni-preisen im Rahmen der Fakultätsfeier im November 2006



# Anorganische, Bioanorganische und Analytische Chemie

## Prof. Dr. Gerald Henkel

### „Metalle in Lebensprozessen – von molekularen Fragmenten sulfidischer Festkörper bis zu aktiven Zentren in Proteinen und Enzymen“

Fossile Brennstoffe sichern heute den Energiebedarf unserer Gesellschaft. Theoretisch könnte es so weitergehen, bis sie verbraucht sind. In der Praxis wird es anders kommen, denn bereits lange, bevor auch nur ein Viertel dieser Biomasse verbrannt ist, reicht der Sauerstoffgehalt der Atmosphäre für unsere Atmung nicht mehr aus. Unsere Zukunft wäre gesichert, wenn wir es stattdessen schaffen, Wasserstoff mit Sonnenlicht zu erzeugen und ihn als Energieträger zu verwenden. Gleichzeitig könnten wir damit auch unsere Rohstoffe und unser Klima wirkungsvoll schützen. Eine elegante Lösung des Problems finden wir bei photosynthetischen Organismen und bei allen Lebewesen, die Wasserstoff oder Sauerstoff in ihrem Stoffwechsel produzieren oder verbrauchen und zur Katalyse dieser Reaktionen auf

Übergangsmetalle zurückgreifen. Unsere Forschungsprojekte verknüpfen diesen Bereich der Biologie mit der klassischen Komplexchemie zur modernen Bioanorganischen Chemie. Hier geht es um die Charakterisierung und die chemische Modellierung von Metallkomplexen, die in Proteinen und Enzymen lebenswichtige Aufgaben erfüllen. Diese Untersuchungen erlauben uns direkte Einblicke in die Abläufe biologischer Prozesse. Mit Blick auf die Wasserspaltung durch Sonnenlicht wollen wir dazu beitragen, die Überspannungsprobleme technischer Elektroden nach dem Vorbild der Photosynthese und natürlicher Enzyme zu lösen.

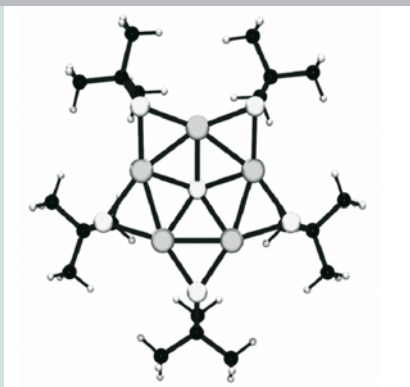
#### Prof. Dr. Gerald Henkel

ist seit April 2002 Professor in der Fakultät für Naturwissenschaften und Inhaber des Lehrstuhls für Anorganische und Analytische Chemie. Er studierte zwischen 1968 und 1973 Chemie an der Universität Kiel und promovierte 1976 an der Universität Bielefeld mit einer Arbeit über S-H...S Wasserstoffbrückenbindungen in Thiosäuren des Phosphors und des Kohlenstoffs bei Bernt Krebs. Nach Forschungsaufenthalten am ILL in Grenoble/Frankreich, am BNL in Brookhaven, Long Island/USA, sowie am Weizman Institute of Science in Rehovot/Israel habilitierte er sich 1984 an der Universität Münster mit Arbeiten über Komplexe elektronenreicher Übergangsmetalle mit biologisch relevanten Chalkogenliganden für das Fach Anorganische Chemie. Vor seiner Tätigkeit in Paderborn war er Professor für Anorganische Chemie und Leiter des Fachgebiets Festkörperchemie an der Universität Duisburg. Weitere Rufe auf Lehrstühle für Anorganische Chemie an den Universitäten Chemnitz (1993) und Clausthal (1997) hat er abgelehnt.

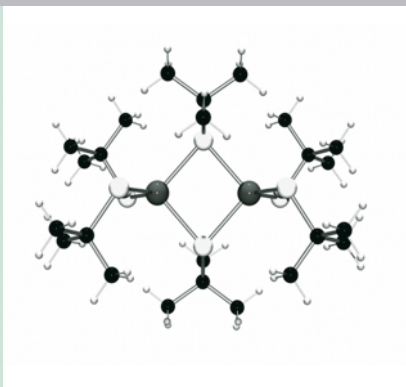
[chemie.upb.de/henkel](http://chemie.upb.de/henkel)

DEPARTMENT CHEMIE  
ANORGANISCHE UND ANALYTISCHE CHEMIE

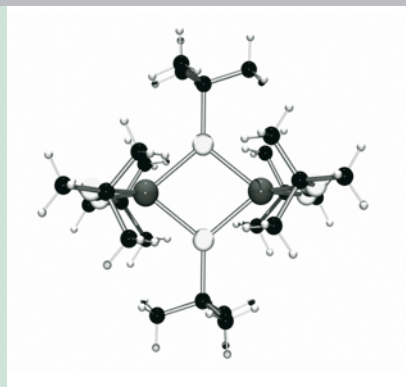
15



Ein molekularer Stern: Sulfid-Thiolat-Komplex des Nickels



Überraschende Isomerie: klassisch (links) und invers (rechts) gebauter Eisen-Thiolat-Komplex



Mitarbeiterkreis: Ehemalige und Aktive der Arbeitsgruppe Henkel (Bad Driburg, 2006)

# Metallorganische Chemie und Materialwissenschaften

Prof. Dr. Stephan Schulz

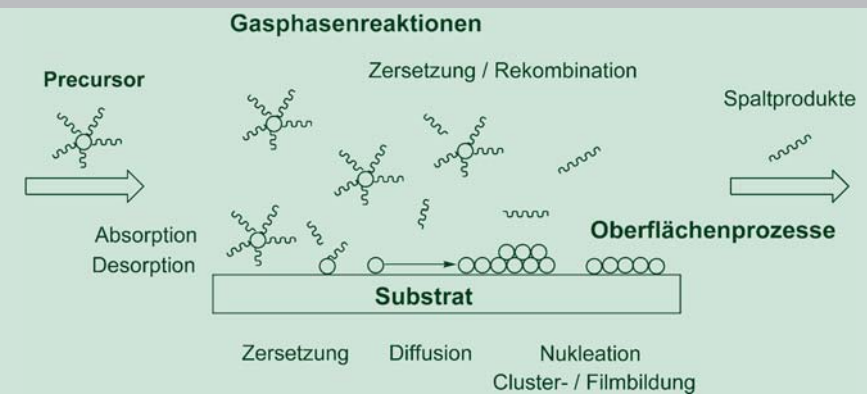
„Synthese neuer Funktionsmaterialien ausgehend von molekularen Single-Source-Precursoren – ein alternativer Ansatz“

Die Synthese neuer (Funktions-) Materialien mit bislang unbekanntem Eigenschaften ist eine Schlüsseltechnologie des kommenden Jahrhunderts (*Soft Matter*). Exemplarisch seien nur die Entwicklungen in den Bereichen (ultra-)dünner Materialfilme oder Nanopartikel angeführt, die bereits Anwendungen in der Optoelektronik, Photovoltaik oder Katalyse gefunden haben. Deren Gewinnung ausgehend von molekularen Startverbindungen (*Precursor*), deren chemische und physikalische Eigenschaften genau eingestellt werden können, stehen im Mittelpunkt unserer Studien. Wir konzentrieren uns auf die Synthese und Strukturaufklärung molekularer Verbindungen, die potenzielle Precursor für wichtige Isolatoren (AlN), Halbleitermaterialien (AlSb, GaSb, InSb) und Thermoelektrika (Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, ZnSb) sind.

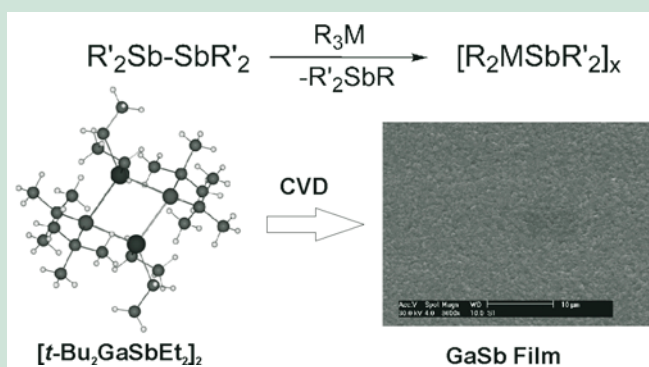
Diese werden mittels MOCVD-Verfahren (*metal organic chemical vapor deposition*) in Form dünner kristalliner Filme auf spezifischen Substraten abgeschieden. Im Unterschied zu klassischen festkörperchemischen Verfahren verläuft dieser Prozess unter kinetisch-kontrollierten Reaktionsbedingungen, so dass sich auch metastabile Materialien bzw. Materialphasen gewinnen lassen, die nicht die thermodynamisch stabilste Modifikation darstellen. Die Synthese nanoskaliger Partikel mittels nasschemischer Verfahren ist ein weiteres Forschungsfeld. Die Materialcharakterisierung erfolgt mit Hilfe modernster Beugungsmethoden, spektroskopischer Verfahren und der Elektronenmikroskopie, die wir größtenteils in Kooperationen mit Physikern und Physikochemikern durchführen.

Prof. Dr. Stephan Schulz

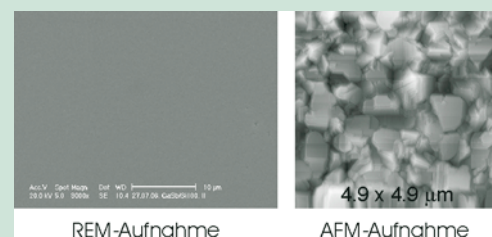
ist seit Oktober 2004 Professor für Anorganische Chemie am Department Chemie der Universität Paderborn. Er studierte zwischen 1986 und 1992 Chemie an der Universität Göttingen und promovierte 1994 an der Universität Göttingen bei Herbert W. Roesky. Nach einem Postdoc-Aufenthalt an der University of Iowa begann er 1996 im Arbeitskreis von Edgar Niecke an der Universität Bonn mit Arbeiten zu seiner Habilitation, die er 2001 abschloss. Vor seiner Tätigkeit in Paderborn war er von 2001 bis 2003 Privatdozent in Bonn, anschließend vertrat er für ein Jahr eine C3-Professur in Köln.



Gasphasen- und Oberflächenprozesse in einem CVD-Prozess



Precursorsynthese und MOCVD-Prozess



REM- und AFM-Aufnahmen an GaSb-Filmen

# Analytik im Gesundheitlichen Verbraucherschutz

apl. Prof. Dr. Manfred Grote

„Arzneistoffrückstände in Umwelt und Nahrungskette“

Arzneistoffe, die von Menschen angewendet wurden und die Umwandlungsprodukte (Metabolite) gelangen über Kläranlagen als Spurenrückstände in Oberflächenwässer, ins Grundwasser und gebietsweise auch ins Trinkwasser. Zusätzlich werden Veterinärarzneistoffe aus der landwirtschaftlichen Tierhaltung über Gülledüngung in die Umwelt eingetragen. Daher können sowohl in Lebensmitteln tierischer Herkunft als auch in Böden und Nutzpflanzen Arzneistoffrückstände vorkommen. Insbesondere der Einsatz von Antibiotika führt zu einer besonderen Gefährdung des Menschen durch vermehrte Ausbil-

dung von Resistenzen. Um die Verbreitungswege von Arzneistoffrückständen in Umwelt und Nahrungskette und damit verbundene Risiken für den Verbraucher zu erkennen, werden empfindliche und zuverlässige spurenanalytische Nachweisverfahren mit der HPLC-UV-MS<sup>n</sup>-Technik entwickelt und im Rahmen von verbraucherschutzorientierten Projekten - in Kooperation mit externen Forschungseinrichtungen - angewandt. Dabei gelang erstmalig der Nachweis, dass Weizen und Feldsalat aus Güllebeaufschlagtem Boden Antibiotika aufnehmen.

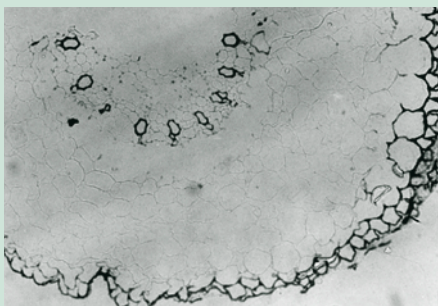
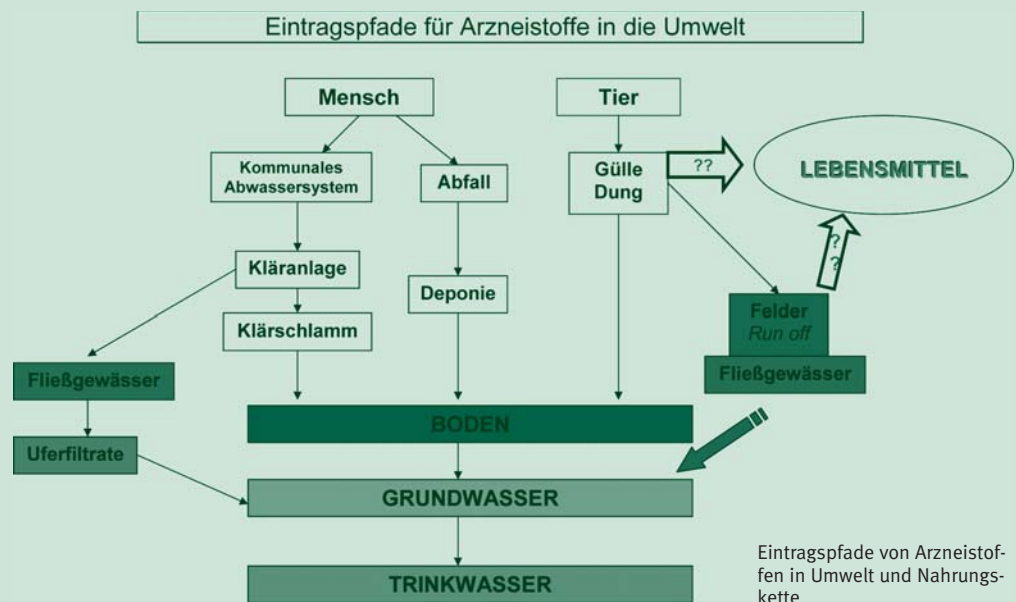
## Prof. Dr. Manfred Grote

Seit 1997 ist Dr. Manfred Grote an der Universität Paderborn als außerplanmäßiger Professor in Forschung und Lehre für Analytische Chemie tätig. Er wurde 1975 an der Ruhr-Universität Bochum am Lehrstuhl für Anorganische Chemie (Prof. Dr. H. Specker) unter Leitung von Prof. Dr. A. Kettrup promoviert (Thematik: Synthese und analytische Anwendung von Metallchelatlignern). Nach Tätigkeit als Wissenschaftlicher Assistent wurde er in der Aufbauphase des Fachbereichs Chemie der Universität (Gesamthochschule) Paderborn als Akademischer Rat eingestellt (inzwischen Akademischer Direktor). Die Habilitation über „Entwicklung und Erprobung edelmetallselektiver und regenerierbarer Extraktionsmittel mit Formazanen und Tetrazoliumsalzen als funktionelle Gruppen“ erfolgte im Jahre 1992.

chemie.upb.de/grote

DEPARTMENT CHEMIE  
ANORGANISCHE UND ANALYTISCHE CHEMIE

17



Mikroautoradiographie des Wurzelquerschnitts einer Weizenpflanze nach Aufnahme eines Tritium-markierten Sulfonamids. Erkennbare Einlagerungen in Zellwänden der Rhizodermis, der ersten Rindenlage (Exodermis) und in Leitbündeln (Xylemgefäße). (Vergrößerung 160x; Aufnahme: Prof. Dr. W. Heyser, UFT Universität Bremen)

# Allgemeine Chemie/Computeranwendungen in der Chemie

Prof. Dr. Gernot Reininger/Prof. Dr. Volker Schubert  
„Schülerakademie Chemie“

Seit 2004 veranstaltet das Department Chemie jährlich die Schülerakademie Chemie. Dabei werden leistungsorientierte und an Naturwissenschaften interessierte Schülerinnen und Schüler der Jahrgangsstufen 11-13 angesprochen und eingeladen, eine Woche lang ganztags Universitätsatmosphäre zu schnuppern. Vormittags werden im Rahmen von Vorlesungen und Übungen theoretische Grundlagen der Allgemeinen Chemie gelernt, nachmittags experimentieren die Teilnehmer in den Laboratorien und wenden die theoretischen Grundlagen praktisch an. Insgesamt stehen 10 Experimente aus der Allgemeinen Chemie zur Verfügung, wobei jeweils 5 konkrete Experimente im Rahmen einer aktuellen Schülerakademie Chemie durchgeführt werden. Im Jahr darauf wird der Experimentesatz

gewechselt, damit auch Mehrfachteilnehmern ein interessantes Programm geboten wird. Die Schülerakademie Chemie findet jeweils in der letzten Ferienwoche der Schulferien statt.

Insgesamt nehmen etwa 15-20 Schülerinnen und Schüler an der Schülerakademie Chemie teil. Die Schüler kommen überwiegend aus der Region um Paderborn. Einige der Teilnehmer konnten wir als Chemiestudenten im Department Chemie begrüßen.

## Prof. Dr. Gernot Reininger

ist Professor für Allgemeine und Anorganische Chemie. Das Chemiestudium absolvierte er von 1964-1969 an der Universität Erlangen-Nürnberg, wo er 1971 im Fach Anorganische Chemie promovierte. Von 1972-1975 war er als Wiss. Referent bei der Bundesanstalt für Arbeitsschutz in Dortmund tätig. Einem Ruf an die Universität Paderborn folgte er 1975. Neben seinen Tätigkeiten in der Allgemeinen und Anorganischen Chemie beschäftigt er sich mit Fragen der Gefahrstoffe, der Sicherheitstechnik und des Arbeitsschutzes.

## Prof. Dr. Volker Schubert

ist Professor für Computeranwendungen in der Chemie. Er studierte Chemie an der RWTH Aachen und der Universität Göttingen, wo er 1983 in der Physikalischen Chemie promovierte. Von 1983 bis 1995 war er im Auftrag des BMFT als Wiss. Referent und Projektstabsleiter im Bereich der Fachinformation tätig. 1995 folgte er einem Ruf an die Universität Paderborn. Seine Lehr- und Forschungsschwerpunkte sind die computergestützte Lehre sowie Struktur-Eigenschaftsbeziehungen (QSPR).

DEPARTMENT CHEMIE  
ALLGEMEINE CHEMIE/COMPUTERANWENDUNGEN IN DER CHEMIE  
18

[chemie.upb.de/schubert](http://chemie.upb.de/schubert)  
[chemie.upb.de/reininger](http://chemie.upb.de/reininger)

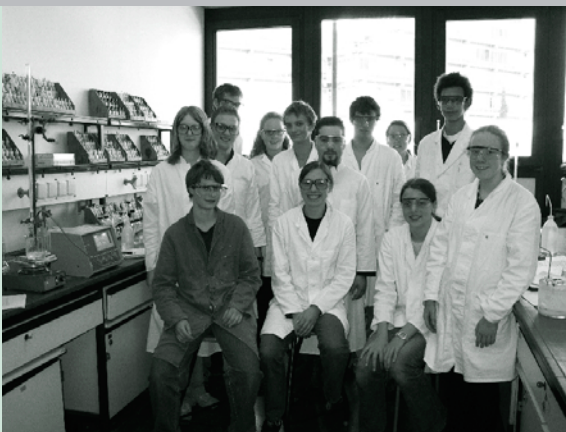


Foto (Kristina von Twistern): Die Teilnehmer an der Schülerakademie Chemie hatten ihren Spaß am Experimentieren.

UNIVERSITÄT PADERBORN  
Die Universität der Informationsgesellschaft

### Schülerakademie 2006

Department Chemie  
31. Juli – 04. August 2006

**Programm**

- Äquivalentmasse einer Säure
- Destillation
- Molmassenbestimmung
- Verteilungsgleichgewicht
- pKs-Bestimmung; Puffer



Programm der Schülerakademie 2006



# Synthetische Organische Chemie, Naturstoffchemie, Chemie der Zucker

Prof. Dr. Karsten Krohn

„Naturstoffisolierung – Synthese von Antibiotika – Zucker als nachwachsende Rohstoffe“

Die Isolierung und Strukturaufklärung von biologisch aktiven Naturstoffen aus terrestrischen und auch marinen Pilzen ist ein laufendes Arbeitsgebiet des Arbeitskreises. Pilze sind eine wichtige Quelle für neue Wirkstoffe im Pharmabereich und im Pflanzenschutz und in Zusammenarbeit mit der BASF werden aus Pilzen neue Leitstrukturen für den Pflanzenschutz isoliert. Zur Aufklärung der absoluten Konfiguration von Naturstoffen wurde eine neue Methode durch Kombination von Röntgenstrukturanalyse und TDDFT-Rechnungen des Circular dichroismus (CD/TDDFT methodology) entwickelt. Bei der Isolierung von Wirk-

stoffen aus traditionellen Heilpflanzen bestehen Kooperationen mit afrikanischen und asiatischen Ländern. Ein weiteres Arbeitsgebiet umfasst die Totalsynthese von Naturstoffen mit biologisch interessanten Wirkungen. Als Zielmoleküle sind hier z.B. neuroprotektive Anthrapyran-Antibiotika, fungicide Pyranone; Chalkone, Palmarumycine, antivirale Polyketide und antimalariawirksame Phenazine zu nennen. Ein drittes Arbeitsgebiet befasst sich mit der Nutzung von Zuckern als nachwachsende Rohstoffe für komplexe chirale Zielmoleküle wie z. B. antitumor-wirksame Makrolide.

Prof. Dr. Karsten Krohn

1963 bis 1966: Studium der Chemie an der TU Berlin, dann Univ. Kiel; 1971: Promotion; 1971-1973: Postdoc-Aufenthalt bei Prof. Mondon, Kiel; 1973 bis 1974: Postdoc-Aufenthalt bei Prof. Winterfeldt, Hannover; 1975 bis 1981: Hochschulassistent am Institut für Organische Chemie und Biochemie der Univ. Hamburg; 1979: Habilitation für die Fächer Biochemie und Organische Chemie; 1981: Berufung an die TU Braunschweig zum C2-Professor; 1982: Verleihung des Karl-Winnacker-Stipendiums; 1991: C4-Lehrstuhl für Organische Chemie an der Universität Paderborn; 1994 bis 1997: Dekan des Fachbereichs Chemie und Chemietechnik, Univ. Paderborn; 2000 bis 2002: Mitherausgeber des Journal of Antibiotics, des Journal of Carbohydrate Chemistry und ARKIVOK; seit 2001 Ortsvorsitzender der Gesellschaft Deutscher Chemiker; 2004: Stipendiat der „Japan Society for the Promotion of Science“; 2006 Verleihung des Ungarischen Humboldt-Preises. Gastprofessuren: 1984 University of Wisconsin; 1996 Universität von Nancy; 2001 University of Santo Tomas, Manila; 2005 Universität Le Mans.

[chemie.upb.de/krohn](http://chemie.upb.de/krohn)

DEPARTMENT CHEMIE  
ORGANISCHE CHEMIE

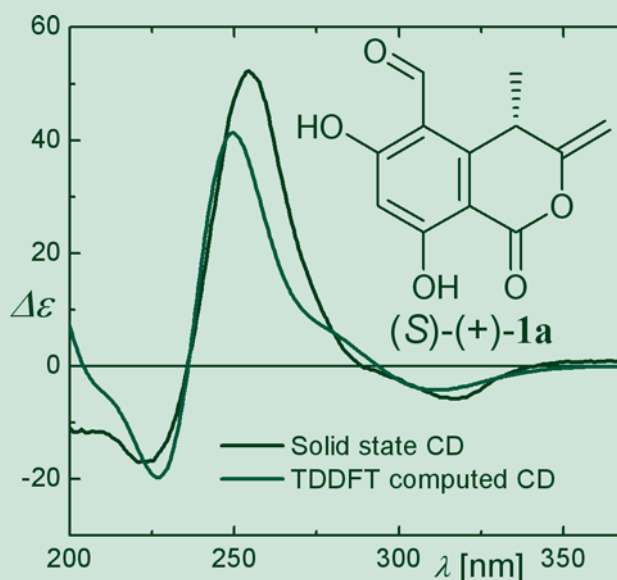
19



Der Arbeitskreis von Prof. Krohn (von links): Harish Kumar Potukuchi, Prof. Dr. Karsten Krohn, Matthias Schmidt, Dr. Anne Vidal, Angelika Kröber (Sekretärin), Hoan Trang Tran-Thien, Mariola Zukowski, Dr. Krisztina Vukics, Dr. Simeon Fogue Kouam, Abdulsalam Aslam, Dr. Hussain Hidayat, Ishtiaq Ahmed, Mohammed Al Sahli



Schüttelkultur eines endophytischen Pilzes



Vergleich gemessenes Festkörper CD- und berechnetes CD-Spektrum und die Struktur des Naturstoffs Asconin



# Präparative Organische Chemie

## Prof. Dr. Nikolaus Risch

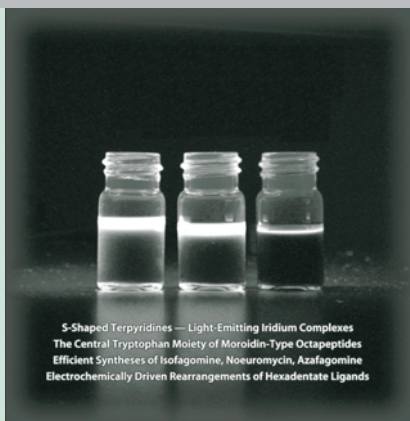
### „Entwicklung effizienter Syntheseverfahren – Moderne Varianten der Mannich-Reaktion“

Die Mannich-Reaktion als klassische Methode zur Darstellung von  $\beta$ -Aminoketonen (Mannich-Basen) zählt traditionell zu den wichtigen Grundreaktionen der Organischen Chemie. Mannich-Basen und ihre Derivate finden vielfältige praktische Anwendungen als Synthesebausteine, z.B. im Pflanzenschutz, bei der Darstellung von Naturstoffen, in der Lack- oder Polymerchemie und vor

allem bei der Herstellung von Arzneimitteln. Im Vordergrund unserer Arbeiten steht die Synthese substituierter Terpyridine, die wir mittels einer effizienten Dominoreaktion darstellen. Die daraus resultierenden Substanzen sind äußerst vielseitig anwendbar, so z.B. auf dem Gebiet der Supramolekularen Chemie, der Materialforschung, der Photokatalyse und der Organokatalyse.

#### Prof. Dr. Nikolaus Risch

ist seit Oktober 2003 Rektor der Universität Paderborn. Er studierte von 1968 bis 1973 Chemie an der TU Braunschweig und promovierte 1975 dort bei Prof. Brockmann. Anschließend war er als wissenschaftlicher Assistent bei der GBF in Stöckheim tätig. An der Universität Bielefeld arbeitete er von 1976 an als wissenschaftlicher Assistent am Aufbau der Fakultät für Chemie mit, wo er 1984 auch seine Habilitation über „Substituierte 1-Azaadamantane“ abschloss. 1992 nahm er einen Ruf auf eine Professur im Bereich Organische Chemie des Fachbereichs Chemie der Universität Paderborn an. Von 1995 bis 1999 war er Mitglied des Rektorats und dort als Prorektor für den Bereich „Planung und Finanzen“ verantwortlich. Von 1999 bis 2001 war er Dekan des Fachbereichs Chemie und von 2001 bis 2003 Gründungsdekan der Fakultät für Naturwissenschaften.



S-Shaped Terpyridines – Light Emitting Iridium Complexes



Der Arbeitskreis Risch (von links): Prof. Dr. N. Risch, A. Lefarth-Risse, J. Hummel, S. Schmedding



Carl Mannich (1877 – 1947), deutscher Apotheker und Chemiker

# Biologische Makromoleküle und Umweltchemie

Prof. Dr. Gregor Fels

„Funktionelle Proteine – ökologische Aspekte – Multimedia“

Eine zentrale Fragestellung unserer Arbeitsgruppe ist das Verständnis der Funktion biologischer Makromoleküle und die daraus abzuleitende Steuerung molekularbiologischer Vorgänge. Dabei verwenden wir vornehmlich Molecular Modeling und Molekuldynamik Methoden und arbeiten eng mit experimentellen Arbeitsgruppen zusammen, um Theorie und Experiment in Einklang zu bringen. Aktuelle Themengebiete sind:

- die Neurotransmission an der cholinergen Synapse, die eng mit dem Auftreten der Alzheimerschen Krankheit verbunden ist (Chemie und Gesundheit) sowie
- die Untersuchung enzymatischer Polykondensationsreaktionen (Makromolekulare Chemie).

Bei unseren klassischen (nass)chemischen Arbeiten gehen wir Fragen der Abbaumöglichkeit von Sprengstoffen in der Umwelt nach und verwenden dabei sowohl mikrobiologische als auch chemische und radiochemische Arbeitsmethoden. Hier bearbeiten wir aktuell, in Zusammenarbeit mit Mikrobiologen, den Abbau von TNT in Grund- und Oberflächenwässern, wobei wir

- einerseits den Vorgängen und Mechanismen bei der Metabolisierung dieser Schadstoffe nachgehen und
- andererseits chemische Abbaumethoden wie z.B. die  $\text{TiO}_2$ -katalysierte Mineralisierung untersuchen.

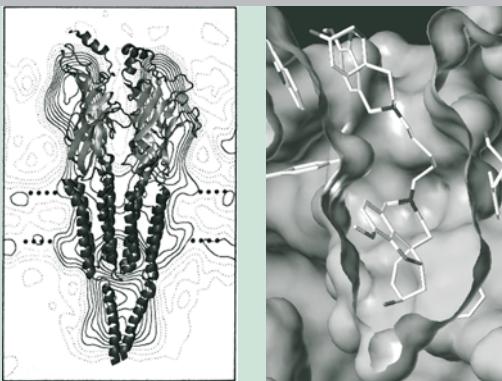
Ein weiterer Schwerpunkt ist der Einsatz neuer Medien in der Lehre, in dem wir die Möglichkeiten der Cyberinfrastruktur in der Lehre der Organischen Chemie ausloten.

**Prof. Dr. Gregor Fels**

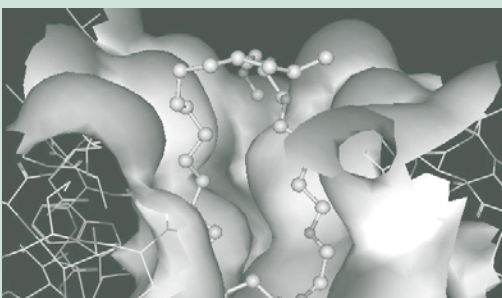
ist Professor für Organische Chemie am Department Chemie der Universität Paderborn. Nach einem Diplomingenieur- und Diplomchemiker-Studium promovierte er 1977 an der Universität Münster und ging anschließend für 18 Monate an die University of California, Berkeley. Nach seiner Rückkehr nach Deutschland arbeitete er bis 1986 am Max-Planck-Institut für Ernährungsphysiologie in Dortmund. In seiner Industrietätigkeit war Prof. Fels bei der Wasagchemie Sythen GmbH für vier Jahre mit Entwicklung und Qualitätskontrolle und für weitere drei Jahre als Produktionsleiter und Prokurist mit der Herstellung von Sprengstoffen befasst. 1993 folgte er dem Ruf an die Universität

chemie.upb.de/fels

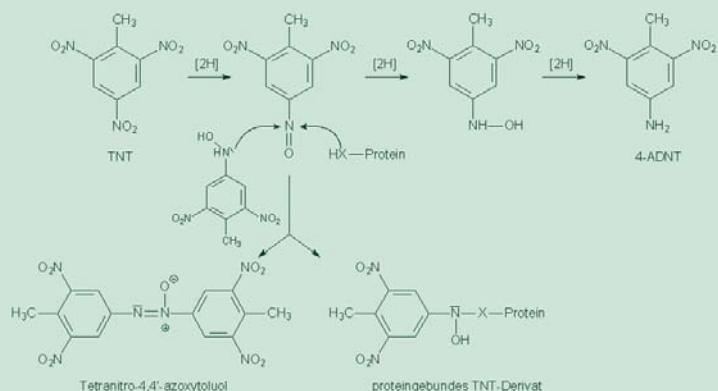
DEPARTMENT CHEMIE  
ORGANISCHE CHEMIE  
21



Modell des kompletten nicotinischen Acetylcholinrezeptors (links) und Bindungstasche der Acetylcholinesterase beispielhaft gezeigt mit einem gebundenen bis-Galanthamin-derivat (rechts). Wir untersuchen Struktur-Funktionsbeziehungen dieser beiden Proteine mit Molecular Modeling und Molekuldynamik Methoden



Orientierung eines Tween-Moleküls in der active site der Lipase B. Dieses Enzym wird für enzymatische Polykondensationen verwendet.



Enzymatische Umsetzung von TNT durch das Bakterium *Raoultella terrigena* (H. Claus et al., *Biotechnol Lett*, 2007, DOI 10.1007/s10529-006-9244-y)

# Asymmetrische Katalyse und Naturstoffsynthese

## PD Dr. Karamali Khanbabaee „Asymmetrische Katalyse“

Asymmetrische Katalyse ist die jüngste Methode zur Synthese von chiralen Zielmolekülen in der Organischen Chemie. Zu diesem Zweck werden oft chirale Katalysatoren eingesetzt, die aus einem chiralen Liganden und einem Metallkation bestehen. Die größte Herausforderung bei der Synthese von derartigen Katalysatoren ist die Herstellung der dazu benötigten chiralen Liganden.

Die von uns bislang synthetisierten Katalysatoren verfügen allesamt über einen chiralen Biphenylliganden mit einem flexiblen Torsionswinkel.

Ein solcher Biphenylligand bietet gegenüber vielen anderen Liganden den Vorteil, dass er sich aufgrund seines flexiblen Torsionswinkels dem Radius des eingesetzten Metallkations

anpasst. Es ist daher möglich, mit einem und demselben chiralen Liganden durch Komplexierung mit verschiedenen Metallkationen unterschiedliche chirale Katalysatoren herzustellen.

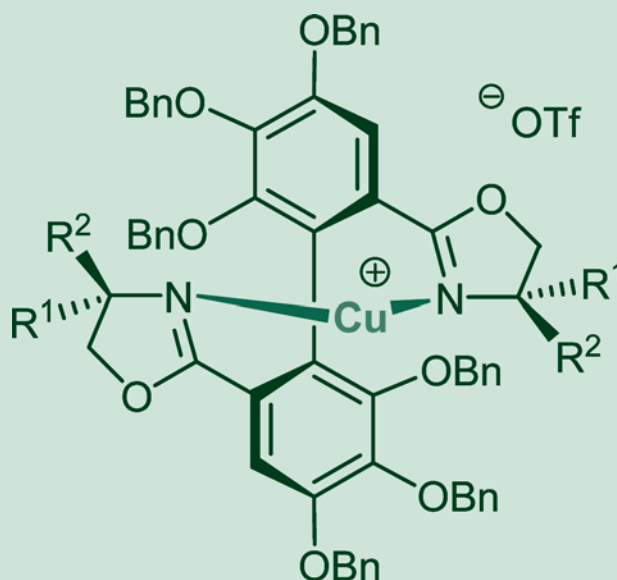
Unsere ersten Untersuchungen wurden bislang nur mit Kupfer(I) als Metallkation durchgeführt. Und zwar wurde die Effizienz jedes von uns hergestellten Kupfer(I)-Katalysators anhand der enantioselektiven Cyclopropanierung von Styrol mit Diazoessigsäureethylester untersucht. Wir konnten auf Anhieb einen Enantiomerenüberschuss (ee-Wert) von 86% erhalten. Als nächstes ist nun geplant, die ee-Werte durch die Variation der Struktur von chiralen Liganden zu erhöhen.

### PD Dr. Khanbabaee

promovierte 1993 an der TU Braunschweig im Fach Organische Chemie unter Leitung von Herrn Prof. Karsten Krohn. Seit 1995 beschäftigt er sich in seinen eigenständigen Forschungsarbeiten mit der Methodenentwicklung und Totalsynthese von Naturstoffen an der Universität Paderborn. Er habilitierte sich im Jahr 1999. Seit 2004 hat er eine Vertretungsprofessur für Organische Chemie an der Universität Paderborn inne.



PD Dr. Karamali Khanbabaee



Perspektivische Darstellung chiraler Kupfer(I)-Katalysatoren

# Flüssigkristalle

## Prof. Dr. Heinz-Siegfried Kitzerow „Mikro- und Nanostrukturen mit Flüssigkristallen“

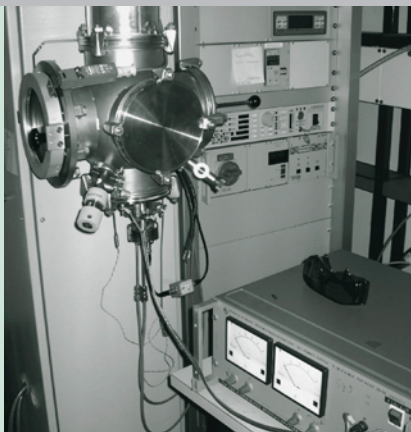
Flüssigkristalle sind geordnete Flüssigkeiten, die sowohl in der belebten Natur als auch in der Informationstechnologie von großer Bedeutung sind. Moderne Flachbildschirme enthalten jeweils eine homogene Flüssigkristallschicht mit einer Dicke von wenigen Mikrometern (Tausendstel eines Millimeters). Um zu Systemen mit neuen Eigenschaften zu gelangen, beschäftigt sich die Arbeitsgruppe in Paderborn einerseits mit sehr dünnen Schichten mit einer Dicke von einigen zehn Nanometern (Millionstel eines Millimeters), andererseits mit heterogenen Kompositen, die einen Flüssigkristall enthalten. Die neuartigen Materialien sind z. B. von Interesse für organische Leuchtdioden mit polarisierter Emission, für photovoltaische Elemente (Lichtsensoren), für die optische Signalverarbei-

tung oder für holographische optische Elemente. Die Dissertationen von zwei Absolventen wurden im Jahr 2005 bzw. im Jahr 2006 mit dem renommierten Otto-Lehmann-Preis ausgezeichnet. Dieser Preis, um den sich junge Nachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftler aus ganz Europa bewerben, ist nach einem Pionier der Flüssigkristallforschung benannt und wird von der Otto-Lehmann-Stiftung und der Universität Karlsruhe für hervorragende Arbeiten vergeben, die sich mit Flüssigkristallen beschäftigen. Im Frühjahr 2005 organisierte die Arbeitsgruppe gemeinsam mit Frau Prof. Claudia Schmidt, Herrn Prof. Peter Pollmann und Herrn Dr. Tarimala Seshadri die 33. Arbeitstagung Flüssigkristalle in Paderborn, eine Konferenz mit 130 Teilnehmern aus neun Staaten.

**Prof. Dr. Heinz-Siegfried Kitzerow** ist Professor für Physikalische Chemie an der Universität Paderborn. Er promovierte 1989 an der Technischen Universität Berlin. Nach Gastaufenthalten in Frankreich und in den Vereinigten Staaten von Amerika erwarb er im Jahr 1995 an der TU Berlin die Lehrbefugnis im Fach Physikalische Chemie. Im Jahr 1998 wurde er an die Universität Paderborn berufen. Prof. Kitzerow ist der Sekretär der International Liquid Crystal Society und Vorstandsmitglied der Deutschen Flüssigkristallgesellschaft, einer Arbeitsgemeinschaft innerhalb der Deutschen Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie.

[chemie.upb.de/kitzerow](http://chemie.upb.de/kitzerow)

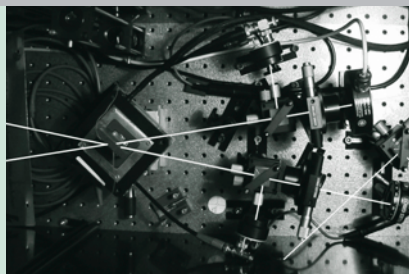
DEPARTMENT CHEMIE  
PHYSIKALISCHE CHEMIE  
23



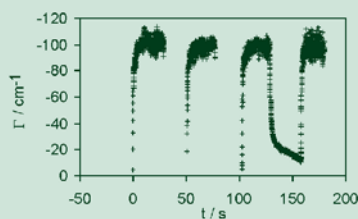
Hochvakuum-Aufdampfanlage zur Herstellung extrem dünner organischer Schichten für organische Leuchtdioden



Organische Leuchtdiode mit flüssigkristallem Emittor



Holographieapparatur zur Charakterisierung photorefraktiver Flüssigkristallsysteme. Bei der hier untersuchten Zweistrahlskopplung wird Energie von einem der beiden kohärenten Laserstrahlen zum anderen übertragen; die Anordnung wirkt als ein optischer Verstärker



Zeitlicher Verlauf des optischen Verstärkungskoeffizienten eines photorefraktiven Flüssigkristallsystems beim Schreiben und Löschen des holographischen Gitters, das den Verstärkungseffekt hervorruft. Das Bild zeigt die Größe des Verstärkungskoeffizienten sowie die Zeitkonstante und die Reversibilität der Gitterbildung



Dr. Stephan Benning (links) und Dr. Lutz Paelke, Preisträger des Otto-Lehmann-Preises im Jahr 2005 bzw. 2006



Arbeitstagung Flüssigkristalle an der Universität Paderborn im März 2005



# Struktur und Dynamik

**Prof. Dr. Claudia Schmidt**

„Festkörper-NMR-Spektroskopie, Weiche Materie und Komplexe Fluide“

Viele moderne Materialien bestehen ganz oder teilweise aus sogenannter Weicher Materie (Soft Matter), die besondere physikalische Eigenschaften zeigt. Polymere (Kunststoffe) und Flüssigkristalle sind typische Beispiele. Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich unter anderem mit dem komplexen Fließverhalten solcher Materialien. Makroskopische rheologische Phänomene, wie die bei Ketchup oder Dispersionsfarbe zu beobachtende Scherverdünnung, haben ihre Ursache in Änderungen der Struktur und Orientierung auf molekularer Ebene; diese werden in situ NMR-spektroskopisch detektiert. Die Experimente erfolgen mit speziellen, in der Arbeitsgruppe entwickelten NMR-Probenköpfen, in die Scherzellen unterschiedlicher Geometrien integriert sind. Auf dem Gebiet der Rheo-NMR-Spek-

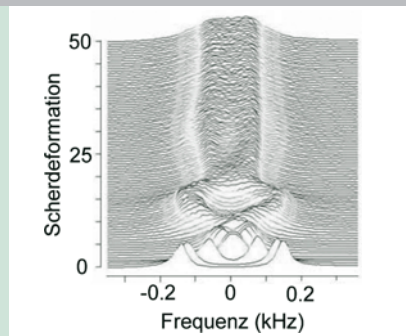
trokopie bestehen weltweit Kooperationen mit mehreren Arbeitsgruppen, die Forscher nach Paderborn senden, um hier Messungen durchzuführen. Anfang 2005 wurde die Installation einer neuen 300-MHz-Festkörper-NMR-Konsole der Firma Tecmag abgeschlossen. Dieses Spektrometer kann außer für die Rheo-NMR-Spektroskopie auch für die Bestimmung der Phasendiagramme von Tensidsystemen oder die Untersuchung der molekularen Orientierung von Flüssigkristallen sowie zur Aufklärung von Struktur und Dynamik in Polymermaterialien genutzt werden. Neben Routine-Methoden wie  $^2\text{H}$ -Breitlinien- und hochauflösender  $^{13}\text{C}$ -Magic Angle Spinning-NMR-Spektroskopie sind zahlreiche für spezielle Fragestellungen maßgeschneiderte NMR-Methoden verfügbar.

**Prof. Dr. Claudia Schmidt**

ist seit April 2002 Professorin für Physikalische Chemie an der Universität Paderborn. Sie studierte von 1977 bis 1984 Chemie an der Johannes-Gutenberg-Universität in Mainz und absolvierte 1981/82 ein Semester als DAAD-Stipendiatin an der University of California, Irvine. 1987 promovierte sie an der Universität Mainz mit einer am Max-Planck-Institut für Polymerforschung bei Hans-Wolfgang Spiess durchgeführten Arbeit über „Zweidimensionale NMR-Methoden zur modellfreien Beschreibung molekularer Bewegungen in Festkörpern“. Nach einem zweijährigen Forschungsaufenthalt als Feodor-Lynen-Stipendiatin der Alexander-von-Humboldt-Stiftung an der University of California, Berkeley, in der Arbeitsgruppe von Alex Pines und einem kurzen Zwischenaufenthalt am MPI für Polymerforschung wechselte sie 1990 in die Arbeitsgruppe von Heino Finkelmann am Institut für Makromolekulare Chemie der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg. Dort habilitierte sie sich 1996 für das Fach Makromolekulare Chemie mit einer Arbeit über „NMR-Spektroskopie an Flüssigkristallen unter dem Einfluss mechanischer Felder“.



NMR-Spektrometer



Deuterium-NMR-Spektren von  $\text{D}_2\text{O}$  in einer lyotrop-nematischen Phase unter Scherung. Die Änderung der NMR-Linienform spiegelt die scherinduzierte Rotation des Direktors in dieser aus Wurmizellen bestehenden Phase wider



Mitglieder der Arbeitsgruppe (in den Bildern von links nach rechts): Felix Kleinschmidt (Bild 1, hinten rechts) beim Ampere-Workshop in Zakopane, Polen, Juni 2005, wo er den Preis für eines der beiden besten Poster erhielt. Shahram Shafaei (Bild 2, links) und Richard Szopko (Bild 3) beim Workshop der NMR-Freunde in Pottenstein, Fränkische Schweiz, März 2006. Claudia Schmidt (Bild 4, rechts) beim Sino-German Symposium on NMR Application in Polymer and Biopolymer Science, Shanghai, August 2005 (mit Yuliang Yang, Vizepräsident der Fudan-Universität, Shanghai)



# Physikalische Chemie der Weichen Materie

## Professor Dr. Klaus Huber „Gesteuerte Strukturbildung“

In Untersuchungen an verdünnten Lösungen organischer Makromoleküle konnte gezeigt werden, dass deren Knäueldimensionen sich bei Zusatz kleiner Kolloide drastisch verringern. Anhand einfachster Modellsysteme gelang es hiermit grundlegende Strukturbildungsprozesse für komplexe biologische Systeme zu erarbeiten. Vergleichbare Experimente wurden auch an elektrisch geladenen Makromolekülen in wässriger Lösung ausgeführt. Hierbei wurde der entsprechende Prozess durch Erdalkalitionen bewerkstelligt. Es gelang der Nachweis, dass die Schrumpfung in diesem Fall reversibel durch Temperaturerhöhung noch verstärkt wird. Solche Erkenntnisse führen zu einem besseren Verständnis der Steuerungsmöglichkeiten der Teilchenbildung von Erdalkalikarbonaten. Im

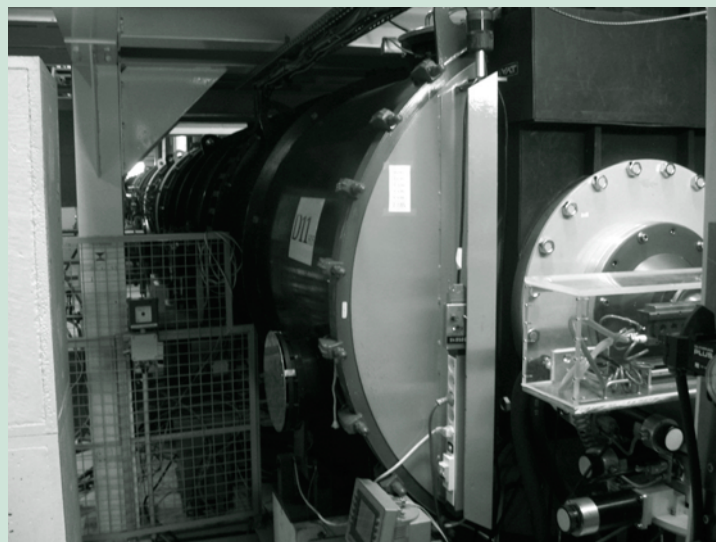
Extremfall bedeutet eine solche Kontrolle die Verhinderung von Inkrustationen, sie ist aber auch der Schlüssel zu einem besseren Verständnis der Biomineralisation. In einem nahe angrenzenden Forschungsgebiet wird daher die Bildung von  $\text{CaCO}_3$ -Teilchen ohne und mit wasserlöslichen Polyelektrolytketten verfolgt. Schließlich gelang es auf dem Gebiet der Proteinaggregation mit einer Dissertation Fuß zu fassen und zu publizieren. Die Arbeit erfolgt in Kooperation mit dem Arbeitskreis von Prof. Fels und befasst sich mit der Aggregation des  $\beta$ -Amyloid welches in der Alzheimerschen Krankheit eine entscheidende Rolle spielt. Diesmal wurde das Wachstum von faserförmigen Amyloidaggregaten nachgewiesen und zeitaufgelöst verfolgt.

### Prof. Dr. Klaus Huber

studierte Chemie an der Albert-Ludwigs Universität Freiburg und promovierte dort 1986 am Institut für Makromolekulare Chemie im Arbeitskreis von Prof. Dr. W. Burchard. Im Anschluss an die Promotion trat er einen PostDoc-Aufenthalt als Feodor-Lynen Stipendiat der AvH-Gesellschaft bei Prof. Dr. W. H. Stockmayer am Dartmouth College in Hanover USA an. Nach neunjähriger Zugehörigkeit zur Ciba-Geigy bzw. Ciba als Forschungs- und Entwicklungsschemiker folgte er 1997 dem Ruf auf die Stelle eines Professors für Physikalische Chemie an die Universität Paderborn.

[chemie.upb.de/huber](http://chemie.upb.de/huber)

DEPARTMENT CHEMIE  
PHYSIKALISCHE CHEMIE  
25



In einer Neutronenstreuanlage am ILL in Grenoble werden von Mitarbeitern des Arbeitskreises Konformationsänderungen an Polyelektrolytketten untersucht die durch Erdalkalitionen hervorgerufen werden. Das Instrument erstreckt sich über nahezu 100 m, wohingegen die zu untersuchenden fadenförmigen Moleküle keine 100 nm groß sind

# Chemie und Technologie der Beschichtungsstoffe

## Prof. Dr. Wolfgang Bremser Industrieller Gesamtprozess „Lack“

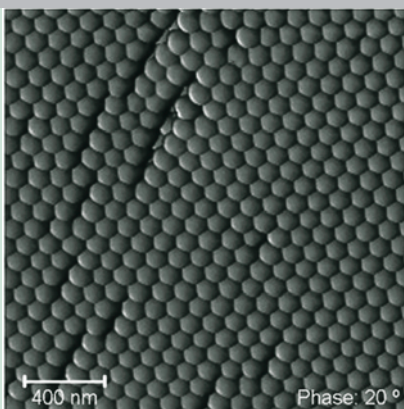
Das Fach „Chemie und Technologie der Beschichtungsstoffe“ (CTB) betreibt eine angewandte Material- und Prozeßwissenschaft, die Überlappungen mit Teilbereichen der klassischen Chemie und ein großes Synergiepotential mit dem ingenieurwissenschaftlichen Maschinenbau aufweist. Mit der Verknüpfung von berufsqualifizierender Ausbildung zum Bachelor/Master/Promotion mit dem Schwerpunkt CTB einerseits und von wissenschaftlicher Forschung auf dem Gebiet der Polymertechnologie andererseits weist dieser Bereich deutschlandweit ein Alleinstellungsmerkmal auf, welches zur Profilbildung der Universität beiträgt.

Der industrielle Prozeß „Lack“, d.h. Herstellung, Verarbeitung, Anlagentechnik und insbesondere die Rohstoffentwick-

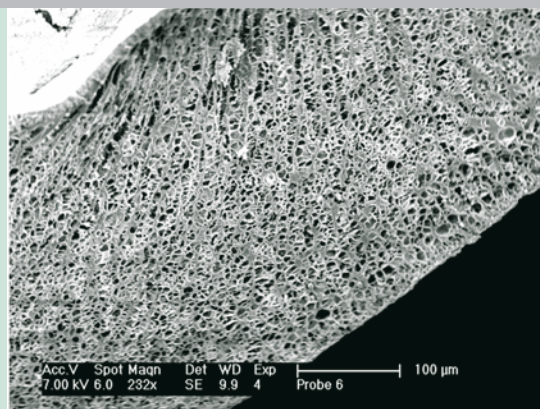
lung und auch die -Funktionalisierung wird in seinen wechselseitigen Abhängigkeiten gesehen. Wichtige Meilensteine sind z.B. i) die Etablierung eines Baukastens für Eigenschaftsmodule, aus welchen eine den jeweiligen Anforderungen entsprechende Gesamteigenschaft eines Produktes zusammengefügt werden kann, oder ii) die gezielte, bioinspirierte Nutzung von Strukturhierarchien zur Optimierung von Materialeigenschaften.

In den vergangenen Jahren wurden in diesem Umfeld mehrere Projekte begonnen und zum Teil bereits abgeschlossen (siehe Abb. unten). Naturgemäß hat dabei eine enge Kooperation mit kleinen und mittelständischen Unternehmen eine wesentliche Rolle gespielt.

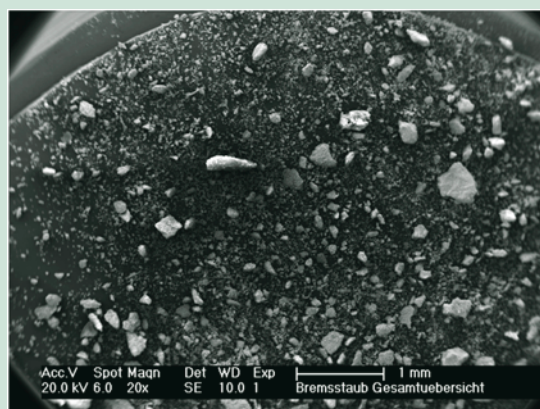
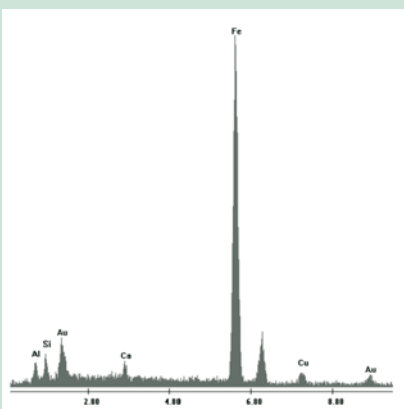
**Prof. Dr. Wolfgang Bremser** leitet seit Oktober 2003 das Fachgebiet Chemie und Technologie der Beschichtungsstoffe an der Universität Paderborn. Er studierte von 1982 bis 1988 Chemie an der Johannes Gutenberg Universität Mainz. Die Diplomarbeit fertigte er in Physikalischer Chemie der Universität Mainz unter Anleitung von Prof. Dr. H. Sillescu zum Thema: Untersuchungen zum Quellungsverhalten von Mikronetzwerken an. In der darauf folgende Dissertation beschäftigte er sich in der gleichen Abteilung und Leitung mit der „Synthese von Mikronetzwerken durch Mikroemulsionspolymerisation – Charakterisierung und Dynamik in der Schmelze“. Die Dissertation wurde im Juni 1991 abgeschlossen. Anschließend erfolgte sein Eintritt in die BASF Coatings in Münster. Von 1991 bis 1997 beschäftigte er sich mit der Entwicklung von Elektrotauchlacken. Es folgte 1997 die Übernahme der Projektleitung „Lösemittelfreie Lacke für alle Anwendungsgebiete“.



Rasterkraftmikroskopische Aufnahme eines dünnen Filmes, hergestellt aus einer Polymerdispersion



Künstliche Knochenstruktur, hergestellt aus einer Polymerdispersion



beide Bilder links:  
Häufigkeitsverteilung von chemischen Elementen in Bremsstaub (siehe auch elektronenmikroskopische Aufnahme), bestimmt mit Hilfe von elektronenstoßinduzierter Röntgen-Strahlung



# Technische und Makromolekulare Chemie

**Prof. Dr.-Ing. Guido Grundmeier**

„Grenzflächenchemische Prozesse, Grenzflächenanalytik und Molekulare Adhäsion“

Der Relevanz grenzflächenchemischer Prozesse in der Synthese und für die Funktionalität komplexer Werkstoffe wird durch neue Ansätze in den Bereichen der in-situ Grenzflächenanalytik, Grenzflächensimulation sowie der Messung und quantenmechanischen Berechnung von molekularen Kräften an Grenzflächen Rechnung getragen. Die interdisziplinären Arbeiten verknüpfen physikalisch chemische Ansätze im Bereich der Analyse mit neuen Methoden zur Synthese von funktionalen Polymeren, dünnen Schichten sowie Kompositmaterialien. Molekular definierte Modellsysteme werden mittels optischer in-situ Spektroskopie (Grenzflächen FTIR-Spektroskopie, abbildende Ellipsometrie), Methoden der Rasterkraftmikroskopie (Messung von Kraft-Abstands-Kurven, lokalen Potentialen

sowie lokaler Leitfähigkeit) sowie der Elektrochemie (Ortsaufgelöste Potential- und Stromdichtemessungen) hinsichtlich der Korrelation von strukturellen und funktionellen Eigenschaften sowie der Langzeitstabilität dieser Eigenschaften untersucht. Dies umfasst auch den Korrosionsschutz von Metallen und Legierungen in meso- und nanoskopischen Dimensionen. Begleitet werden einige dieser Untersuchungen durch DFT (Density Functional Theory) Rechnungen am PC2. Beispiele für solche Forschungsarbeiten sind die Messung der Adhäsion einzelner Moleküle auf Oxidoberflächen sowie die optische Spektroskopie von Wasser an Polymer/Metall-Grenzflächen. Darüber hinaus werden funktionelle Metall/Polymer und Oxid/Polymer Nanokomposit-schichten synthetisiert.

**Prof. Dr. Guido Grundmeier**

Ist seit Dezember 2006 Professor für Technische und Makromolekulare Chemie an der Universität Paderborn.

Er studierte zwischen 1988 und 1993 Chemie an der Universität Dortmund und promovierte 1997 an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen.

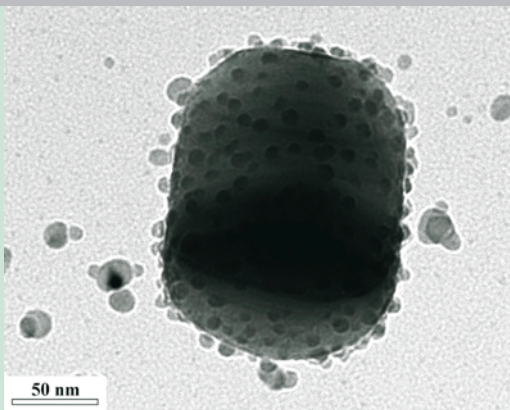
Nach einem Post-Doc Aufenthalt bei den Bell-Laboratorien in Murray Hill (in New Jersey, USA) leitete er von 1999 bis 2001 eine Abteilung für Grenzflächenchemie und Elektrochemie als Teil der zentralen Forschung der ThyssenKruppStahl AG.

Im Juli 2001 wechselte er an das MPI für Eisenforschung in Düsseldorf und leitet dort eine Arbeitsgruppe für Adhäsion und Dünne Schichten sowie das Christian-Doppler-Labor für Polymer/Metall-Grenzflächen. Im Juli 2006 schloss er die Habilitation im Bereich der Materialwissenschaften an der Ruhr-Universität Bochum ab.

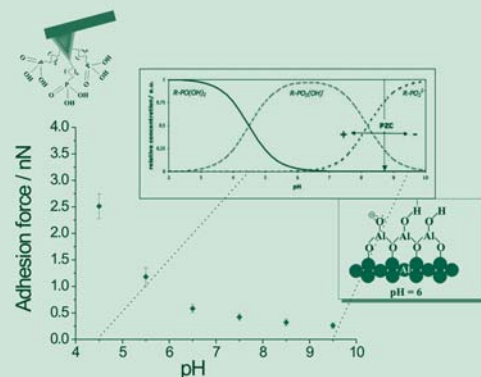
[chemie.upb.de/grundmeier](http://chemie.upb.de/grundmeier)

DEPARTMENT CHEMIE  
TECHNISCHE CHEMIE

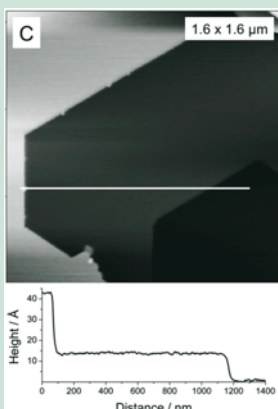
27



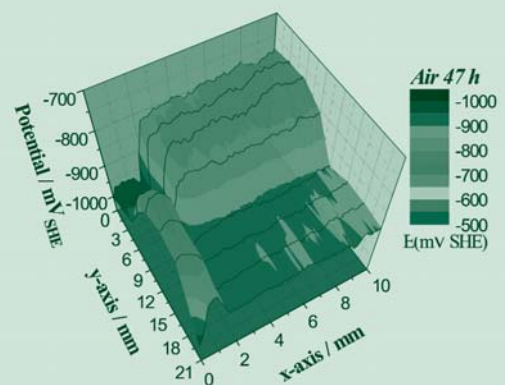
Hochauflösende TEM Messung an einem durch Ostwald-Reifung entstandenen Ag-Nanocluster in einer perfluorierten polymeren Matrix



Chemische Kraftspektroskopie mittels funktionalisierter AFM-Spitzen auf oxidblegtem Aluminium als Funktion des pH-Wertes der umgebenden wässrigen Lösung



AFM Messung einer polaren ZnO(0001) Oberfläche mit monoatomar glatten Terrassen



Raster Kelvin Sonden Messung zur Bestimmung der Potentialverteilung an Polymer/Metall-Grenzflächen

# Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik

Prof. Dr.-Ing. Hans-Joachim Warnecke

„Intensivierung strömungsbasierter Prozesse der Chemischen Technik“

Selbst etablierte Verfahren der chemischen Industrie bedürfen aus ökonomischen und ökologischen Zwängen dringend weiterer Optimierung. Die dafür notwendige Prozessintensivierung erfordert neben experimentellen Untersuchungen die theoretische Durchdringung des komplexen Zusammenspiels zwischen Hydrodynamik, konvektivem und diffusivem Stofftransport sowie chemischer Reaktion. In Mehrphasensystemen kommen Stoffaustausch sowie dynamische Verformung der Phasengrenzfläche hinzu. Eine große Herausforderung ist dabei die oftmals enorme Mehrskaligkeit solcher strömungs-basierten technisch-chemischen Prozesse, bei der relevante Teilprozesse auf räumlich und/oder zeitlich weit auseinander liegenden Skalenbereichen ablaufen. Ziel ist es, auf Grundlage von

theoretischer Analyse und numerischer Simulationen mittels vereinfachender mathematisch-mechanistischer Modellierung die Lücke zwischen den in praktischen Anwendungen eingeführten integralen Prozessmodellen und den in der akademischen Forschung aktuell genutzten mathematisch-mechanistischen Modellen zu schließen.

Forschungsfelder:

- Laminar durchströmter Mikroreaktor
- Hochviskose Strömung im Knetter
- Aufstiegsverhalten von und Stoffaustausch aus Gasblasen

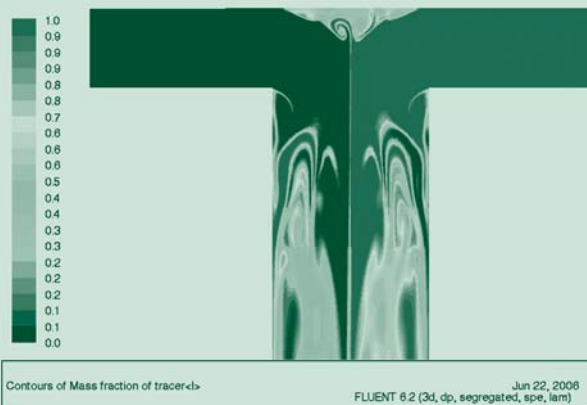
**Nachhaltige Aufbereitungsprozesse**

Erarbeitung von Lösungsansätzen zur Handhabung von Frischwasser und Abwasser für Industrie, Wirtschaft und Kommunen.

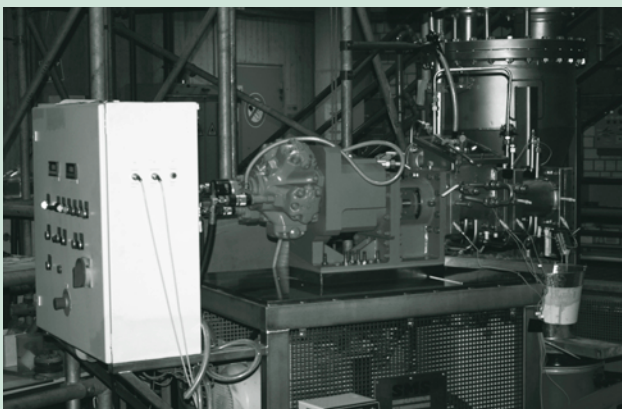
**Prof. Dr.-Ing. Hans-Joachim Warnecke**

ist seit 1998 Professor für Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik in der Universität Paderborn.

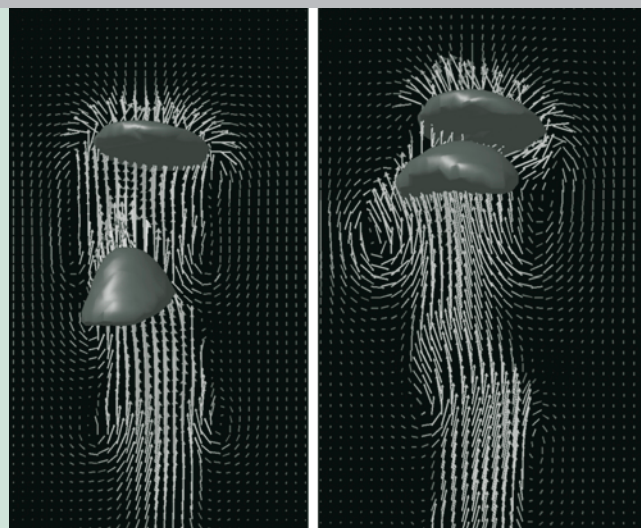
Werdegang: Studium der Chemie und Chemischen Verfahrenstechnik an der TU Berlin; 1974 Promotion Dr.-Ing. am Institut für Technische Chemie, TU Berlin, Prof. Dr. Kölbl, Akademischer Rat/Direktor im Fachgebiet Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik der Universität Paderborn, 1990 Habilitation, 1992 – 1995 Direktor (in Vertretung) des Instituts für Chemische Technik, Universität Karlsruhe, Rufe an die TU Chemnitz und die Universität des Saarlandes. Seit Oktober 2003 Dekan der Fakultät für Naturwissenschaften an der Universität Paderborn. Arbeitsgebiet: Reaktionstechnik ein- und mehrphasiger Systeme – Experimente, Modellierung, Simulation



Strömungsmischen im Mikroreaktor



Hochviskose Strömung im Knetter



Aufstiegsverhalten von und Stoffaustausch aus Gasblasen



# Systematik und chemiedidaktische Lehre

**Prof. Dr. Hans-Jürgen Becker**

„Integration und Vernetzung fachdidaktischer Erkenntnisse“

Die elektronischen Datenbanken FADOK, GECHU und BUEDOK sind im Berichtszeitraum aktualisiert worden. Die Zunahme von Rechercheanfragen als wissenschaftliche Serviceleistungen belegt ihre Leistungsfähigkeit und Akzeptanz. Der Forschungsschwerpunkt „Systematische Chemiedidaktik“ wird durch die Trendberichte „Chemiedidaktik 2003 - 2006“ sowie durch ein Promotionsvorhaben über chemiedidaktische Entwicklungen ab 1990 (Vanessa Pompetzki) gefestigt. Zwei Habilitationen zur chemiedidaktischen Lehre verfügen somit über ein breites Fundamentum. Dr. Bettina Labahn beschäftigt sich in einer bundesweit angelegten Untersuchung mit der Wirksamkeit der chemiedidaktischen Lehre. Dr. Henry Hildebrandt fokussiert den Einfluss metatheoretischer Lehrpositio-

nen auf die Gestaltung chemiedidaktischer Ausbildungssituationen.

Fortbildungsangebote in Kooperation mit dem Chemielehrerfortbildungszentrum Dortmund haben den Dialog mit Chemielehrkräften in der Region Ostwestfalen gesucht. Kinderfreizeitinitiativen stellen chemische Bildungsangebote im Rahmen des Konzepts „Familienfreundliche Hochschule“ in Zusammenarbeit mit der Gleichstellungsbeauftragten und der regionalen Wirtschaft bereit. Sie werden im Rahmen einer Habilitationsarbeit zu kindlichen Verstehensprozessen (Dr. Andreas Müller) wissenschaftlich weiterentwickelt. Im realen Sachunterricht werden Lernarrangements erprobt, die chemische Bedeutungsvorstellungen gedächtnismäßig verankern helfen.

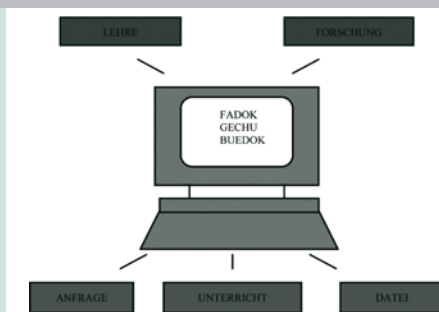
**Prof. Dr. Hans Jürgen Becker**

ist seit 1995 Professor für Chemiedidaktik an der Universität Paderborn. Er war in unterschiedlichen Funktionen an TU und FU Berlin beschäftigt. (Promotion 1978, Habilitation 1992). Seine wissenschaftlichen Tätigkeiten wurden durch langjährige Schul- und Unterrichtserfahrungen (Lehrer an unterschiedlichen Schularten, Fachleiter, Referendarausbilder) bereichert: Chemiedidaktik muss zunächst Chemieunterricht theoretisierend reflektieren und Programme „realistisch“ darauf beziehen. Bewährt hat sich, in Weiterbildungsszenarien den Dialog mit Lehrkräften zu suchen sowie durch hochschulübergreifende Aktivitäten Erkenntnisleistungen zu verdichten. So werden unterrichtspraktische Handlungsaspekte nicht ausgeblendet bzw. Modellvorstellungen von chemischen Unterrichtsprozessen erweitert bzw. präzisiert. Forschungsschwerpunkte sind die „Didaktik der Didaktik der Chemie“, unterrichtliche Lern- und Lehrzusammenhänge und die Grundlegung einer systematischen Chemiedidaktik.

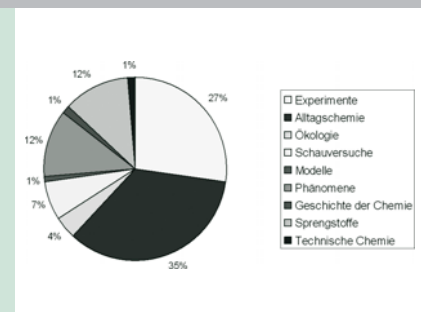
[chemie.upb.de/becker](http://chemie.upb.de/becker)

DEPARTMENT CHEMIE  
DIDAKTIK DER CHEMIE

29



- Artikel/Bücher (ab 1976)
- Zeiträume  
1900 – 1945 (unsystematisch)  
1945 – 2006 (systematisch)
- Zuordnung auch durch Suchkriterien
- bibliographische und inhaltliche Erfassung
- ca. 46.000 Einträge
- ca. 180 Zeitschriften
- 56 Hauptkriterien mit 225 Suchbegriffen

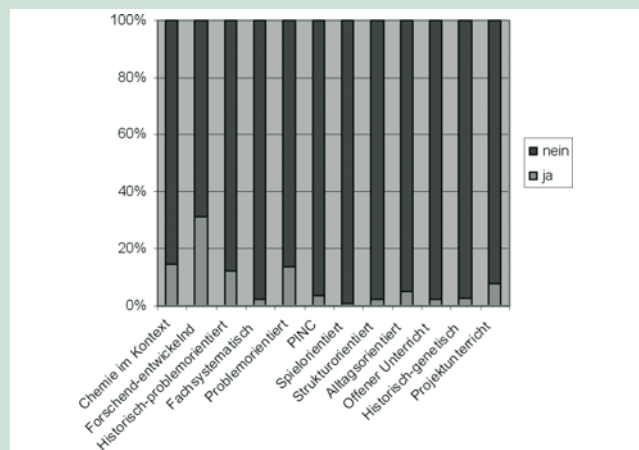


Datenbanken: Anwendungen und Merkmale (Stand Januar 2007)

Schülerinteressen nach Meinung der Lehramtskandidaten (Dr. Bettina Labahn)

- Der Fachwissenschaftler
  - Der Ausgegrenzte
  - Der Grenzgänger
- Der Zufallsdidaktiker
- Der verdiente Lehrer
- Der Studienseminarist

Zur Diskussion: Typisierungsversuche von Lehrenden der Chemiedidaktik – nach Werdegang (Dr. Henry Hildebrandt)



Kenntnisse von Unterrichtskonzeptionen der Lehramtskandidaten (Dr. Bettina Labahn)

# Department Physik

Eine Universität der Informationsgesellschaft ist undenkbar ohne eine leistungsfähige Physik, denn diese Naturwissenschaft stellt das gesamte Basiswissen für alle Bereiche unserer modernen Hochtechnologie bereit. Ohne die Arbeit der Physikerinnen und Physiker gäbe es keine Halbleiterbauelemente und damit weder Kommunikations- noch Informationstechnologie, es gäbe keine Raumfahrt und keine moderne Medizintechnik – Physik ist daher auch ein bedeutendes Lehrfach für alle technischen Studiengänge an jeder Hochschule.

Bei der Ausbildung unserer eigenen Studierenden haben wir uns bereits zum WS 2001/02 entschlossen, nur

noch nach dem neuen europäischen Studiengangmodell eines konsekutiven Bachelor/Master-Studiengangs einzuschreiben, und im Sommer 2006 haben die ersten Master-Absolventen in NRW bei uns ihr Zeugnis erhalten. Im WS 2003/04 wurden darüber hinaus sowohl der Bachelor- als auch der Masterstudiengang von der Agentur ASIIN akkreditiert. Damit bietet die Universität Paderborn als erste Hochschule in NRW einen durchgängigen akkreditierten Physik-Studiengang an.

Die Ausbildung unserer Studierenden zu Physikerinnen und Physikern vermittelt jedoch nicht nur solide naturwissenschaftliche Kenntnisse, sondern liefert auch die Fähigkeit, Probleme aller

Art zu analysieren und sie einer gesetzmäßigen Beschreibung zugänglich zu machen. Wegen dieser universellen Problemlösungskompetenz haben Absolventen physikalischer Studiengänge nicht nur in allen Bereichen von Forschung und Entwicklung, sondern auch in vielen anderen Bereichen der Wirtschaft hervorragende Berufschancen.

Die Paderborner Physik ist stark im Center for Optoelectronics and Photonics Paderborn vertreten. In dieser neu geschaffenen wissenschaftlichen Einrichtung der Universität arbeiten Physiker, Chemiker und Elektrotechniker gemeinsam an anwendungs- und zukunftsorientierten Forschungsthemen.

## Arbeitsgruppen des Departments Physik

Angewandte Physik	Experimentalphysik	Theoretische Physik
<p><b>Prof. Dr. Wolfgang Sohler</b> Integrierte Optik</p> <p><b>Prof. Dr. Margit Zacharias</b> Nanostrukturen für Optik und Elektronik (seit Oktober 2006)</p>	<p><b>Prof. Dr. Klaus Lischka</b> Physik und Technologie optoelektronischer Halbleiter</p> <p><b>Prof. Dr. Artur Zrenner</b> Optoelektronik und Spektroskopie an Nanostrukturen</p> <p><b>Prof. Dr. Gerhard Wortmann</b> Hochdruck-Festkörperspektroskopie</p>	<p><b>apl. Prof. Dr. Donat As</b> Optoelektronische Halbleiter – Gruppe III-Nitride</p> <p><b>apl. Prof. Dr. Siegmund Greulich-Weber</b> Materialien für die Optoelektronik und Photonik</p> <p><b>Prof. Dr. Ralf Wehrspohn</b> Nanophotonische Materialien (bis Juli 2006)</p>
		<p><b>Prof. Dr. Wolf Gero Schmidt</b> Festkörpertheorie (seit Januar 2006)</p> <p><b>Prof. Dr. Thomas Frauenheim</b> Molekulare Modellierung von Materialien (bis April 2006)</p> <p><b>Prof. Dr. Harald Overhof</b> Elektronische Eigenschaften von Halbleitern († im Oktober 2005)</p>
		<p>Assoziiertes Mitglied <b>Prof. Dr. Jörg Neugebauer</b> Computergestützte Materialphysik (Direktor MPI Düsseldorf, seit 2004)</p>
	<p>Nachwuchsgruppe <b>PD Dr. Stefan Schweizer</b> Optisch aktive Glaskeramiken (Heisenbergstipendiat)</p>	<p>Nachwuchsgruppe <b>Jun.-Prof. Dr. Marcus Elstner</b> Theoretische Biophysik (bis April 2006)</p>
<b>Didaktik der Physik</b>		
<p>Prof. Dr. Peter Reinhold Wissenszentriertes Problemlösen, offenes Experimentieren</p>		

## Department Physik – Studium

Das Department Physik bietet als erste Hochschule in NRW bereits seit dem WS 2001/02 statt eines klassischen Diplom-Studienganges ausschließlich einen gestuften Studiengang nach den Vorgaben des „Bologna-Prozesses“ an. Das Studium beginnt dabei mit einem sechssemestrigen, grundständigen Bachelor-Studiengang. Wie in jedem gründlichen Physikstudium unumgänglich, wird hierbei in den ersten vier Semestern fast ausschließlich Basiswissen aus den verschiedenen Bereichen der Physik und der Mathematik vermittelt. Alle Teilgebiete der Physik werden dabei in Vorlesungen aus experimenteller und aus theoretischer Richtung behandelt und in Übungen und Praktikumsversuchen werden die erworbenen Kenntnisse vertieft und eingeübt.

In den folgenden zwei Semestern unseres Bachelor-Studienganges wird die Vermittlung von Grundlagen ergänzt durch anwendungs- und forschungs-

orientierte Veranstaltungen. Dazu gehören z.B. Vorlesungen und Übungen zur Halbleiterphysik, Angewandten Optik, Mikroskopie oder Laserphysik. Eine wissenschaftliche Arbeit von ca. 3 Monaten Dauer in einer unserer Forschungsgruppen vermittelt eigene Forschungserfahrungen. Durch diese Lehrinhalte wird die geforderte frühe Berufsqualifikation bereits nach sechs Semestern erreicht. Unser weiterführendes, viersemestriges Master-Programm steht natürlich auch Absolventen anderer Hochschulen offen. Hier können im ersten Jahr neben Pflichtveranstaltungen aus fortgeschrittenen Gebieten der Physik vor allem Kenntnisse aus dem Umfeld unserer Forschungsschwerpunkte erworben werden. Eine einjährige Forschungsphase, während der die Studierenden ein eigenes Projekt im Rahmen unserer Forschungsgruppen selbständig bearbeiten, beschließt den Studiengang. Diese gründliche Vorbereitung auf eine forschende Tätigkeit hat schon den deut-

lichen Physik-Diplomstudiengängen zu großem internationalen Ansehen verholfen.

Sowohl der Bachelor- als auch der Masterstudiengang wurden bereits im Jahr 2004 (als erste Physikstudiengänge in NRW) akkreditiert.

Neben der Ausbildung zum Bachelor bzw. Master of Science bieten wir auch Physik-Studiengänge für das Lehramt an allen Schulformen an. Auch diese sind, wie alle Studiengänge, die den europäischen Richtlinien entsprechen, vollständig modular aufgebaut. Für die Studienleistungen, die durchweg studienbegleitend geprüft werden, werden benotete Leistungspunkte nach den Vorschlägen des europäischen Transfer-Systems (ECTS) vergeben. Damit wird ein vorübergehender oder endgültiger Wechsel des Studienortes oder des Studienfaches erleichtert und damit die Mobilität der Studierenden gefördert.

[physik.upb.de/studium](http://physik.upb.de/studium)

DEPARTMENT PHYSIK  
STUDIUM  
31



Mai 2006 - Die ersten Masterabsolventen im Department Physik: Bereits aktiv an ihren Promotionsarbeiten - Master of Science Marina Panfilova, Bernd Ahrens und Elena Tschumak (v. l.)

# Department Physik – Experimenteller Forschungsschwerpunkt

Im Schwerpunkt Optoelektronik/ Photonik untersuchen vier Arbeitsgruppen des Departments Physik die Grundlagen und Anwendungen für viele derzeit wichtige Anwendungsbereiche in den optischen Technologien.

Dazu gehören:

- Integriert optische Baugruppen für die optische Nachrichtentechnik
- Quantenpunkte für Anwendungen im Bereich der Quanteninformationsverarbeitung
- Halbleiternanostrukturen aus kubischem GaN und ZnSe für optische Anwendungen
- Nanophotonische Materialien für die Sensorik, Photovoltaik und integrierte Optik („photonische Kristalle“)

Diese Gebiete sind von großer Bedeutung für eine Vielzahl von Entwicklungen im Bereich der optischen Nachrichtentechnik und Informationsverarbeitung, der Optoelektronik, der Sensorik

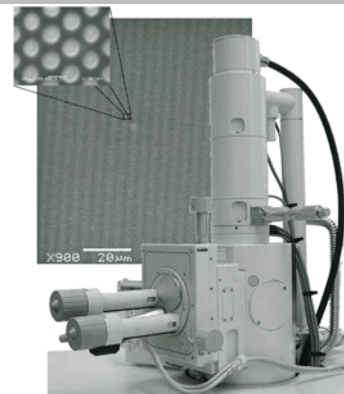
Beleuchtungstechnik, Medizintechnik u.a. Diese Forschungsaktivitäten sind auch Teil der zentralen wissenschaftlichen Einrichtung CeOPP (Center for Optoelectronics and Photonics Paderborn) zusammen mit Partnern aus dem Department Chemie und dem Institut für Elektrotechnik und Informationstechnik. Seit Frühjahr 2006 werden diese Aktivitäten in einem neuen Labor- und Reinraumgebäude mit mehr als 2.000 m<sup>2</sup> Grundfläche und 400 m<sup>2</sup> Weißfläche gebündelt und stehen für die Durchführung eingeworbener Forschungsprojekte zur Verfügung.

## Beteiligte Personen der Fakultät:

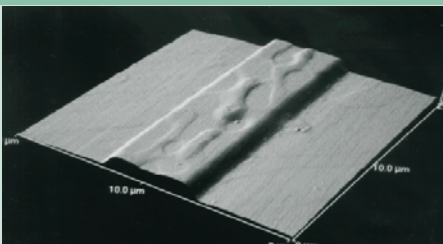
Prof. Dr. Klaus Lischka  
apl. Prof. Dr. Donat As  
Prof. Dr. Wolfgang Sohler  
Prof. Dr. Ralf Wehrspohn  
apl. Prof. Dr. S. Greulich-Weber  
Prof. Dr. Artur Zrenner



Das neue Gebäude für „Optoelektronik, Integrierte Optik und Photonik“



2-dimensionaler photonischer Kristall hergestellt mit Elektronenstrahl-Lithographie



Integrierter Streifen-Lichtleiter in Lithiumniobat (Aufnahme mit Atomkraftmikroskop)



Opale sind natürliche photonische Kristalle



# DFG-Forschergruppe „Integrierte Optik in Lithiumniobat – neue Bauelemente, Schaltkreise und Anwendungen“

In einer von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) geförderten Forschergruppe arbeiten Forscher der Universitäten Paderborn und Bonn an der Entwicklung und Anwendung neuartiger integriert optischer Bauelemente in Lithiumniobat. Dabei werden in interdisziplinärer Zusammenarbeit von Wissenschaftlern aus Physik und Elektrotechnik Projekte zu Material- und Technologieproblemen, zu Fragen aus Festkörper- und Bauelementephysik sowie aus Optik und Elektrotechnik bearbeitet. In der im Januar 2007 auslaufenden zweiten Förderphase wurden schwerpunktmäßig nichtlinear optische Bauelemente entwickelt und Anwendungen dieser Bauelemente demonstriert. Neue Methoden zur Herstellung von optisch hoch belastbaren Wellenleitern und zur periodischen Polung von Lithiumniobat wurden untersucht. Ein konfokales Frequenzverdopplungsmikroskop wurde entwickelt und zur Analyse optisch nichtlinearer Materialien und Strukturen

eingesetzt. Mit periodisch gepolten Wellenleitern wurden miniaturisierte kohärente Lichtquellen (optisch parametrische Oszillatoren und Fluoreszenzgeneratoren) und (optisch parametrische) Verstärker für den nahen und mittleren Infrarotbereich realisiert. Der Einsatz dieser Lichtquellen in spektroskopischen Messaufbauten zum Nachweis von Spurengasen ist geplant. In einem weiteren Projekt wurden elektrooptische Bauelemente zur Kompensation der Polarisationsmodendispersion in optischen Übertragungssystemen entwickelt und in einer hochratigen Übertragungstrecke eingesetzt. Neue Modulationsverfahren wurden für die optische Nachrichtentechnik entwickelt; dabei wurden Übertragungsraten bis zu 5.94 Tbit/s demonstriert.

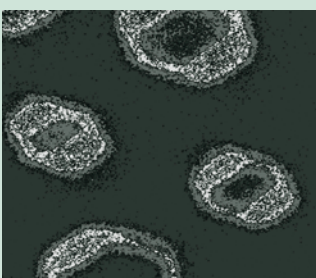
**Beteiligte Personen der Fakultät:**  
Prof. Dr. Wolfgang Sohler  
Prof. Dr. Artur Zrenner  
Dr. Hubertus Suche  
Dr. Harald Herrmann

[physik.upb.de/fg-integrierte-optik](http://physik.upb.de/fg-integrierte-optik)

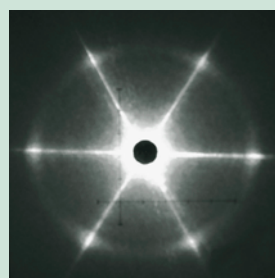
DEPARTMENT PHYSIK  
DFG-FORSCHERGRUPPE „INTEGRIERTE OPTIK IN LITHIUMNIOBAT“  
33



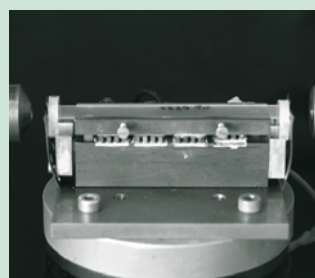
Workshop der DFG-Forschergruppe gemeinsam mit amerikanischen Kollegen im April 2005 in Paderborn



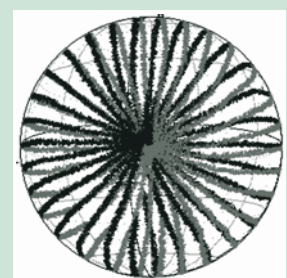
Nichtlinear optische Mikroskopie: Ferroelektrische Mikrodomänen in  $\text{LiNbO}_3$  (Zrenner/Berth)



Beugungsmuster während des Polungsprozesses (Buse/Wen-gerler)



Integriert optisch parametrischer Oszillator mit externen Resonatorspiegeln (Sohler/Orlov)



Polarisationsregelung (Polarisationszustand auf der Poincaré-Kugel) (Noé/Sandel)

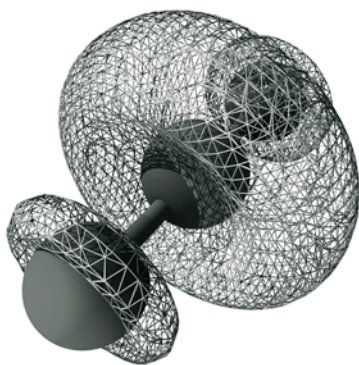
# Department Physik – Theoretischer Forschungsschwerpunkt

Die Forschung und Lehre der Theoretischen Physik in Paderborn ist seit Jahren auf den Schwerpunkt Computational Materials Science ausgerichtet. Standen dabei traditionell quantenmechanisch basierte Methoden für dynamisch atomistische Simulationen von sehr komplexen Materialsystemen im Vordergrund, hat sich der Focus in jüngster Zeit in Richtung auf parameterfreie, prediktive Rechenverfahren verschoben. Solche sogenannten ab-initio-Rechenverfahren erlauben es, Materialeigenschaften ohne Zuhilfenahme empirischer Parameter außerordentlich präzise zu berechnen. Sie dienen daher sowohl bei der Interpretation experimenteller Daten als auch bei der Vorhersage der Eigenschaften hypothetischer, noch nicht synthetisierter Materialsysteme. Das Spektrum der bearbeiteten Systeme reicht dabei von Molekülen und Nanoteilchen bis zu polymorphen und kristallinen Festkörpern, wobei organisch-anorganische Hybridsysteme

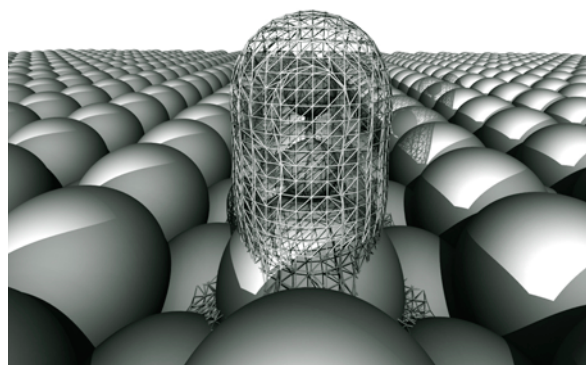
sowie Nanodrähte im Mittelpunkt der Forschung stehen. Das Methodenspektrum umfaßt Dichtefunktionaltheorie ebenso wie Vielteilchenstörungsrechnung und erfordert den Einsatz massivparalleler Hochleistungsrechner des Paderborner Zentrums für Paralleles Rechnen (PC2) sowie der nationalen Höchstleistungsrechenzentren in Stuttgart und München. Im Frühjahr 2007 werden die Aktivitäten der Theoretischen Physik auf das Gebiet der Festkörperoptik ausgeweitet und damit eng mit der Forschung des experimentellen Forschungsschwerpunkts Optoelektronik/Photonik verzahnt.

## Beteiligte Personen der Fakultät:

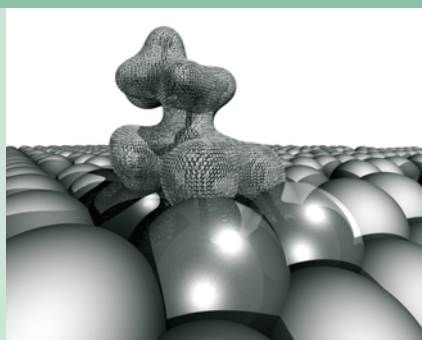
Prof. Dr. Jörg Neugebauer  
Prof. Dr. Wolf Gero Schmidt  
Prof. Dr. Thomas Frauenheim (bis April 2006)  
Prof. Dr. Torsten Meier (ab April 2007)  
Prof. Dr. Harald Overhof (bis Oktober 2005)



Bindungsinduzierte Ladungsträgerverschiebung im Kohlenstoffdioxid



Elektronendichte von Kohlenstoffmonoxid adsorbiert auf der Cu(110)-Oberfläche



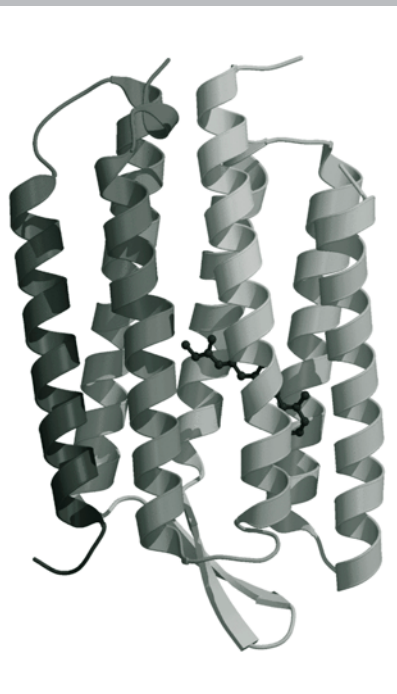
Elektronendichte von Glutaminsäure adsorbiert auf der Ag(110)-Oberfläche

# DFG-Forschergruppe „Molecular Mechanisms of Retinal Protein Action: A Combination of Theoretical Approaches“

Forscher der Universität Paderborn arbeiten mit Hilfe von Computersimulationen in einer von der Deutschen Forschungsgemeinschaft geförderten Forschergruppe an einer tiefer gehenden Aufklärung der Funktion von Retinalproteinen. Dies geschieht in enger Zusammenarbeit mit Kollegen an den Universitäten Heidelberg, Bayreuth, Duisburg-Essen sowie dem Deutschen Krebsforschungszentrum in Heidelberg. Das Verständnis der Funktionsweise dieser Biomoleküle, die ihre vitale Rolle im Sehprozess und der bakteriellen Photosynthese haben, setzt dabei eine theoretische Beschreibung auf atomarer Ebene sowie die Vernetzung unterschiedlichster Simulationen voraus. Die Forscher der Universität Paderborn bringen in den interdisziplinären Verbund die Expertise in Simulationstechniken ein, wie sie in den Paderborner Arbeitsgruppen um Prof. Thomas Frauenheim und Jun.-Prof. Marcus Elstner in den letzten Jahren entwi-

ckelt wurden. Retinalproteine, auch Rhodopsine genannt, stellen eine bedeutende Gruppe unter den biologischen Photorezeptoren dar. Der für die Funktion entscheidende lichtabsorbierende Farbstoff (Chomophor) ist das sogenannte Retinal, welches an ein Membranprotein bindet und so das lichtabsorbierende Pigment Rhodopsin bildet. Aus der Erforschung der molekularen Mechanismen und dem Verständnis der zugehörigen Prozesse in den verschiedenen Rhodopsinen erhofft man sich auch wichtige Impulse für die Entwicklung zukünftiger Technologien wie z.B. Energie- und Informationsspeicher und ein verbessertes Verständnis der Vorgänge in lebenden Organismen. Die Forschergruppe wurde im Sommer 2005 für weitere drei Jahre verlängert. Im Fokus dieser Periode steht insbesondere das Verständnis der Mechanismen des Protonentransports in Bakteriorhodopsin sowie des Farbtunings in der Familie der Rhodopsinproteine.

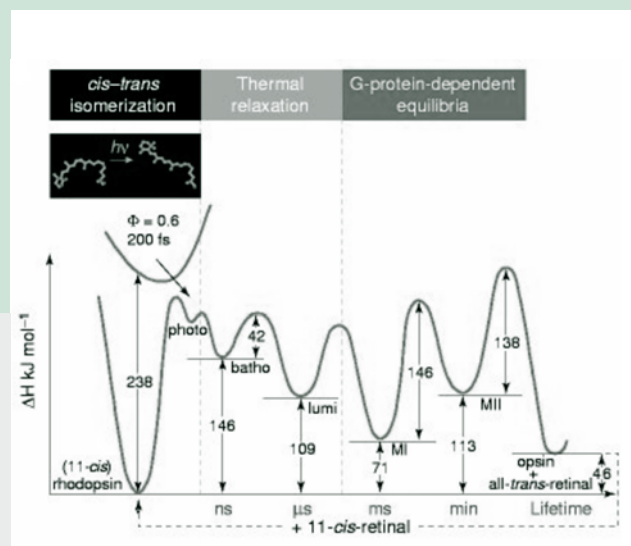
**Beteiligte Personen der Fakultät:**  
 Prof. Dr. Thomas Frauenheim (Sprecher),  
 Jun.-Prof. Dr. Marcus Elstner,  
 Dr. Thomas Niehaus,  
 Dipl. Chem. Michael Hoffmann,  
 Dipl. Phys. Marius Wanko



Oben: Modell der Kristallstruktur von Bakteriorhodopsin



Unten: Energieprofil des Rhodopsinphotozyklus



Links: Protonentransferschritte während des Photozyklus von Bakteriorhodopsin



# Angewandte Physik/Integrierte Optik

**Prof. Dr. Wolfgang Sohler**

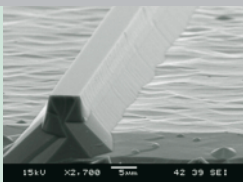
„Baulemente und Schaltkreise für die optische Nachrichtentechnik, Messtechnik und Sensorik“

Das Arbeitsgebiet der Fachgruppe Angewandte Physik (Prof. Dr. W. Sohler) ist die Integrierte Optik. Als Substratmaterial für integriert optische Bauelemente wird vorwiegend Lithiumniobat ( $\text{LiNbO}_3$ ) verwendet, das sich durch seine hervorragenden elektro-, akusto- und nichtlinear optischen Eigenschaften auszeichnet. Diese werden ausgenutzt, um eine Vielzahl optisch und/oder elektrisch steuerbarer, miniaturisierter Wellenleiterbauelemente und optischer Schaltkreise für Anwendungen in optischer Messtechnik, Nachrichtentechnik und Sensorik zu entwickeln. So werden beispielsweise effiziente optische Frequenzkonverter für den nahen (NIR) und mittleren (MIR) Infrarotbereich her-

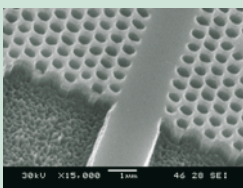
gestellt und untersucht. Darunter sind Schlüsselkomponenten für die optische Nachrichtentechnik im NIR als auch kohärente und abstimmbare Lichtquellen im MIR für die optische Spurengasanalytik. Seit kurzem werden darüber hinaus Quellen für einzelne Photonenpaare entwickelt für Anwendungen in der Quantenkryptographie.  $\text{LiNbO}_3$  kann auch mit Ionen der Seltenen Erden dotiert werden, um integriert optische Verstärker und Laser zu entwickeln. Deren Emission ist je nach Laserstruktur kontinuierlich oder gepulst mit fester oder abstimmbarer, bzw. zeitlich schnell veränderlicher Emissionswellenlänge.

**Prof. Dr. Wolfgang Sohler**

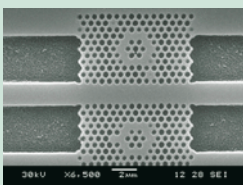
studierte Physik an der Ludwig Maximilian Universität München und promovierte dort 1974 zum Dr. rer. nat. Von 1975 bis 1980 forschte er als wissenschaftlicher Assistent an der Universität Dortmund und baute eine Arbeitsgruppe „Integrierte Optik“ auf. 1980 ging er als Leiter der Abteilung „Faseroptik“ an das Fraunhofer Institut für Physikalische Messtechnik in Freiburg. Nach seiner Habilitation im Fach Physik an der Universität Dortmund wurde er Ende 1981 als Universitätsprofessor für Angewandte Physik an die Universität Paderborn berufen. Hier baute er das Fachgebiet „Integrierte Optik“ auf mit zahlreichen nationalen und internationalen Forschungskooperationen. W. Sohler ist seit vielen Jahren Mitglied des Vorstandes des Heinz Nixdorf Institutes und Sprecher der Paderborner Forschergruppe „Integrierte Optik in Lithiumniobat“, die seit 1997 von der DFG gefördert wird.



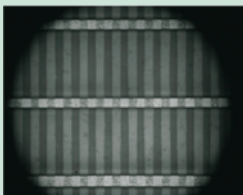
Rippenwellenleiter



„Photonic crystal“  
Wellenleiter



dito mit Ringresonatoren



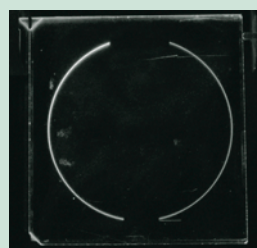
Periodisch gepolter Kristall



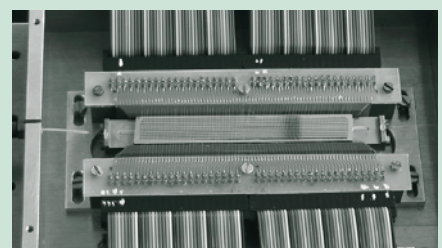
Arbeitsgruppe Angewandte Physik



Modengekoppelter Laser



Er-dotierter Ringlaser



PMD-Kompensator



# Physik und Technologie optoelektronischer Halbleiter

**Prof. Dr. Klaus Lischka**

„Grundlagenforschung für die Technologie von morgen“

Die Basis der Kommunikationstechnologie bilden Bauelemente, die aus einer Folge von Halbleiterschichten mit Dicken von nur wenigen Millionstel Millimeter gebildet werden. Da an die Qualität der Halbleiter immer höhere Anforderungen gestellt werden, arbeiten wir an der Verbesserung der Herstellung und an der Neuentwicklung von Methoden für ihre Analyse. Die Gruppe hat eine anerkannte Expertise für die Herstellung von III-Nitriden (Ga(Al,In)N) und II-VI Verbindungshalbleitern (ZnSe, CdSe). Die III-Nitride bilden die Grundlage der optoelektronischen Bauelemente für den blau-grünen Spektralbereich und elektronische Bauelemente, die bei sehr hohen Temperaturen noch funktionstüchtig sind. Quantenstruktu-

ren aus II-VI Halbleitern sind für zukünftige Anwendungen als Einzelphotonenquellen in der Quanteninformationstechnologie konzipiert und werden in Zusammenarbeit mit einer Gruppe an der Stanford Universität (USA) erforscht. Ein weiteres spannendes Forschungsprojekt beschäftigt sich mit der Integration von Nanokristallen in epitaktischen Strukturen. Wesentlich bei der Herstellung von Nanostrukturen sind Methoden zur Kontrolle der entsprechenden Prozesse. In Zusammenarbeit mit der Firma PANalytical (NL) wurde eine effektive Methode der Röntgenbeugung an kristallinen Schichten entwickelt. Die Methode eignet sich hervorragend zur Qualitätskontrolle in der Halbleiterproduktion.

**Prof. Dr. Klaus Lischka**

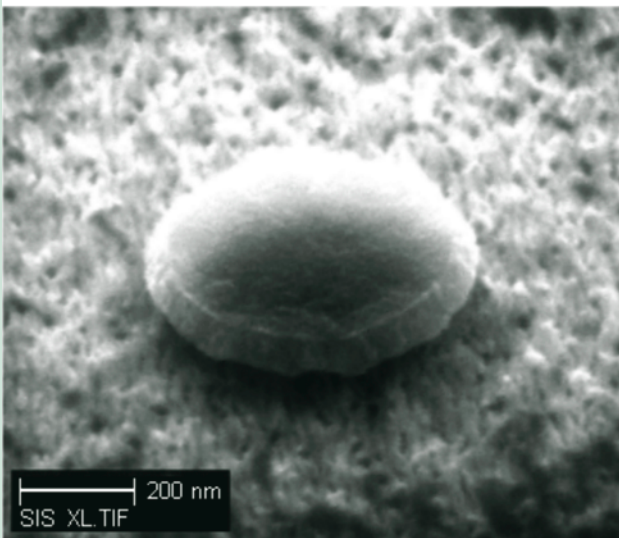
ist seit 1993 Universitätsprofessor für „Physik und Technologie optoelektronischer Halbleiter“ im Department Physik der Fakultät für Naturwissenschaften an der Universität Paderborn. Er promovierte 1973 an der Universität Wien bei Prof. K.H. Seeger. Bis 1983 war er Univ. Assistent am Institut für Experimentalphysik der Universität Linz, Abteilung Festkörperphysik (Prof. H. Heinrich). Nach seiner Habilitation 1983 übernahm er 1989 die Leitung des Forschungsinstituts für Optoelektronik an der Universität Linz.

[physik.upb.de/optoelectronic-semiconductors](http://physik.upb.de/optoelectronic-semiconductors)

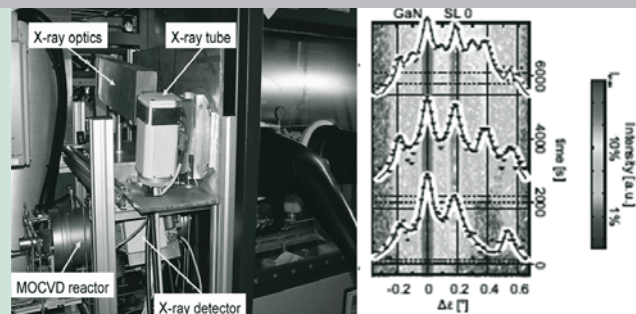
DEPARTMENT PHYSIK  
EXPERIMENTALPHYSIK

37

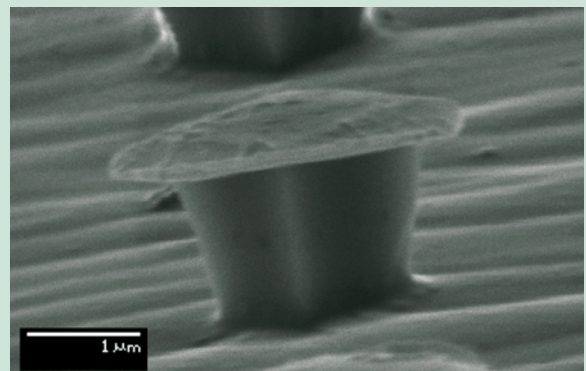
Mesa diameter 400 nm



Einzelphotonen Emitter aus nanostrukturierten II-VI Verbindungshalbleitern



An der Universität Paderborn entwickelte Anlage zur in-situ Kontrolle des Wachstums von Nanostrukturen mittels Röntgenbeugung (links) Röntgenspektren, gemessen während eines Epitaxieprozesses (rechts)



Rasterelektronenmikroskop-Aufnahme eines ZnMgSe/ZnSe Quantenwell-Microdisk-Resonators auf GaAs

# Experimentalphysik

Prof. Dr. Artur Zrenner

„Neue Informationstechnologien aus der Nano-Welt“

Die innovative Forschung auf dem Gebiet der Halbleiterphysik beschäftigt sich heute mit neuen Klassen von Quantenbauelementen auf der Basis selbstorganisierter Nanostrukturen. Diese bringen die Funktionalität atomarer Systeme in die Anwendungsfelder der halbleiterbasierenden Quantenoptik und Elektronik. Die Umsetzung dieser Konzepte erfordert eine präzise Kontrolle einzelner Quantensysteme auf der Ebene einzelner Elementarladungen, Lichtquanten oder Spins. Es ist nun die Aufgabe der Grundlagenforschung geeignete Hardware-Konzepte zu realisieren auf diesem Weg zu einer neuartigen Informationstechnologie für die Zukunft. Dabei bietet insbesondere die Nutzung kohärenter und ultraschneller Phänomene Raum für völlig neuartige Funktionen, die grundlegende Innova-

tionen im Bereich der Quanten-Informationstechnologie erwarten lassen.

Zur Erreichung unserer Ziele stehen uns Kompetenzen und Ressourcen in den folgenden Bereichen zur Verfügung:

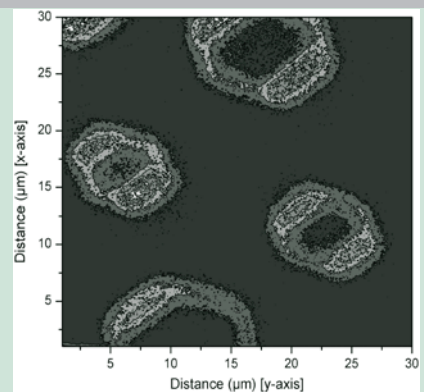
- Nano-Physik und Technologie
- Ultra-Kurzzeit Spektroskopie
- Moderne Mikroskopie
- Nano-Positioniertechnik

## Prof. Dr. Artur Zrenner

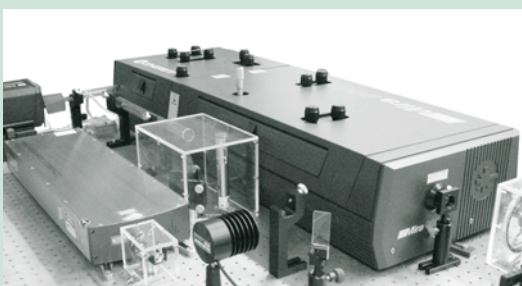
wurde im Oktober 2001 an die Universität Paderborn berufen. Sein Arbeitsgebiet ist die Optoelektronik und Photonik auf der Basis nanostrukturierter Materialsysteme. Er hat 1987 an der Technischen Universität München im Bereich der experimentellen Halbleiterphysik promoviert. In den Jahren 1988 und 1989 war er im Rahmen eines Ernst von Siemens Stipendiums an der Princeton University und bei Bell Communication Research (Bellcore) in USA tätig. Von 1990 bis zu seiner Berufung nach Paderborn war er am Walter Schottky Institut der Technischen Universität München Forscher und Gruppenleiter auf dem Gebiet von Halbleiter-Nanostrukturen. Im Verlauf dieser Arbeiten hat er 1995 im Fachgebiet Experimentalphysik habilitiert.



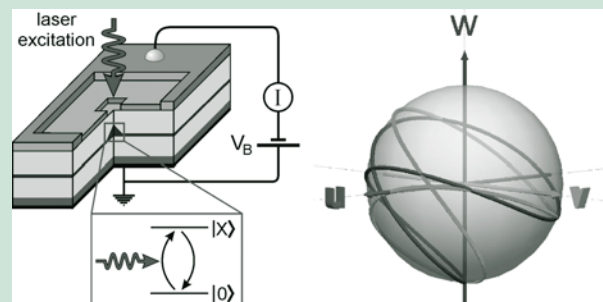
Die Mitglieder der Arbeitsgruppe



Nichtlineare Mikroskopie an ferroelektrischen Domänen in Lithiumniobat



Lasersystem zur Erzeugung ultrakurzer Lichtpulse bis in den Bereich  $2 \cdot 10^{-14}$  s



Schwerpunkt Quanteninformation:  
Einzelquantenpunkt Photodiode und Quantenbit

# Hochdruck-Festkörperspektroskopie

Prof. Dr. Gerhard Wortmann

„Magnetismus und Gitterdynamik unter hohen Drücken“

In der Arbeitsgruppe werden strukturelle, elastische, elektronische und magnetische Eigenschaften von ausgewählten Festkörpern bis zu Drücken von 150 GPa untersucht. Als Methoden dienen Röntgenbeugung, Röntgenabsorption und, dem Mössbauereffekt verwandt, die elastische bzw. unelastische Kernstreuung von Synchrotronstrahlung (SR), mit der magnetische Eigenschaften und Gitterdynamik sehr effektiv untersucht werden können. Diese Experimente werden in den SR-Labors HASYLAB (Hamburg), ESRF (Grenoble) und APS (Chicago) durchgeführt (siehe Forschungsforum Paderborn 2000, p. 52).

Untersucht werden beispielsweise:

- Phononen-Zustandsdichten des Eisens unter Drücken, wie sie im Inneren der Erde herrschen

- Systeme der Seltenen Erden zum Studium des Magnetismus der 4f-Elektronen und des Auftretens von gemischter Valenz
- Invar-Systeme des Eisens zum Verständnis der anomalen thermischen Ausdehnung

In den unten gezeigten Bildern sind aktuelle Arbeiten zum Magnetismus und gemischter Valenz in den Eu(II)-Chalkogeniden EuO, EuS, EuSe und EuTe dargestellt. Diese Verbindungen kristallisieren bei Normaldruck in der NaCl-Struktur und wandeln bei Drücken von 10 bis 40 GPa in die Hochdruckphase mit CsCl-Struktur um. Wir führten Untersuchungen zum Magnetismus in diesen Phasen bei Drücken bis 120 GPa (1.2 Mbar) durch, wobei die Kernstreuung von SR an der 21.5-keV Mössbauer-Resonanz von  $^{151}\text{Eu}$  verwandt wurde.

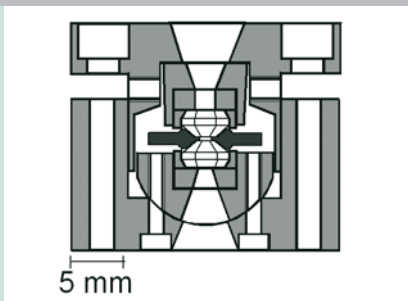
**Prof. Dr. Gerhard Wortmann**

hat am Physik-Department der TU München bei Prof. R.L. Mößbauer 1971 promoviert, war dort 1972-78 wiss. Assistent und Leiter der Hochdruckgruppe, 1978-79 Postdoc am Argonne National Laboratory (Illinois, USA). 1979 Hochschulassistent am Fachbereich Physik der FU Berlin, dort 1982 Habilitation und 1986 Professor für Experimentalphysik. 1989 Ruf an die Universität Paderborn in die dortige Hochdruckgruppe. Seit der Emeritierung von Prof. W.B. Holzapfel im Mai 2003 alleiniger Leiter der Hochdruckgruppe.

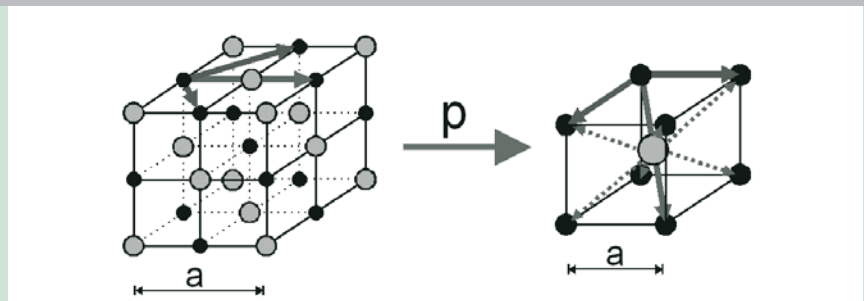
physik.upb.de/wortmann

DEPARTMENT PHYSIK  
EXPERIMENTALPHYSIK

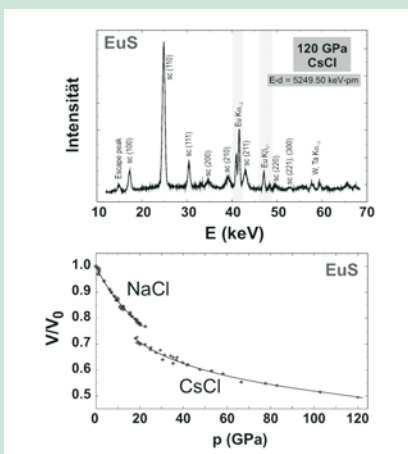
39



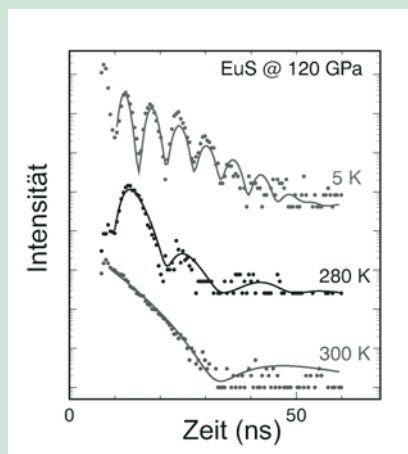
Die Hochdruckzange aus nichtmagnetischem CuBe-Stahl; die Probe befindet sich in einem Gasket (schwarz) zwischen zwei Diamanten



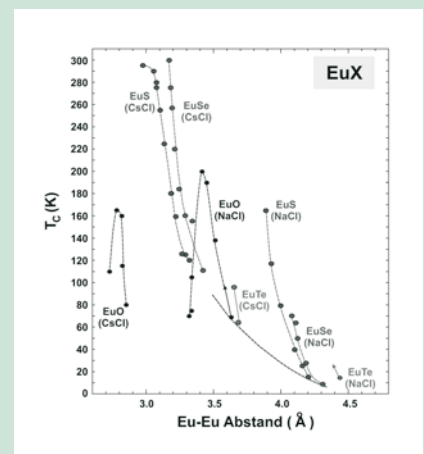
Der druckinduzierte Phasenübergang von der NaCl-Struktur zur CsCl-Struktur, die Pfeile zeigen den magnetischen Austausch  $J_1$  (Eu-Eu) bzw.  $J_2$  (Eu-X-Eu) zwischen den Eu-Ionen



Energiedispersive XRD-Aufnahme von EuS (sc) bei 120 GPa und das Druck-Volumen-Diagramm von EuS mit dem Phasenübergang bei 20 GPa



Repräsentative  $^{151}\text{Eu}$ -NFS Spektren von EuS bei 120 GPa. Aus der periodischen Struktur erkennt man für die Spektren bei 5 K und 280 K magnetische Ordnung, das Spektrum bei 300 K wurde oberhalb von  $T_C = 295$  K gemessen



Ferromagnetische Ordnungstemperaturen  $T_C$  von EuX (X = O, S, Se, Te). Alle  $T_C$ -Werte in der CsCl-Struktur wurden hier erstmals bestimmt (siehe K. Rupprecht et al., 2005)



# Materialien für die Optoelektronik und Photonik

apl. Prof. Dr. Sigmund Greulich-Weber

„Low-cost Halbleiter und Design von künstlichen Materialien“

Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit alternativen kostengünstigen Herstellungsmethoden von Halbleitermaterialien und mit dem Design von Metamaterialien für Anwendungen in der Optoelektronik und Photonik.

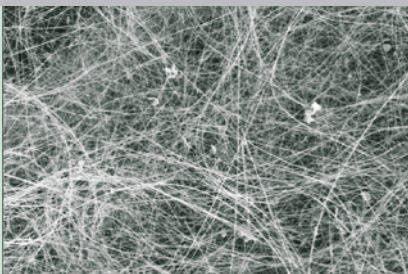
Der ‚wide-bandgap‘ Halbleiter Siliziumkarbid (SiC) mit herausragenden physikalischen Eigenschaften wird in verschiedenen Modifikationen und in praktisch beliebigen Formen für Anwendungen in der Photovoltaik, Sensorik und Photonik hergestellt. Der in Paderborn entwickelte SiC-Prozess erlaubt auch eine maßhaltige Umwandlung beliebiger Formen aus Kohlenstoff (z. B. Graphit) in SiC, welchem als härtestem Material nach Diamant damit neue Anwendungsgebiete erschlossen werden. Insbesondere makroporöses SiC kombiniert geringe Dichte mit hoher

mechanischer und chemischer Stabilität und Biokompatibilität für innovative Technologien.

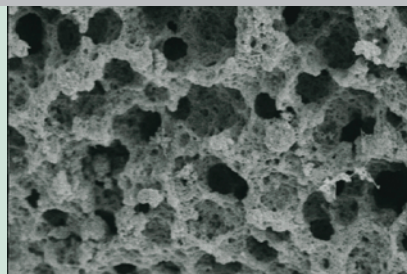
Metamaterialien sind künstliche Kompositmaterialien mit neuen zukunftsweisenden Eigenschaften, wie z. B. einem negativen Brechungsindex. Solche Materialien werden speziell für den Mikrowellen- und sichtbaren Spektralbereich entwickelt und untersucht. Für die Materialuntersuchung stehen magnetische Resonanzmethoden, auch optisch und elektrisch nachgewiesen, zur Verfügung. Ergänzend können Materialien mit Elektronenmikroskopie untersucht werden. Speziell für die Untersuchung von Metamaterialien und photonische Kristalle wurde ein Mikrowellenmessplatz mit reflexionsfreiem Raum aufgebaut.

apl. Prof. Dr. Sigmund Greulich-Weber

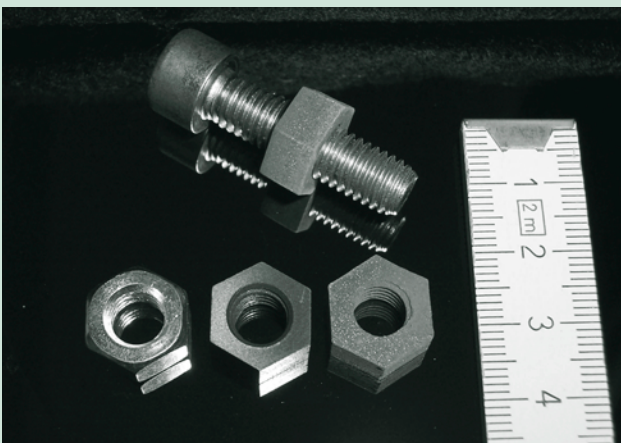
wurde 2004 zum apl. Professor an der Universität Paderborn ernannt. Sein Arbeitsgebiet ist die Festkörperspektroskopie, insbesondere magnetische Resonanzmethoden, und die Entwicklung von Materialien für die Photonik und Optoelektronik. Er hat sich 1997 mit einer Arbeit über die Spektroskopie von Defekten in Siliziumkarbid an der Universität Paderborn habilitiert und anschließend sein Arbeitsgebiet auf die Herstellung von Siliziumkarbid und die Entwicklung photonischer und optoelektronischer Anwendungen aus diesem Material erweitert.



Einkristalline Siliziumkarbidfasern für Anwendungen in der Photovoltaik



Ultraleichtes, extrem hartes und chemisch resistentes makroporöses Siliziumkarbid, geeignet für Höchsttemperatur- oder medizinische Anwendungen



Maßhaltige Umwandlung von Graphit in Siliziumkarbid. Unten ist von links nach rechts eine Stahlmutter, eine Graphitmutter und eine umgewandelte Siliziumkarbidmutter zu sehen. Die Mutter auf der Schraube oben im Bild ist ebenfalls von Graphit in Siliziumkarbid umgewandelt worden



Mikrowellenmessplatz mit echo-armem Raum



# Nanophotonische Materialien

**Prof. Dr. Ralf B. Wehrspohn**

„Bausteine für zukunftsweisende optische Technologien“

Photonische Kristalle sind zwei- oder dreidimensionale, periodisch strukturierte, dielektrische Materialien. Wenn die Strukturen eine Periodizität im Wellenlängenbereich des Lichtes aufweisen, so kommt es zu Interferenzen, welche die Weiterleitung des Lichtes in diesen Materialien stark beeinflussen. Erste Anwendungen gibt es bereits in den Bereichen Laser, Glasfasern und Pigmenten. Weitere Anwendungen in den Bereichen der integrierten Optik, Photovoltaik und Sensorik werden folgen. Neben dielektrischen Photonischen Kristallen ist es seit einiger Zeit ebenfalls möglich, periodische metallo-dielektrische Strukturen herzustellen

und zu berechnen. Sie eröffnen ein neues Feld im Bereich der künstlichen optischen Materialien. Wenn es möglich wäre, zusätzlich zu rein plasmonischen Resonanzen (Überhöhungen des elektrischen Feldes) auch magnetische Resonanzen zu erzeugen, so könnte man Materialien herstellen, die einen negativen Brechungsindex besitzen und die klassische Optik entsprechend revolutionieren würden, die so genannten Metamaterialien. Die Paderborner Gruppe interessiert sich für diese künstlichen optischen Materialien, die neue Strukturierungstechnologien auf einer nanoskopischen Skala erforderlich machen.

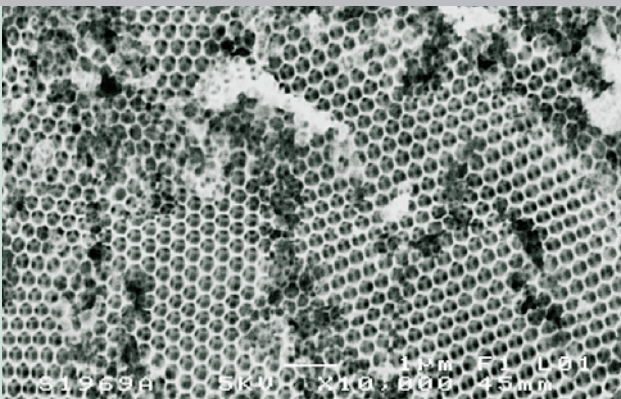
**Prof. Dr. Ralf B. Wehrspohn**

geboren am 17.08.1970 in Lübeck, promovierte 1997 an der Carl-von-Ossietzky-Universität zu Oldenburg und der École Polytechnique, Palaiseau, Frankreich. Von 1998 bis 1999 arbeitete er als Wissenschaftlicher Mitarbeiter bei Philips Research, Redhill, UK, im Projekt „Stabilität von amorphen und mikrokristallinen Silizium-Dünnschichttransistoren für AMLCDs und OLEDs“. Von Ende 1999 bis März 2003 war er Leiter der Gruppe „Poröse Nanostrukturen und Photonische Kristalle“, am Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik in Halle/Saale und betreute dort Projekte im Bereich Nanophotonik, Nanotechnologie, Nanomagnetismus und Nanobiotechnologie. 2003 habilitierte er an der Martin-Luther-Universität Halle/Wittenberg. April 2003 bis 31.12.2006 Professor für Experimentalphysik, Lehrstuhl für Nanophotonische Materialien an der Universität Paderborn. Seitdem Institutsleiter des Fraunhofer Institutes für Werkstoffmechanik Halle und Lehrstuhl für Mikrostrukturbasiertes Werkstoffdesign, Martin-Luther Universität Halle-Wittenberg

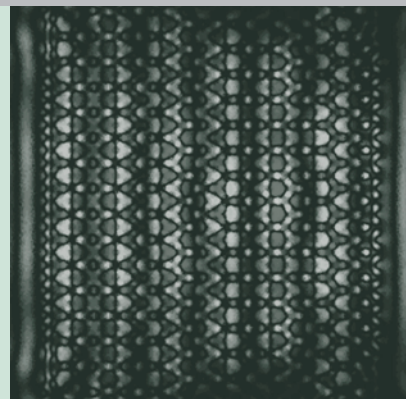
[physik.upb.de/nanomat](http://physik.upb.de/nanomat)

DEPARTMENT PHYSIK  
EXPERIMENTALPHYSIK

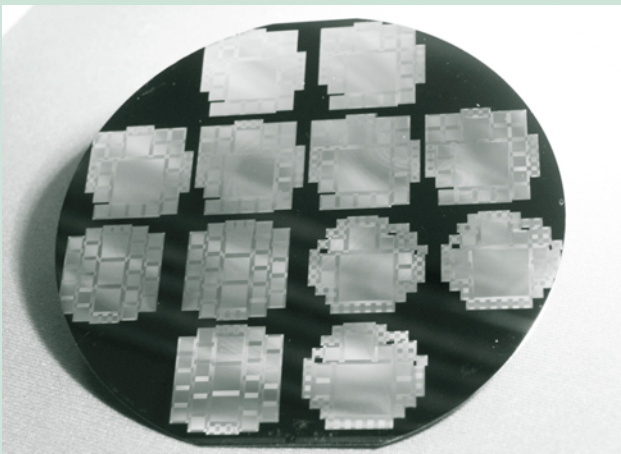
41



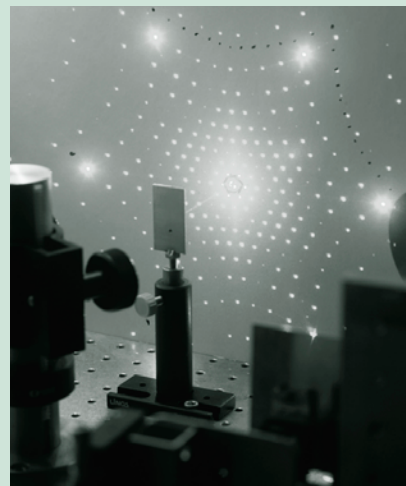
Dreidimensionaler Photonischer Kristall (invertierter Opal) aus Titandioxid



Finite-Elemente-Simulation der zeitharmonischen Maxwell-Gleichungen für einen Photonischen-Kristall-Gassensor



Photonische-Kristall-Gassensoren aus Silizium vor der Vereinzelung



Beugung von Laserlicht an einem dotierten 2D-Photonischen Kristall

# Optoelektronische Halbleiter – Gruppe III-Nitride

apl. Prof. Dr. tech. Donat Josef As

„Baelemente aus kubischen Gruppe III-Nitriden“

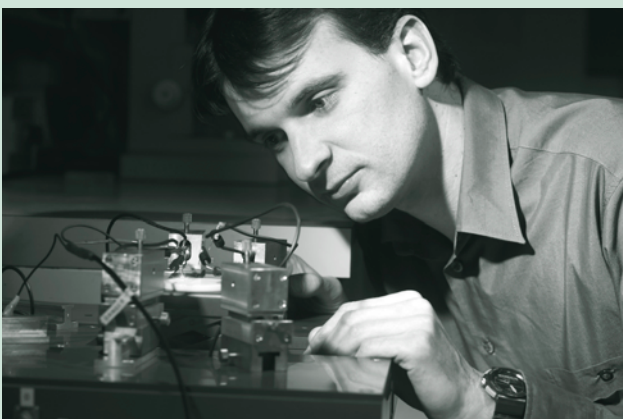
Mit der technologische Entwicklung von optoelektronischen und elektronischen Bauelementen auf der Basis von Gruppe III-Nitriden wie GaN, AlN, InN konnte der blaue und UV-Spektralbereich auch für künftige optoelektrische Anwendungen in der LED (Beleuchtungstechnik) und Laser-Technologie erschlossen werden. Wegen ihrer mechanischen Festigkeit, ihrer chemischen und thermischen Beständigkeit eignen sich elektronische Bauelemente aus Gruppe III-Nitride hervorragend für Anwendungen bei hohen Temperaturen und Frequenzen. Hauptarbeitsgebiet des in den Paderborner Optoelektronikschwerpunkt integrierten

Fachgebietes ist die Herstellung und Erforschung der Grundlagen kubischer Gruppe III-Nitride mit Hilfe der Molekularstrahlepitaxie auf 3C-SiC Substraten und karbonisierten Si-Substraten, deren Charakterisierung mit optischen, elektrischen und strukturellen Messmethoden sowie der Fertigung erster Bauelementstrukturen. Diese Arbeiten führten zur Realisierung der weltweit ersten kubischen Leuchtdiode auf Basis kubischer III-Nitride. Weitere Schwerpunkte sind die Herstellung und Untersuchung von kubischen Hetero-Feldeffekttransistoren kommender Kommunikationsnetze für mobile Sprach- und Datenübertragung.

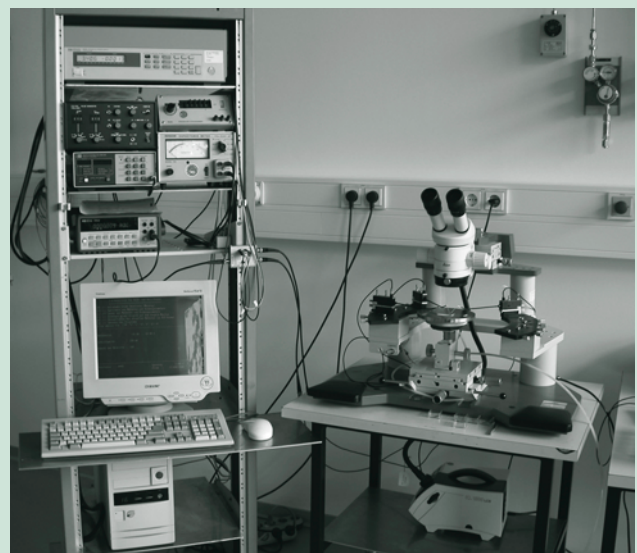
**apl. Prof. Dr. tech. Donat Josef As** leitet die Arbeitsgruppe „Optoelektronische Halbleiter – Gruppe III Nitride“. Er studierte von 1976 bis 1982 Technische Physik an der Johannes-Kepler-Universität in Linz (Österreich), wo er 1986 mit Auszeichnung promovierte. Nach einem Postdoc-Jahr am IBM Forschungszentrum Rüschlikon (Zürich, Schweiz, 1987) war er mehrere Jahre als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fraunhofer Institut für Angewandte Festkörperphysik (Freiburg) und am Heinrich-Hertz-Institut (Berlin) tätig. 1995 wechselte er als Hochschuldozent an die Universität Paderborn in die Abteilung „Physik und Technologie optoelektronischer Halbleiter“. Seit 2001 ist er außerplanmäßiger Professor an der Universität Paderborn mit den Aufgabenschwerpunkten Optoelektronik, Halbleiterphysik, Halbleiterepitaxie und Halbleitertechnologie und erhielt 2006 den Forschungspreis der Universität Paderborn.



Kontrolle des MBE-Wachstums einer kubischer Gruppe III - Nitrid Schicht



Testen blauer GaN LEDs



Spitzenmessplatz zur elektrischen Charakterisierung

# Optisch aktive Glaskeramiken

PD Dr. Stefan Schweizer

„Neue Materialien für die digitale Radiographie und die Photovoltaik“

Bei optisch-aktiven Glaskeramiken handelt es sich um Gläser, die mit nanokristallinen Leuchtstoffen dotiert werden. Ein Beispiel für derartige Leuchtstoffe ist in Bild 1 zu sehen. Die Größe der Nanokristallite in den Gläsern kann hierbei so eingestellt werden, dass die Glaskeramik im sichtbaren Spektralbereich transparent bleibt. Die bislang untersuchten Glassysteme sind Zirkonfluorid-Gläser, aber seit kurzem auch Borat-Gläser (siehe Bild 2).

Transparente Glaskeramiken wurden ursprünglich als Detektoren für Röntgen- und  $\gamma$ -Strahlung entwickelt. Hauptanwendungsgebiet ist hierbei nicht nur die medizinische Diagnostik, sondern auch Röntgenprüfanlagen zum Beispiel an Flughäfen. In den letzten beiden Jahren zeigte die Industrie ein verstärktes

Interesse daran, derartige Materialien auch als Fluoreszenzkollektoren in der Photovoltaik anzuwenden. Die optischen Eigenschaften dieser transparenten Glaskeramiken können hierbei zur Effizienzerhöhung von Solarzellen eingesetzt werden. Ein Teilaspekt ist beispielsweise, den ansonsten ungenutzten infraroten Anteil des Sonnenspektrums nutzbar zu machen, indem zwei oder mehr niederenergetische Lichtquanten in ein höherenergetisches Photon umgewandelt werden („up-conversion“). Letzteres wird dann in der Solarzelle zur Stromerzeugung verwendet. Bild 3 zeigt die Fluoreszenzeigenschaften einer Nd-dotierten Zirkonfluorid-Glaskeramik.

**PD Dr. Stefan Schweizer**, geboren am 22.07.1968 in Lauterbach, wechselte nach dem Abschluss seines Physikstudiums an der Justus-Liebig-Universität Giessen 1994 nach Paderborn, wo er 1997 promovierte und sich Ende des Jahres 2000 auf dem Gebiet der digitalen Radiographie habilitierte. Für seine Forschungsvorhaben auf dem Gebiet der bildgebenden Verfahren in Medizin und Materialprüfung wurde ihm Anfang des Jahres 2002 von der DFG ein Heisenberg-Stipendium zugesprochen. Mitte 2003 kehrte er nach seiner Gastprofessur am MIT (Cambridge, MA, USA) an die Universität Paderborn zurück, um dort im Department Physik seine Arbeitsgruppe weiter auszubauen. Von Oktober 2005 bis September 2006 forschte er als „Visiting Scientist“ am Argonne National Laboratory (Argonne, IL, USA).

[physik.upb.de/schweizer](http://physik.upb.de/schweizer)

DEPARTMENT PHYSIK  
EXPERIMENTALPHYSIK

43



Bild 1: Foto zweier einkristalliner langlebiger Leuchtstoffe. Die Proben sind bereits an Styropor®-Probenhalter geklebt. Die Aufnahmen entstanden in normalem Tageslicht nach 10-minütiger Anregung mit Sonnenlicht



Bild 2: Foto zweier Borat-Gläser

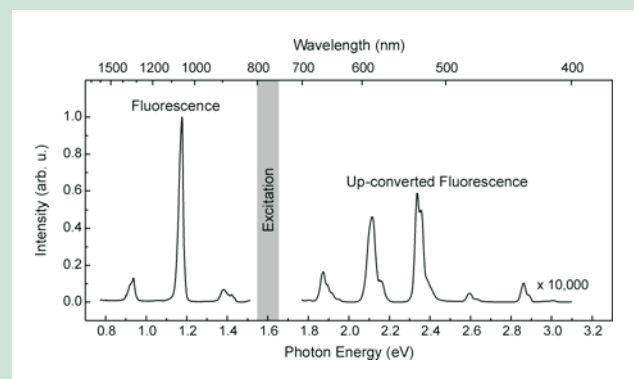


Bild 3: Fluoreszenz (linkes Spektrum) und upkonvertierte Fluoreszenz (rechtes Spektrum) einer Nd-dotierten Zirkonfluorid-Glaskeramik. Die Anregung erfolgte bei etwa 800 nm mit einer LASER-Diode



# Festkörpertheorie

Prof. Dr. Wolf Gero Schmidt

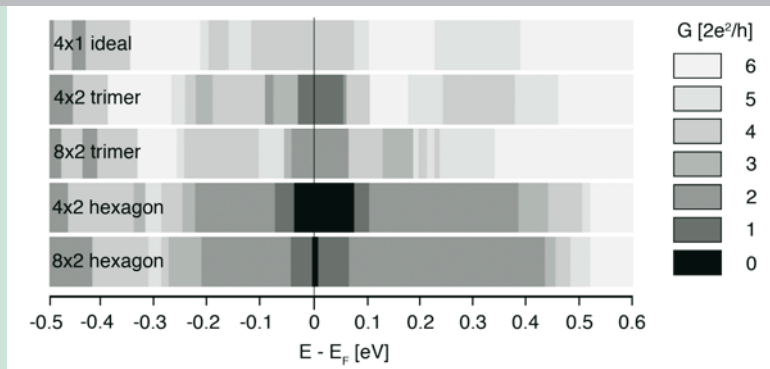
„Parameterfreie Theorie von Materialeigenschaften“

Die Miniaturisierung elektronischer Bauelemente beinhaltet zahlreiche technologische als auch wissenschaftliche Herausforderungen, zu denen die moderne Theoretische Physik wesentliche Beiträge liefern kann. Bei Strukturgrößen im Nanometer-Bereich verliert zum Beispiel die makroskopische Definition des Widerstands eines Leiters ihre Bedeutung und der quantenmechanische Charakter der Elektronen gibt Anlaß zu Quanteninterferenz-Effekten und Leitwertquantisierung. Die Entwicklung und Anwendung von Methoden zur präzisen, parameterfreien Berechnung des Elektronentransports durch Nanostrukturen atomarer Dimension ist eine der Forschungsaktivitäten der Arbeitsgruppe Schmidt – etabliert zu Beginn des Jahres 2006. Die praktische Umsetzung der viel diskutierten Ablösung tra-

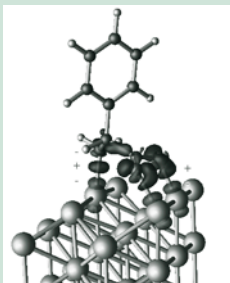
ditioneller Lithographieprozesse durch molekulare Selbstorganisation ist eine weitere spannende Fragestellung der Miniaturisierung. Hierfür sind nicht nur das Verständnis und die Berechnung des Elektronentransports auf atomistischen Skalen erforderlich, sondern auch grundlegende Phänomene der molekularen Selbstorganisation müssen verstanden werden. In der AG Schmidt werden solche Prozesse anhand von Modellsystemen - wie kleinen, miteinander wechselwirkenden Aminosäuren oder DNA-Basen schwach gebunden auf inerten oder metallischen Substraten - numerisch modelliert und untersucht. Dabei werden quantenmechanische Methoden wie die Dichtefunktionaltheorie mit makroskopischen Konzepten der Thermodynamik verknüpft.

Prof. Dr. Wolf Gero Schmidt

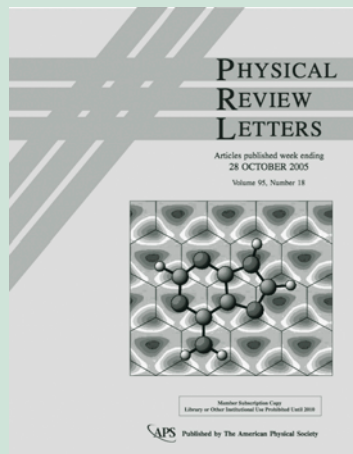
studierte Physik an der Friedrich-Schiller-Universität Jena und promovierte 1997 am Lehrstuhl von Friedhelm Bechstedt mit einer theoretischen Arbeit zum Einfluß dünner Metallschichten auf Halbleiteroberflächen. Nach einem Postdoc-Aufenthalt in der Gruppe von Jerry Bernholc an der North Carolina State University in den USA baute er in Jena eine Nachwuchsgruppe „Computational Materials Science“ auf. 2001 wurde er Adjunct Assistant Professor der North Carolina State University und habilitierte sich im Jahr darauf in Jena mit einer Arbeit zu den optischen Eigenschaften von Halbleiteroberflächen. 2005 wurde er Associate Professor an der Massey University Auckland, Neuseeland, bevor er 2006 einen Lehrstuhl für Theoretische Physik an der Universität Paderborn annahm.



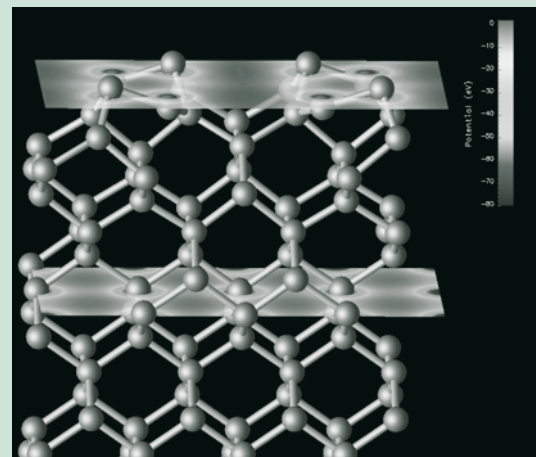
Berechnetes Leitwertspektrum von In-Nanodrähten auf einer Siliziumoberfläche



Berechneter Ladungstransfer an der Grenzfläche zwischen Kupfer und Phenylglycin



Berechnete Potentialenergiefläche für Adenin auf einer Graphitoberfläche – Auf der Titelseite der *Physical Review Letters*



Berechnetes elektronisches Potential im Inneren und an der Oberfläche von Silizium

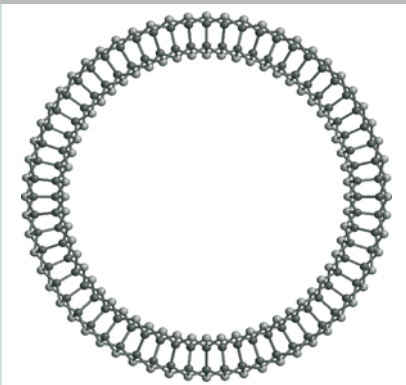
# Molekulare Modellierung von Materialien

**Prof. Dr. Thomas Frauenheim**  
 „Computational Material Science“

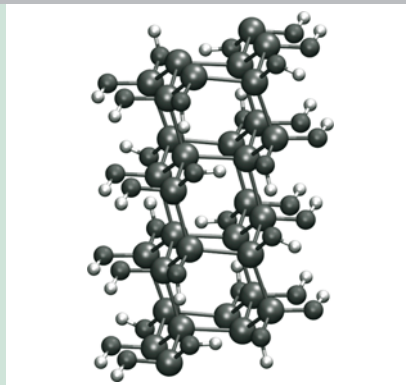
Die Forschung und Lehre der Theoretischen Physik der Arbeitsgruppe Frauenheim an der Universität Paderborn wird seit sieben Jahren mit starker Orientierung auf Materialwissenschaften – Computational Material Science ausgerichtet. Es werden quantenmechanisch basierte Methoden für dynamische atomistische Simulationen von realen Materialsystemen eingesetzt und weiterentwickelt. Die geschaffenen Programmsysteme gestatten dabei nicht nur dynamische atomistische Simulationen von Nanosystemen in elektronischen Grund- und angeregten Zuständen, sondern werden neuerdings auch

eingesetzt, um das Verhalten dieser Systeme im technischen Anwendungsbetrieb zu modellieren. Untersuchungsgegenstand bilden Nanostrukturen aus der Physik, Chemie und Biologie (Medizin) sowie zunehmend auch verschiedenen Ingenieurwissenschaften. Das Spektrum der bearbeiteten Systeme, das von Clustern, Molekülen, Nanoteilchen und Nanoröhren über polymere, amorphe und kristalline Festkörper bis zu biologischen Systemen reicht, widerspiegelt einen hohen Grad an Interdisziplinarität, der über die Forschung auch auf die Ausbildung der Studierenden wirkt.

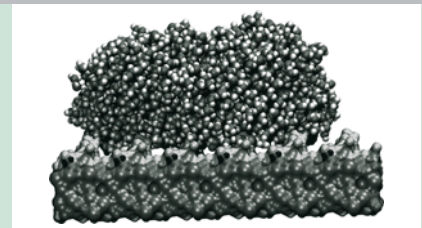
**Prof. Dr. Thomas Frauenheim** studierte Physik an der TU-Dresden und diplomierte und promovierte dort zu Themen der Theoretischen Festkörperphysik. Nach einem Postdoc-Aufenthalt am Vereinigten Institut für Kernforschung habilitierte er 1983 ebenfalls an der TU-Dresden und wurde 1984 auf eine Dozentur für Theoretische Physik an die spätere TU Chemnitz berufen. Mit Beginn der 90er Jahre wechselte er seine Forschungsthematik und baute an der TU Chemnitz eine Arbeitsgruppe „Computational Material Science“ auf. 1997 erhielt er schließlich einen Ruf auf den Lehrstuhl für Theoretische Physik an der Universität Paderborn, dem er im April 1998 mit dem Umzug seiner gesamten Gruppe folgte. Im November 2005 erhielt Prof. Frauenheim einen Ruf auf eine Professur für Computational Materials Science an der Universität Bremen und hat im April 2006 dort seine Tätigkeit aufgenommen.



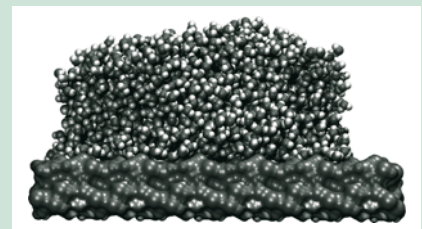
GaS - Nanoröhre; aus Phys. Rev. B, 69, p. 193403 (2004)



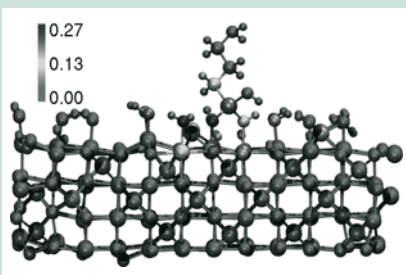
Siliziumnanodraht entlang 112-Richtung mit OH-Passivation.



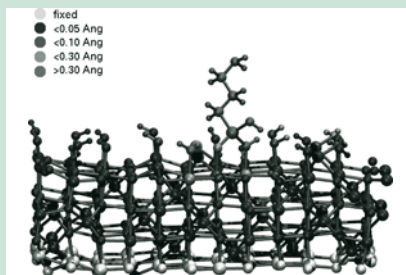
Wassertropfen auf CF<sub>3</sub> (Teflon) beschichteter SiO<sub>2</sub> Oberfläche



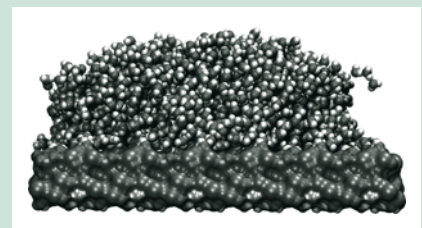
Wassertropfen auf SiO<sub>2</sub> Oberfläche



Maximale Ladungsänderung der Atome während der Kondensation von AMEO auf Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; aus J. Phys. Chem. B 2006, 110, 20460



Maximale RMS der Atombewegung entlang des Minimumenergiepfads der Kondensation von AMEO auf Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; aus J. Phys. Chem. B 2006, 110, 20460



Wassertropfen auf hydroxylierter SiO<sub>2</sub> Oberfläche

# Elektronische Eigenschaften von Halbleitern

Prof. Dr. Harald Overhof (†)

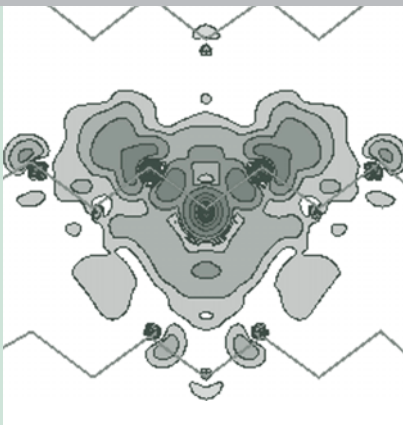
„Identifizieren von Fremdatomen in Halbleitern und Isolatoren“

Die in der Mikroelektronik verwendeten Halbleiter erhalten erst durch den Einbau von Fremdatomen, den Dotierstoffen, ihre nützlichen Eigenschaften. Durch die Herstellung und Prozessierung werden daneben noch weitere Fremdatome eingebaut, die unerwünscht und oft extrem schädlich sind. Der erste Schritt zur Vermeidung des Einbaus unerwünschter Fremdatome ist die Identifizierung der Atomsorte. Experimentell kann man Fremdatome mittels magnetischer Resonanzmethoden zwar beobachten, ihren Einbauplatz im Kristallgitter und ihre chemische Identität aber experimentell meist nicht eindeu-

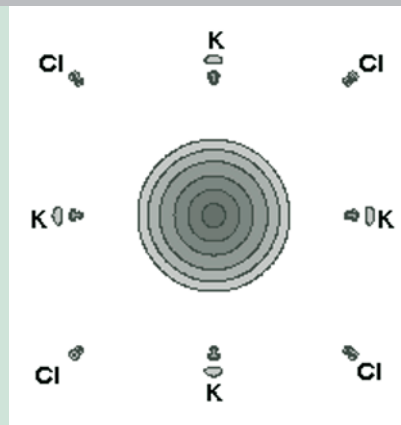
tig bestimmen. Moderne theoretische Berechnungsmethoden erlauben die quantitative Berechnung der elektrischen und magnetischen Eigenschaften dieser Defekte. Durch den Vergleich der Resultate dieser Berechnungen mit experimentellen Daten, die z.B. in der AG Prof. Greulich-Weber gemessen werden, ist dann eine eindeutige Identifizierung beobachteter Defekte möglich. Viele wichtige Eigenschaften der Defekte, z.B. ihre chemische Bindung oder die Verteilung der Spindichte, sind nur durch theoretische Berechnung bestimmbar.

**Prof. Dr. Harald Overhof**

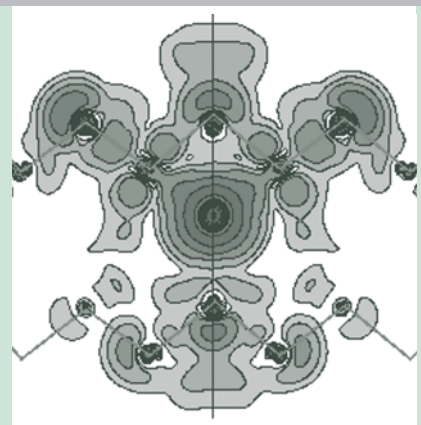
studierte Physik an der Philipps-Universität in Marburg. Er promovierte 1969 bei Prof. Madelung. Nach einem einjährigen Forschungsaufenthalt bei IBM in San Jose, Cal., habilitierte er sich 1975 in Marburg. Ab 1976 war er als Professor an der TU Berlin tätig und vertrat seit 1980 das Arbeitsgebiet Theoretische Festkörperphysik in Paderborn. Er verstarb im Oktober 2005.



Ein Schwefelatom auf einem Gitterplatz in Silizium



Ein Wasserstoffatom auf einem Chlorplatz in KCl



Ein Aluminiumatom auf einem Zwischengitterplatz in Silizium



# Computergestütztes Materialdesign

Prof. Dr. Jörg Neugebauer

„Entwicklung von ab initio Multiskalenmethoden in der Materialwirtschaft“

Ziel der Abteilung „Computergestütztes Materialdesign“ ist die Entwicklung von *ab initio* (d.h. vollständig parameterfreien) Multiskalenmethoden und deren Anwendung auf bisher ungelöste grundlagenphysikalische und anwendungsorientierte Fragestellungen aus verschiedensten Bereichen der Materialphysik. Die Grundidee dieser Methode ist die Kombination quantenmechanischer Methoden, die eine sehr präzise Beschreibung auf atomarer Skala realisieren, mit mesoskopischen/makroskopischen Konzepten wie Thermodynamik, statistische oder Kontinuumsmechanik. Mittels dieser Kombination

gelingt es, Materialeigenschaften und -prozesse ganzheitlich unter Berücksichtigung aller relevanten Längen- und Zeitskalen mit hoher Genauigkeit zu berechnen und vorherzusagen. Erfolgreiche Anwendungen dieses Zugangs waren die Beschreibung von Elementarprozessen des epitaktischen Wachstums von Halbleiteroberflächen, z.B. Identifizierung technologisch wichtiger surfactants/ antisurfactants zur Nanostrukturierung von Oberflächen sowie die Vorhersage neuer biomedizinischer Ti-Legierungen mit maßgeschneiderten thermodynamischen und mechanischen Eigenschaften.

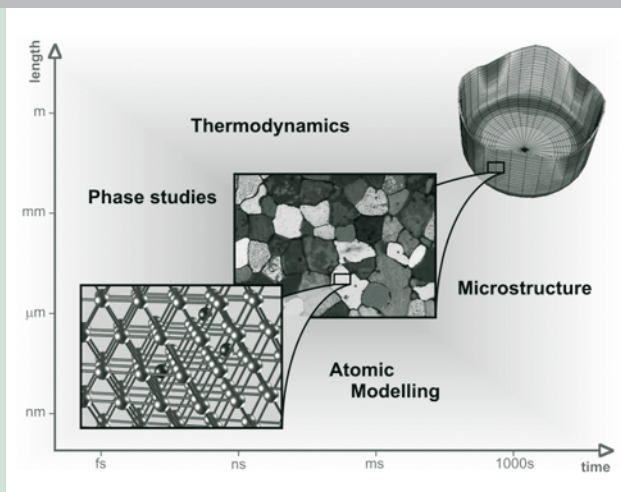
**Prof. Dr. Jörg Neugebauer**

studierte Physik an der Humboldt-Universität zu Berlin und diplomierte dort 1987 mit einer kombiniert experimentellen und theoretischen Arbeit zur Festkörperphysik. 1989 promovierte er an der gleichen Universität mit der Entwicklung und Anwendung effizienter computergestützter Methoden zur Berechnung von Festkörpereigenschaften. Nach einem PostDoc-Aufenthalt am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft in Berlin (Schwerpunkt: Katalyse auf Oberflächen) und einem Aufenthalt als Gastwissenschaftler am Xerox Palo Alto Research Center im kalifornischen „silicon valley“ (Schwerpunkt: Dotierung von Halbleitern) erhielt er 1999 einen Ruf am Fritz-Haber-Institut als Leiter (C3) einer unabhängigen Max-Planck-Nachwuchsgruppe, die sich mit Fragestellungen zur Morphologie und zum Wachstum von Halbleiteroberflächen beschäftigte. 2001 habilitierte er an der TU Berlin und 2003 nahm er einen Ruf auf den Lehrstuhl für Theoretische Physik an. 2004 erhielt er einen Ruf auf eine Max-Planck-Direktorenstelle am MPI für Eisenforschung in Düsseldorf.

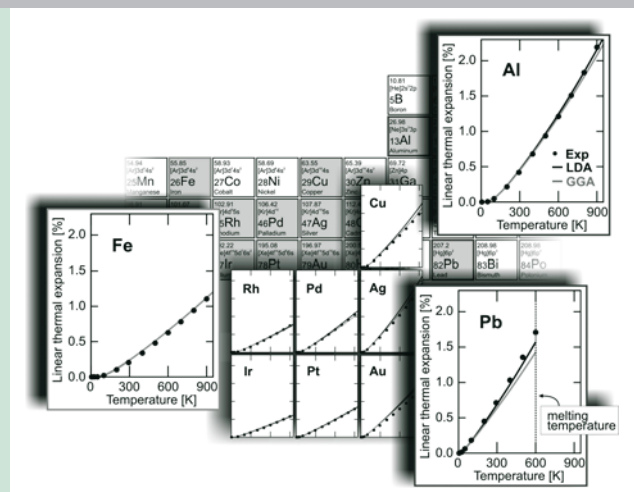
cmd.upb.de

DEPARTMENT PHYSIK  
THEORETISCHE PHYSIK

47



Modernen Werkstoffe, wie sie heute z.B. für die Automobilindustrie entwickelt werden, lassen sich typischerweise nicht mehr auf der für die Anwendungen relevanten Makroskala beschreiben. Für eine realistische Vorhersage von Material-/Prozesseigenschaften werden numerisch extrem aufwendige Multiskalensimulationen benötigt, die ausgehend von einer *ab initio* Beschreibung der atomaren Skala alle relevanten Parameter für die hierarchische Beschreibung der Meso- und letztendlich der Makroskala liefern.



Die Kombination von vollständig parameterfreien *ab initio* Methoden mit klassischen physikalischen Konzepten wie der Thermodynamik ermöglicht eine bisher nicht erzielbare Vorhersagegenauigkeit. Das Bild zeigt für eine thermodynamische Schlüsselgröße – die thermische Ausdehnung – welche Genauigkeit mittels dieser von uns entwickelten Methoden für prinzipiell beliebige Materialsysteme erzielbar ist.

# Theoretische Biophysik

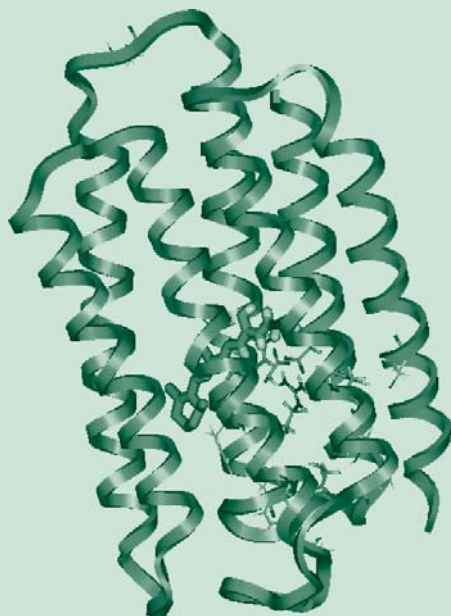
Jun.-Prof. Dr. Marcus Elstner

„Simulation der Struktur und Funktion von Biomolekülen“

Biologische Strukturen zeichnen sich u.a. dadurch aus, dass sie (photo-)chemische Reaktionen sehr effizient ablaufen lassen. Basierend auf experimentell aufgeklärten Strukturen soll mit Hilfe von Computersimulationen ein Verständnis der Funktion von Biomolekülen im atomaren Detail erreicht werden. Protonen Transfer Reaktionen sind elementare Schritte in vielen enzymatischen Prozessen, wie etwa bei dem Abbau von Alkohol im Körper durch das Enzym Alkoholdehydrogenase oder in der Bioenergetik. In der Photosynthese wird die Lichtenergie dazu benutzt, durch Protonentransfer einen pH-Gradienten zu erzeugen, der in nachfolgenden Schritten in chemische Energie

umgesetzt wird. Untersucht werden u.a. das bakterielle Photozentrum, Bakteriorhodopsin und Aquaporin. Photobiophysik: Studium der Dynamik optisch angeregter Moleküle. Die Chromophore der untersuchten Proteine (Rhodopsin, GFP, Bakteriorhodopsin) zeichnen sich durch eine effiziente Lichtausnutzung und extrem schnelle Schaltzeiten aus. Hier wird untersucht, wie die Proteinumgebung der Chromophore diese Effizienz ermöglicht. Elektronentransport durch DNA: Die Verwendung von DNA als „nano“-Leiter wird durch die Simulation ihrer Leitfähigkeit unter verschiedenen Bedingungen (trocken, in Lösung, metallisiert) betrachtet.

**Jun.-Prof. Dr. Marcus Elstner** studierte Physik und Philosophie an der TU München und der TU Berlin. Die an der Universität Paderborn eingereichte Doktorarbeit fertigte er zwischen 1994 bis 1998 am Deutschen Krebsforschungszentrum in der Abteilung für Molekulare Biophysik an. 1999 bis 2000 war er „postdoc“ an der Harvard Universität in Cambridge, danach wissenschaftlicher Mitarbeiter in der Theoretischen Physik an der Universität Paderborn. Von Dezember 2002 bis März 2006 ist er Juniorprofessor für Theoretische Biophysik and der Universität Paderborn, seit April 2006 Professor für Theoretische Chemie an der TU Braunschweig.



Das Membranprotein Bakteriorhodopsin besteht aus sieben X-Helices und dem lichtabsorbierenden Chromophor (grün)



Die Struktur des Green Fluorescent Protein (GFP) ähnelt einer „Tonne“, in der Mitte das Chromophor. Wie in Bakteriorhodopsin wird nach Lichtabsorption ein Protonentransfer in Gang gesetzt

# Wirkung der Lehrausbildung, neue Medien im Physikunterricht

Prof. Dr. Peter Reinhold

„Empirische Forschung zur Lehrerbildung und zum Einsatz neuer Medien“

Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit der Einbeziehung neuer Medien in den Physikunterricht. Auf der Schülerebene untersuchen wir die Rahmenbedingungen (u. a. kooperatives Lernen, mediale Repräsentationsformate), unter denen der Einsatz des Computers effektives Problemlösen fördert. Auf der Lehrerebene fragen wir, inwiefern sich das vielfach kritisierte Muster des fragend-entwickelnden Unterrichts durch den Einsatz neuer Medien verändert. In Rahmen des vom BMBF geförderten Projekts piko beschäftigen wir uns damit, wie Interesse fördernde und kognitiv anregende Lernumgebungen durch die Einbettung von Physik in alltagsnahe und Technik bezogene Kontexte gestaltet werden können. Im Projekt werden in Kooperation mit Lehrkräften Unterrichtsmaterialien entwickelt und

erprobt. Weiter untersuchen wir, wie sich die Kooperation auf das professionelle Handeln der beteiligten Lehrkräfte auswirkt.

In Kooperation mit dem Paderborner Lehrerbildungszentrum (PLAZ) untersuchen wir die Wirkung der Lehrerbildung. Es werden Instrumente zur Erfassung zentraler Komponenten professioneller Handlungskompetenz von angehenden Physiklehrkräften (Fachwissen, fachdidaktisches Wissen, beliefs) entwickelt.

„Naturwissenschaften zum Anfassen“ lautet das Motto der interaktiven Dauerausstellung in der Computer- und Kinderbibliothek Paderborn. Dieses „Experimentarium“ wurde von der AG Didaktik der Physik in Kooperation mit der Kinderbibliothek und mit Unterstützung der Benteler AG entwickelt.

**Prof. Dr. Peter Reinhold**

ist Professor für Didaktik der Physik an der Universität Paderborn. Nach der Ersten Staatsprüfung für das Lehramt an Gymnasien in den Fächern Physik und Mathematik promovierte er 1987 in Physikdidaktik am Leibniz Institut für die Pädagogik der Naturwissenschaften an der Universität Kiel (IPN). Von 1987 bis 1993 war er als Wiss. Assistent am IPN bei Prof. Dr. W. Westphal tätig und habilitierte sich 1994 im Fach Didaktik der Physik. Von 1996 bis 1997 war er Referendar für die Laufbahn der Studienräte am Gymnasium und von 1997 bis 1999 Professorenvertreter an der Universität Paderborn. Seit 1999 ist er Professor für Didaktik der Physik an der Universität Paderborn. Seit 1999 leitet er im Paderborner Lehrerbildungszentrum (PLAZ) das Forschungskolleg „Lehren und Lernen mit Neuen Medien“ zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses in Erziehungswissenschaft und den Fachdidaktiken. Seit 1999 ist er Mitglied im Vorstand und seit 2004 Stellvertretender Vorsitzender des PLAZ.

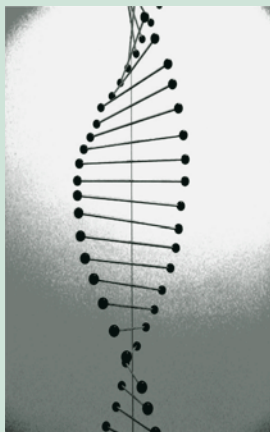
physik.upb.de/didaktik

DEPARTMENT PHYSIK  
DIDAKTIK DER PHYSIK


49




Empirische Untersuchung des Lernens mit Simulationen in Schulen



Entwicklung und Betreuung des Experimentariums




UNIVERSITÄT PADERBORN  
Fakultät für Erziehungswissenschaften



IPN

**Wärmelehre im Kontext Wetter**



piko  
Schüler Orientierung  
Lippe

---

**Klassenstufe:** 10      **Schularten:** Haupt- und Realschule      **Bundesland:** NRW

**Ziele**

Schaffung einer neuen Lehr-Lern-Kultur (L1) und Förderung naturwissenschaftlichen Denkens und Arbeitens (L2) wie z. B. Experimentieren, Recherchieren, Argumentieren durch:

- Einbettung der Wärmelehre in den Kontext Wetter
- Schülerfragen als Ausgangspunkt

- Eigenständiges Bearbeiten der Fragestellungen mit selbstgewählten Materialien
- Ergebnissicherung durch Expertenrunden

Entwicklung und Erprobung einer ungefähr 10-stündigen Unterrichtseinheit für die Real- und Hauptschule, Klasse 10

**Ablauf der Unterrichtseinheit**

1. Stunde: Fragensammlung  
Schüler stellen Fragen zum Thema Wetter mit Wetterbildern als zusätzliche Impulse.

2. Stunde: Gruppenbildung  
Die Schüler bilden Ger-Gruppen (Stammgruppen). Anschließend wählt jede Gruppe 5 Fragen als Arbeitsaufgabe.

3.-8. Stunde: Bearbeitung der Fragen  
Die Stammgruppen werden geteilt. Bearbeitung der Fragen in 3er-Gruppen mit frei wählbaren Medien / Materialien.

**Angeborene Experimente:**

- Tellen in der Colaflasche (Weißbildung)
- Hoch und Tief in Luftballons (Druckausgleich)
- Geschichtsbuch für jedermann (Wasserkreislauf)
- Wälzen in der Flasche (Kondensations)
- Kanivakki gefüllt (Luftdruck)
- Kälter gelte in warmer (Galo-Gal-Mischung)
- Eine Kugel auf Rollen (Kontaktkraft)
- Am Strand und im Wasser (Wärmekapazität)

**Zur Verfügung stehen:**  
Was ist Wiss-Bücher, Fachvideos, DVD, CD-ROM, CD-ROM, Experimente mit vorbereiteten Anleitungen.

Ihre Ergebnisse sollen die Schüler nicht als Text, sondern in Form von Skizzen und Bilder festhalten.

9.-11. Stunde: Vergleich der Ergebnisse  
Vergleich der erarbeiteten Antworten in den Stammgruppen und Erstellung einer Präsentation.

12.-16. Stunde: Präsentation  
Mit der Präsentation stellen die Schüler ihre Ergebnisse der Klasse vor.

**Stand**

- Erste Erprobungen in 2005 in der Realschule
- Erprobung in der Hauptschule Mai/Juni 2006
- Voraussätzliche Veröffentlichung der Dokumentation Ende 2006

**Beteiligte Schulen**

- Johanneschule, Hauptschule Salzkotten (Dieter Grützner)
- Philipp-Korte-Realschule Salzkotten (Raik Möbius)

piko: Entwicklung und Erprobung von Unterrichtsmaterial



# Department Sport & Gesundheit

Gesunde Ernährung und Bewegung sind zentrale Voraussetzungen für Lebens-, Lern- und Arbeitsfähigkeit in allen Lebensphasen. Sport, Freizeit und Gesundheit zählen zu den wachsenden Märkten. Insbesondere der Fitness- und der erlebnisorientierte Outdoor-Activity-Sektor sowie der Markt für Lebensmittel mit Zusatznutzen expandieren stark. Das Feld der Gesundheitsvorsorge (Prävention) und -fürsorge hat ein großes Wachstumspotenzial. Die Zusammenhänge zwischen Individuen und Umwelt- bzw. Lebensstilfaktoren werden in einer zunehmend informationsgeprägten Gesellschaft immer komplexer. Hieraus resultiert eine wachsende Nachfrage nach kompetenten Absolventinnen und Absolventen, die in der Lage sind, zielgruppenorientierte Bildungs- und Beratungsangebote im Sport- und Gesundheitssektor zu entwickeln und bereitzustellen. Darüber hinaus steigt der Bedarf an anwendungsbezogener Forschung im Bereich Sport, Ernährung,

Freizeit und Gesundheit aus einer sozialwissenschaftlichen wie auch medizinisch-naturwissenschaftlichen Perspektive stetig.

An diesem Profil orientieren sich die sieben Professuren der Fachgebiete Ernährung & Verbraucherbildung, Sportwissenschaft und Sportmedizin in ihrer interdisziplinären Forschung und Lehre. Dem Schutz und der Förderung der Gesundheit des Menschen soll im Rahmen der Aufgabenschwerpunkte des Departments Sport & Gesundheit eine besondere Bedeutung zukommen. Die beteiligten Fachgebiete nutzen Synergien, um:

- wissenschaftliche Grundlagen des geistigen und körperlichen Wohlbefindens des Menschen zu erarbeiten,
- zukunftsorientierte Konzepte der Betreuung und Beratung zur Gesundheitsförderung sowie der Ernährungs-

und Verbraucherbildung zu entwickeln,

- wissenschaftliche Partnerschaften für die Gesundheitswirtschaft, das Gesundheitswesen und die Lebensmittelindustrie aufzubauen,
- Unterstützungsangebote für eine innovative Aus- und Weiterbildung von Akteuren in der Ernährungs- und Verbraucherbildung und in bewegungsrelevanten Handlungsfeldern zu entwickeln und zu vernetzen.

## Arbeitsgruppen des Departments Sport & Gesundheit

Ernährung & Verbraucherbildung	Sportmedizin	Sportwissenschaft
<p><b>Prof. Dr. Helmut Heseker</b> Ernährungswissenschaft</p> <p><b>Prof. Dr. Schlegel-Matthies</b> Haushaltswissenschaft</p> <p><b>StD Georg Israel</b> OPUS-Geschäftsstelle NRW</p> <p><b>Dr. Andreas Sollmann</b> Biologie</p>	<p><b>Prof. Dr. Michael Weiß</b> Analytik und Diagnostik</p> <p><b>Prof. Dr. Heinz Liesen</b> Prävention und Leistung (Emeritiert: März 2006)</p>	<p><b>Prof. Dr. Wolf-Dietrich Brettschneider</b> Sport und Erziehung</p> <p><b>Prof. Dr. Norbert Olivier</b> Bewegung und Training</p> <p><b>Prof. Dr. Dr. Sebastian Braun</b> Sport und Gesellschaft</p>

# Department Sport & Gesundheit – Aktivitäten

Wissenschaftliche Fragestellungen von Gesundheit im Sinne individueller Prävention und von Freizeit stehen im Zentrum der Forschungsaktivitäten unseres Departments. Interdisziplinär zusammengesetzte Arbeitsgruppen untersuchen einerseits die Auswirkungen weitreichender gesellschaftlicher Veränderungen, die u.a. aus der Globalisierung und dem technischen Fortschritt resultieren, auf das Bewegungs-, Freizeit-, Ernährungs- und Verbraucherverhalten der Menschen in unterschiedlichen Lebensphasen und sozialen Kontexten. Andererseits werden die hiermit zusammenhängenden Auswirkungen gesellschaftlicher Veränderungen auf Organisationen wie Verbände, Vereine oder Wirtschaftsunternehmen untersucht.

Zu diesen Thematiken wurden u.a. große Modellprojekte initiiert und federführend durchgeführt (PATRAS, ESKIMO, ESTESS, REVIS, SPRINT, EU- und bundesweite Studien).

Das Department Sport & Gesundheit hat sich insbesondere mit seinen Wissenschaftsgebieten als Partner der Gesundheitswirtschaft der Region OWL entwickelt. In dieser Perspektive ist es u.a. eingebunden in zahlreiche außerwissenschaftliche Einrichtungen zur regionalen und lokalen Sportförderung und -beratung. Unser Department kooperiert beispielsweise mit einer orthopädischen Rehabilitationsklinik mit sportmedizinischer Abteilung (Klinik Lindenplatz, Bad Sassendorf) und einem Lehr- und Forschungszentrum für die Sportart Golf (Golfakademie Paderborn).

## Forschung & Entwicklung

Sport und Gesundheit in Lebensphasen	Sport- und Gesundheits-Beratungskonzepte	Sport & Gesundheits-information	Sport, Leisure & Politik-beratung
<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Sportliche Aktivität und psychosoziale Gesundheit im Kindes-/Jugendalter</li> <li>■ Ernährung im Kindes- und Jugendalter</li> <li>■ Stabilisations-, Regenerations-, Kraft- und Techniktraining für Prävention und Leistungssport</li> <li>■ Exercise and Brain</li> <li>■ Gesundes Altern               <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Ernährung</li> <li>■ Bewegung</li> </ul> </li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Gesundheitsmanagementsysteme</li> <li>■ Kreativität und mentale Gesundheit</li> <li>■ OPUS Netzwerk Bildung und Gesundheit</li> <li>■ Diagnostik von Bewegung und Bewegungssteuerung</li> <li>■ Adipositas-Prävention im Kindesalter</li> <li>■ Lebensstile von Heranwachsenden</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Bewegungslernen mit neuen Medien</li> <li>■ ILIS – Internet-Lehrbuch Integration</li> <li>■ wissensbasierte Systeme</li> <li>■ Kompetenzzentrum Sport &amp; Gesundheit</li> <li>■ Verbraucherbildung</li> <li>■ Kompetenzzentrum Ernährung und Verbraucherbildung</li> <li>■ CEAN Consumer Education for Adults</li> <li>■ evb-online.de</li> <li>■ REVIS – Reform der Ernährungs- und Verbraucherbildung in Schulen</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ DFG-Exzellenzgruppe zu soziale Integration und Vereine</li> <li>■ Forschungszentrum für Bürger-schaftliches Engagement</li> <li>■ Sportengagement und Entwicklung im Kindes und Jugendalter</li> <li>■ Sport im interkulturellen Vergleich</li> <li>■ Vereins- und Schulsportberatung</li> <li>■ Beratung von Bundes- und Landesministerien</li> </ul>

# Department Sport & Gesundheit – Wissenschaftliche Lehre

Die Forschungsschwerpunkte des Departments spiegeln sich in der Lehre und den Studienangeboten des Departments wider. Zum Wintersemester 2006/2007 wurde der Studiengang „Bachelor of Science in Exercise, Sport and Health“ mit den beiden Profilen „Sport in der Freizeit“ und „Sport und Gesundheit“ eingerichtet.

Die gewonnenen wissenschaftlichen und praktischen Kompetenzen werden in Verbindung mit der Theorie und Praxis der Sportarten in verschiedene Anwendungs- und Berufsfelder umgesetzt, z.B. in kommerziellen und nicht kommerziellen Freizeiteinrichtungen, im Sporttourismus, in Gesundheitszentren, in Organisationen des Gesundheitswe-

sens mit Präventionsangeboten, bei Sportorganisationen oder der öffentlichen Sportverwaltung. Darüber hinaus ist in den Bereichen Behindertensport/ Integrationsport und Golfsport der Erwerb von Zusatzqualifikationen möglich.

Außerdem bietet das Department derzeit folgende Studiengänge an:

- Unterrichtsfach Sport für alle Lehramtsstudiengänge
- Diplomstudiengang Sportwissenschaft
- Lehramtsfach Hauswirtschaft GHR (für Grund-, Haupt- und Realschule und die entsprechenden Jahrgangsstufen der Gesamtschule)

Eine Profilbildung des Lehrangebots erfolgt im Sinne eines Portfolios Gesundheitsförderung in der Schule/„Gesunde Schule“ (Prävention) für alle Lehramtsstudierenden.

Ein Lehr-Import und –Export erfolgt in den Bereichen:

- Master-Studiengang „Chemie & Gesundheit“
- Sachunterricht Gesellschaftslehre GHR, Schwerpunkt Grundschule
- Sachunterricht Naturwissenschaft GHR, Schwerpunkt Grundschule



Impressionen aus dem Bereich Theorie und Praxis der Sportarten der Sportstudiengänge: "Citius, altius, fortius" als Bestandteil der Leichtathletikprüfung



# Gesundheitsförderung durch Ernährung und Verbraucherbildung

Die Zunahme von Adipositas und ihrer Folgeerkrankungen – verursacht durch die wachsende körperliche Inaktivität in Beruf und Freizeit verbunden mit ungünstigen Ess- und Trinkgewohnheiten – zeigt deutlich den bestehenden Forschungs- und Handlungsbedarf. Veränderungen in der Altersstruktur der Bevölkerung sowie ein mangelndes Konsum- und Finanzmanagement privater Haushalte mit den sich daraus ergebenden gesellschaftlichen Problemen sind Forschungs- und Handlungsfelder, die zu bearbeiten und für den Bildungsbereich aufzuarbeiten sind.

Die interdisziplinären Forschungs- und Entwicklungsarbeiten sind auf die Bereiche Ernährung, Verbraucherbildung und -schutz sowie Gesundheit in verschiedenen Lebensphasen fokussiert. Hierzu zählen Studien zur „Ernäh-

rungs- und Verbraucherbildung in allgemein bildenden Schulen (EiS-Projekt)“, das Modellprojekt „Reform der Ernährungs- und Verbraucherbildung in Schulen (REVIS-Projekt), die Entwicklung einer Unterrichtshilfe zur schulischen Schuldenprävention, das EU-Projekt „Consumer Education for Adults Network (CEAN)“ und die Anfertigung von Expertisen.

Traditionelle Beiträge zur Gesundheitsförderung in der Schule, die auf die Vermeidung pathogener Verhaltensweisen von Schülerinnen und Schülern zielen, reichen nicht aus. Gefordert sind Ansätze, die sich aus salutogenetischer Perspektive mit der Frage auseinandersetzen, wie Gesundheit entsteht, welche Ressourcen dafür benötigt werden und was die Aufgabe von Schule und Unterricht dabei ist.

Deshalb wurden im Rahmen des OPUS-Netzwerkes Bildung und Gesundheit Unterstützungssysteme für Kindertagesstätten und Schulen eingerichtet und vernetzt, um ein gesundheitsförderliches Versorgungsangebot nachhaltig zu etablieren.

evb.upb.de

DEPARTMENT SPORT & GESUNDHEIT  
ERNÄHRUNG & VERBRAUCHERBILDUNG  
53



Mobile Esswerkstatt für den Einsatz an Schulen



Lehr- und Lernprozesse in der Ernährungs- und Verbraucherbildung

# Sportwissenschaft und Sportmedizin

Die vier Arbeitsbereiche der Einheit Sportwissenschaft und Sportmedizin verbindet ein gemeinsames forschungsleitendes Ziel: die Entwicklung von Kreativität und Gesundheit im Kindes- und Jugendalter sowie die Gesunderhaltung in späteren Lebensphasen. Diesem Ziel wird sich in natur- und sozialwissenschaftlichen Ansätzen zugewendet. Qualitative und vor allem quantitative Erhebungen zu Bewegung, Sport und Gesundheit im schulischen sowie im außerschulischen Kontext sowie Untersuchungen zur Einordnung des Sports und insbesondere der Sportvereine in die politische Landschaft ergänzen die Entwicklungskonzeptionen vom Kindes-

bis zum Seniorenalter. Auch die Entstehung, Beschreibung und Auswertung von Bewegung passt in dieses Konzept der Optimierung zur Bewahrung vor Schädigung bei der Sportausübung und im Hinblick auf den Erwerb einer Bewegungskompetenz, die zeitlebens den Alltag begleiten und mit zunehmenden Alter die Mobilität und Selbständigkeit erhalten soll.

Sportwissenschaft und Sportmedizin zeichnen sich durch eine multi- bzw. interdisziplinäre Ausrichtung aus. So werden z.B. in einem übergreifenden Ansatz Untersuchungen zum Schulsport mit den Problemen der Ernährung im

Kindes- und Jugendalter gekoppelt. Hier werden die Ansätze für eine gesunde Zukunft gelegt und praxisorientiert aufbereitet. Hierzu passt auch die Erforschung der Mechanismen, durch die Sport und Training die Abwehrfunktionen, die antioxidativen Systeme und den Stoffwechsel anregen sowie Stressreaktionen abbauen. Zu dem gesamtgesellschaftlichen Forschungsansatz in den Forschungseinrichtungen zählen auch Untersuchungen von Gehirnaktivitäten mittels elektrophysiologischer Methoden mit dem Zweck, Konzepte zur präventiven und rehabilitativen Bewegungssteuerung zu entwickeln und zu realisieren.



Oben: Bewegung und Bewegungssteuerung



Oben: Koordinationsforschung im Golf-sport



Rechts: Präsidium und Mitglieder der Stiftung Jugendfußball  
v.l.: Stefan Kunz, Dieter Eilts, Joachim Löw, Prof. Liesen, Jürgen Klinsmann

# Forschungszentrum für Bürgerschaftliches Engagement

Bürgerschaftliches Engagement bezeichnet die Vielzahl von freiwilligen gesellschaftlichen Aktivitäten von Individuen und Organisationen, die einen Bezug zu Demokratie und Gemeinwohl aufweisen.

Auf individueller Ebene handelt es sich um ein breites Spektrum unterschiedlicher Aktivitäten von Individuen jenseits der Erwerbsarbeit und der Privatsphäre. Exemplarisch zu nennen sind: freiwillige unbezahlte Mitarbeit in (Sport-)Vereinen, Verbänden und karitativen oder gemeinwohlorientierten Einrichtungen (z.B. Krankenhäuser, Schulen oder Museen), direktdemokratische Formen der Bürgerbeteiligung (z.B. im Rahmen von Volksbegehren oder Volksentscheiden), Beteiligung an Protestaktionen (z.B. Bürgerinitiativen oder soziale Bewegungen).

Auf organisationsbezogener Ebene bezeichnet bürgerschaftliches Engage-

ment die freiwilligen gesellschaftlichen Aktivitäten von Wirtschaftsunternehmen, staatlichen Einrichtungen oder Nonprofit-Organisationen. Zu diesen Aktivitäten zählen alle einmaligen oder dauerhaften freiwilligen Leistungen, die zum Nutzen für die Gesellschaft auf lokaler, regionaler, nationaler oder globaler Ebene erbracht werden, jedoch außerhalb des originären Organisationsziels liegen.

Das Forschungszentrum für Bürgerschaftliches Engagement dient als unabhängige sozialwissenschaftliche Einrichtung am Lehrstuhl von Professor Dr. Dr. Sebastian Braun der Forschung und Beratung im Bereich des bürgerschaftlichen Engagements.

Darüber hinaus vermittelt das Forschungszentrum für Bürgerschaftliches Engagement relevante Forschungsergebnisse in die Öffentlichkeit und fördert den Dialog zwischen Wissenschaft,

privatwirtschaftlichen Unternehmen, Organisationen des Dritten Sektors sowie staatlichen und politischen Einrichtungen.

forschungszentrum-be.uni-paderborn.de

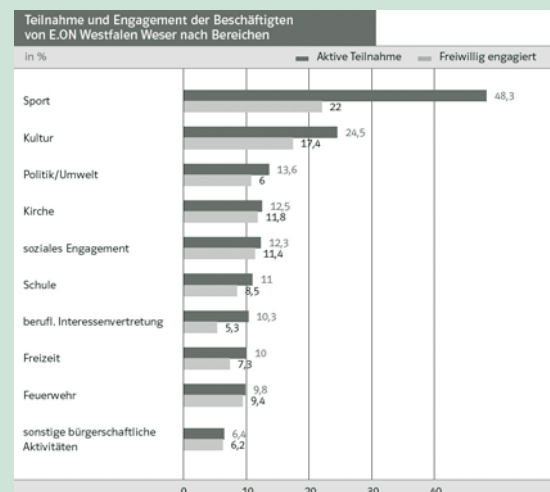
DEPARTMENT SPORT & GESUNDHEIT,  
FORSCHUNGSZENTRUM FÜR BÜRGERSCHAFTLICHES ENGAGEMENT  
55



Logo des Forschungszentrums für Bürgerschaftliches Engagement



Prof. Dr. Dr. Sebastian Braun, Direktor des Forschungszentrums für Bürgerschaftliches Engagement



Aktive Teilnahme und bürgerschaftliches Engagement der Beschäftigten von E.ON Westfalen Weser in Vereinen, Projekten und Initiativen, Differenzierung nach gesellschaftlichen Bereichen



# Ernährungswissenschaft

## Prof. Dr. Helmut Heseker „Ernährung und Gesundheit“

Die Ernährung hat einen wesentlich höheren Stellenwert für unsere Gesunderhaltung und Leistungsfähigkeit, als dies lange Zeit für möglich gehalten wurde. Im Kindes-, Jugend- und Erwachsenenalter führen eine überreichliche Ernährung und körperliche Inaktivität immer häufiger und immer früher zu Übergewicht bzw. Adipositas und damit assoziierten Erkrankungen. Hohe ökonomische und soziale Kosten sind die Folge. Um erfolgreich zu sein, muss Prävention bereits im Kindesalter beginnen und kontinuierlich fortgesetzt werden (Forschungsprojekte ESKIMO und PATRAS). Die bestehenden Defizite der schulischen Ernährungs-, Gesundheits- und Verbraucherbildung erfordern eine umfangreiche Reform, wie dies mit unserem bundesweit durchgeführten REVIS-Projekt verfolgt wird [[www.evb-online.de](http://www.evb-online.de)].

Im Alter erschweren dagegen altersassoziierte Veränderungen eine bedarfsangepasste, ausreichende Ernährung und führen nicht selten zu Unterernährung, Untergewicht und erheblichen Einbußen der Lebensqualität (Forschungsprojekt ESTESS). In dem PATRAS-Projekt wurden wissenschaftlich fundierte Konzepte zur Verbesserung der Gesundheit und Lebensqualität im hohen Alter durch altersgerechte Ernährung und Bewegung entwickelt („healthy aging“). Im Rahmen des Schwerpunkts „Gesundheitlicher Verbraucherschutz“ werden in Kooperation mit dem Department Chemie Untersuchungen zu sekundären Pflanzenstoffen und definierten Rückständen in Lebensmitteln durchgeführt. Es bestehen Kooperationen mit dem BfR und dem RKI in Berlin und dem IFEL in Bonn.

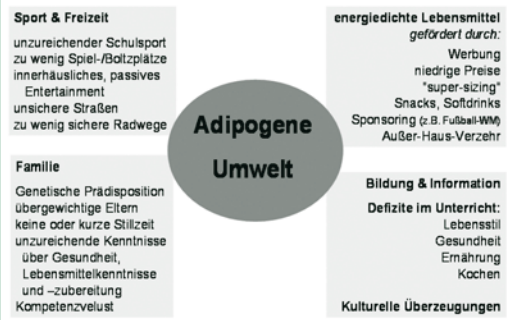
### Prof. Dr. Helmut Heseker

Universitätsprofessor Dr. oec. troph. Helmut Heseker, geboren am 5.02.1955 in Warendorf. Fachgebiet: Ernährungswissenschaft. Beruflicher Werdegang ab Examen: 1984 Promotion, 1993 Habilitation an der Universität Gießen. Ernährungsstatus älterer Menschen. Vitaminversorgung, psychische Befindlichkeit und Leistungsfähigkeit. Ernährungs- und Vitaminstatus der deutschen Bevölkerung. Biokinetik von Vitaminen. Ernährungsepidemiologische Studien. 1996-1997 Leiter des Fachgebiets „Ernährung, diätetische und neuartige Lebensmittel“ im BgVV. Seit 1997 Professor an der Universität Paderborn. Aufgabenschwerpunkte im Fachgebiet: Ernährung im Kindes- und Jugendalter, Ernährung in der Schule, Ernährung im Alter und im hohen Alter, Ernährungsepidemiologie, sekundäre Pflanzenstoffe. 2. Platz beim Deutscher Präventionspreis im Jahr 2005 für das F&E-Projekt PATRAS.

Weitere Aufgaben: Hochschulbeauftragter für das Studium für Ältere; Vize-Präsident der Deutschen Gesellschaft für Ernährung e.V. (DGE)



Prof. Dr. H. Heseker



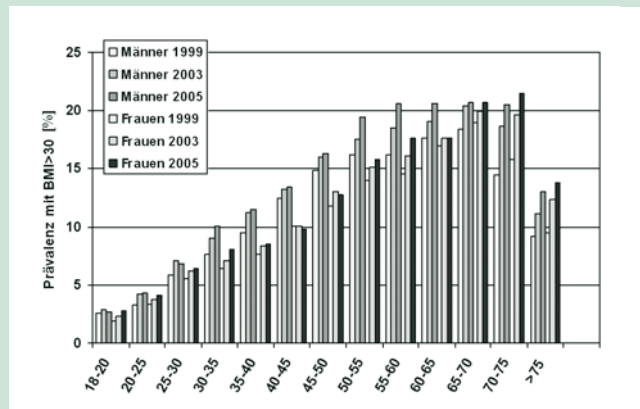
Adipogene Umweltbedingungen



Verleihung des Deutschen Präventionspreises 2005 (2. Platz) in Berlin



F&E-Projekt in Kooperation mit Prof. Dr. Brettschneider



Adipositas in Deutschland

# Haushaltswissenschaft

Prof. Dr. Kirsten Schlegel-Matthies

„Alltagskompetenzen für Lebensgestaltung und gesellschaftliche Teilhabe“

Die Haushaltswissenschaft befasst sich mit den Zusammenhängen im Haushalt selbst sowie mit den Zusammenhängen, in denen der Haushalt steht. Vielfältige Abstimmungs- und Entscheidungsprozesse zur Daseinssicherung und Daseinsgestaltung müssen bei wachsender Komplexität des Alltagslebens bewältigt werden: Fragen des Einkommenserwerbs, des Konsums, des Zusammenlebens, des Großziehens von Kindern und der Sorge für ältere Menschen. Das Zusammenleben in tradierten und neuen Haushalts- und Lebensformen sowie der Wandel der Aufgaben der Geschlechter und der Umgang mit Institutionen sind aktuelle Problemfelder. Das häusliche Handeln betrifft nicht nur die eigene Lebensführung und Gesundheit, sondern ebenfalls die der Kinder und der älteren

Generation und hat wesentliche soziale, ökonomische und ökologische Auswirkungen für die Wohlfahrt der Gesellschaft. Zunehmend bedeutender werden das lebenslange Lernen und der Erwerb von Alltagskompetenzen auch für die Bewältigung des Alltags. Die Reform der Ernährungs- und Verbraucherbildung in Schulen (REVIS) bezieht diese Zusammenhänge ebenso mit ein wie die Projekte „Vermeidung von Überschuldung – Netzwerk Schuldenprävention“ (www.unterrichtshilfe-finanzkompetenz.de) und „Gewusst wie – Förderung der Finanzkompetenz bei Kindern und Jugendlichen“ und das Erasmus-Projekt „Consumer Citizenship Network“.

**Prof. Dr. Kirsten Schlegel-Matthies** ist Professorin für Haushaltswissenschaft an der Universität Paderborn. Sie studierte Geschichte und Germanistik an der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster und promovierte dort in Wirtschafts- und Sozialgeschichte. 1998 habilitierte sie in Münster im Fach Haushaltswissenschaft. Von 1984 bis 2000 war sie als wissenschaftliche Mitarbeiterin, Assistentin und Oberassistentin an der Universität Münster tätig. Von 2000 bis 2002 hatte sie die Professurvertretung für Haushaltswissenschaft und Didaktik der Haushaltslehre an der Universität Dortmund inne. Sie ist Präsidentin für Europa der International Federation for Home Economics (IFHE) und Mitglied im wissenschaftlichen Beirat folgender Projekte:

- OPUS-Netzwerk NRW
- „Vermeidung von Überschuldung – Netzwerk Schuldenprävention“ (Projekt des BMFSFJ und SKM Deutschland)
- „Zertifikatskurs Neue Hauswirtschaft“ des Verbraucherzentrale Bundesverbands e.V. (vzbv)
- „OSSENA“, BMBF-Förderschwerpunkt „Sozialökologische Forschung“.

evb.upb.de

DEPARTMENT SPORT & GESUNDHEIT  
ERNÄHRUNG & VERBRAUCHERBILDUNG  
57

## Bildungsziele

Die Schüler/innen

- gestalten die eigene Essbiografie reflektiert und selbstbestimmt
- gestalten Ernährung gesundheitsförderlich
- handeln sicher in Kultur und Technik der Nahrungszubereitung und Mahlzeitengestaltung
- entwickeln ein positives Selbstbild durch Essen und Ernährung
- entwickeln ein persönliches Ressourcenmanagement und sind in der Lage, Verantwortung für sich und andere zu übernehmen
- treffen Konsumentscheidungen reflektiert und selbstbestimmt
- gestalten die eigene Konsumentenrolle reflektiert in rechtlichen Zusammenhängen
- treffen Konsumentscheidungen qualitätsorientiert
- entwickeln einen nachhaltigen Lebensstil

Was esse ich? Wie esse ich? Wozu esse ich? Was schmeckt mir? Warum esse ich so? Was sollte ich essen? Was sollte ich essen? Warum und mit welchem Ziel?

Was bedeutet Essen für meinen Körper, meine Gefühle und mein Wohlbefinden? Wie gehe ich mit meinem Körper um?

Welche Gesundheitsrisiken des Umgangs mit Nahrungsmitteln sollte ich kennen und können? Wie kann ich geschmackvoll zubereiten, anrichten, essen und genießen?

Was brauche ich? Was wünsche ich? Warum kaufe ich? Wie kaufe ich? Was kaufe ich?

Wie ist das Angebot an Waren und Dienstleistungen? Wie beurteile ich ihre Qualität? Welche und wie viel Arbeit steckt in einem Produkt? Was muss ich wissen über Herstellung, Verarbeitung, Verpackung?

Was muss ich über Versicherungen wissen? Wie nutze ich sie? Was brauche ich als soziale Sicherung heute und morgen? Wozu brauche ich sie?

Was muss bei der Entsorgung beachtet werden? Was muss ich darüber wissen und warum? Welchen Nutzen hat das für mich und andere? Wie kann ich mich umweltbewusst verhalten?

Was muss ich über Essen, Ernährung und Gesundheit wissen? Was muss ich können, um mein Wissen über Essen, Ernährung und Gesundheit im Alltag zu nutzen?

Welche Sinne nutze ich beim Essen und Trinken? Welche Sinne sind dafür wichtig?

Wie verbindet mich Essen mit anderen? Wodurch trennt mich Essen von anderen?

Wie kann ich eine Tischgemeinschaft gestalten? Wie kann ich mit dem Essen für mich und Andere sorgen?

Wie funktioniert Werbung? Was macht Werbung mit mir?

Wie gehe ich mit Angebotsvielfalt und Informationsflut um? Wie und wo bekomme ich hilfreiche Informationen?

Wie wird sich das, was ich verbrauche, was ich kaufe, auf mich, andere und die Umwelt aus?

Wie gehe ich mit Geld um? Wie bekomme ich Geld? Wofür bekomme ich Geld? Was muss ich über den Umgang mit Geld für heute und morgen wissen?

©REVIS

Ernährungs- und Verbraucherbildung  
Das Leben kompetent gestalten

### Beobachtung zum SchmeXperiment Nr. 4 „Butterherstellung“

Zeit	Wie schmeckt es	Wie fühlt es sich an	Wie sieht es aus
1 Min.			

#### Anleitung zum SchmeXperiment Nr. 5 „Ei und Ei“

Vorbereitung

Füllt das große Becherglas zur Hälfte mit Wasser.

Du brauchst:

- 1 „Essig“
- 1 normale Ei
- 1 normale Ei

### Sammel-Mappe für SchmeXpertinnen und SchmeXperten

Vorname Name \_\_\_\_\_

Schmecken -  
experimentieren -  
Bescheid wissen

Universität Paderborn  
Fachgruppe Ernährung und ...

**Aufg**

**Schau**

**Beschr**

**Aufgab**

1. Legt d

Becherr

2. Stellt d

Kochplatt

3. Beobacht

**Aufgabe 3**

Haushaltswissenschaft  
im Dialog

Arbeitsmaterial für die Schule

Haushaltswissenschaft im Dialog

# Analytik und Diagnostik

**Prof. Dr. med. Michael Weiß**

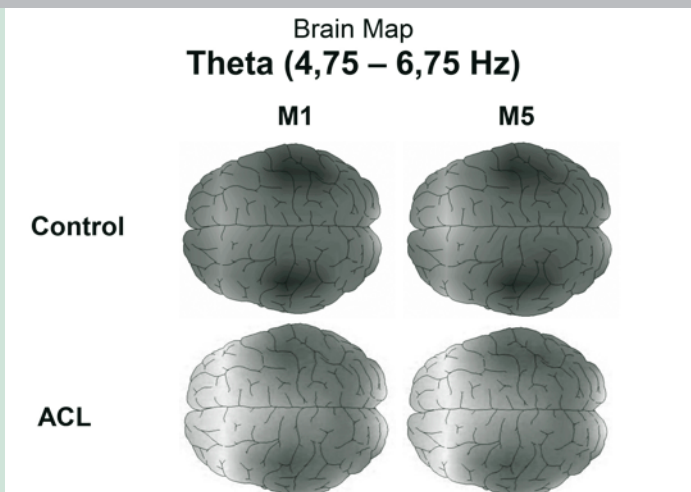
„Vom Gehirn zur Bewegungsausführung, funktionelle Nahrungsmittel, Training und Radikal-Chemie-Gemeinsamkeiten?“

Sauerstoff ist ein Leistungsfaktor, er kann aber auch durch oxidativen Stress zum Gesundheitsschädling werden. Sauerstoff und andere Verbindungen (ROS) mit ungepaarten Elektronen dienen teilweise als schnelle und kurz wirksame Regulatoren und Signalstoffe auf zellulärer Ebene. Sie können aber auch Zellmembrane, Struktur- und Funktions-Proteine oder das Erbgut schädigen, wenn ein Missverhältnis zwischen anfallender Radikal-Menge und der Kapazität des Radikalfänger-Systems (antioxidatives System) entsteht. Der Muskelstoffwechsel verbraucht nicht nur Sauerstoff, Zucker und Fett. Er setzt auch Aminosäuren um und produziert dabei für die Körperabwehr nötige Substanzen. In der Unterstützung dieser beiden Systeme bei regelmäßiger und systematisch geplanter Aktivität (=Trai-

ning) besteht ein wesentlicher Mechanismus der präventiven Wirkung von regelmäßigem Sport, der Gegenstand mehrerer Studien war. Zudem werden typische Auswirkungen von Belastung, Ermüdung und Erholung auf die elektrische Aktivität des Gehirns (EEG) untersucht. Es wurde ein Messplatz zur Untersuchung der Bewegungsregulation aufgebaut, womit jetzt neben EEG auch die elektrische Aktivierung ausgewählter Muskelgruppen (EMG) synchron erfassbar ist. Der Forschungsansatz bezieht sich einerseits auf den Einfluss von Ermüdung auf die Bewegungsregulation. Andererseits konnten Auswirkungen von Veränderungen im Bereich der Sinnesorgane der Bewegungskontrolle (Propriozeption) am Modell einer Kreuzbandverletzung gezeigt werden.

**Prof. Dr. Michael Weiß**

geb. 27.05.1947 in Marbach/N., Ausbildung zum Arzt für Innere Medizin und Sportmedizin an verschiedenen Krankenhäusern und zuletzt am Universitätsklinikum Heidelberg an der Abteilung für Pathophysiologie und Sportmedizin (Prof. Weicker). 1981 bis 1992 Oberarzt in der sportmedizinischen Ambulanz der medizinischen Universitäts-Poliklinik Heidelberg u.a. verantwortlich für die Leistungssportler im Spitzen- und Nachwuchsbereich, beteiligt am Aufbau des Olympiastützpunktes Rhein-Neckar und dann dort für die internistische Betreuung und die Leistungsdiagnostik zuständig. 1989 Habilitation mit Untersuchungen zur hormonellen Regulation bei Belastungen an Land und im Wasser. Als Mitglied im Ärzte-Team des Deutschen Schwimmverbandes bis 1992 beteiligt an der komplexen Leistungsdiagnostik und der medizinischen Betreuung der Nationalmannschaften. Seit 1992 Professor für Sportmedizin an der Universität Paderborn.



Kortikale Aktivierung während einer sensomotorischen Aufgabe im Theta-Frequenzband



Untersuchungsaufbau EEG



# Prävention und Leistung

## Prof. Dr. med. Heinz Liesen „Konzeptionen, Golf und Fußball“

„Training der Sinne“ ist zentraler Begriff der verschiedenen Forschungsansätze, die sich in Deutschlands einzigem Forschungszentrum für Golf entwickelt haben. Funktionelle Anatomie wie physiologische Bedingungen in der koordinativ hoch anspruchsvollen Sportart Golf und zugleich Sportler im höheren Lebensalter bieten eine breite Basis zur Implementierung von präventiven wie auch rehabilitativen Aspekten für den Gesundheitsmarkt. Die Nutzung körpereigener Signale als Grundlage für die Steuerung und Optimierung gesundheitsorientierter Trainingsformen fördert die Kreativität, Stabilisation sowie das Herzkreislaufsystem. Komplexe neurophysiologische Parameter in spezifischen Be- und Entlastungssituationen werden in einer eigenständigen Arbeitsgruppe untersucht.

Ein weiteres Handlungsfeld des Teams um Prof. Liesen ist die Auseinandersetzung mit dem Einfluss von Bewegung, Spiel und Sport auf die integrativen und entwicklungsfördernden Leistungen des Gehirns. Am Beispiel Fußball werden koordinative, variable Beanspruchungsformen analysiert und diagnostische Verfahren entwickelt. In der überregionalen Evaluation bei zahlreichen Leistungszentren der Bundesliga werden diese Entwicklungen auf Praxistauglichkeit geprüft. Unter [www.fskt.info](http://www.fskt.info) stehen diese Testverfahren bereits den Nachwuchstrainern zur Verfügung. Um konzeptionelle Innovationen voranzutreiben, leistet die in Paderborn gegründete und ansässige Stiftung Jugendfußball wertvolle finanzielle Förderung und Unterstützung zur gezielten Anwendung in der Praxis.

### Prof. Dr. Heinz-P. Liesen

geb. 22.03.41 in Kvelaer/Ndrh. Ausbildung zum Facharzt für Innere Medizin. Habilitation im Fach Sportmedizin. Er war wiss. Ang., Assistent, Oberarzt, wiss. Rat und Professor an der Deutschen Sporthochschule. Seit 1987 leitete er den Lehrstuhl für Sportmedizin an der Universität Paderborn. 1980-1989 Mitglied der Medizinischen Kommission des IOC. Mannschafts- und Verbandsarzt des Dt. Hockeybundes, des Dt. Fußballbundes und der Nordischen Kombination. Außerdem verantwortlich für die sportmedizinische Ausbildung der Fußballlehrer an der Trainerakademie Köln. Er ist Gründer der International Society of Exercise and Immunology, des Lehr- und Forschungszentrums für Golf (Golfakademie), des Vereins zur Förderung des sportwissenschaftlichen Nachwuchses und der Stiftung Jugendfußball. Als Berater im Leistungssport praktiziert er den Transfer von wiss. Erkenntnissen. In der neuen Fakultät war er Prodekan, geschäftsführender Direktor des Department Sport & Gesundheit und Leiter des Sportmedizinischen Instituts. Im März 2006 wurde er emeritiert.

[www.dsg.upb.de](http://www.dsg.upb.de)

DEPARTMENT SPORT & GESUNDHEIT  
SPORTMEDIZIN

59



Das Präsidium der Stiftung Jugendfußball bis Dez. 2006 (v.l.: A. Köpke, J. Klinsmann, D. Fitschen, J. Löw, P.-P. Klotz, H. Liesen)



Stabilisationstraining im Golf

# Sport und Erziehung

**Prof. Dr. Wolf-Dietrich Brettschneider**  
 „Empirische Sportpädagogik“

Sportliche Aktivität spielt im Leben von Kindern und Jugendlichen eine wichtige Rolle. Welche Zusammenhänge bestehen aber zwischen sportlicher Aktivität und der Entwicklung von Kindern und Jugendlichen? In welchem Maße gehen vom Sportengagement Wirkungen auf die körperliche, kognitive und psychosoziale Dimension der Entwicklung aus? Dies sind spannende, politisch wichtige und wissenschaftlich noch ungeklärte Fragen. Unsere Forschung konzentriert sich deshalb auf die verschiedenen Felder des Sports und fragt nach ihrer Wirkung auf die Entwicklung junger Menschen. So zielt etwa eine Frage darauf ab, wie jugendliche Hochleistungssportler die enormen Belastungen bewältigen, die sich aus den Anforderungen des Trainings, Wettkampfes und der schulischen oder beruflichen Ausbil-

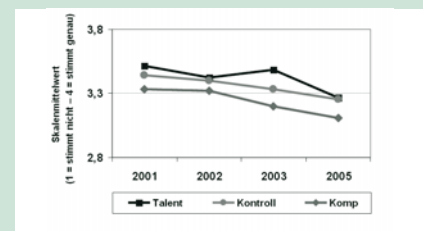
dung ergeben. Weitere Fragestellungen zielen auf die Zusammenhänge von sportlichem Engagement in der Schule oder im Verein und der Persönlichkeitsentwicklung im Kindes- und Jugendalter. Beispielhafte Fragestellungen sind: Welchen Einfluss hat sportliche Aktivität auf die Gewaltbereitschaft junger Menschen? Kann sie den Aufbau sozialer Beziehungen unterstützen oder gehen von ihr gar positive Impulse für die kognitive Entwicklung aus? Neben der Analyse gesellschaftlich relevanter Probleme gilt unsere Aufmerksamkeit auch der Frage nach Lösungsmöglichkeiten. Daher bildet die Entwicklung von Interventionsstrategien und Konzepten für das Qualitätsmanagement im Kinder- und Jugendsport einen Bestandteil unserer wissenschaftlichen Arbeit.

**Prof. Dr. Wolf-Dietrich Brettschneider** ist Professor für Sportwissenschaft im Department Sport & Gesundheit der Universität Paderborn. Zuvor hatte er Professuren an der Deutschen Sporthochschule Köln, der Universität Hamburg und der Freien Universität Berlin inne. Wolf-Dietrich Brettschneider war und ist in verschiedenen Funktionen für das Bundesinstitut für Sportwissenschaft (BISP), den Deutschen Sportbund (DSB) und die DFG tätig, u.a. als Direktoriumsmitglied (BISP), als Vorsitzender der Bildungskommission (DSB) und als Fachgutachter (DFG). Zudem ist er in Herausgebergremien in einer Reihe von nationalen und internationalen Buchreihen und Fachzeitschriften. Daneben ist er in verschiedenen internationalen Institutionen der Sportwissenschaft engagiert.

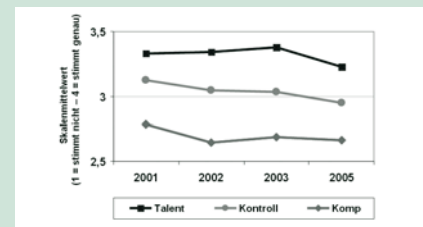


Das Team des Arbeitsbereiches Sport und Erziehung: (v.l.) Erin Gerlach, Verena Freytag, Sandra Branekemper, Uli Kussin, Sonja Saage, Christine Thiele, Dr. Christiane Richter, Miriam Kehne, Carolin Köster, Doreen Reymann, Andrea Bünemann, Eva Natus, Prof. Dr. Wolf-Dietrich Brettschneider (es fehlt: Meike Zöpnek)

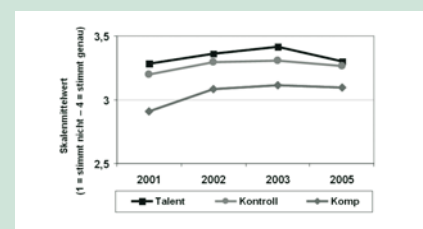
Dimensionen des Selbstkonzeptes im Vergleich talentierter Jugendlicher, einer Kontrollgruppe und einer Gruppe mit motorischen Defiziten (Kompensationsportgruppe)



Selbstwertgefühl



Sportbezogenes Selbstkonzept



Soziales Selbstkonzept

# Bewegungs- und Trainingswissenschaft

**Prof. Dr. Norbert Olivier**

„Motorische Kontrolle, motorisches Lernen und Koordinationstraining“

Der Arbeitsbereich Bewegungs- und Trainingswissenschaft bearbeitet Fragestellungen zur motorischen Kontrolle, zum motorischen Lernen und Koordinationstraining. Hierzu werden labor- und feldexperimentelle Untersuchungen durchgeführt. Diese Arbeiten sollen dazu beitragen, die menschliche Motorik und das motorische Lernen besser zu verstehen und die Methoden des Koordinationstrainings zu optimieren. Praktische Bedeutung erlangen die Forschungsarbeiten im Leistungs- und Breitensport, im Berichtszeitraum verstärkt auch in der klinischen Rehabilitation. Im Fokus stehen aktuell das sportmotorische Bildschirmtraining (Leistungs- und Breitensport), die motorische Kontrolle unter hohen neuromuskulären Beanspruchungen (Leistungs- und Breitensport), das Erlernen von Teil-

belastungen beim Gehen mit Unterarmstützen (orthopädisch-traumatologische Rehabilitation) und das Stabilisationstraining zur Prävention von Sprunggelenkverletzungen (Leistungs- und Breitensport, Rehabilitation).

Als weiterer Schwerpunkt werden in Zusammenarbeit mit anderen deutschen und ausländischen Sportwissenschaftlern Lehrbücher und Online-Kurse für das sportwissenschaftliche Grundstudium produziert.

**Prof. Dr. Norbert Olivier**

ist seit Oktober 2000 für den Arbeitsbereich „Bewegungs- und Trainingswissenschaft“ in der Sportwissenschaft verantwortlich. Vorher hatte er eine Professur für „Bewegungs- und Trainingswissenschaft“ an der Universität Augsburg inne. Er promovierte 1987 an der Freien Universität Berlin und habilitierte 1994 als DFG-Habilitationsstipendiat an der Universität des Saarlandes. Die Habilitationsschrift „Konditionelle Belastungen und Techniktraining“ wurde im Rahmen des Carl-Diem-Preises ausgezeichnet. Seine Arbeitsschwerpunkte sind das motorische Lernen und das Koordinationstraining. Prof. Dr. Norbert Olivier ist DFG-Sondergutachter für die Sportwissenschaft im Bereich Sportmotorik.

[www.dsg.upb.de](http://www.dsg.upb.de)

DEPARTMENT SPORT & GESUNDHEIT  
SPORTWISSENSCHAFT

61



Teilbelastungstraining auf einer Kraftmessplattform



Versuchsaufbau zur experimentellen Untersuchung beanspruchungsbedingter Veränderungen der motorischen Kontrolle

Verschiedene Darstellungsperspektiven beim sportmotorischen Bildschirmtraining



# Sport und Gesellschaft

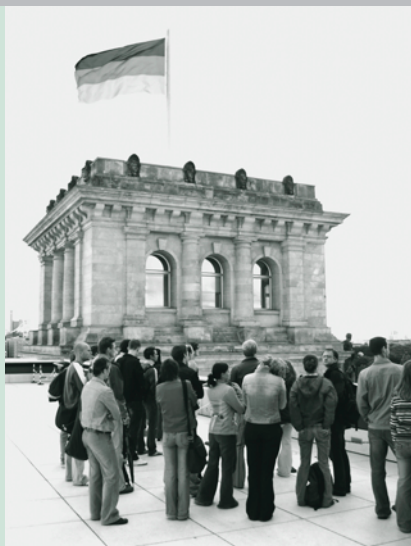
**Prof. Dr. Dr. Sebastian Braun**

**„Soziales Handeln und soziale Strukturen im Sport“**

Im Arbeitsbereich Sport und Gesellschaft wird der Sport in seiner historischen, kulturellen, politischen und sozialen „Verfassung“ analysiert. Dabei kristallisiert sich ein zentraler Arbeitsschwerpunkt heraus, der sich als interdisziplinäre und interkulturelle Forschung über den Zusammenhang von Sport und Gesellschaft bezeichnen lässt. Dieser Schwerpunkt umfasst sowohl theoretische Analysen als auch empirische Untersuchungen. Dabei werden sportwissenschaftliche Themen in die allgemeine sozialwissenschaftliche Debatte vermittelt und sozialwissenschaftliche Problemstellungen und Forschungsmethoden für die Sportwissenschaft fruchtbar gemacht. Vor diesem Hintergrund werden folgende Themenschwerpunkte bearbeitet: soziale und politische Integrationsleistungen von

Vereinen, gesellschaftliches Engagement von Unternehmen, Integration von Menschen mit Migrationsgeschichte, sozialer Wandel im Sport, gesellschaftliche Funktionen des Sports, Sport für Menschen mit Behinderung und Integrationssport. Im Sinne einer engen Verzahnung von Forschung und Lehre werden diese Themenbereiche u.a. praxisnah für die Arbeit mit Studierenden aufbereitet und berufsorientiert vermittelt. Neben der Analyse gesellschaftlich relevanter Probleme gilt die Aufmerksamkeit auch der Frage nach praxisnahen Umsetzungs- und Lösungsmöglichkeiten. Es bildet die Politikberatung einen festen Bestandteil der wissenschaftlichen Arbeit.

**Prof. Dr. Dr. Sebastian Braun** ist seit 2003 Professor an der Universität Paderborn. Er ist Geschäftsführender Direktor des Departments Sport & Gesundheit, Leiter des Arbeitsbereichs Sport und Gesellschaft und Direktor des Forschungszentrums für Bürgergesellschaftliches Engagement. Braun habilitierte sich in den Fächern Sportwissenschaft und Politische Soziologie (Universität Potsdam). Er ist Doktor der Philosophie (FU Berlin) und Doktor der Soziologie (Universität Nantes), besitzt Diplome in Politikwissenschaft (FU) und in Sozialwissenschaften (Nantes) und hat einen Magister Artium in Sport- und Erziehungswissenschaft (FU) erworben. Im Jahr 2001 wurde er mit dem Wissenschaftspreis „Otto Wolff von Amerongen“ des Club of Cologne ausgezeichnet. Er ist Mitglied in verschiedenen Beiräten und Forschungsgruppen auf nationaler und internationaler Ebene.



Sportgeschichte hautnah: Exkursion nach Berlin



Das Team des Arbeitsbereichs Sport und Gesellschaft:  
(v.l.) Sebastian Finke, Carina Böttcher, Marcel Pillath, Marco Rühmann,  
Prof. Dr. Dr. Sebastian Braun, Annette Schubert, Marc Kukuk, Stefan Hansen

# Festveranstaltung der Fakultät für Naturwissenschaften – Verleihung der Abschlussurkunden

Fast schon Tradition an der jungen Fakultät für Naturwissenschaften ist die Fakultätsfeier, mit der jeweils zum Ende des Studienjahres der Erwerb der Hochschulabschlüsse und die Erzielung ausgezeichneten Leistungen von Wissenschaftlern in einem angemessenen Rahmen gewürdigt werden.

Im Mittelpunkt stehen die Absolventinnen und Absolventen des vorangegangenen Studienjahrs, denen im Beisein von Familienangehörigen, Verwandten und Freunden von den Sprechern der Departmentsvorstände ihre Abschlussurkunden übergeben werden. Der Rahmen wird neben der musikalischen Begleitung ("Achill Sound" in 2005 bzw. "Arte Musica" in 2006) insbesondere durch einen Festvortrag, der jeweils ein Thema der Fakultät in besonderer Weise aufgreift und beleuchtet, gebildet.

Auf der Fakultätsfeier 2005 trug Prof. mult. Dr. med. Dr. h. c. Wildor Hollmann von der Deutschen Sporthochschule Köln neueste Forschungsergebnisse zum Thema "Gehirn, Geist und körperliche Aktivität" vor. Insbesondere Studierende, die gern die Nacht zum Tag machen, sollten ihre Lernmethodik überdenken, so sein Fazit. "Am effektivsten ist es, abends zu lernen und anschließend die ganze Nacht zu schlafen", sagte Hollmann. Doch auch Sportler und Pianisten hätten tendenziell gute Karten, wenn es um die Leistung des Gehirns geht. "Nichtstatische körperliche Betätigung erhöht die Hirnaktivität". Diese Erkenntnis sei auch für die ältere Generation von hoher Bedeutung. Dabei reiche ein täglicher Spaziergang bereits aus, um das Gehirn auf Trab zu halten.

Auf der Fakultätsfeier 2006 beantwortete Prof. Dr. Andreas Hahn, Leiter der Abteilung Ernährungsphysiologie und

Humanernährung am Institut für Lebensmittelwissenschaft der Universität Hannover, die Frage "Steinzeiternährung - Stein der Weisheit oder Stein des Anstoßes?". Sein Fazit: viel Lärm um nichts, denn die "paleo diet" (Steinzeitdiät), bestand aus nährstoffreichen, relativ energiearmen Lebensmitteln (Gemüse, Obst, Fleisch, mageres Fleisch, Fisch und Meeresfrüchten), im Prinzip also das, was heutige Ernährungswissenschaftler auch empfehlen.

Zusammen mit dem abschließenden Empfang im Foyer des Audimax entwickelt sich die Fakultätsfeier nicht zuletzt auch zu einem Treffpunkt für ehemalige Kommilitoninnen und Kommilitonen sowie Angehörige der Fakultät für Naturwissenschaften.



Rektor, Kanzler und Fakultätsleitung freuen sich gemeinsam mit dem Festredner Prof. mult. Dr. med. Dr. h.c. Wildor Hollmann (3. von links) über die erfolgreichen Absolventen (Fakultätsfeier 2005)



Erfolgreicher Abschluss – Der Absolventenjahrgang des Studienjahrs 2005/2006 (Fakultätsfeier 2006)



Prof. Dr. Andreas Hahn, Leiter der Abteilung Ernährungsphysiologie und Humanernährung am Institut für Lebensmittelwissenschaft der Universität Hannover (Fakultätsfeier 2006)



Auflockerung vor der Urkundenübergabe – Bewegungstechnische Studie zum Thema „Kontakt“ von Christiane Lerch und Linda Seidensticker (Fakultätsfeier 2006)

# Anhang



# Preisverleihungen, Auszeichnungen, Ehrungen

## Vergabe von Graduiertenstipendien an erfolgreiche Nachwuchswissenschaftler

Elisabeth von Rhein (Department Physik): Linkshändige Materialien für Mikro- und Terahertzwellen (Prof. Dr. Siegmund Greulich-Weber, 2005)

Karin Schmalfeld (Department Sport und Gesundheit): Inter- und intramuskuläre Kompensationseffekte bei hohen neuromuskulären Beanspruchungen der Ellenbogenbeuger (Prof. Dr. Norbert Olivier, 2006)

Dipl.-Chem. Adam Neuba (Department Chemie): Polyfunktionelle Guanidin-Liganden - ein biomimetischer Ansatz zur Entwicklung funktionaler Mangankomplexe (Prof. Dr. Gerald Henkel, 2006)

Elena Tschumak (Department Physik): Elektronische Bauelemente basierend auf kubischen Gruppe III-Nitriden (Betreuer: Prof. Dr. Donat J. As, 2006)

## Preis des Rektorats für hervorragende Dissertationen

Dr. Sonja Herres-Pawlis (Department Chemie): Oxygen activation and transfer mediated by copper(I) complexes with polyfunctional bisguanidine ligands (Prof. Dr. Gerald Henkel, 2006)

Dr. Dietmar Gehele (Department Chemie): Umsetzung von Eerný-Epoxiden mit Gilman-Cupraten. Neue chirale Bausteine für Naturstoffe polyketiden Ursprungs (Prof. Dr. Karsten Krohn, 2006)

## Forschungspreis der Universität Paderborn

PD Dr. Stefan Schweizer (Department Physik): Neue Anwendungen von Glaskeramiken in der Optoelektronik – Upconversion in Transparenten Zirkonfluorid-Glaskeramiken, (2005)

Prof. Dr. Donat J. As (Department Physik) zusammen mit Prof. Dr. Uwe Hillebrand (Fakultät EIM): Feldeffekt-Transistoren aus kubischen Gruppe III-Nitriden - Basis für künftige drahtlose Datenübertragung, (2006)

## Preis der Paderborner Sportwissenschaft

Oliver Grote (Department Sport & Gesundheit): Entwicklung einer multimedialen Plattform für eine therapeutische Trainingsdiagnostik zur Verbesserung motorischer Defizite durch golfspezifisches Training, (2005).

Marc Kukuk (Department Sport & Gesundheit): Idealtypus und Wirksamkeit freiwilliger Vereinigungen. Sportvereine im organisationsstrukturellen Vergleich mit freiwilligen Vereinigungen aus außersportlichen Kontexten, (2005).

Eva Natus (Department Sport & Gesundheit): Schüler im Sportunterricht – Analyse relevanter Themen des Sportunterrichts aus Schülersicht, (2006).

André Erlmann, Timo Hölzchen, Daniel Krause, Garvin Krug, Melanie Mull & Martin Wünnemann, alle Department Sport & Gesundheit: Kontext-Interferenz-Effekte beim Teilbelastungstraining mit Unterarmgehstützen, (2006).

## Mankiewicz Förderpreis 2005

Dipl.-Chem. Ing. Annika Lux (Department Chemie) für herausragende Abschlussarbeiten im Bereich Chemie und Technologie der Beschichtungsstoffe, Verleihende Institution: Fa. Mankiewicz, Hamburg

## Deutscher Präventionspreis 2005 (2. Platz)

Prof. Dr. Helmut Hesecker und Prof. Dr. Michael Weiß (Department Sport und Gesundheit) für das Projekt: PATRAS - ein Programm zur Verbesserung der Ernährung und Mobilität im Alter und im hohen Alter (Durchführung in Kooperation mit dem Diözesan-Caritasverband für das Erzbistum Paderborn). Verleihende Institutionen: Bundesministerium für Gesundheit (BMG), Bundeszentrale für gesundheitliche Aufklärung (BZgA), Bertelsmann Stiftung (Preisthema 2005: Gesund in der zweiten Hälfte (50plus))

## Ehrendoktorwürde der Universität von Zaragoza

Prof. Dr. Johann-Martin Spaeth (Department Physik): Auszeichnung für heraus-

ragende wissenschaftliche Arbeit und vierzehnjährige Tätigkeit als Koordinator des Studentenaustausches im Rahmen des Erasmusprogramms zwischen der Universität von Zaragoza und der Universität Paderborn (25. Januar 2005)

## Otto-Lehmann-Preis 2005

Dr. rer. nat. Stephan Benning (Department Chemie): Lumineszenz mesogener Halbleiter (Dissertation, Betreuer: Prof. Dr. Heinz S. Kitzerow)

## Otto-Lehmann-Preis 2006

Dr. Lutz Paelke (Department Chemie): Der Photorefraktive Effekt an Polymer-eingebetteten Flüssigkristallen (Dissertation, Betreuer: Prof. Dr. Heinz S. Kitzerow)

## Ungarischer Humboldt-Preis 2006

Prof. Dr. Karsten Krohn (Department Chemie) für seine hervorragenden Leistungen auf dem Gebiet der ungarisch-deutschen Beziehungen auf kultureller, wissenschaftlicher und zwischenmenschlicher Ebene.

# Personalia – Professuren

## Angenommene Rufe

**Prof. Dr. Jörg Neugebauer**, Physik  
zum Max-Planck-Institut für Eisenfor-  
schung, Düsseldorf (November 2004)

**HD Dr. Dieter Bothe**, Chemie  
auf Lehrstuhl Mathematik, RWTH  
Aachen (November 2005)

**Juniorprofessor Dr. Marcus Elstner**, Phy-  
sik  
an die TU Braunschweig (April 2006)

**Prof. Dr. Thomas Frauenheim**, Physik  
an die Universität Bremen (April 2006)

**Prof. Dr. Ralf Wehrspohn**, Physik  
an die Universität Halle-Wittenberg (Juli  
2006)

## Eintritt in den Ruhestand

**Prof. Dr. Bernhard Lendermann**, Chemie  
(Juli 2005)

**Prof. Dr. Heinz Liesen**, Sport  
(März 2006)

## Verstorben

**Prof. Dr. Harald Overhof**, Physik  
(Oktober 2005)

## Ernennungen

**Prof. Dr. Wolf Gero Schmidt**, Physik  
(Januar 2006)

**Prof. Dr. Margit Zacharias**, Physik  
(Oktober 2006)

**Prof. Dr. Guido Grundmeier**, Chemie  
(Dezember 2006)

## Anstehende Ernennungen

**Prof. Dr. Thorsten Meier**, Physik

# Personalia – Promotionen

## Promotionen im Department Chemie

2005:

**Laleh Alisaraie**  
Improvement of a Molecular Docking  
Approach and its Applications Using  
QXP+ (Prof. Dr. Gregor Fels)

**Mahmoud Bataineh**  
Separation and determination of selec-  
ted organic pharmaceuticals in waters  
by means of natural flat membranes,  
GC, HPLC and mass spectrometry (Prof.  
Dr. Manfred Grote)

**Jan Diederichs**  
Synthese von chinoiden Naturstoffen.  
Ein neuer Weg zum 2`-Desalkyl-Mumbai-  
statin (Prof. Dr. Karsten Krohn)

**Brigitta Elsässer**  
Investigation on Structure-Bioactivity

Relationship and Determination of the  
Absolute Configuration of Natural Pro-  
ducts (Prof. Dr. Karsten Krohn)

**Dietmar Gehle**  
Umsetzung von Eerný-Epoxiden mit Gil-  
man-Cupraten. Neue chirale Bausteine  
für Naturstoffe polyketiden Ursprungs  
(Prof. Dr. Karsten Krohn)

**Thorsten Grebe**  
Simulation und Modellierung des Misch-  
verhaltens von Taylor-Couette-Reaktoren  
(Prof. Dr. Hans-Joachim Warnecke)

**Jens Hasenjäger**  
Chirale Phosphorliganden in der homo-  
genen, rhodiumkatalysierten, asymme-  
trischen Hydrierung (Prof. Dr. Bernhard  
Westermann, Prof. Dr. Birgit Drießen-  
Hölscher t)

**Sonja Herres-Pawlis**  
Oxygen activation and transfer media-  
ted by copper(I) complexes with poly-  
functional bisguanidine ligands (Prof.  
Dr. Gerald Henkel)

**Andreas Jens Heuwing**  
Synthese und Charakterisierung von  
Übergangsmetallkomplexen mit poly-  
funktionellen N,S-Chelatliganden (Prof.  
Dr. Gerald Henkel)

**Andreas Hoischen**  
Untersuchungen an photo-reaktiven  
Flüssigkristallsystemen (Prof. Dr. Heinz-  
S.Kitzerow)

**Ines Kock**  
Isolierung und Strukturaufklärung von  
Sekundärmetaboliten aus endophyti-  
schen Pilzen und Versuche zur Synthese  
des Pseudoanguillosporins A (Prof. Dr.  
Karsten Krohn)

**Thomas Kramer**  
Untersuchungen an Kolloid-Polymer-  
Gemischen im Protein- und Kolloid-Limit  
(Prof. Dr. Klaus Huber)

**Bedia Kurtulus**  
Anreicherung und Bestimmung von Arz-  
neistoffspuren in Wässern mit Flüssig-  
membransystemen und HPLC-MS (Prof.  
Dr. Manfred Grote)

**Nils Leßmann**

Numerical and Experimental Investigation of the Disintegration of Polymer Melts in an Ultrasonic Standing Wave Atomizer (Prof. Dr. Hans-Joachim Warnecke)

**Lars Müller**

Zur homogen katalysierten, stereoselektiven Hydrierung von Sacchariden (Prof. Dr. Bernhard Westermann, Prof. Dr. Birgit Drießen-Hölscher †)

**Md. Hossain Sohrab**

Isolation and Structure Elucidation of Secondary Metabolites from Endophytic Fungi and the Plant *Prismatomeris tetrandra* and Synthesis of (+)-Ochromycinone (Prof. Dr. Karsten Krohn)

**Khanra Sumit**

Designed Synthesis of Exchange-Coupled Oximate-Based Polynuclear Complexes (Prof. Dr. Phalguni Chaudhuri)

**Andrea Vockel**

Bestimmung von Chlortetracyclinrückständen in biologischen Proben aus der landwirtschaftlichen Tierhaltung mit HPLC-UV-MS/MS – Methodenentwicklung und Anwendung in Medikationsstudien (Prof. Dr. Manfred Grote)

2006:

**Sinan Basceken**

Die Herstellung und Untersuchung des präparativen Potentials neuer chiraler Biaryl-Übergangsmetallkatalysatoren (PD Dr. Karamali Khanbabaee)

**Markus Borges**

Synthese und Charakterisierung von Ionenaustauschharzen zur Abtrennung von Arsen und Selen aus Wässern (Prof. Dr. Manfred Grote)

**Bernd Hammann**

Eisen-<sup>tert</sup> Butanchalkogenolat-Komplexe Synthese, strukturelle und spektrosko-

pische Untersuchungen (Prof. Dr. Gerald Henkel)

**Christian Hartmann**

Untersuchungen zur komplexchemischen Modellierung der aktiven Zentren der Nitrogenase (Prof. Dr. Gerald Henkel)

**Jens Hasenjäger**

Chirale Phosphorliganden in der homogenen, rhodiumkatalysierten, asymmetrischen Hydrierung (Prof. Dr. Bernhard Westermann)

**Swarnalatha Kokatam**

The Coordination Chemistry of Redox Noninnocent o-Aminophenol and Dithiolene Ligands with Transition Metal Ions (Prof. Dr. Phalguni Chaudhuri)

**Jens Krüger**

Struktur und Funktion Acetylcholin bindender Proteine (Prof. Dr. Gregor Fels)

**László István Majoros**

Separation and recycling of phosphane ligands from homogeneously catalyzed processes (Prof. Dr. Nikolaus Risch)

**Chandan Mukherjee**

Transition Metal-Radical Complexes and Their Catalytic Reactivity (Prof. Dr. Phalguni Chaudhuri)

**Andreas Müller**

Kognitive Zustandsanalysen von Kindern nach chemischen Verstehensprozessen in außerschulischen Handlungssituationen (Prof. Dr. Hans-Jürgen Becker)

**Lars Müller**

Zur homogen katalysierten, stereoselektiven Hydrierung von Sacchariden (Prof. Dr. Bernhard Westermann)

**Lutz Paelke**

Der photorefraktive Effekt an polymer-eingebetteten Flüssigkristallen (Prof. Dr. Heinz-S. Kitzerow)

**Raul Roman Hernandez**

Eliminierung von Organozinnverbindungen aus Industrieabwasser im Labor-

und Technikumsmaßstab (Prof. Dr. Hans-Joachim Warnecke)

**Ivan Shuklov**

Synthese der 4-Deoxy-D-lyxo-hexose-Derivate und Untersuchung zur Synthese des Makrolid-Antibiotikums "LL-Z 1640-2" (Prof. Dr. Karsten Krohn)

**Sultan Sönmez, geb. Altun**

Untersuchungen zur Biomimetischen Synthese von Palmarumycinen (Prof. Dr. Karsten Krohn)

**Carsten Stemich**

Theoretische und numerische Untersuchung des Strömungsmischens in einem T-förmigen Mikromischer (Prof. Dr. Hans-Joachim Warnecke)

**Thomas Witte**

Untersuchungen zur Aggregation mesoskopischer Systeme mittels zeitaufgelöster statischer Lichtstreuung (Prof. Dr. Klaus Huber)

**Promotionen im Department Physik**

2005:

**Liverios Lymperakis**

Ab-Initio based multiscale calculations of extended defects in and on group III-nitrides (Prof. Dr. Thomas Frauenheim)

**Li Shunfeng**

Growth and Characterization of cubic InGaN and InGaN/GaN Quantum Wells (Prof. Dr. Klaus Lischka)

2006:

**Werner Grundkötter**

Dynamik nichtlinearer Wechselwirkungen zweiter Ordnung in integriert optischen Wellenleitern (Prof. Dr. Wolfgang Sohler)

**Christoph Neugebauer**

Lernen mit Simulationen und der Einfluss auf das Problemlösen in der Physik (Prof. Dr. Peter Reinhold)



**Selim Reza**

Acoustooptically Tunable Waveguide Lasers in Erbium Doped Lithium Niobate (Prof. Dr. Wolfgang Sohler)

**Stefan Stufler**

Kohärente optische Eigenschaften einzelner Halbleiter-Quantenpunkte (Prof. Dr. Artur Zrenner)

**Agnes Szabone Varnai**

Unterstützung des Problemlösens in Physik durch den Einsatz von Simulationen und die Vorgabe eines strukturierten Kooperationsformats (Prof. Dr. Peter Reinhold)

**Promotionen im Department Sport & Gesundheit**

2005:

**Dipl.-Sportwissenschaftler Thorsten Barthel**

Sportliche Belastungsauswirkungen im Abbild hirnelektrischer Veränderungen und Perspektiven für die sportmedizinische Forschung (Prof. Dr. Michael Weiß, Prof. Dr. Heinz Liesen)

**Dipl.-Sportlehrerin Heinke Möllenhoff**

Entwicklung und Evaluation eines Muskelkräftigungsprogramms für Hochbegabte – PATRAS, Paderborner Trainingsprogramm für Senioren (Prof. Dr. Helmut Heseke, Prof. Weiß)

**Dr. med. Claus Reinsberger**

Einsatzmöglichkeiten von Messungen Elektrodermaler Aktivität in der Sportmedizin am Beispiel Golf – eine Pilot-

studie (Dr. Holger Herwegen, Prof. Dr. Heinz Liesen)

# Department Chemie

## Prof. Dr. Gerald Henkel

### Publikationen

- S. Herres, A. Heuwing, U. Flörke, J. Schneider und G. Henkel  
Hydroxylation of a Methyl Group: Synthesis of [Cu<sub>2</sub>(btmmO)<sub>2</sub>]<sup>+</sup> and of [Cu<sub>2</sub>(btmmO)<sub>2</sub>]<sup>2+</sup> Containing the Novel Ligand bis(trimethylmethoxy)guanidino-propane (btmmO) by Copper-Assisted Oxygen Activation  
Inorg. Chim. Acta 358, 1089 - 1095 (2005)
- B. Lippold, W. Meyer-Klaucke, T. Meyer und G. Henkel  
Towards an automated quality control of XAS data  
J. Synchr. Rad. 12, 47 - 52 (2005)
- S. Herres-Pawlis, U. Flörke und G. Henkel  
Tuning of copper(I)-dioxygen reactivity by bis-guanidine ligands  
Eur. J. Inorg. Chem. 2005, 3815 - 3824
- S. Herres-Pawlis, A. Neuba, O. Seewald, T. Seshadri, H. Egold, U. Flörke und G. Henkel  
A Library of Peralkylated Bis-guanidine Ligands for Use in Biomimetic Coordination Chemistry  
Eur. J. Org. Chem. 2005, 4879 - 4890
- S. Herres-Pawlis, U. Flörke und G. Henkel  
Catena-Poly[( $\eta^2$ -cyano-1,3-bis(tetramethyl-guanidino)propane]dicopper(II)- $\eta^2$ -cyano]  
Acta Cryst. E61, m79 - m81 (2005)
- O. Seewald, U. Flörke und G. Henkel  
Dichlorobis(triphenylphosphine)iron(II)  
Acta Cryst. E61, m1829 - m1830 (2005)
- O. Seewald, U. Flörke, G. Henkel und T. Seshadri  
Di- $\mu$ -bromo-bis(bromo[N-(8-quinolyloxy)-o-phenylenediamine- $\epsilon^3$ N,N',N'']manganese(II))  
Acta Cryst. E61, m1948 - m1950 (2005)
- U. Flörke, S. Herres-Pawlis, A. Heuwing, A. Neuba, O. Seewald und G. Henkel  
The diprotonated 2,2'-8propane-1,3-diyli)bis(1,1,3,3-tetramethylguanidinium) cation: packing and conformational changes  
Acta Cryst. C62, m234 - m237 (2006)
- C. van Wolven, D. Döpp und G. Henkel  
Oxetanes from Photocycloaddition of 2-Aminopropenenitriles to Methyl Phenylglyoxylate and Benzils  
Z. Naturforsch 61b, 301 - 310 (2006)
- S. Herres-Pawlis, U. Flörke und G. Henkel  
Di- $\mu$ -fluoro-bis[acetoneitrile]{N,N'-bis(dimethylamino)(morpholino)methylene}propane-1,3-diamine-copper(II) bis(hexafluorophosphate): the first di- $\mu$ -fluoro-bridged dicopper isguanidine compound  
Acta Cryst. E62, m2138 - m2140 (2006)
- D. Döpp, C. Kruse, U. Flörke und G. Henkel  
rel-(1R, 4R, 9R)-1-acetyl-9-(azepan-1-yl)-1,4-dihydro-1,4-ethanonaphthalene-9-carbonitrile  
Acta Cryst. E62, o3735 - o3736 (2006)
- D. Döpp, C. Kruse, U. Flörke und G. Henkel  
rel-(1R, 4R, 9R)-1-acetyl-9-(1-piperidiny)-1,4-dihydro-1,4-ethanonaphthalene-9-carbonitrile  
Acta Cryst. E62, o3904 - o3906 (2006)

D. Döpp, C. Kruse, U. Flörke und G. Henkel  
Dimethyl 2-(3-amino-4-oxo-4H-benzo[f]thieno[3,4-c]chromen-1-yl) fumarate  
Acta Cryst. E62, o4095 - o4097 (2006)

D. Döpp, C. Kruse, U. Flörke und G. Henkel  
rel-(1R,4R,9R)-1-acetyl-9-(1-pyrrolidiny)-1,4-dihydro-1,4-ethanonaphthalene-9-carbonitrile: the major [4+2]-photocycloadduct of 1-acetonaphthone with 2-(1-pyrrolidiny) propenenitrile  
Acta Cryst. E62, o3245 - o3246 (2006)

U. Flörke, S. Herres-Pawlis, A. Heuwing, A. Neuba, O. Seewald und G. Henkel  
The diprotonated 2,2-(propane-1,3-diyli)bis(1,1,3,3-tetramethylguanidinium) cation: packing and conformational changes  
Acta Cryst. C62, m234 - m237 (2006)

E.S. Fondjo, D. Döpp und G. Henkel  
Reactions of some anellated 2-aminothiophenes with electron poor acetylenes  
Tetrahedron 62, 7121 - 7131 (2006)

M. Mastalerz, G. Dyker, U. Floerke, Ulrich, G. Henkel, I.M. Opper, und K. Merz  
Oligophenylcalix[4]arenes as potential precursors for funnelenes and calix[4]triphenylenes: Syntheses and preliminary cyclodehydration studies  
Eur. J. Inorg. Chem. 2006, 4951-4962

J.H. Liu, E. Muth, U. Flörke, G. Henkel, K. Merz, J. Sauvageau, E. Schwake und G. Dyker  
Alkylation of arenes with benzylic and propargylic alcohols - Classical versus fancy catalysts  
Adv. Synt. & Catal. 348, 456 - 462 (2006)

S. Herres-Pawlis, U. Flörke und G. Henkel  
N,N,N',N'-Tetraethylchloroformamidinium chloride, the first acyclic diaminocarbene-Cl<sub>2</sub> adduct  
Inorg. Chem. Commun. 9, 996 - 998 (2006)

B. Hammann, C. Chen, U. Flörke, R. Hauptmann, E. Bill, S. Sinnecker und G. Henkel  
 $\hat{a}$ - und  $\hat{a}$ -[Fe<sub>2</sub>( $\mu$ -StBu)<sub>2</sub>(StBu)<sub>4</sub>]<sub>2</sub> - Koexistenz zweier Bindungsdehnungsisomere einer klassischen bitetraedrischen Metall-Chalkogenolat-Verbindung  
Angew. Chem. 118, 8425 - 8430 (2006);  
Angew. Chem. Int. Ed. 45, 8245 - 8249 (2006)

T. Seshadri, H.-J. Haupt, U. Flörke und G. Henkel  
Novel cholesteric glassy liquid crystals of monosubstituted ferrocenes: synthesis and selective reflection properties of a dimesogen, and crystal structure of a monomesogen  
Liq. Cryst. 34, 33 - 47 (2007)

### Weitere Funktionen

Sprecher des Vorstands des Departments Chemie

### Forschungsprojekte

DFG-Forschungsprojekt:  
„Neuartige Ligand-Hybride mit Schwefel-Stickstoff-Donorgruppen: Komplexchemische Modellierung der CuA-Zentren der Cytochrom-c-Oxidase und der N<sub>2</sub>O-Reduktase sowie des Cu<sub>2</sub>Zentrums der N<sub>2</sub>O-Reduktase“

DFG-Forschungsprojekt:  
„Neue Perspektiven der Nickel-Chemie: Reduzierte Clusterkomplexe mit vollständiger Schwefel-Koordinationsphäre“

### Industriekooperationen:

Henkel KGaA, Düsseldorf (Bleichkatalysatoren)

## Prof. Dr. Stephan Schulz

### Publikationen

S. Schulz, A. Kuczkowski, D. Schuchmann, U. Flörke, M. Nieger  
Group 13 - Group 13 Donor-Acceptor Complexes  
Organometallics, 2006, 25, 5487.

S. Schulz  
Gallium, Indium and Thallium, Excluding Transition Metal Derivatives  
In Comprehensive Organometallic Chemistry III, Chapter 03.07; Ed. R. H. Crabtree, D. M. P. Mingos, 2006, 287-342.

S. Schulz, F. Thomas, W. Priesmann, M. Nieger  
Syntheses and X-ray structures of base-stabilized iminoalanes  
Organometallics, 2006, 25, 1392.

S. Schulz, F. Thomas, M. Nieger  
Syntheses and Structural Characterization for the First Metal Organic Thallium Antimonide  
J. Chem. Soc. Chem. Commun. 2006, 1860.

S. Schulz  
CVD Deposition of Binary AlSb and GaSb Material Films - A Single-Source-Approach  
In Top. Organomet. Chem., Vol. 9, Precursor Chemistry of Advanced Materials - CVD, ALD and Nanoparticles, Ed. R. A. Fischer, 2005, 101.

S. Schulz, S. Fahrenholz, A. Kuczkowski, W. Assenmacher, A. Seemayer, K. Wandelt  
Deposition of GaSb films from the Single Source Precursor [t-Bu<sub>2</sub>GaSbEt]<sub>2</sub>  
Chem. Mater. 2005, 17, 1982.

T. Bauer, S. Chatterjee, S. Schulz, M. Nieger, I. Krossing  
Studien zur Synthese, Struktur und Reaktivität heterozyklischer Metallonitridophosphinate  
Z. Anorg. Allg. Chem. 2005, 631, 2900.

F. Thomas, S. Schulz, M. Nieger  
Synthese thermolabiler Zink-Pentel-Verbindungen unter kinetisch kontrollierten Reaktionsbedingungen  
Angew. Chem. 2005, 117, 5813.

Synthesis of thermolabile zinc-pentel compounds under kinetically controlled reaction conditions  
Angew. Chem. Int. Ed. 2005, 44, 5668.

S. Fahrenholz, A. Kuczkowski, S. Schulz, K. Wandelt, A. Seemayer, W. Assenmacher  
A Single Source Approach for the Deposition of GaSb Films  
Electrochem. Soc. Proc. 2005, 9, 730.

S. Schulz, S. Fahrenholz, A. Kuczkowski, K. Wandelt, A. Seemayer, W. Assenmacher  
Synthesis of Tailor-made Single Source Precursors for the Deposition of Group13-Antimonide Thin Films  
Electrochem. Soc. Proc. 2005, 9, 736.

## Weitere Funktionen

Sprecher des SGU-Teams

Auslandsbeauftragter im Department Chemie (bis 31.12.2006)

Mitglied der Forschungskommission

Mitglied der Studienreformkommission „Lehr-  
amtsstudium“

Vorsitzender der Studienreformkommission  
„BSc Chemie“

## Aktuelle Projekte

*Eine neue Synthesemethode zur Knüpfung ther-  
misch labiler Metall-Pentel-Bindungen*; DFG-  
Normalverfahren

*Growth of AlSb, GaSb and InSb Films - Precursor  
Design, Gas Phase Decomposition Mechanisms  
and Surface Reactions*; DFG-Schwerpunktpro-  
gramm 1119 (Anorganische Materialien durch  
Gasphasensynthese: Interdisziplinäre Ansätze  
zur Entwicklung, Verständnis und Kontrolle von  
CVD-Verfahren)

## Kooperationen

Prof. Dr. I. Krossing, EPFL Lausanne

Prof. Dr. W. Mader, Universität Bonn

Prof. Dr. K. Kohse-Höinghaus, Universität Biele-  
feld

Prof. Dr. K. Wandelt, Universität Bonn

M. Bataineh, J. Nolte, B. Kuhlmann, N. Zullei-  
Seibert, M. Borges, M. Grote  
Degradation behavior of selected pharmaceuti-  
cals and their main metabolites in model sys-  
tems for slow sand filtration, Part I: Develop-  
ment of the Analytical Procedures,  
Current Pharmaceutical Analysis, 2 (3), 313-322  
(2006)

M. Grote  
Vorkommen von Antibiotika in Lebensmitteln  
pflanzlichen und tierischen Ursprungs  
Tagungsband „Schweinegülle – Quelle für  
potentiell unerwünschte Stoffe (Boden, Wasser,  
Pflanze)? 5. Kulturlandschaftstag, 4. Mai 2006,  
Freising-Weißenstephan. Schriftenreihe der Bay-  
rischen Landesanstalt für Landwirtschaft, 12,  
63-69 (2006), (ISSN 1611-4159)

U. Schulte-Ebbert, N. Büchner, B. Kuhlmann, G.  
Preuß, N. Zullei-Seibert, H. Stevens, M. Grote  
Partikelmedierte Verlagerung und biologische  
Auswirkungen von güllebürtigem Chlortetracy-  
clin und Sulfadiazin im Boden und Sickerwasser  
Tagungsband: 72. Jahrestagung der Wasserche-  
mischen Gesellschaft, Fachgruppe in der GDCh,  
22.-24. Mai 2006, Celle (S. 86 - 91) (ISBN 3-  
936028-39-7)

K. Jagiello, N. Zullei-Seibert, U. Schulte Ebbert,  
M. Grote  
Einfluss von Modellpartikeln auf den Transport  
von Chlortetracyclin und Sulfadiazin in wasser-  
ungesättigten Modellbodenkörpern (Poster)  
Tagungsband: 72. Jahrestagung Wasserchemi-  
sche Gesellschaft, Fachgruppe in der GDCh, 22.-  
24. Mai 2006, Celle (S. 155 - 158) (ISBN 3-  
936028-39-7)

M. Grote, C. Schwake-Anduschus, H. Stevens, R.  
Michel, H. Korste, W. Heyser, T. Betsche, M. Frei-  
tag  
Antibiotikaeinträge aus der Tierhaltung in  
Boden und Nutzpflanzen - Ergebnisse eines  
Modellversuches  
VDLUFA-Schriftenreihe, Kongressband 2005,  
VDLUFA-Verlag, LUFA Speyer Kreislaufwirtschaft  
mit der Landwirtschaft- quo vadis? 27. -  
30.09.2005, Bonn, S. 228 - 232 (ISBN 3-  
922712-92-4)

A. Vockel, M. Grote, A. Mehlich  
Bestimmung von Chlortetracyclin in Schlacht-  
proben: Methodenentwicklung und Validierung  
Laborpraxis, Juli/August, 19-21 (2005)

## Tagungen (Vorträge, Poster)

M. Grote  
Aufnahme und Transport von Tierarzneistoffen  
in Nutzpflanzen  
58. Fachtagung „Tierarzneimittel in der  
Umwelt“, Bayerisches Landesamt für Umwelt,  
23.11.2006, München (Vortrag)

M. Grote  
Antibiotikaeinträge aus der Tierhaltung in  
Boden und Nutzpflanzen- Ergebnisse einer  
Modellstudie  
(Münster Forum LE): „Von F, wie Futtermittel-  
überwachung, bis R, wie Rückstände“,  
18.10.2006 (Vortrag)

M. Grote  
Vorkommen von Antibiotika in Lebensmitteln  
pflanzlichen und tierischen Ursprungs  
„Schweinegülle – Quelle für potentiell uner-  
wünschte Stoffe (Boden, Wasser, Pflanze)? 5.  
Kulturlandschaftstag, 4. Mai 2006, Freising-  
Weißenstephan (Vortrag)

M. Grote  
Antibiotikarückstände aus der Tiermast in

Umwelt und Nahrungsmitteln

14. Veranstaltung der Fortbildungsreihe Infek-  
tionsprävention: Resistente Keime – hat die  
postantibiotische Zeit begonnen?, Klinikum Bre-  
men-Mitte, 22.03.2006, Bremen (Vortrag)

M. Grote  
Antibiotikaeinträge aus der Tierhaltung in  
Boden und Nutzpflanzen – Ergebnisse eines  
Modellversuches  
Fachgespräch „Antibiotika in Wirtschaftsdün-  
gern“, FAL-Braunschweig – Bundesforschungs-  
anstalt für Landwirtschaft, 08.12.2005 (Vortrag)

M. Grote  
Antibiotikaeinträge aus der Tierhaltung in  
Boden und Nutzpflanzen – Ergebnisse eines  
Modellversuches  
117.VDLUFA Kongress: Kreislaufwirtschaft mit  
der Landwirtschaft- quo vadis? 28.09.2005,  
Bonn (Vortrag, Poster)

M. Grote  
„Untersuchung zur Flüssigmembran-Anreiche-  
rung und zur Identifizierung von Arzneiwirkstof-  
fen und ihrer Metaboliten“  
Graduiertenkolleg AGEESA II, 12. Workshop,  
RWTH Aachen: Strukturaufklärung und Analytik  
endokriner wirksamer Stoffe und Pharmaka, 21.  
April 2005, Aachen (Vortrag)

J. Nolte, W. Nigge, M. Bataineh, M. Grote  
Einsatz von LC/ESI-MS und GC/MS zur Bestim-  
mung ausgewählter Pharmaka und ihrer Meta-  
boliten  
Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für  
Massenspektrometrie DGMS, 6.03. – 9.03.2005  
Rostock (Poster)

M. Grote, B. Haciosmanoglu, J. Nolte, H. Gelten-  
poth, B. Kuhlmann, N. Zullei-Seibert  
Studie zur Anwendbarkeit von Flüssig- und Fest-  
membranen in der Wasseranalytik zur Bestim-  
mung von Pharmaka  
71. Jahrestagung 2005, 2.-4. Mai 2005, Bad  
Mergentheim, Wasserchemische Gesellschaft  
(GDCh), (Poster)

B. Kuhlmann, N. Zullei-Seibert, J. Nolte, M.  
Grote  
Biologischer Abbau von Arzneimitteln und ihren  
Metaboliten – eine Alternative bei der Verringe-  
rung von Stoffeinträgen aus Abwasserleitun-  
gen?  
71. Jahrestagung 2005, 2.-4. Mai 2005, Bad  
Mergentheim, Wasserchemische Gesellschaft  
(GDCh), (Poster)

K. Jagiello, N. Zullei-Seibert, U. Schulte Ebbert,  
M. Grote  
Einfluss von Modellpartikeln auf den Transport  
von Chlortetracyclin und Sulfadiazin in wasser-  
ungesättigten Modellbodenkörpern (Poster)  
72. Jahrestagung Wasserchemische Gesell-  
schaft, Fachgruppe in der GDCh, 22.-24. Mai  
2006, Celle (Poster)

## Weitere Funktionen

Mitglied im Editorial Advisory Board von „CUR-  
RENT PHARMACEUTICAL ANALYSIS“

Mitglied in der Mediterranean Scientific Associ-  
ation of Environmental Protection (MESAEP)

(bis 2005)

Mitglied der Arbeitsgruppe Rückstände und  
Resistenzen des Ministeriums für Umwelt und  
Naturschutz, Landwirtschaft und Verbraucher-  
schutz des Landes Nordrhein-Westfalen  
(MUNLV)

## apl. Prof. Dr. Manfred Grote

### Publikationen

M. Grote, C Schwake-Anduschus, R. Michel, H.  
Stevens, W. Heyser, G. Langenkämper, T. Bet-  
sche, M. Freitag  
Incorporation of veterinary antibiotics into crops  
from manured soil.  
Landbauforschung Völkensrode (invited paper,  
im Druck)

M. Grote, C. Schwake-Anduschus, R. Michel,  
D.H. Yolcu, W. Heyser, H. Hayen  
G. Langenkämper, Th. Betsche, M. Freitag  
Aufnahme und Transport von Tierarzneistoffen  
in Nutzpflanzen  
Münchener Beiträge zur Abwasser-, Fischerei-  
und Flussbiologie (invited paper, in Vorberei-  
tung)

M. Grote  
„Antibiotika in der Nahrungskette – Risiko für  
Konsumenten?“  
internistische praxis („Medizin und Umwelt“)  
(invited paper, in Vorbereitung)

M. Grote, C. Schwake-Anduschus, H. Stevens, R.  
Michel, T. Betsche, M. Freitag  
Antibiotika-Aufnahme von Nutzpflanzen aus  
Gülle-gedüngten Böden - Ergebnisse eines  
Modellversuchs  
Journal für Verbraucherschutz und Lebensmittelsi-  
cherheit, 1, 38 – 50 (2006)



Mitglied des Web-Beirates des Department Chemie

Mitglied der „Kommission Studienordnungen Lehrämter Chemie“

Leitung der „Kommission für Außendarstellung“ des Department Chemie

## Forschungsprojekte

„Screening zum Antibiotikatransfer aus dem Boden in Getreide in viehstarken Regionen Nordrhein-Westfalens“ (MUNLV)

Tierarzneimittel in der Umwelt: Bewertung von Eintrag, Verlagerung und Resistenzentwicklung unter Gesichtspunkten des Verbraucherschutzes (MUNLV)

Antifektivaeinträge aus der Tierproduktion in terrestrische und aquatische Kompartimente (MUNLV)

„Entwicklung eines Monitoringsystems zur Identifizierung und Quantifizierung von Xenobiotika in Honig“ (Faethe Labor GmbH, Paderborn)

## Wissenschaftliche Kooperationen

Prof. Dr. W. Heyser, Universität Bremen, Zentrum für Umweltforschung und Umwelttechnologie (UFT), Angewandte Botanik

Prof. Dr. M. Freitag, FH Südwestfalen, Abtlg. Soest, FB Agrarwirtschaft

Dir. und Prof. Dr. T. Betsche, Bundesforschungsanstalt für Ernährung und Lebensmittel, BFEL Detmold

Dr. H. Hayen, ISAS Dortmund, Institute of Analytical Science

Dr. J. Nolte, ISAS Dortmund, Institute of Analytical Science

Prof. Dr. Sanaa Omar, Alexandria University, Alexandria, Faculty of Science, Microbiology

Prof. Dr. M. Sietz, FH Lippe und Höxter, Abtlg. Höxter, Analytische Chemie und Umweltmanagement

Dr. M. Stolz, CVUA Chemisches und Veterinäruntersuchungsamt Detmold

Dipl.-Ing. N. Zullei - Seibert (Geschäftsführerin), IfW Institut für Wasserforschung Dortmund

Dr. C. Sprenger, Faethe Labor GmbH, Paderborn

## Prof. Dr. Karsten Krohn

### Publikationen

Gehle, D.; Flörke, U.; Krohn, K.: 1,6-Anhydro-2-iodo-2-deoxy- $\beta$ -D-glucopyranose (Iodolevoglucozan). *Acta Cryst.* 2005, E61, 664-666.

Kouam, S.F.; Flörke, U.; Krohn, K.; Akhtar, M.N.; Ngadjui, B.T.; Abegaz, B.M.:  $\beta$ -Taraxerol from *Bridelia micrantha*. *Acta Cryst.* 2005, E61, 599-600.

Wafo, P.; Hussain, H.; Kouam, S.F.; Ngadjui, B.T.; Flörke, U.; Krohn, K.: 20-Hydroxy-4,4,5,6-tetramethoxychalcone. *Acta Cryst.* 2005, E61, 3017-3019.

Elsässer, B.; Krohn, K.; Akhtar, M.N.; Flörke, U.; Kouam, S.F.; Kuigoua, M.G.; Ngadjui, B.T.; Abegaz, B.M.; Antus, S.; Kurtán, T.: Revision of the Absolute Configuration of Plumericin and Isoplumericin from *Plumeria rubra*. *Chem. & Biodiversity* 2005, 2, 799-808.

Eyong, K.O.; Krohn, K.; Hussain, H.; Gabriel N. Folefoc, G.N.; Nkengfack, A.E.; Schulz, B.; Hu, Q.: Newbouldiaquinone and Newbouldiamide: A New Naphthoquinone-Anthraquinone Coupled Pigment and a New Ceramide from *Newbouldia laevis*. *Chem. Pharm. Bull.* 2005, 53, 616-619.

Dai, J.; Krohn, K.; Flörke, U.; Gehle, D.; Aust, H.-J.; Draeger, S.; Schulz, B.; Rheinheimer, K.: Novel Highly Substituted Biraryl Ethers, Phomopsins D-G, Isolated from the Endophytic Fungus *Phomopsis* sp. from *Adenocarpus foliolosus*. *Eur. J. Org. Chem.* 2005, 5100-5105.

Dai, J.; Krohn, K.; Gehle, D.; Kock, I.; Flörke, U.; Aust, H.-J.; Draeger, S.; Schulz, B.; Rheinheimer, J.: New Oblongolides Isolated from the Endophytic Fungus *Phomopsis* sp. from *Melilotus dentata* from the Shores of the Baltic Sea. *Eur. J. Org. Chem.* 2005, 4009-4016.

Elsässer, B.; Krohn, K.; Flörke, U.; Root, N.; Aust, H.-J.; Draeger, S.; Schulz, B.; Antus, S.; Kurtán, T.: X-Ray Structure Determination, Absolute Configuration and Biological Activity of Phomoxanthone A. *Eur. J. Org. Chem.* 2005, 4563-4570.

Krohn, K.; Gehle, D.; Flörke, U.: New Derivatives of Levoglucosan by Tandem Epoxide Allyl Alcohol Rearrangement-Cuprate Cross-Coupling. *Eur. J. Org. Chem.* 2005, 2841-2848.

Krohn, K.; Gehle, D.; Flörke, U.: New Chiral Building Blocks and Branched 1,6-Anhydro Sugars from Regio- and Stereoisomeric Cerný epoxides. *Eur. J. Org. Chem.* 2005, 4557-4562.

Wu, X.; Liu, X.; Lin, Y.; Luo, J.; She, Z.; Houjin, L.; Chan, W.W.L.; Antus, S.; Kurtán, T.; Elsässer, B.; Krohn, K.: Xyloketal F: A Strong L-Calcium Channel Blocker from the Mangrove Fungus *Xylaria* sp. (#2508) from the South China Sea Coast. *Eur. J. Org. Chem.* 2005, 4061-4064.

Krohn, K.; Dai, J.; Flörke, U.; Aust, H.-J.; Draeger, S.; Schulz, B.: Botryane Metabolites from the Fungus *Geniculosporium* sp. Isolated from the Marine Red Alga *Polysiphonia*. *J. Nat. Prod.* 2005, 68, 400-405.

Kouam, S.F.; Ngadjui, B.T.; Krohn, K.; Wafo, P.; Ajaz, A.; Choudhary, M.I.: Prenylated anthro-noid antioxidants from the stem bark of *Harungana madagascariensis*. *Phytochemistry* 2005, 66, 1174-1179.

Macabeo, A.P.; Krohn, K.; Gehle, D.; Read, R. W.; Brophy, J.J.; Cordell, G.A.; Franzblau, S.G.; Aguin-aldo, A.M.: Indole alkaloids from the leaves of Philippine *Alstonia* scholaris. *Phytochemistry* 2005, 66, 1158-1162.

Heredia-Moya, J.; Krohn, K.; Flörke, U.; Araya-Maturana, R.: Ethyl 15-ethoxy-4-hydroxy-2-oxo-9-oxatetracyclo[10,2,2,0,1,3,8] hexadeca-4,6,8,13-tetraene-13-carboxylate (1,a12a). *Acta Cryst.* 2006, E62, 3636-3638.

Ulrich Flörke, U.; Krohn, K.; Zia-Ullah, H.H.: An orthorhombic modification of (R)-(-)-8-hydroxy-3-methyl-3,4-dihydro-1H-2-benzopyran-1-one

[(R)-(-)-mellein]. *Acta Cryst.* 2006, E62, 3539-3541.

Krohn, K.: Antibiotics and Much More. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2006, 45, 536-539.

Tudla F. A.; Aguin-aldo A. M.; Krohn, K.; Hussain, H.; Macabeo, A.P.G.: Highly oxygenated cyclohexene metabolites from *Uvaria rufa*. *Biochem. Sys. Ecol.* 2007, 35, 45-47.

Zhang, W.; Guo, Y.-W.; Krohn, K.: Macropodumines A-C: Novel Pentacyclic Alkaloids with an Unusual Skeleton or Zwitterion Moiety from *Daphniphyllum macropodum* Miq.. *Chem. Eur. J.* 2006, 12, 5122-5127.

Dai, J.; Krohn, K.; Flörke, U.; Aust, H.-J.; Draeger, S.; Schulz, B.; Szikszai, A.-K.; Antus, S.; Kurtán, T.; van Ree, T.: Metabolites from the Endophytic Fungus *Nodulisporium* sp. from *Juniperus cedre*. *Eur. J. Org. Chem.* 2006, 3498-3506.

Krohn, K.; Dai, J.; Kock, I.; Flörke, U.: Diversität biologisch aktive Naturstoffe aus endophytischen terrestrischen und marinen Pilzen. *Humboldt-Nachrichten; Berichte des Humboldt-Vereins Ungarn* 2006, 27, 2-9.

Krohn, K.; Shuklov, I.: Two Efficient Syntheses of Protected 4-Deoxy-D-lyxo-hexose (4-Desoxy-D-mannose). *J. Carbohydr. Chem.* 2006, 25, 331-343.

Kouam, S.F.; Khan, S.N.; Krohn, K.; Ngadjui, B.T.; Kapche, D.G.W.F.; Yapna, D.; Zareem, S.; Moustafa, A.M.Y.; Choudhary, M. I.: New  $\beta$ -Glucosidase Inhibitory Anthranols, Kenganthranols A-C, from the stem bark of *Harungana madagascariensis*. *J. Nat. Prod.* 2006, 69, 229-233.

Bouberte, M.Y.; Krohn, K.; Hussain, H.; Dongo, E.; Schulz, B.; Hu, Q.: Tithoniamarin and Tithoniamide: A Structurally Unique Isocoumarin Dimer and a New Ceramide from *Tithonia diversifolia*. *Nat. Prod. Rep.* 2006, 20, 842-849.

Eyong, K.O.; Krohn, K.; Kuete, V.; Hussain, H.; Folefoc, G.N.; Nkengfack, A.E.; Saefel, M.; Sarite, S.R.; Hoerauf, A.: Newbouldiaquinone B: a new Naphthoquinone-Anthraquinone Ether Coupled Pigment, a Potential Antimicrobial and Antimalarial agent from *Newbouldia laevis*. *Phytochemistry* 2006, 67, 605-609.

Krohn, K.; Böker, N.: 1,2-, 1,4-, 2,9- and 9,10-Anthraquinones and Higher Fused Polycyclic Quinone Derivatives. In *Science in Synthesis*, Griesbeck, A.G., Ed. Thieme Verlag, Stuttgart, 2006; 367-506.

Krohn, K.; Diederichs, J.; Riaz, M.: Synthesis of 2'-Dealkylmumbaistatin. *Tetrahedron* 2006, 62, 1223-1230.

Bouberte, M.Y.; Krohn, K.; Hussain, H.; Dongo, E.; Schulz, B.; Hu, Q.: Tithoniaquinone A and Tithoniamide B: A New Anthraquinone and a New Ceramide from leaves of *Tithonia diversifolia*. *Z. Naturforsch.* 2006, 61b, 78-82.

Miemanang, R.S.; Krohn, K.; Hussain, H.; Dongo, E.: Paullinoside A and Paullinamide A: A New Cerebroside and a New Ceramide from leaves of *Paullinia pinnata*. *Z. Naturforsch.* 2006, 61 b, 1123-1127.

Kouam, S.F.; Ngadjui, B.T.; Krohn, K.; Choudhary, M.I.: Thermal rearrangement of harunganin and allylalts of some compounds from *Harungana madagascariensis*. *ARKIVOK*, 2007, IX, 64-70.

Krohn, K.; Agocs, A.: Total Synthesis of Dehydro-Boscialin Glucoside. *ARKIVOK*, 2007, V, 46-49.

Hussain, H.; Krohn, K.; Flörke, U.; Schulz, B.; Draeger, S.; Pescitelli, G.; Antus, S.; Kurtán, T.: Absolute Configuration of Hypothemycin and New 5'-O-Methylhypothemycin from *Phoma* sp. - A Novel Solid State CD/TDDFT Approach to 14 Membered Conformationally Flexible system. *Eur. J. Org. Chem., Tetrahedron Asymmetry* 2007, 18, in print.

Hussain, H.; Krohn, K.; Flörke, U.; Schulz, B.; Draeger, S.; Pescitelli, G.; Antus, S.; Kurtán, T.: Absolute Configuration of Globosuxanthone A and Secondary Metabolites from *Microdiplodia* sp. - A novel solid-state CD / TDDFT approach. *Eur. J. Org. Chem.*, 2007, 292-295.

Kock, I.; Krohn, K.; Egold, H.; Draeger, S.; Schulz, B.; Rheinheimer, J.: New Massarilactones, Massarigenins and Coniothyrenol, Isolated from the Endophytic Fungus *Coniothyrium* sp. from *Carpobrotus edulis*. *Eur. J. Org. Chem.*, 2007, 2186-2190.

Krohn, K.; Kock, I.; Elsässer, B.; Flörke, U.; Schulz, B.; Draeger, S.; Pescitelli, G.; Antus, S.; Kurtán, T.: New Natural Products from the Endophytic Fungus *Ascochyta* sp. from *Melilotus dentatus*. *Eur. J. Org. Chem.*, 2007, 1123-1129.

Macabeo, A.P.G.; Aguinaldo, A.M.; Krohn, K.; Gehle, D.; Byrne, L.T.; Franzblau, S.G.: In vitro activity against *Mycobacterium tuberculosis* H37Rv of the extracts and metabolites from *Alstonia scholaris*. *Internat. J. Antimicrob. Agents*, submitted.

Dai, J.; Krohn, K.; Flörke, U.; Gehle, D.; Aust H.-J.; Draeger, S.; Schulz, B.; Antus, S.; Kurtán, T.: Metabolic Products of the Fungus *Microspheeropsis* sp. Associated with the Plant *Larix* sp. from Hjerting, Denmark. *Eur. J. Org. Chem.*, submitted.

Kouam, S.F.; Yapna, D.B.; Krohn, K.; Ngadjui, B.T.; Ngoupayo, J.; Choudhary, M.I.; Schulz, B.: Prenylated Anthracene derivatives from the leaves of *Harungana madagascariensis* Lam. *J. Nat. Prod.*, printed in the web.

Kuete, V.; Eyong, K.O.; Benb, V.P.; Folefoc, G.N.; Hussain, H.; Krohn, K.; Nkengfack, A.E.: Antimicrobial activity of the methanolic extract and of the chemical constituents isolated from *Newbouldia laevis* Seem. *Pharmazie*, in print.

Wang, J.-D.; Zhang, W.; Xiang, W.-S.; Guo, Y.-W.; Krohn, K.: Excogallochaols A-D, Four Novel Diterpenoids from the Chinese Mangrove *Excoecaria agallocha*. *Phytochemistry*, in print.

Krohn, K.; Tran-Thien, H.T.; Vitz, J.; Vidal, A.: Total Synthesis of (rac)- $\beta$ -Indomycinone by Baker-Venkataraman Rearrangement. *Tetrahedron, Euro. J. Org. Chem.*, 2007, 1905-1911.

Krohn, K.; Vidal A.; Vitz, J.; Westermann, B.; Abbas, M.; Green, I.: First Enantioselective Baker-Venkataraman-Rearrangements Aiming at the Total Synthesis of Chiral Anthrapyran Antibiotics. *Tetrahedron Asymmetry*, 2006, 17, 3051-3057.

Tala, M.F.; Krohn, K.; Hussain, H.; Kouam, S.F.; Waboa, H.K.; Tanea, P.; Schulz, B.; Hu, Q.: Laurantixanthone C: A New Antifungal and Algicidal Xanthone from Stem bark of *Vismia laurentii*. *Z. Naturforsch.*, 2007, 62 b, 565-568.

Macabeo, A.P.G.; Villafranca, M.C.G.; Aguinaldo, A.M.; Hussain, H.; Krohn, K.: Clerosterols from *Clerodendrum quadriloculare*. *Bio. Chem. Sys. Eco.*, submitted.

## Weitere Funktionen

Vorsitzender des Ortsverbands der GDCh

Stellvertretender Sprecher des Vorstands des Departments Chemie

Vertrauensdozent des VCI für das Department Chemie

## Aktuell geförderte Forschungsprojekte

DFG-Projekt „Synthesen aus der Reihe der 4H-Anthra-[1,2-b]pyranon-Antibiotika (Premithramycinone, Espicufoline)“ (bis 2009)

DFG-Projekt „Synthese von Dekaketid-Zwischenstufen der Polyketidsynthetasen vom Typ II. ein Beitrag zur Aufklärung der Biosynthese von Angucyclinen und der gerichteten Biosynthese neuer Dekaketide“ (bis Ende 2008)

## Industriekooperationen

BASF AG 3. Syntheseprojekt mit der BASF auf dem Gebiet der fungiciden Phomisine und Palmarumycine (bis Ende 2007)

## Kooperationspartner

Frau PD Dr. B. Schulz und Dr. S. Dräger, Institut für Mikrobiologie der TU Braunschweig, Deutschland

Dr. Simeon Kouam Fogue, University of Yaounde I, Ecole Normale Supérieure, Kamerun

Prof. Etienne Dongo, Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, Yaounde University, Yaounde, Kamerun

Prof. Pierre Tane, University of Dschang, Department of Chemistry, Faculty of Science, Dschang, Kamerun

Prof. Dr. Wahyudi Priyono Suwarso, Chem. Dept., Fac of Math. and Sci., The University of Indonesia, DEPOK, Indonesien

Prof. Alicia M. Aguinaldo, Department of Chemistry, University of Santo Tomas, Research Center Natural Sciences, Philippinen

Prof. Dr. Andreas Bechthold, Institut für Pharmazeutische Biologie, Albert-Ludwigs-Universität, Freiburg

Prof. T. van Ree, Department of Chemistry, University of Venda, Süd Afrika

Prof. Ivan R Green, Department of Chemistry, University of the Western Cape, Süd Afrika

## Prof. Dr. Nikolaus Risch

### Publikationen

Winter, A., Piper, S., Lefarth-Risse, A., und Risch, N.

New Advances in the Mannich Reaction: An Efficient Synthesis of Novel  $\alpha$ -Aminophosphonates. *Eur. J. Org. Chem.* 2005, 387-394

Sielemann, D., Winter, A., und Risch, N. Synthesis of Ditopic Oligopyridines Using the Suzuki-Coupling Reaction. *Heterocycles* 2005, 65, 1663-1672

Winter, A., Hummel, J., und Risch, N. Oligo(U-terpyridines) and their Ruthenium(II) Complexes: Synthesis and Structural Properties. *J. Org. Chem.* 2005, 4862-4871

Winter, A., Ulbricht, C., Holder, E., Risch, N. und Schubert, U. S. Unusual Terpyridines as Ligands for Novel Light-Emitting Iridium(III)Complexes: Synthesis and Characterisation. *Aust. J. Chem.* 2006, 59, 773-782

## Aktuell geförderte Forschungsprojekte

DFG-Forschungsprojekt „Diversity approach towards organocatalytic, asymmetric Mannich reactions“, Synthese und Charakterisierung organisch katalysierter Mannich-Reaktionen chiraler funktionalisierter Terpyridine.

## Kooperationen

TU Eindhoven NL, Prof. Dr. U. Schubert

Bergische Universität Wuppertal, Prof. Dr. E. Holder

Leibniz-Institut für Pflanzenbiochemie Halle/Saale, Prof. Dr. B. Westermann

## Industriekooperationen

Firma Lanxess AG, Leverkusen

## Weitere Funktionen

Rektor der Universität Paderborn

## Prof. Dr. Gregor Fels

### Publikationen

Fels, G. Elektronische Medien in der Chemie – Chemieinformation gestern, heute, morgen. 2007, Information, Wissenschaft und Praxis, accepted

Witte, T., Haller, L.A., Luttmann, E., Krüger, J., Fels, G., and Huber, K. Time Resolved Structure Analysis of Growing  $\alpha$ -Amyloid Fibers. *J. Struct. Biol.*, accepted for publication

Claus, H., Perret, N., Bausinger, T., Fels, G., Preuß, J., and König, H.. TNT transformation products are affected by the growth conditions of *Raoultella terrigena*. 2006, Biotech. Lett., DOI: 10.1007/s10529-006-9244-y

Kröger, M., and Fels, G. Combined biological-chemical procedure for the mineralization of TNT. Biodegradation, 2006, DOI : 10.1007/s10532-006-9076-4.

Claus, H., Bausinger, T., Lehmler, I., Fels, G., Dehner, U., Preuss, J., and König, H. Degradation of 2,4,6-Trinitrotoluene (TNT) by Strains of *Raoultella* and *Serratia* species. Biodegradation, 2006, DOI: 10.1007/s10532-005-9033-7.

Fels, G. eTeaching and eLearning in Chemistry. In die Zukunft publizieren. Contribution to the „11. Kongress der IuK-Initiative der Wissenschaftlichen Fachgesellschaften in Deutschland, 9.-11.05.2005, Bonn, Germany (Stempfhuberler, M. ed.), 2006, 185-190.

Alisaraie, L., Haller, L.A., and Fels, G. A QXP-based Multi-Step Docking Procedure for Accurate Prediction of Protein-Ligand Complexes. J. Chem. Inf. Mod., 2006 46, 1174-1187.

Alisaraie, L., and Fels, G. Molecular Docking Study on the „Back Door“ Hypothesis for Product Clearance in Acetylcholinesterase. J. Mol. Mod., 2006, 12, 348-354.

Luttmann, E., and Fels, G. All-atom Molecular Dynamic Studies of the Full Length Beta-Amyloid Peptides. Chem. Phys., 2006, 323, 138-147.

Krüger, J., Manmontri, B., and Fels, G. Iridium catalyzed H/D-exchange. Eur. J. Org. Chem. 2005, 7, 1402-1408.

## Gastaufenthalte

Fels, Gregor, zusammen mit 5 Masterstudierenden an der University of Missouri, Columbia, Missouri, USA, bei Prof. Dr. Rainer Glaser im Rahmen des gemeinsamen studentischen CIITN-Projektes

## Weitere Funktionen

*innerhalb der Universität Paderborn*

Mitglied der Studienkommission des Senates

Mitglied des Fakultätsrats der Fakultät Naturwissenschaften

Mitglied des Prüfungsausschusses des Departments Chemie

*in überregionalen Gremien*

Mitglied des Vorstands der GDCh-Fachgruppe „Chemie-Information-Computer“ (CIC)

## aktuell geförderte Forschungsprojekte

Web-basierte multimedial und interaktive Darstellung der Organischen Chemie, gefördert vom FIZ-Chemie Berlin

Im Rahmen eines Konsortialprojektes zur Erforschung der allosterischen Potenzierung des Acetylcholinrezeptors Teilfinanzierung durch die Firma Galantos, Mainz (Mitglieder der Forschungsgruppe siehe unter Kooperationen)

## Aktuelle Kooperationen

Im Rahmen eines Konsortialprojektes zur Erforschung der allosterischen Potenzierung des

Acetylcholinrezeptors Kooperation mit Prof. Dr. Ulrich Jordis (TU Wien, Österreich), Prof. Dr. Alfred Maelicke (Fierma Galantos, Mainz), Prof. Dr. Horst Weber (Universität Düsseldorf), Dr. Claus Weichel (Janssen).

Untersuchung von enzymatischen Polykondensationen zusammen mit Dr. Katja Loos, Universität Groningen, Niederlande.

Im Bereich der Molecular Modeling Projekte und der Reaktionsanimationen Zusammenarbeit mit Dr. Jens Simon, PC2 der Universität Paderborn

Metabolisierung von TNT durch das Bakterium *Raoultella terrigena* zusammen mit Prof. Dr. H. König und Dr. H. Claus, Universität Mainz

## PD Dr. Karamali Khanbabaee

### Publikationen

Khanbabaee, K.; Basceken, S., Flörke, U. „Chiral 6,6'-Bis(oxazolyl)-1,1'-biphenyls as Ligands for Copper(I)-Catalyzed Asymmetric Cyclopropanation“ Eur. J. Org. Chem., 2007, 5, 831-837.

Khanbabaee, K.; Basceken, S., Flörke, U. „Synthesis of Novel Chiral 6,6'-Bis(oxazolyl)-1,1'-biphenyls and their Application as Ligands in Copper(I)-Catalyzed Asymmetric Cyclopropanation“ Tetrahedron: Asymmetry, 2006, 17, 2804-2812.

### Aktuelle Kooperationen

BASF, Ludwigshafen

## Prof. Dr. Heinz-S. Kitzerow

### Publikationen

T. Kramer, T. Röder, K. Huber und H.-S. Kitzerow: „Surface Modification of Epoxy-Functionalized Acrylate Colloids, Polym. Adv. Technol. 16 (1), 38-41 (2005).

N. Stich und H.-S. Kitzerow: „Superposition of Patterns in Cross-linked Liquid Crystals“, J. Appl. Phys. 97, 033519 (2005).

L. Paelke, H.-S. Kitzerow und P. Strohmriegel: „Photorefractive Polymer-Dispersed Liquid Crystal Based on a Photoconducting Polysiloxane“, Appl. Phys. Lett. 86, 031104 (2005).

J. Strauss, A. Hoischen und H.-S. Kitzerow: „An Efficient Optical Method to Detect Phase Transitions in Liquid Crystals“, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 439, 281/[2147]-291/[2157] (2005).

G. Mertens, R. B. Wehrspohn, H.-S. Kitzerow, S. Matthias, C. Jamois und U. Gösele: „Tunable defect mode in a three-dimensional photonic crystal“, Appl. Phys. Lett. 87, 241108 (2005).

H. Matthias, T. Röder, R. B. Wehrspohn, H.-S. Kitzerow, S. Matthias und S. J. Picken: „Spatially periodic liquid crystal director field appearing in

a photonic crystal template“, Appl. Phys. Lett. 87, 241105 (2005).

H.-S. Kitzerow, G. Mertens, H. Matthias, H. Marsmann, R. B. Wehrspohn, S. Matthias, U. Gösele, S. Frey, and H. Föll: „Director fields of nematic liquid crystals in tunable photonic crystals“ (Invited Paper), Proc. SPIE 5926, 592605/1-10 (2005).

L. Paelke und H.-S. Kitzerow: „Space Charge Field and Dynamics of the Grating Formation in Photorefractive Polymer-Dispersed Liquid Crystal Based on a Photoconducting Polysiloxane“, J. Appl. Phys. 100, 113101 (2006).

M. W. Lauhof, S. A. Benning, H.-S. Kitzerow, F. Scheliga und E. Thorn-Csányi: „Dichroic Photo- and Electroluminescence of Oligo p-(Phenylene Vinylene) Derivatives“, Synthetic Metals, im Druck.

H. Matthias, S. L. Schweizer, R. B. Wehrspohn und H.-S. Kitzerow: „Cholesteric Liquid Crystal Director Fields in Micropores with Modulated Diameter“, Journal of Optics A, im Druck.

### Weitere Funktionen

Sekretär der International Liquid Crystal Society

Mitherausgeber des elektronischen Newsletters „Liquid Crystals Today“

Mitglied im Vorstand der Deutschen Flüssigkristallgesellschaft

Kapazitätsbeauftragter des Departments Chemie der Universität Paderborn

Mitglied des Vorstands des Departments Chemie der Universität Paderborn

Vorsitzender des Promotionsausschusses des Departments Chemie der Universität Paderborn

Mitglied der Deutschen Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie, der Deutschen Physikalischen Gesellschaft und des Deutschen Hochschulverbands

### Forschungsprojekte

„Anwendung von Flüssigkristallen für abstimmbare Photonische Kristalle“ (DFG-Schwerpunktprogramm „Photonische Kristalle“, Az. KI 411/5, 2001-2007)

„Photopolymerisation dissipativer Strukturen in Flüssigkristallen“, (DFG, Az. KI 411/9, 2002-2008)

„Liquid Crystals Nanoparticles“, (European Science Foundation, EUROCORES-Programm Self-Organized Nanostructures (SONS), Az. ESF: 05-SONS-014; DFG: KI 411/14, 2006-2009)

### Wissenschaftliche Kooperationen

Dr. H. Bock, Centre de Recherche Paul Pascal, CNRS, Université Bordeaux I (F): Elektrolumineszierende diskotische Mesogene

Prof. Dr. U. Gösele, Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik, Halle (Saale): Photonische Kristalle aus makroporösem Silizium

Prof. Dr. J. W. Goodby, Department of Chemistry, The University of York (GB): Flüssigkristalle-Nanoteilchen

Prof. Dr. E. Gorecka, University of Warsaw (PL): Flüssigkristalle-Nanoteilchen

Prof. Dr. D. Guillon, Université Strasbourg (F): Flüssigkristalle-Nanoteilchen

Prof. Dr. J. C. Hummelen, Universität Groningen (NL): Organische Halbleiter für Plastiksolarzellen

Prof. Dr. S. J. Picken, Department of Materials Science and Technology, Delft University of Technology, Delft (NL): Flüssigkristalline Gläser

Prof. Dr. J.-L. Serrano, Universidad de Zaragoza (E): Flüssigkristalle-Nanoteilchen

Prof. Dr. Emma Thorn-Csanyi, Universität Hamburg: Elektrolumineszierende Flüssigkristalle

Prof. Dr. R. Wehrspohn, Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik, Halle (Saale): Photonische Kristalle aus makroporösem Silizium

## Prof. Dr. Claudia Schmidt

### Publikationen

Becker, P.; Siebert, H.; Noirez, L.; Schmidt, C. Shear-Induced Order in Nematic Polymers. *Macromol. Symp.* 2005, 220, 111–122.

Kleinschmidt, F.; Hickl, M.; Saalwächter, K.; Schmidt, C.; Finkelmann, H. Lamellar Liquid Single Crystal Hydrogels: Synthesis and Investigation of Anisotropic Water Diffusion and Swelling. *Macromolecules* 2005, 38, 9772–9782.

Burgemeister, D.; Farrell, T.; Schmidt, C. Lyotropic Lamellar Polysiloxanes with Isomeric Amphiphilic Side Chains. *Macromol. Chem. Phys.* 2006, 207, 396–403.

Frank, Ch.; Strey, R.; Schmidt, C.; Stubenrauch, C. Coexisting Lamellar Phases in Water-Oil-Surfactant Systems Induced by the Addition of an Amphiphilic Block Copolymer. *J. Coll. Interface Sci.*, in press (available online 30 June 2006).

Schmidt, C. Rheo-NMR Spectroscopy. in Webb, G. A. (Ed.), *Modern Magnetic Resonance*, Vol. 3, Applications in Materials, Food and Marine Sciences, Springer, New York 2006.

18 externe Vorträge und Poster

### Studienabschlussarbeiten

Michael Blaschke, <sup>2</sup>H-NMR-Untersuchungen der Scherorientierung der lamellaren Phase des lyotropen Systems Lecithin/n-Dekan/D<sub>2</sub>O, Diplomarbeit Physik, 2005.

### Messen/Tagungen/Seminare

33rd Topical Meeting Liquid Crystals, Paderborn, 16. – 18. März 2005 (Mitglied im Scientific Committee)

Frühjahrstreffen der NMR-Freunde, Blomberg, 18. – 21. Februar 2005 (Organisation)

Sino-German Symposium on NMR Application in Polymer and Biopolymer Science, Department of Macromolecular Science, Fudan University, Shanghai, 28. August – 2. September 2005 (Kontaktperson auf deutscher Seite)

Workshop „Nanochemie“ bei Nano4girls (Nanotag für Mädchen im Heinz-Nixdorf-Forum), 19. November 2005 (Organisation und Leitung des Workshops)

### Weitere Funktionen

Gutachterin für zahlreiche Zeitschriften, DFG, Alexander von Humboldt-Stiftung u. a.

Mitglied des Fakultätsrates der Fakultät für Naturwissenschaften, Mitglied des Prüfungsausschusses des Department Chemie, Studiengangsmanagerin der BSc- und MSc-Studiengänge Chemie

### Forschungsprojekte

Orientierung und Strukturbildung lyotroper Flüssigkristalle im Scherfeld (DFG bis 2005)

NMR-Spektroskopie und Diffusimetrie zur Untersuchung der Aggregation von Farbstoffmolekülen

Bildung multilamellarer Vesikel in lamellaren Mesh-Phasen (DAAD, Kooperation mit Lund, Schweden)

Neue Rheo-NMR-Methoden zur Untersuchung von Flüssigkristallen und Flüssigkristallpolymeren (DFG, Kooperation mit Kaliningrad, Russland)

Synthese kugelförmiger Mikropartikel auf Melaminbasis

### Aktuelle Kooperationen

Prof. Dr. Paul T. Callaghan, School of Chemical and Physical Sciences, Victoria University of Wellington, Wellington, Neuseeland

Prof. Dr. Heino Finkelmann, Dr. Markus Hickl, Institut für Makromolekulare Chemie, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Dr. Laurence Noirez, Laboratoire Léon Brioullin, CE-Saclay, Gif-sur-Yvette, Frankreich

Prof. Dr. Ulf Olsson, Center for Chemistry and Chemical Engineering, Lund University, Schweden

Prof. Dr. Yurii A. Shchipunov, Institute of Chemistry, Far East Department, Russian Academy of Sciences, Vladivostok, Russland

Dr. Cosima Stubenrauch, School of Chemical & Bioprocess Engineering, University College Dublin

Prof. Dr. Nikolay Sinyavsky, Department Physik, Baltische Staatsakademie, Kaliningrad, Russland

Dr. Felix Kleinschmidt, Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, Orsay

### Gastwissenschaftler

Dr. Jean-François Berret, Université Denis Diderot, Paris, Frankreich (Gastvortrag)

Prof. Alfred Blume, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg (Gastvortrag)

Dr. Victor Litvinov, DSM Research, Geleen, Niederlande (Gastvortrag)

Prof. Ulf Olsson, Physical Chemistry 1, Lund University, Sweden (Projektbesprechung)

Bruno Medronho, University of Coimbra, Portugal (zwei kurzzeitige Forschungsaufenthalte)

Prof. Dr. Nikolay Sinyavsky, Baltische Staatsakademie, Kaliningrad, Russland (dreimonatiger Forschungsaufenthalt)

Prof. Dr. Felix Tuczek, Institut für Anorganische Chemie, Christian-Albrechts-Universität Kiel (Gastvortrag)

## Prof. Dr. Klaus Huber

### Publikationen

Kramer, T.; Röder, T.; Huber, K.; Kitzrow, H. S. Surface Modification of Epoxy-Functionalized Acrylate Colloids. *Polymers for Advanced Technologies* (2005) 16, 38

Kramer, T.; Schweins, R.; Huber, K. Silsesquioxane Molecules and Polystyrene Chains as a Model System for Colloid-Polymer Mixtures in the Protein-Limit. *Macromolecules* (2005) 38, 151

Kramer, T.; Schweins, R.; Huber, K. Small-Angle Neutron Scattering of dilute Polystyrene Chains at the Protein Limit of a Colloid-Polymer Mixture. *Journal of Chemical Physics* (2005) 123, 014903

Kramer, T.; Schweins, R.; Huber, K. Coil dimensions of Polystyrene Chains in Colloid-Polymer Mixtures at the Protein-Limit: A SANS Study. *Macromolecules* (2005) 38, 9783

Schweins, R.; Goerigk, G.; Huber, K. Specific Interactions between Anionic Polyacrylate Chains and Ca<sup>2+</sup>, Sr<sup>2+</sup> and Ba<sup>2+</sup> Ions. *The Europ.Phys.J. E-Soft Matter* (2006) accepted

Huber, K.; Witte, T.; Hollmann, J.; Keuler-Baumann, S. Controlled Formation of Ag-Nanoparticles by Means of Long Chain Sodium Polyacrylates in Dilute Solution. *Journal of the American Chemical Society* (2006) accepted

Witte, T.; Haller L. A.; Luttmann, E.; Krüger, J.; Fels, G.; Huber, K. Time Resolved Structure Analysis of Growing



beta-Amyloid Fibers  
Journal of Structural Biology (2006) submitted

Lages, S.; Schweins, R.; Huber, K.  
Temperature induced Collapse of Alkaline Earth  
Cation – Polyacrylate Anion Complexes  
Journal of Physical Chemistry (2006) submitted

## Weitere Funktionen

Prof. Dr. K. Huber ist Vorsitzender des Prüfungsausschusses für das Fach Chemie.

## Aktuelle geförderte Forschungsprojekte

Ab 2005, DFG Projekt im Normalverfahren  
Polyelectrolyte Conformations and Phase bTransition  
24Monate x IIa(1/2)BAT + 14.000EURO Sachmittel

Ab 1.1.2006, Kooperation mit BASF  
Anorganische Nanopartikel  
24Monate x IIaBAT

## Aktuelle Kooperationen

Priv.Do. U. Beginn, Universität RWTH Aachen  
(Selbstorganisation niedermolekularer Systeme)

Prof. Dr. P. Behrens, Universität Hannover und  
Prof. H. Menzel, Technische Universität Braunschweig  
(kontrollierte Bildung von Silikatpartikel).

Prof. G. Fels, Universität Paderborn (Aggregation  
von  $\beta$ -Amyloid)

Prof. Fischer, Universität Bochum (Bildung von  
MOF-5 Teilchen).

Dr. G. Goerigk, JUSIFA Hamburg (anomale Röntgenkleinwinkelstreuung an Polyelektrolyt-Metallkation-Salzen)

Dr. R. Schweins, ILL Grenoble (Neutronenstreuung an Polyelektrolyt-Metallkation-Salzen und an Kolloid-Polymer-Gemischen)

## Prof. Dr. Guido Grundmeier

### Publikationen

C. Stromberg, P. Thissen, I. Klueppel, N. Fink, G. Grundmeier:  
Synthesis and characterisation of surface gradient thin conversion films on zinc coated steel. *Electrochimica Acta* 52 No. 3, 804-815 (2006)

G. Sun, G. Grundmeier:  
Synthesis and application of SERS active substrates prepared by combined PVD and PCVD technology. *Thin Solid Films*, in press, available online (2006)

M.L. Zheludkevich, R. Serra, G. Grundmeier, L.H. Yang and M.G.S. Ferreira:  
Barrier properties of polyurethane coil coatings treated by microwave plasma polymerization. *Surface and Coatings Technology* 200 No. 12-13, 4040-4049 (2006)

X. Wang, G. Grundmeier:  
Surface analytical studies of Ar-plasma etching of thin heptadecafluoro-1-decene plasma polymer films. *Applied Surface Science* 252 No. 23, 8331-8336 (2006)

X. Wang, G. Grundmeier:  
Morphology and patterning processes of thin organosilicon and perfluorinated bi-layer plasma polymer films. *Plasma Processes and Polymers* 3 (1), 39-47 (2006)

G. Grundmeier, B. Rossenbeck, K.J. Roschmann, P. Ebbinghaus, M. Stratmann:  
Mechanistic Understanding of the Corrosion Protection of Zn-Phosphate Containing Water Borne Dispersion Coatings on Steel Part II: Corrosive de-adhesion of model films on iron substrates. *Corrosion Science* 48 No. 11, 3716-3730 (2006)

B. Rossenbeck, P. Ebbinghaus, M. Stratmann, G. Grundmeier:  
Mechanistic Understanding of the Corrosion Protection of Zn-Phosphate Containing Water Borne Dispersion Coatings on Steel Part I: Design and Analysis of Model Water Based Latex Films on Iron Substrates. *Corrosion Science* 48 No. 11, 3703-3715 (2006)

K. Wapner, M. Stratmann, G. Grundmeier:  
In-situ infrared spectroscopic and Scanning Kelvin Probe measurements of water and ion transport kinetics at model polymer/metal interfaces. *Electrochimica Acta* 51 No. 16, 3303-3315 (2006)

N. Fink, B. Wilson, G. Grundmeier:  
Formation of ultra-thin amorphous conversion films on zinc alloy coatings Part 2: Nucleation and growth of inorganic-organic thin hybrid films. *Electrochimica Acta* 51 No. 15, 3066-3075 (2006)

B. Wilson, N. Fink, G. Grundmeier:  
Formation of ultra-thin amorphous conversion films on zinc alloy coatings Part 1: Composition and reactivity of native oxides on ZnAl(0.05%) coatings. *Electrochimica Acta* 51 No. 15, 2956-2963 (2006)

M.L. Zheludkevich, R. Serra, G. Grundmeier, L.H. Yang and M.G.S. Ferreira:  
Barrier properties of polyurethane coil coatings treated by microwave plasma polymerization. *Surface and Coatings Technology* 200 No. 12-13, 3947-3955 (2006)

G. Grundmeier, M. Stratmann:  
Adhesion and de-adhesion processes at polymer/metal interfaces. *Annual Reviews Materials Research* 35, 571-615 (2005)

K. Wapner, B. Schönberger, M. Stratmann, G. Grundmeier:  
Applications of a new height regulated Scanning Kelvin Probe in Adhesion and Corrosion. *Science Journal of the Electrochemical Society* 152 (3), E114-E122 (2005)

K. Wapner, G. Grundmeier:  
Spectroscopic analysis of the interface chemistry of ultra-thin plasma polymer films on iron. *Surface and Coatings Technology* 200 (1-4), 100- 103 (2005)

M. Giza, J. Raacke, G. Grundmeier:  
Combination of FTIR reflection absorption spectroscopy and work function measurement for in-situ studies of plasma modification of polymer and metal surfaces. *Surface and Coatings Technology* 200 (1-4), 280- 283 (2005)

G. Grundmeier, J. Carpentier:  
Chemical structure and morphology of thin bi-layer and composite organosilicon and fluorocarbon microwave plasma polymer films. *Surface and Coatings Technology* 192, Issues 2-3, 189-198 (2005)

K. Wapner, G. Grundmeier:  
Application of the Scanning Kelvin Probe for the Study the Corrosion Resistance of Interfacial Thin Silicon Organic Films at Adhesive/Metal Interfaces. *Silicon Chemistry* 2, No. 5-6, 235-245 (2005)

## Aktuelle Forschungsprojekte

Christian-Doppler-Labor für Polymer/Metall-Grenzflächen am MPI für Eisenforschung (Christian-Doppler-Forschungsgesellschaft, Wien)

Partner der „International Max Planck Research School for Surface and Interface Engineering in Advanced Materials“ an der Ruhr-Universität Bochum (IMPRS-SurMat)

## Wissenschaftliche Partner

CAU Kiel, Materials Science

University of Bochum (Materials Science, Geosciences)

IST in Lissabon

University of Helsinki, Department of Physical Chemistry

State Key Labs in Xiamen, China

## Industriepartner

BASF AG

BASF Coatings AG

ThyssenKrupp Stahl AG

Chemetall

Henkel KGaA

## Prof. Dr. Hans-Joachim Warnecke

### Publikationen

D. Bothe, C. Stemich, H.-J. Warnecke:  
Mixing in a T-shaped microreactor: scales and quality of mixing. pp. 351-357 in 16th European Symposium on Computer Aided Process Engineering and 9th International Symposium on Process Systems Engineering (W. Marquardt, C. Pantelidis, eds.), Garmisch-Partenkirchen (Germany), Elsevier 2006.

D. Bothe, M. Schmidtke, H.-J. Warnecke:  
VOF-Simulation of the lift force for single bubbles in a simple shear flow.  
Chem. Eng. Tech. 2006, 29(9), 1048-1053

D. Bothe, A. Steinkemper, H.-J. Warnecke:  
Modeling the dehydration of tert-butyl alcohol and avoidance of the formation of oligomers.  
Ind. Eng. Chem. Res. 2006, 45, 2986-2993

D. Bothe, C. Stemich, H.-J. Warnecke:  
Fluid mixing in a T-shaped micro-mixer.  
Chem. Eng. Sci. 2006, 61, 2950-2958

D. Bothe, H.-J. Warnecke:  
VOF-simulation of rising air bubbles with mass transfer to the ambient liquid.  
pp. 61-72 in Proc. of 10th Workshop on „Transport Phenomena in Two-Phase Flow“ (C. Boyadjev, J. Hristov, Eds.), Slanchev Bryag, Bulgaria 2005.

M. Schmidtke, D. Bothe, H.-J. Warnecke:  
VOF-simulation of the rise behaviour of single air bubbles in linear shear flows.  
in Proc. of 3rd Int. Berlin Workshop on „Transport Phenomena with moving boundaries“ (M. Kraume, Ed.), Berlin 2005.

## Wissenschaftliche Kooperationen

Prof. Dr. D. Bothe, CCES, RWTH Aachen

Prof. Dr. N. Rübiger, IUW, Universität Bremen

Prof. Dr. B. Weigand, ITLR, Universität Stuttgart

Prof. Dr. H. Viljoen, Chemical Engineering, University of Lincoln, USA

## Industriekooperationen

BASF AG, Ludwigshafen

BTS, Leverkusen

BUSS, Butzbach

Zimmermann GmbH & Co., Gütersloh

## Aktuell geförderte Projekte

Strömungsmischen Mikroreaktor, DFG SPP 1141

Wasseraufbereitung Lebensmittelindustrie, Deutsche Bundesstiftung Umwelt (DBU)

Zinn Organik, MUNLV NRW

Simulationsmethoden, BASF AG

## Weitere Funktionen

Dekan der Fakultät für Naturwissenschaften (seit Oktober 2003)

Stellvertretender Vorsitzender des GVC/DEHEMA-Fachausschusses „Produktionsintegrierte Wasser-/Abwassertechnik“

Stellvertretender Vorsitzender des Westfälischen Umwelt Zentrums (WUZ)

## Prof. Dr. Hans-Jürgen Becker

### Publikationen

H.-J. Becker, A. Müller, Kognitive Zustandsanalysen von Grundschulkindern nach außerschulischen Lernerfahrungen mit chemischen Sachverhalten. In: A. Pitton (Hrsg.), Relevanz fachdidaktischer Forschungsergebnisse für die Lehrerbildung, Münster (2005), S. 486 - 487

H.-J. Becker, Ein Blick zurück: sine ira et studio. In: A. Wellensiek, M. Welzel & T. Nohl (Hrsg.), Didaktik der Naturwissenschaften - Quo Vadis?, Logos Verlag Berlin, (2005), S. 40-49

H.-J. Becker, I. Eilks, E. Sumfleth, Trendbericht Chemiedidaktik 2004. In: Nachrichten aus der Chemie 53 (2005), Heft. 3, S. 317 - 321

H.-J. Becker, FADOK als Energiequelle. Zeitschriften-Publikation zur Thematik „Energie“ im Zeitraum 1990 bis 2004. In: Naturwissenschaften im Unterricht 16 (2005), Heft 1 S. 345

H.-J. Becker, R. Arendt, J. Busse, St. Cordes, Der Paderborner Lehransatz „Forschung in der Lehre“. In: Die wilde 13, (SS 2005), Nr. 19, S. 9 - 12

H.-J. Becker, T. Deperschmidt, Deutsche und russische Chemie-Freeware im Internet - eine studentische Analyse und Bewertung. In: chimica didactica, 31 (2006), S. 113-120

H.-J. Becker, A. Müller, Kognitive Zustandsanalysen von Kindern nach chemischen Verstehensprozessen in außerschulischen Handlungssituationen. In: A. Pitton (Hrsg.), Lehren und Lernen mit neuen Medien, Münster (2006), S. 123-125

H.-J. Becker, V. Pompetzki, „Rund um die Marmelade“ - Kinderfreizeitinitiativen und Lernen an Stationen. In PdN-Ch 55 (2006), H.3, Seite 6-9

H.-J. Becker, Vorwort. In: A. Müller, Kognitive Zustandsanalysen von Kindern nach chemischen Verstehensprozessen in außerschulischen Handlungssituationen. Eine rekonstruktive Analyse kognitiver Endzustände. P. Lang-Verlag, Frankfurt am Main (2006), S. 1

H.-J. Becker, G. Lück, Trendbericht Chemiedidaktik 2005. In: Nachrichten aus der Chemie 54 (2006), Heft 3, S. 308 - 312

H.-J. Becker, A. Müller, Leserbrief zu „V. Wis-kamp, Physikalisch-chemische Experimente im Kindergarten. MNU 58 (2006), Nr. 7, S. 415-420. In: MNU 59 (2006), Nr. 6, S. 368 - 369

Andreas Müller, H.-J. Becker: Kognitive Zustandsanalysen von Kindern nach chemischen Verstehensprozessen in außerschulischen Handlungssituationen. (in Vorbereitung für MNU 2007)

H.-J. Becker, Eva Schulte, „Tütensuppen“ – Stationenlernen im Unterrichtspraktikum an der Berliner Sophie-Scholl-Gesamtschule. Praxis der Naturwissenschaften – Chemie in der Schule (angenommen für 2007, H. 3) Fachdidaktik Chemie. Aulis. Köln. 3. Auflage in Vorbereitung

H.-J. Becker, Diverse Buchrezensionen sowie Zeitschriften-Rundschauen deutsch- und englischsprachiger Publikationsorgane. In: Praxis der Naturwissenschaften – Chemie in der Schule (2005-2006) und in: Chemie Konkret (2005-2006)

H.-J. Becker, Trendbericht „Chemiedidaktik 2006“ (in Vorbereitung für Nachrichten aus der Chemie 55 (2007), H. 3

### Weitere Funktionen

Leiter des Autorenteam des Lehrwerks „Fachdidaktik Chemie“ (3. Auflage), Köln, Aulis-Verlag

Leitung der Arbeitsgruppe „Elektronische Erfassung von Quellen zur Chemiedidaktik“ (FADOK; GEChU, BUEDOK)

Vorsitzender der Studienkommission „Lehrämter Chemie“

Regionale Tagungsleitung der GDCh-Tagung, Paderborn, September 2005 (zusammen mit Kollegen Prof. Dr. Reinhold)

Gutachter im Auftrag der Zentralen Evaluations- und Akkreditierungsagentur Hannover

### Weiterbildungsaktivitäten

Leitung der Regionalen GdCh-Chemielehrerfortbildung 2005: Entwicklungen in Teilgebieten der Chemie – Perspektiven für Chemieunterricht? (sechs Einzelvorträge)

Leitung der Regionalen GdCh-Chemielehrerfortbildung 2006: Chemie in außerschulischen Erziehungs- und Bildungsaktivitäten: Zwischen Freizeit und systematischer Unterweisung (sechs Einzelvorträge)

Leitung der Regionalen GdCh-Chemielehrerfortbildung 2007: Chemielernen an/mit Alltagsstoffen – Anregungen für einen chemisch-orientierten Sachunterricht (sechs Einzelvorträge in Vorbereitung)

Leitung der Überregionalen GdCh-Chemielehrerfortbildung an der Universität Paderborn: Waschmittel als Thema im Grundschulunterricht (2005). Referenten: H.-J. Becker; Ch. Wolff, Fa. Henkel; H. Hildebrandt

Leitung der Überregionalen GdCh-Chemielehrerfortbildung an der Universität Paderborn: Alltagsstoffe im Grundschulunterricht - Experimentelle und chemiedidaktische Zugänglichkeit an Beispielen (16./17.11.2006) (Referenten: H.-J. Becker; Ch. Wolf, Fa. Henkel; V. Pompetzki)

Leitung der Überregionalen GdCh-Chemielehrerfortbildung an der Universität Paderborn: Experimentierkästen für den Sachunterricht in der Grundschule (Referenten: H.-J. Becker, V. Pompetzki, in Vorbereitung für den 31.05./01.06.2007)

### Kinderfreizeitprojekte im AK Chemiedidaktik

Das Marmeladen-Projekt (Frühjahr 2005)

Frühstückscerealien (Oktober 2005)

Geldfälschung und andere Kriminalfälle (April 2006)

Marmelade, Konfitüre und Gelee. Viel Frucht aufs Brot (Juli 2006)

Damit alles blitzt und blinkt und sauber ist ... Rund um Wasser, Wasch- und Reinigungsmittel (Oktober 2006)

Experimente rund ums Ei (in Vorbereitung für Ostern 2007)

## Vorträge

Kognitive Zustandsanalysen von Kindern nach chemischen Verstehensprozessen in außerschulischen Handlungssituationen. GDCh - Tagung Jena. 2005 (mit A. Müller)

Der Paderborner Lehransatz "Forschung in der Lehre" - Studierende präsentieren Studienleistungen. Chemielehrerfortbildung GDCh. Universität Paderborn 2004 (und Lehramtsstudierende)

Trends in der Chemiedidaktik: Bildung und Ausbildung in der Bewegung. Chemielehrerfortbildung GDCh. Universität Paderborn. 2005

Die Gedanken sind frei - Alltagstheorie als Kontext für Chemie(lernen) am Beispiel "Waschmittel". Freie Universität Berlin. 2005

Konzeptionelle Vielfalt im naturwissenschaftlichen Unterricht - Anregungen aus chemiedidaktischer Perspektive. SINUS-Arbeitsgruppe Ostwestfalen. Gesamtschule Elsen. 2006

Die Datenbank FADOK - Eine Möglichkeit für forschendes und selbstreflektierendes Berufshandeln. Studienseminar Hagen. 2006

## Forschungsprojekte

Freie Universität Berlin, Fachbereich Biologie, Chemie, Pharmazie. Abteilung Chemiedidaktik (Prof. Dr. Bolte): Kinderfreizeitinitiativen, u. a. ein gemeinsames Dissertationsvorhaben (Sabine Streller)

Friedrich-Schiller-Universität Jena, Chemisch-Geowissenschaftliche Fakultät, Arbeitsgruppe Chemiedidaktik (Prof. Dr. Woest): Chemiedidaktische Ausbildungsprozesse

Universität Dortmund, Fachbereiche Mathematik & Naturwissenschaften, Fachbereich Chemie (Dr. Scheuer): Kindliche Verstehensförderungen

Universität Paderborn, AK Chemiedidaktik (Prof. Dr. Becker, Dr. Andreas Müller): Zum Einfluss „realer“ Lernumgebungen auf die Förderung kindlicher Verstehensprozesse zu grundschulgeeigneten Chemieinhalten (Antrag auf Förderung durch den Fonds des VCI in Vorbereitung)

# Department Physik

## Prof. Dr. Wolfgang Sohler

### Publikationen

#### 2005

W. Sohler, B. Das, D. Dey, S. Reza, H. Suche, and R. Ricken: „Erbiium-doped lithium niobate waveguide lasers“, *IEICE Transactions Electron.* E88-C, No. 5, 990-997 (2005) (invited paper)

B.K. Das, W. Sohler, and V. Dierolf, „Internal fluorescence induced refreshment of thermally fixed photorefractive grating in Ti:Fe:Er:LiNbO<sub>3</sub> for stable laser emission“, *Electronics Lett.* 41, 646-647 (2005)

A. Hellwig, H. Suche, R. Schrör, and W. Sohler: „Titanium-indiffused waveguides in magnesium oxide doped stoichiometric lithium niobate (MgO:SLN)“, *Proc. European Conference on Integrated Optics (ECIO '05)*, Grenoble, April 2005, p. 254-257, paper ThB2-5

S. Orlov, I. Kadetov, W. Grundkötter, V. Quiring, R. Ricken, W. Sohler: „MIR-optical parametric fluorescence: from photon pairs to pump depletion“, *Proc. European Conference on Integrated Optics (ECIO '05)*, Grenoble, April 2005, p. 237-240

S. Reza, D. Dey, Y. Min, R. Ricken, and W. Sohler: „Integrated optical ring laser in Er:LiNbO<sub>3</sub>“, *Proc. European Conference on Integrated Optics (ECIO '05)*, Grenoble, April 2005, p. 81-84

W. Grundkötter: „Quantitative model for high power optical parametric fluorescence in Ti:PPLN channel waveguides“, *Proc. European Conference on Integrated Optics (ECIO '05)*, Grenoble, April 2005, p. 630-633 (poster session)

A. Barthélémy, V. Couderc, P. Pioger, C. De Angelis, F. Baronio, W. Sohler, V. Quiring, Y. Min: „Spatial Routing of signals at 1549 nm by soliton emission in engineered nonlinear waveguides“, *Proc. European Conference on Integrated Optics (ECIO '05)*, Grenoble, April 2005

W. Sohler, W. Grundkötter, D. Hofmann, I. Kostjucenko, S. Orlov, V. Quiring, R. Ricken, G. Schreiber, and H. Suche: „Integrated Optical Parametric Oscillators with Ti:PPLN Waveguides“, *Proc. Conference on Laser and Electro-Optics (CLEO 2005)*, Baltimore, May 2005, paper CML1

T. Pertsch, R. Schiek, R. Iwanow, G. Stegeman, U. Peschel, F. Lederer, Y.H. Min, and W. Sohler: „Direct measurement of photonic band structures by second harmonic generation“, *Proc. Conference on Laser and Electro-Optics (CLEO 2005)*, Baltimore, May 2005, paper QThK4

R. Iwanow, D. May-Arrijoa, D.N. Christodoulides, G. Stegeman, Y.H. Min, and W. Sohler: „Observation of the discrete Talbot effect“, *Proc. Conference on Laser and Electro-Optics (CLEO 2005)*, Baltimore, May 2005, paper QFA3

P.-H. Pioger, V. Couderc, L. Grossard, A. Barthélémy, F. Baronio, C. De Angelis, Y.H. Min, V. Quiring, W. Sohler: „Temporal reshaping of picosecond pulses using quadratic soliton deflection in engineered film PPLN waveguide“, *Con-*

*ference on Laser and Electro-Optics (CLEO 2005)*, Baltimore, May 2005

S. Orlov, W. Grundkötter, V. Quiring, R. Ricken and W. Sohler: „Synchronously Pumped Mid-Infrared Ti:PPLN Waveguide Optical Parametric Oscillator“, *Proc. Conference on Mid-Infrared Coherent Sources (MICS 2005)*, Barcelona/Spain, November 2005, paper Mo2

W. Sohler, B.K. Das, D. Dey, S. Reza, H. Suche, and R. Ricken, „Recent Advances of Erbium-Doped Lithium Niobate Waveguide Lasers“, *Proc. of SPIE, Vol. 5949, SPIE-International Congress on Optics and Optoelectronics (COO'05)*, Warsaw, Poland, August 28 – September 2, 2005 (invited), paper 5956-11

W. Sohler, W. Grundkötter, D. Hofmann, I. Kostjucenko, M. Hübner, S. Orlov, V. Quiring, R. Ricken, G. Schreiber, H. Suche: „Mid-infrared optical parametric fluorescence and oscillation in Ti:PPLN waveguide structures“, *Proc. of SPIE, Vol. 5949, SPIE-International Congress on Optics and Optoelectronics (COO'05)*, Warsaw, Poland, August 28 – September 2, 2005 (invited), paper 5949-01

S.L. Jansen, D. van den Borne, C. Climent, M. Serbay, C.-J. Weiske, H. Suche, P. Krummrich, S. Spaelter, S. Calabró, N. Hecker-Denschlag, P. Leisching, W. Rosenkranz, W. Sohler, G.D. Khoe, T. Koonen, H. de Waardt: „10,200km 22x2x10Gbit/s RZ-DQPSK dense WDM transmission without inline dispersion compensation through optical phase conjugation“, *OFC 2005 Anaheim*, postdeadline paper 28

T. Pertsch, R. Iwanow, R. Schiek, and G. I. Stegeman U. Peschel and F. Lederer Y. H. Min and W. Sohler: „Spatial ultrafast switching and frequency conversion in lithium niobate waveguide arrays“, *Opt. Lett.* 30, 177-179 (2005)

R. Iwanow, R. Schiek, G. Stegeman, Y.H. Min, W. Sohler: „Discrete modulational instability in periodically poled lithium niobate waveguide arrays“, *Optics Express* Vol. 13, 7794-7799 (2005)

R. Iwanow, R. Schiek, G. Stegeman, T. Pertsch, F. Lederer, Y. Min, and W. Sohler: „Arrays of weakly coupled, periodically poled lithium niobate waveguides: beam propagation and discrete spatial quadratic solitons“, *Opto-Electronics Review* 13(2), 113-121 (2005)

R. Iwanow, D.A. May-Arrijoa, D.N. Christodoulides, G.I. Stegeman, Y.H. Min, W. Sohler: „Discrete Talbot Effect in Waveguide Arrays“, *Physical Review Letters* 95, 053902 (2005)

P.-H. Pioger, V. Couderc, L. Grossard, A. Barthélémy, F. Baronio, C. De Angelis, Y.H. Min, V. Quiring, W. Sohler: „Temporal reshaping of picosecond pulses at 1548 nm based on soliton emission and spatial filtering in non-uniform Ti:PPLN waveguides“, *Photonic Techn. Lett.* 17 (11), 2373-2375 (2005)

R. Schiek, R. Iwanow, G. Stegeman, T. Pertsch, F. Lederer, Y.H. Min, W. Sohler: „Low-power, multiport, ultrafast, parametric switching in cascaded waveguide couplers“, *Appl. Phys. Lett.* 87, 011109 (2005)

#### 2006

S.L. Jansen, D. van den Borne, B. Spinnler, S. Calabró, H. Suche, P.M. Krummrich, W. Sohler, G.-D. Khoe, and H. de Waardt: „Optical phase conjugation for ultra long-haul phase-shift-

keyed transmission“, *J. Lightw. Techn.* 24, no. 1, 54 – 64 (2006)

W. Sohler, W. Grundkötter, H. Herrmann, J. H. Lee, Y. H. Min, V. Quiring, H. Suche, R. Schiek, T. Pertsch, F. Lederer, R. Iwanow, G. I. Stegeman, S. L. Jansen: „All-optical wavelength conversion, parametric amplification, multiplexing, and switching in integrated PPLN-devices“, *8th International Conf. on Transport Optical Networks (ICTON 2006)*, Nottingham/UK, June 2006 (invited)

H. Hu, A.P. Milenin, R.B. Wehrspohn, H. Herrmann, W. Sohler: „Plasma etching of proton-exchanged lithium niobate“, *J. Vac. Sci. Technol. A*, vol. 24, no. 4, 1012 (2006)

F. Gómez Agís, C. Ware, D. Erasme, R. Ricken, V. Quiring, and W. Sohler: „10-GHz clock recovery using an optoelectronic phase-locked loop based on three-wave mixing in periodically poled lithium niobate“, *IEEE Photon. Techn. Lett.*, vol. 18, nos. 13-16, 1460 (2006)

F. Gómez, C. Ware, D. Erasme, R. Ricken, V. Quiring, and W. Sohler: „10 GHz clock recovery using an opto-electronic phase-locked loop based on four-wave mixing in periodically-poled lithium niobate“, *Proc. Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO 2006)*, Long Beach, May 2006

G. A. Siviloglou, K. G. Makris, R. Iwanow, R. Schiek, D. N. Christodoulides, G. I. Stegeman, Y. Min, and W. Sohler: „Discrete Quadratic Interface Solitons“, *Proc. Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO 2006)*, Long Beach, May 2006

V. Crozatier, G. Gorju, F. Bretenaker, J.-L. Le Gouët, I. Lorgère, B. Krishna Das, and W. Sohler: „Highly Coherent Electronically Tunable Waveguide Extended Cavity Diode Laser“, *Proc. Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO 2006)*, Long Beach, May 2006

S.L. Jansen, D. van den Borne, P.M. Krummrich, H. Suche, W. Sohler, G.D. Khoe, and H. de Waardt: „Transmission of 42.8-Gbit/s RZ-DQPSK over 42x94.5-km SSMF spans using optical phase conjugation and EDFA only amplification“, *Proc. ECOC 2006*

V. Crozatier, B. Krishna Das, G. Gorju, F. Bretenaker, J.-L. Le Gouët, W. Sohler and I. Lorgère: „Highly coherent electronically tunable waveguide extended cavity diode laser“, *Proc. 9th Intern. Conf. on Hole Burning, Single Molecule and Related Spectroscopies: Science and Applications (HBSM 2006)*, Aussois/France, June 2006

S. Reza, R. Ricken, V. Quiring, and W. Sohler: „Integrated frequency shifted feedback (FSF) laser for optical frequency domain ranging (OFDR)“, *2nd EPS-QEOD Europhoton Conference, Pisa/Italy*, paper FrB7, September 2006

V. Crozatier, G. Gorju, J.-L. Le Gouët, I. Lorgère, F. Bretenaker, W. Sohler, B. Krishna: „Highly coherent electronically tunable waveguide extended cavity diode laser“, *2nd EPS-QEOD Europhoton Conference, Pisa/Italy*, paper TuE3, September 2006

G. I. Stegeman, D. N. Christodoulides, S. Suntsov, K. G. Makris, G. A. Siviloglou, R. Iwanow, R. Schiek, R. Morendotti, A. Haché, H. Yang, G. Salamo, M. Sorel, Y. Min, and W. Sohler: „Spatial Solitons Along the Interface Between Discrete and Continuous Media“, *Lasers and Electro-Optics Society Annual Meeting (LEOS 2006)*, Montreal/Canada, Oct./Nov. 2006, invited paper



S. Reza, H. Herrmann, R. Ricken, V. Quiring, and W. Sohler: „Spectral characteristics of an integrated tunable frequency shifted feedback laser in erbium doped lithium niobate“, Proc. Photonics 2006, Hyderabad/India, December 2006, paper FrA 5, p. 250

V. Crozatier, B.K. Das, G. Baili, G. Gorju, F. Bretenaker, J.-L. Le Gouët, I. Lorgeté, and W. Sohler: „Highly Coherent Electronically Tunable Waveguide Extended Cavity Diode Laser“, IEEE Photonics Technol. Lett., Vol. 18, No. 14, 1527-1529 (2006)

P.-H. Pioger, L. Grossard, V. Couderc, A. Barthelemy, F. Baronio, C. De Angelis, Y. Min, V. Quiring, W. Sohler: „Ultra-fast reconfigurable spatial switching between a quadratic solitary wave and a weak signal“, Appl. Phys. B85, No. 1, 131-134 (2006)

## Dissertationen

*Werner Grundkötter*  
Dynamik nichtlinearer Wechselwirkungen zweiter Ordnung in integriert optischen Wellenleitern, 2006

*Selim Reza*  
Acoustooptically Tunable Waveguide Lasers in Erbium Doped Lithium Niobate, 2006

## Weitere Funktionen

### Mitgliedschaften:

Vorstand des Heinz Nixdorf Institut (HNI) der Universität Paderborn

Steering Committee „European Conference on Integrated Optics“ (ECIO)

Technical Programme Committee „13th European Conference on Integrated Optics“ (ECIO '07)

Advisory Committee „Contemporary Photonics Technology“ (CPT '05 and CPT '06)

Fachausschuss „Optische Nachrichtentechnik“ der ITG

Arbeitskreis Integrierte Optik (AKIO)

### Gutachtertätigkeiten für:

DFG: Einzelprojekte, Emmy-Noether-Nachwuchsgruppe, 2 Graduiertenkollegs, Forschergruppe

Alexander von Humboldt Stiftung

Optical Society of America (OSA): OSA-Fellowship, Wood-Prize

Viele Fachzeitschriften

## Forschungsprojekte

DFG-Forschergruppe „Integrierte Optik in Lithiumniobat: neue Bauelemente, Schaltkreise und Anwendungen“ (2. Förderphase, Sprecher: Prof. Wolfgang Sohler)

mit den Teilprojekten:

„MgO-dotierte, periodisch gepolte Wellenleiter in stöchiometrischem LiNbO<sub>3</sub>“ (Dr. Hubert Suche)

„Parametrische Fluoreszenzgeneratoren und Oszillatoren für das mittlere Infrarot“ (Prof. Wolfgang Sohler und P.D. Frank Kühnemann, Angewandte Physik, Universität Bonn)

„Nichtlineare konfokale Mikroskopie“ (Prof. Artur Zrenner)

„40 Gbit/s-Demonstrator mit PMD-Kompensation und Polarisationsmultiplex“ (Prof. Reinhold Noé, Institut für Elektrotechnik und Informationstechnik, Universität Paderborn)

„Lichtunterstützte periodische Polung“ (Prof. Carsten Buse, Physikalisches Institut, Universität Bonn)

Laufzeit: März 2004 – Januar 2007  
Förderer: DFG

„Integrated Optical Wavelength Converters and Parametric Amplifiers in Periodically Poled Lithium Niobate“

Laufzeit: August 2005 – Februar 2008  
Förderer: DFG

Materials World Network: „Nanoscale Structure and Shaping of Ferroelectric Domains“

Laufzeit: Juli 2006 – Juni 2009  
Förderer: DFG / NSF

„Periodisch gepolte und verspiegelte optische Wellenleiter in Lithiumniobat“

Laufzeit: November 2005 – März 2010  
Förderer: Universität Jena

„Berechnung und Simulation einfach resonanter integriert optischer parametrischer Oszillatoren“

Laufzeit: August 2005 – November 2005  
Förderer: Fraunhofer Institut f. Physikalische Messtechnik, Freiburg

## Aktuelle Kooperationen

### Intern:

Im Rahmen der DFG-Forschergruppe „Integrierte Optik in Lithiumniobat“:  
Prof. Dr. A. Zrenner (Experimentalphysik)  
Prof. Dr. R. Noé (Optische Nachrichtentechnik)

Im Rahmen des Projektes „Photonic crystal waveguides in LiNbO<sub>3</sub>“:  
Prof. Dr. R. Wehrspohn (Experimentalphysik)

### Extern:

Im Rahmen der DFG-Forschergruppe „Integrierte Optik in Lithiumniobat“:

Prof. Dr. K. Buse (Experimentalphysik, Universität Bonn)  
PD Dr. F. Kühnemann (Angewandte Physik, Universität Bonn)  
Associate Prof. Dr. V. Dierolf (Experimental Physics, Lehigh University, Bethlehem/USA)

Im Rahmen des DFG-Projektes „Integrated Optical Wavelength Converters and Parametric Amplifiers in Periodically Poled Lithium Niobate“:

Prof. Dr. K. Petermann (Elektrotechnik und Informatik, Technische Universität Berlin)  
Prof. Dr. H. Weber (Fraunhofer Institut für Software und Systemtechnik/Heinrich-Hertz-Institut)  
Prof. Hanyi Zhang (Tsinghua Universität, Peking/China)

Im Rahmen des DFG-Projektes Materials World Network: „Nanoscale Structure and Shaping of Ferroelectric Domains“:

Prof. S. Phillpot (Department of Materials Science and Engineering, University of Florida)  
Prof. Dr. V. Dierolf (Physics Department, Lehigh

University)

Prof. V. Gopalan (Materials Science and Engineering, Penn State University)

Im Rahmen des Projektes „Periodisch gepolte und verspiegelte optische Wellenleiter in Lithiumniobat“:

Prof. Dr. T. Pertsch (Physikalisch-Astronomische Fakultät, Universität Jena)

Im Rahmen des Projektes „Berechnung und Simulation einfach resonanter integriert optischer parametrischer Oszillatoren“:

Dr. V. Hinkov (Fraunhofer Institut f. Physikalische Messtechnik, Freiburg)

### Weitere Kooperationen mit:

Prof. W. Johnstone (University of Strathclyde, Glasgow)

Dr. F. Reynaud (Université de Limoges)

Dr. R. Ferrière (Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS) - Université Franche-Comté, Besançon)

Im Rahmen der Vorbereitung des ERA-SPOT Projektes „Waveguide Single Photon Sources“ (bewilligt durch BMBF ab Februar 2007):

Prof. P. Baldi (Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS) - Laboratoire de Physique de la Matière Condensée (LPMC)  
Prof. Dr. Laurell (Royal Institute of Technology (KTH))

Dr. H. Karlsson Cobolt AB (COB)

## Eingeladene Wissenschaftler/Innen

Dr. Hui Hu, Tsinghua University, Department of Electronic Engineering, Beijing, VR China  
Gastwissenschaftler im Rahmen der DFG-Forschergruppe „Integrierte Optik in Lithiumniobat“ (01.12.2005 – 31.01.2006)  
Betreuer: Prof. Sohler, Prof. Wehrspohn

Miguel García Granda, Universidad de Oviedo (15.09.2005 – 31.05.2006)

### DAAD-Förderung Forschungsaufenthalte ausländischer Wissenschaftler:

Dr. Djavadt Yusupov, Tashkent Aviation Institute, Republic of Uzbekistan (Mitte Oktober – Ende Dezember 2005)

Prof. Hong Sik Jung, Hongik University, Dept. of Electronic & Electrical Engineering, Korea (16.06. – 15.07.2006)

## Prof. Dr. Klaus Lischka

### Publikationen

#### 2005

S.F. Li, D.J. As, K. Lischka, D.G. Pacheco-Salazar, L.M.R. Scrofolaro, J.R. Leite, F. Cerdeira, E.A. Meneses  
Strong room temperature 510 nm emission from cubic InGaN/GaN multiple quantum wells  
MRS Symp. Proc. Vol. 831, E8.15 (2005)

A. Kharchenko, K. Lischka, K. Schmidegg, H. Sitter, J. Bethke, and J. Woitok  
In-situ and real-time characterization of MOCVD

growth by high resolution X-ray diffraction  
Rev. Sci. Instrum. 76, No. 3, 033101-1 (2005)

U. Woggon, E. Herz, O. Schöps, M.V. Artemyev, C. Arens, N. Rousseau, D. Schikora, K. Lischka, D. Litvinov, D. Gerthsen  
Hybrid epitaxial-colloidal semiconductor nanostructures  
Nano Letters 5 (3), 483-490 (2005)

Shunfeng Li, J. Schörmann, A. Pawlis, D.J. As, K. Lischka  
Cubic InGa<sub>1-x</sub>N/GaN multi-quantum wells and AlGa<sub>1-x</sub>N/GaN distributed Bragg reflectors for application in resonant cavity LEDs  
Microelectronics Journal 36, 963-968 (2005)

D.G. Pacheco-Salazar, S.F. Li, F. Cerdeira, E.A. Meneses, J.R. Leite, L.M.R. Scolfaro, D.J. As and K. Lischka:  
Growth and characterization of cubic In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N epilayers on two different types of substrates  
J. Crystal Growth 284 (3-4), 379 (2005)

H. Przybylinska, G. Kocher, W. Jantsch, D.J. As, and K. Lischka  
Photoconductivity study of Mg and C acceptors in cubic GaN  
AIP Conf. Proc. 772 (2005) 253

R. Goldhahn, C. Buchheim, V. Lebedev, V. Cimala, O. Ambacher, C. Cobet, M. Rakel, N. Esser, U. Rossow, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, S. Potthast, and D.J. As  
Dielectric function and critical points of the band structure for hexagonal and cubic GaN and AlN  
BESSY (Berliner Elektronenspeicherung-Gesellschaft für Synchrotronstrahlung m.b.H.) Annual Report 2005, ed. K. Godehusen, p. 206

## 2006

J. Schörmann, D.J. As, K. Lischka, P. Schley, R. Goldhahn, S.F. Li, W. Löffler, M. Hetterich, H. Kalt  
Molecular Beam Epitaxy of phase pure cubic InN  
Appl. Phys. Lett. 89, 261903 (2006)

J. Schörmann, S. Potthast, D.J. As, and K. Lischka  
Near UV emission from nonpolar cubic Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN Quantum Wells  
Appl. Phys. Lett. 89, 131910 (2006)

H. Potente, S. Preuß, Th. Preuß  
A New Approach for Temperature Measurement inside an Injection Molding Tool, Antec 2006, Charlotte NC, Mai 2006, Paper 103176

S. Preuß, D. Potthoff, Th. Preuß, K. Lischka  
LED encapsulation- a new approach of rear light design, Proceedings of SPIE 6198, 619801 (2006)

D.G. Pacheco-Salazar, F. Cerdeira, E.A. Meneses, J.R. Leite, S.F. Li, D.J. As and K. Lischka  
Optical measurements on c-InGa<sub>1-x</sub>N layers deposited on SiC substrates  
Semicond. Sci. Technol. 21, 846 (2006)

D.J. As, S. Potthast, J. Schörmann, S.F. Li, K. Lischka, H. Nagasawa, M. Abe  
Molecular beam epitaxy of cubic group III-Nitrides on free-standing 3C-SiC substrates  
Proc. ICSCRM-2005 Pittsburgh, PA/USA, Sept. 2005, abstract no. 3250,  
Materials Science Forum Vols. 527-529, 1489 (2006)

M. Abe, H. Nagasawa, S. Potthast, J. Fernandez, J. Schörmann, D.J. As, and K. Lischka  
Cubic GaN/AlGa<sub>1-x</sub>N HEMTs von 3C-SiC substrate for normally-off operation

IEICE Transactions on Electronics, E89-C (7), 1057 (2006)

A. Pawlis, K. Sanaka, S. Götzinger, Y. Yamamoto and K. Lischka,  
Investigation of excitons bound to fluorine donors in ZnSe  
Semicond. Sci. Technol. 21 (2006) 1412-1415

J. Schörmann, S. Potthast, M. Schnietz, S.F. Li, D.J. As, and K. Lischka  
Growth of ternary and quaternary cubic III-nitrides on 3C-SiC substrates  
phys. stat. sol. (c) 3, No. 6 (2006) 1604

S. Potthast, J. Schörmann, J. Fernandez, D.J. As, K. Lischka, H. Nagasawa, M. Abe  
Two-dimensional electron gas in cubic Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN heterostructures  
phys. stat. sol. (c) 3, No. 6 (2006) 2091

C. Simbrunner, K. Schmidegg, A. Bonanni, A. Kharchenko, J. Bethke, J. Woitok, K. Lischka, and H. Sitter  
In-situ and real-time monitoring of MOCVD growth of III-nitrides by simultaneous multi-wavelength-ellipsometry and X-ray diffraction  
phys. stat. sol. (a) 203, No. 7 (2006) 1704-1707

Ch. Arens, N. Rousseau, D. Schikora, K. Lischka, O. Schöps, E. Herz, U. Woggon, D. Litvinov, D. Gerthsen, and M.V. Artemyev  
Colloidal nanocrystals integrated in epitaxial nanostructures: structural and optical properties  
phys. stat. sol. (c) 3, No. 4 (2006) 861-864

D.J. As, S. Potthast, J. Fernandez, J. Schörmann, and K. Lischka  
Ni Schottky diodes on cubic GaN  
Appl. Phys. Lett. 88, 1521112 (2006)

D.J. As, S. Potthast, J. Fernandez, K. Lischka, H. Nagasawa, M. Abe:  
Mechanism of current leakage in Ni Schottky diodes on cubic GaN and Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N epilayers  
MRS Symp. Proc. Vol. 892, 283 FF 13.4.1 (2006)

D.J. As, S. Potthast, J. Fernandez, K. Lischka, H. Nagasawa, M. Abe  
Cubic GaN/AlGa<sub>1-x</sub>N Schottky-barrier devices on 3C-SiC substrates  
Microelectronic Engineering 83, 34 (2006)

## Dissertationen

Stefan Potthast: „Growth and Characterization of cubic AlGa<sub>1-x</sub>N/GaN based Devices“  
(Februar 2007)

Shunfeng Li: „Growth and Characterization of Cubic InGa<sub>1-x</sub>N based structures and devices“  
Juni 2005

## Preise/Auszeichnungen

Frau Marina Panfilova erhielt den DAAD Preis des Jahres 2006 für ausländische Studierende.

Frau Elena Tschumak erhielt 2006 ein Graduiertenstipendium der Universität Paderborn.

apl. Prof. Dr. Donat Josef As (Fakultät für Naturwissenschaften) erhielt 2006 zusammen mit Prof. Dr. Ulrich Hilleringmann (Fakultät für Elektrotechnik, Informatik und Mathematik) für ein gemeinsames Projekt einen Forschungspreis der Universität Paderborn.

## Aktuelle Kooperationen

Dr. Alexander Pawlis  
Mai/Juni 2006  
Stanford University, Ginzton Lab.  
Group of Prof. Yamamoto

Stefan Potthast  
September/Oktober 2006  
Universidade de Sao Pauli, Dept. Física dos Materiais e Mecânica/Brasilien

Prof. Dr. Klaus Lischka  
Oktober 2006  
Stanford University, Ginzton Lab.  
Group of Prof. Yamamoto

Marcio Peron Franco de Godoy, Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física, Departamento de Física da Matéria Condensada, Grupo de Propriedades Ópticas (Brasilien)  
Aufenthalt an der Universität Paderborn, Department Physik, von August 2006 - August 2007

## Prof. Dr. Artur Zrenner

### Publikationen

O. G. Schmidt, A. Rastelli, G. S. Kar, R. Songmuang, S. Kiravittaya, M. Stoffel, U. Denker, S. Stuffer, A. Zrenner, D. Grützmacher, B.-Y. Nguyen, P. Wennekers: „Novel nanostructure architectures“, Physica E 25, 280 (2004).

Y. Ducommun, M. Kroutvar, J. J. Finley, M. Bichler, A. Zrenner, and G. Abstreiter: „Dynamics of optically stored charges in InGaAs quantum dots“, Physica E 21, 886-891 (2004).

E. Beham, M. Betz, S. Trumm, M. Kroutvar, Y. Ducommun, H. J. Krenner, M. Bichler, A. Leitensdorfer, J. J. Finley, A. Zrenner, G. Abstreiter: „Physics and applications of self-assembled quantum dots“, phys. stat. sol (c) 1, 2131-2159 (2004).

S. Stuffer, P. Ester, A. Zrenner, and M. Bichler: „Power broadening of the exciton linewidth in a single InGaAs/GaAs quantum dot“, Appl. Phys. Lett. 85, 4202 (2004).

R. Schmidt, M. Vitzethum, R. Fix, U. Scholz, S. Malzer, C. Metzner, P. Kailuweit, D. Reuter, A. Wieck, M. C. Hübner, S. Stuffer, A. Zrenner, and G.H. Döhler: „Electroluminescence of single-dot nano-LEDs--optical spectroscopy of an electrically tunable few-electron/hole system“, Physica E 26, 110 (2005)

S. Stuffer, P. Ester, A. Zrenner, and M. Bichler: „Quantum optical properties of a single In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As-GaAs quantum dot two-level system“, Phys. Rev. B 72, 121301 (2005).

H. J. Krenner, S. Stuffer, M. Sabathil, E. C. Clark, P. Ester, M. Bichler, G. Abstreiter, J. J. Finley, and A. Zrenner: „Recent advances in exciton-based quantum information processing in quantum dot nanostructures“, New Journal of Physics 7, 184 (2005).

R. Schmidt, U. Scholz, M. Vitzethum, R. Fix, S. Malzer, C. Metzner, P. Kailuweit, D. Reuter, A. Wieck, M. C. Hübner, S. Stuffer, A. Zrenner, G. H. Döhler: „Single quantum dot nano-LEDs - spectroscopy of an electrically controlled few-particle system“, physica status solidi (c), Vol. 2, Issue 8, 2974-2977 (2005).

A. Zrenner, S. Stufler, P. Ester, and M. Bichler: „Manipulations of a qubit in a semiconductor quantum dot”, *Advances in Solid State Physics*, Vol. 45, pp. 173-184, ed. by B. Kramer (Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden) (2005)

A. Zrenner: „Quantum Dot Diodes”; in: „Optics of quantum dots and wires”, Artec House 2005, ISBN 1-58053-761-8, ed. by Garnett W. Bryant and Glenn S. Solomon.

S. Stufler, P. Ester, A. Zrenner, and M. Bichler: „Ramsey Fringes in an Electric-Field-Tunable Quantum Dot System”, *Phys. Rev. Lett.* 96, 037402 (2006).

S. Stufler, P. Machnikowski, P. Ester, M. Bichler, V. M. Axt, T. Kuhn, and A. Zrenner: „Two-Photon Rabi Oscillations in a Single InGaAs/GaAs Quantum Dot”, *Phys. Rev. B* 73 125304 (2006).

R. Schmidt, U. Scholz, M. Vitzethum, R. Fix, C. Metzner, P. Kailuweit, D. Reuter, A. Wieck, M. C. Hübner, S. Stufler, A. Zrenner, S. Malzer and G. H. Döhler: „Fabrication of genuine single-quantum-dot light-emitting diodes”, *Appl. Phys. Lett.* 88, 121115 (2006).

S. Michaelis de Vasconcellos, S. Stufler, S.-A. Wegner, P. Ester, A. Zrenner, and M. Bichler: „Quantum interferences of a single quantum dot in the case of detuning”, *Phys. Rev. B* 74, 081304(R) (2006).

A. Zrenner, S. Stufler, P. Ester, S. Michaelis de Vasconcellos, M. Hübner, and M. Bichler: „Recent developments in single dot coherent devices”, *phys. stat. sol. (b)* 243, 3696 (2006).

## Weitere Funktionen

Vorsitzender der zentralen wissenschaftlichen Einrichtung „Center for optoelectronics and photonics Paderborn“ (CeOPP).

Mitglied der Kommission für Planung und Finanzen, Universität Paderborn

NRW-NanoCluster für Informationstechnik, Vertreter der Universität Paderborn

Aufsichtsratsvorsitzender der Mechanics AG

Mitglied des Aufsichtsrats der Microstep IT AG

Gutachtertätigkeit für diverse Zeitschriften und Institutionen

## Forschungsprojekte

BMBF Förderschwerpunkt „Elektronenkorrelationen und Dissipationsprozesse in Halbleiter-Quantenstrukturen“, Teilprojekt 01 BM 917 „Deterministische Ladungsquelle“

BMBF Förderschwerpunkt „Nanoquit“, Teilprojekt 01 BM 466 „Einzelphotonquelle auf der Basis kohärenter Zustandskontrolle“

Forscherguppe Integrierte Optik in Lithiumniobat, Teilprojekt A3 „Nichtlineare konfokale Mikroskopie“

DFG Paketantrag (PAK 119), Teilprojekt: „Bestimmung inhärenter Kinetiken chemischer Reaktionen in flüssiger Phase im Flachbett-Mikroreaktor“

Korea Electronics Technology Institute (KETI) „Low temperature optical characterization of nanoscale phototransistors“

## Aktuelle Industriekooperationen und wissenschaftliche Kooperationen

Walter Schottky Institut, Technische Universität München

Universität Bochum

Universität Erlangen

Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart

Universität Linz

## Prof. Dr. Gerhard Wortmann

### Publikationen

H. Giefers, F. Porsch, G. Wortmann, „Kinetics of the disproportionation of SnO”, *Solid State Ionics* 176, 199-207 (2005)

G.A. Stewart, W.D. Hutchinson, A.V.J. Edge, K. Rupprecht, G. Wortmann, K. Nishimura, Y. Isikawa, „The magnetic properties of GdNiAl<sub>4</sub>”, *J. Magn. Magn. Mat.* 292, 72-78 (2005)

C.K. Jayasankar, V. Venkatramu, P. Babu, Th. Tröster, W. Sievers, G. Wortmann, W.B. Holzapfel, „High-pressure fluorescence study of Sm<sup>3+</sup> doped borate and fluoroborate glasses”, *J. Appl. Phys.* 97, 093523-1-7 (2005)

H. Giefers, F. Porsch, G. Wortmann, „High-pressure EXAFS and XRD investigation of unit cell parameters of SnO”, *Physica Scripta T115*, 538-540 (2005)

H. Giefers, G. Wortmann, A.I. Chumakov, D. Alfe, „High-pressure Phonon Spectroscopy of Oriented hcp Iron”, *ESRF Highlights* 2004, p. 19-20

H. Giefers, F. Porsch, G. Wortmann, „Thermal disproportionation of SnO under high pressure”, *Solid State Ionics* 176, 1327-1332 (2005)

W. B. Holzapfel, „Progress in the realization of a practical pressure scale for the range 1-300 GPa”, *High Pressure Research* 25, 87-96 (2005)

W. B. Holzapfel, „Effects of intrinsic anharmonicity in the Mie-Grüneisen equation of states and higher order corrections“, *High Pressure Research* 25, 186-203 (2005)

I. Karasevskii, W. B. Holzapfel, and V. V. Lubaschenko, „Vacancy structure of crystals at high temperature: Thermodynamic properties and melting“, *J. Low Temp.* 139, 609-620 (2005)

S. Surenda Babu, P. Babu, C.K. Jayasankar, Th. Tröster, W. Sievers, G. Wortmann, „Photoluminescence from the <sup>5</sup>D<sub>0</sub> level of Eu<sup>3+</sup> ions in a phosphate glass under pressure”, *J. Phys.: Condens. Matter* 18, 1927-1938 (2006)

K. Rupprecht, U. Ponkratz, O. Leupold, G. Wortmann, „Magnetic Properties of EuS and EuSe at Extreme Pressures”, *ESRF Highlights* 2005, p. 10-12

H. Giefers, F. Porsch, G. Wortmann, „Structural study of SnO at high pressure”, *Physica B* 373, 76-81 (2006)

I. Serdons, R. Callens, R. Coussement, S. Gheysen, J. Ladrrière, S. Morimoto, S. Nasu, Y. Yoda, J.

Odeurs, G. Wortmann, „Stroboscopic Detection of the <sup>181</sup>Ta-Mössbauer Resonance with Synchrotron Radiation”, *Nucl. Instrum. Methods in Physics Research B* 251, 297-303 (2006).

H. Giefers, S. Koval, G. Wortmann, W. Sturhahn, E.E. Alp., M.Y. Hu, „Phonon density-of-states of Sn in textured SnO under high pressure: Comparison of nuclear inelastic x-ray scattering spectra to a shell model”, *Phys. Rev. B* 74, 094303-1-12 (2006).

C.K. Jayasankar, R. Balakrishnaiah, P. Babu, Th. Tröster, W. Sievers, G. Wortmann, „High-pressure fluorescence of Sm<sup>3+</sup>-doped K-Ba-Al phosphate glass”, *High Pressure Research* 26, 349-353 (2006).

V. Venkatramu, P. Babu, C.K. Jayasankar, Th. Tröster, W. Sievers, G. Wortmann, „Optical spectroscopy of Sm<sup>3+</sup> ions in phosphate and fluorophosphate glasses”, *Optical Materials* (2006, in print)

S. Surenda Babu, P. Babu, C.K. Jayasankar, W. Sievers, Th. Tröster, G. Wortmann, „Optical absorption and photoluminescence studies of Eu<sup>3+</sup>-doped phosphate and fluorophosphate glasses”, *J. Luminescence* 126, 109-120 (2007).

K. Rupprecht, G. Wortmann, E.V. Sampathkumaran, Th. Doert, „<sup>155</sup>Gd-Mössbauer study of GdCuAs<sub>2</sub>, a compound exhibiting anomalous transport properties”, *Phys. Rev. B* (submitted).

V. Venkatramu, C.K. Jayasankar, P. Babu, Th. Tröster, W. Sievers, G. Wortmann, „High-pressure luminescence study of Tb<sup>3+</sup>-doped lithium fluoroborate glass”, *Phys. Rev. B* (submitted)

H. Giefers, K. Rupprecht, U. Ponkratz, O. Leupold, G. Wortmann, „Pressure and temperature dependence of the phonon density-of-states in the Invar alloy Fe<sub>65</sub>Ni<sub>35</sub>”, *Phys. Rev. B* (submitted)

G.A. Stewart, A.V. Edge, K. Rupprecht, H. Giefers, G. Wortmann, „<sup>155</sup>Gd-Mössbauer and Gd-LIII EXAFS investigation of the perovskite manganese series GdMnO<sub>3</sub> and Gd<sub>2/3</sub>A<sub>1/3</sub>MnO<sub>3</sub> (A = Ca, Sr, Ba)”, *Phys. Rev. B* (submitted)

A.I. Karasevskii, H.-J. Hesse, G. Wortmann, „Formation of an equilibrium heterogeneous structure at the valence transition in EuNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>”, *J. Phys.: Condens. Matter* (in preparation)

## Weitere Funktionen

Vorsitzender des Prüfungsausschusses am Department Physik

2002-2006: Member of the ESRF Review Committee on Hard Condensed Matter

Member of the Editorial Board of „High Pressure Research“ (Taylor and Francis)

2003-2006: Committee Member of the European High Pressure Community (EHPRG)

2003-2006: Wissenschaftlicher Beirat im Forschungsforum Paderborn

Juni 2006: Mitglied im Wissenschaftlich-Technischen Rat (WTR) des Forschungszentrums Jülich

Gutachterliche Tätigkeit für diverse physikalische Zeitschriften

## Aktuell geförderte Forschungsprojekte

In Nachfolge für zwei auslaufende BMBF-Projekte wurde ein neues BMBF-Projekt (Laufzeit April 2004 bis 30. Juni 2007) für Experimente mit Synchrotronstrahlung an der European Synchrotron Radiation Facility (ESRF, Grenoble) eingeworben. Im Rahmen dieses Projekts „Magnetismus und Gitterdynamik unter extremen Bedingungen: Nanoskalierte Materialien und hohe Drücke“ stehen insgesamt 418.000 EUR an Personal- und Sachmittel zur Verfügung; damit verbunden ist die Position eines wissenschaftlichen Mitarbeiters an der ESRF (Dr. U. Ponkrat) und einer Doktorandenstelle an der Uni Paderborn

## Wissenschaftliche Kooperationen

Prof. Dr. M.M. Abd-Elmeguid (Universität Köln): Fe-Pt-Invarsysteme

Dr. A.I. Chumakov (ESRF), Dr. O. Leupold (HASY-LAB): Kooperation bei  $^{57}\text{Fe}$ - und  $^{151}\text{Eu}$ -NFS/NIS Experimenten an der ESRF

Dr. A. Fernandez Fuentes (University of Saltillo, Mexico): Gd-pyrochlores for radioactive waste containment

Prof. Dr. C.K. Jayasankar (Tirupati, Indien): High-pressure fluorescence studies of rare-earth ions in glasses

Prof. Dr. A. Karasevskii (Universität Kiev, Ukraine): Modeling of equation-of states and valence transitions

Prof. Dr. W. Paulus (Université de Rennes, France): Untersuchung der Sauerstoffdiffusion in ausgewählten Oxiden für Brennstoffzellen

Prof. Dr. E.V. Sampathkumaran (Tata-Institute Bombay): Komplexer 4f-Magnetismus in intermetallischen Systemen

Prof. Dr. G.A. Stewart (Canberra): Komplexer 3d-4f-Magnetismus in metallischen und oxidischen Systemen

## Gastwissenschaftler

Prof. Dr. C.K. Jayasankar (Universität Tirupati, Indien), 3 Monate 2005 und 2006

Prof. Dr. A. Karasevskii (Universität Kiev, Ukraine), 2 Monate 2006 (DAAD Stipendium)

## apl. Prof. Dr. Donat As

## Publikationen

### 2005

S.F. Li, D.J. As, K. Lischka, D.G. Pacheco-Salazar, L.M.R. Scolfaro, J.R. Leite, F. Cerdeira, E.A. Meneses  
Strong room temperature 510 nm emission from cubic InGa<sub>x</sub>N/GaN multiple quantum wells  
MRS Symp. Proc. Vol. 831, E8.15 (2005)

Shunfeng Li, J. Schörmann, A. Pawlis, D.J. As, K. Lischka  
Cubic InGa<sub>x</sub>N/GaN multi-quantum wells and AlGa<sub>x</sub>N/GaN distributed Bragg reflectors for

application in resonant cavity LEDs  
Microelectronics Journal 36, 963-968 (2005)

D.G. Pacheco-Salazar, S.F. Li, F. Cerdeira, E.A. Meneses, J.R. Leite, L.M.R. Scolfaro, D.J. As and K. Lischka:  
Growth and characterization of cubic In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N epilayers on two different types of substrates  
J. Crystal Growth 284 (3-4), 379 (2005)

H. Przybylinska, G. Kocher, W. Jantsch, D.J. As, and K. Lischka  
Photoconductivity study of Mg and C acceptors in cubic GaN  
AIP Conf. Proc. 772 (2005) 253

R. Goldhahn, C. Buchheim, V. Lebedev, V. Cimala, O. Ambacher, C. Cobet, M. Rakel, N. Esser, U. Rossow, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, S. Potthast and D.J. As  
Dielectric function and critical points of the band structure for hexagonal and cubic GaN and AlN  
BESSY (Berliner Elektronenspeicherung-Gesellschaft für Synchrotronstrahlung m.b.H.) Annual Report 2005, ed. K. Godehusen, p. 206

### 2006

J. Schörmann, D.J. As, K. Lischka, P. Schley, R. Goldhahn, S.F. Li, W. Löffler, M. Hetterich, H. Kalt  
Molecular Beam Epitaxy of phase pure cubic InN  
Appl. Phys. Lett. 89, 261903 (2006)

J. Schörmann, S. Potthast, D.J. As, and K. Lischka  
Near UV emission from nonpolar cubic Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN Quantum Wells  
Appl. Phys. Lett. 89, 131910 (2006)

D.G. Pacheco-Salazar, F. Cerdeira, E.A. Meneses, J.R. Leite, S.F. Li, D.J. As and K. Lischka  
Optical measurements on c-InGa<sub>x</sub>N layers deposited on SiC substrates  
Semicond. Sci. Technol. 21, 846 (2006)

D.J. As, S. Potthast, J. Schörmann, S.F. Li, K. Lischka, H. Nagasawa, M. Abe  
Molecular beam epitaxy of cubic group III-Nitrides on free-standing 3C-SiC substrates  
Materials Science Forum Vols. 527-529, 1489 (2006)

M. Abe, H. Nagasawa, S. Potthast, J. Fernandez, J. Schörmann, D.J. As, and K. Lischka  
Cubic GaN/AlGa<sub>x</sub>N HEMTs von 3C-SiC substrate for normally-off operation  
IEICE Transactions on Electronics, E89-C (7), 1057 (2006)

J. Schörmann, S. Potthast, M. Schnietz, S.F. Li, D.J. As, and K. Lischka  
Growth of ternary and quaternary cubic III-nitrides on 3C-SiC substrates  
phys. stat. sol. (c) 3, No. 6 (2006) 1604

S. Potthast, J. Schörmann, J. Fernandez, D.J. As, K. Lischka, H. Nagasawa, M. Abe  
Two-dimensional electron gas in cubic Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN heterostructures  
phys. stat. sol. (c) 3, No. 6 (2006) 2091

D.J. As, S. Potthast, J. Fernandez, J. Schörmann, and K. Lischka  
Ni Schottky diodes on cubic GaN  
Appl. Phys. Lett. 88, 1521112 (2006)

D.J. As, S. Potthast, J. Fernandez, K. Lischka, H. Nagasawa, M. Abe:  
Mechanism of current leakage in Ni Schottky diodes on cubic GaN and Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N epilayers  
MRS Symp. Proc. Vol. 892, 283 FF 13.4.1 (2006)

D.J. As, S. Potthast, J. Fernandez, K. Lischka, H. Nagasawa, M. Abe  
Cubic GaN/AlGa<sub>x</sub>N Schottky-barrier devices on 3C-SiC substrates  
Microelectronic Engineering 83, 34 (2006)

## Dissertationen

Stefan Potthast: „Growth and Characterization of cubic AlGa<sub>x</sub>N/GaN based Devices“ (Februar 2007)

## Preise/Auszeichnungen

M.Sc. Elena Tschumak erhielt Graduiertenstipendium 2006 der Universität Paderborn.

apl. Prof. Dr. Donat Josef As (Fakultät für Naturwissenschaften) erhielt 2006 zusammen mit Prof. Dr. Ulrich Hilleringmann (Fakultät für Elektrotechnik, Informatik und Mathematik) für ein gemeinsames Projekt einen Forschungspreis der Universität Paderborn.

## Weitere Funktionen

Bibliotheksbeauftragter des Department Physik

Mitglied des Fakultätsrates

Gutachterliche Tätigkeit für diverse physikalische Zeitschriften

## Forschungsprojekte

Forschungspreisprojekt der Universität Paderborn, „Feldeffekttransistoren auf kubischer Gruppe III-Nitride Basis für künftige drahtlose Datenübertragung“

Mitarbeit im DAAD Austauschprogramm mit Sao Paulo, Brasilien „Ferromagnetic GaN layers for Spintronic Applications“

## Aktuelle Kooperationen

### Intern

Prof. Dr. Ulrich Hilleringmann (Fakultät für Elektrotechnik, Informatik und Mathematik) für ein gemeinsames Projekt einen Forschungspreis der Universität Paderborn

### Extern

Prof. Dr. Jose Roberto Leite, Prof. Dr. Luisa M. Scolfaro  
Universidade de Sao Pauli, Dept. Física dos Materiais e Mecânica, Brazil

Prof. Dr. Fernando Cerdeira, Prof. Dr. Elirmes Meneses  
Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física, Campinas, SP, Brazil

Dr. H. Nagasawa, Dr. M. Abe  
HOYA Cooperation, SiC Development Center, 1-17-16 Tanashioda, Sagami-hara, Kanagawa 229-1125, Japan

Dr. Rüdiger Goldhahn, Dr. Jürgen Pezoldt  
TU Ilmenau, Germany



Dr. Jürgen W. Gerlach  
Leibnitz-Institut für Oberflächenmodifikation  
e.V. Leipzig, Germany

Dr. J. Vogt  
Universität Leipzig, Germany

Dr. Manfred Maier  
Fraunhofer-Institut für Angewandte Festkörper-  
physik (IAF) Freiburg, Germany

Prof. Dr. W. Jantsch  
Johann-Kepler-Universität Linz, Austria

Prof. Dr. O. Manasreh  
MS. Eric. A. DeCuir Jr.  
University of Arkansas, USA

Prof. Dr. Friedhelm Bechstedt,  
Universität Jena, Germany

Prof. K.P. O'Donnell,  
University of Strathclyde, Glasgow, UK

Prof. A.D. Wieck,  
Ruhr-Universität Bochum, Germany

#### **Gastaufenthalte von Mitgliedern der Arbeits- gruppe**

Apl.Prof. Dr. Donat Josef As August/September  
2005 August 2006 Universidade de Sao Pauli,  
Dept. Física dos Materiais e Mecânica/Brasilien

Stefan Potthast September/Oktober 2006 Uni-  
versidade de Sao Pauli, Dept. Física dos  
Materiais e Mecânica/Brasilien

#### **Gastwissenschaftler**

MS. Eric A. DeCuir, Jr. (University of Arkansas,  
USA) July-August 2005

Dr. Marcio Peron Franco de Godoy, Universidade  
Estadual de Campinas, Instituto de Física,  
Departamento de Física da Matéria Condensa-  
da, Grupo de Propriedades Ópticas (Brasilien)  
Aufenthalt an der Universität Paderborn,  
Department Physik, vom Mai 2006 – Mai 2007  
gefördert von der Partnerorganisation des DAAD  
in Brasilien „Conselho Nacional de Desenvolvi-  
mento Científico e Tecnológico“ (National Coun-  
sel of Technological and Scientific Develop-  
ment)

## **apl. Prof. Dr. Siegmund Greulich-Weber**

#### **Publikationen**

S. Greulich-Weber and H. Marsmann, From  
nanosize Silica Spheres to three-dimensional  
Colloidal Crystals, in Ordered Porous Nanostruc-  
tures and Applications, Series:Nanostructure  
Science and Technology, Kluwer Academic Ple-  
num Publisher, New York, ed. R. B. Wehrspohn,  
February 2005, 350pp, ISBN: 0-387-23541

E. Rauls, U. Gerstmann, M.V.B. Pinheiro, S.  
Greulich-Weber, H. Overhof, Th. Frauenheim,  
and J.M. Spaeth, A new model for the DI-lumi-  
nescence in 6H-SiC, Materials Science Forum  
Vols. 483-485 (2005) pp. 465-468

M.V.B. Pinheiro, E. Rauls, U. Gerstmann, S.Gre-  
ulich-Weber, J.-M. Spaeth, The VSiCSi(SiCCSi)  
complex in electron-irradiated 6H-SiC, Materials  
Science Forum Vols. 483-485 (2005) pp. 477-  
480

H. B. Ribeiro, K. J. Guedes, M. V. B. Pinheiro, S.  
Greulich-Weber, K. Krambrock,

About the blue and green colours in natural flu-  
orapatite, *physica status solidi (c)*, Volume 2, 1,  
p 720-723 (2005)

J.-M. Spaeth, I. Tkach, S. Greulich-Weber and H.  
Overhof, High field optically detected EPR and  
ENDOR of semiconductor defects using W-band  
microwave Fabry-Pérot resonators, *Magn. Res.  
Chem.* 2005, 43,153 - 165

E. N. Kalabukhova, S. N. Lukin, D. V. Savchenko,  
W. C. Mitchel, S. Greulich-Weber, E. Rauls, and  
U. Gerstmann, Possible Role of Hydrogen within  
the so-called X center in semi-insulating 4H-SiC,  
*Materials Science Forum Vols. 527-529 (2006)*  
pp. 559-562

M.V.B. Pinheiro, E. Rauls, U. Gerstmann, S.  
Greulich-Weber, J.-M. Spaeth, and H. Overhof,  
Identification of carbon split-interstitials in elec-  
tron-irradiated n-type 6H-SiC, *Materials Science  
Forum Vols. 527-529 (2006)* pp. 551-554

B. Friedel and S. Greulich-Weber, Sol-Gel Silicon  
Carbide for Photonic Applications, *Materials  
Science Forum Vols. 527-529 (2006)* pp. 759-  
762

E. N. Kalabukhova, S. N. Lukin, D. V. Savchenko,  
A. A. Sitnikov, W. C. Mitchel, S. R. Smith, S.  
Greulich-Weber, Trapping Recombination Pro-  
cess and Persistent Photoconductivity in Semi-  
Insulating 4H-SiC, *Materials Science Forum Vols.  
527-529 (2006)* pp. 563-566

E. N. Kalabukhova, D. V. Savchenko, S. Greulich-  
Weber, M.F. Bulanyi, S.A. Omelchenko, O.V.  
Khmelenko, A.A. Gorban, E.N. Mokhov, Lumi-  
nescence and EPR Characterization of Vana-  
dium Doped Semi-Insulating 4H-SiC, *Materials  
Science Forum Vols. 527-529 (2006)* pp. 651-  
654

E. Rauls, U. Gerstmann, S. Greulich-Weber, K.  
Semmelroth, G. Pensl, and E.E. Haller, New  
aspects in n-type doping of SiC with Phospho-  
rus, *Materials Science Forum Vols. 527-529  
(2006)* pp. 609-612

E. von Rhein, A. Bielawny and S. Greulich-  
Weber, Control of Colloidal Crystal Growth by  
external Fields, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.  
Vol. 901E, 0901-Rb10-08.1, 2006 Materials  
Research Society*

B. Friedel and S. Greulich-Weber, Preparation of  
Monodisperse, Submicrometer Carbon Spheres  
by Pyrolysis of Melamine-Formaldehyde Resin,  
*Small*, 2006, 2(7), 859-864

D. V. Savchenko, E. N. Kalabukhova, S. N. Lukin,  
Tangali S. Sudarshan, Yuri I. Khlebnikov, William  
C. Mitchel, S. Greulich-Weber, Intrinsic defects  
in high purity semi-insulating 6H SiC, *Mater.  
Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 91, 0911-B05-07,  
2006 Materials Research Society*

E. N. Kalabukhova, S. N. Lukin, D. V. Savchenko,  
W. C. Mitchel, S. Greulich-Weber, U. Gerstmann,  
A. Pöppl, J. Hoentsch, E. Rauls, Yu.Rozentzveig,  
E. N. Mokhov, M. Syväjärvi, R.Yakimova, EPR,  
ESE and pulsed ENDOR study of nitrogen rela-  
ted centers in 4H SiC wafers grown by different  
technologies, *Materials Science Forum*, 2006, in  
press

U. Gerstmann, E. Rauls, S. Greulich-Weber, E.N.  
Kalabukhova, D.V. Savchenko, A. Pöppl, and F.  
Mauri, Nitrogen donor aggregation in 4H-SiC  
investigated via g-tensor calculations, *Materials  
Science Forum*, 2006, in press

U. Gerstmann, S. Greulich-Weber, E. Rauls, J.-M.  
Spaeth, E.N. Kalabukhova, E. N. Mokhov, and F.  
Mauri, New insight in Scandium-mediated  
growth techniques: Sc-related defects in 4H-SiC  
and 6H-SiC, *Materials Science Forum*, 2006, in  
press

A. von Rhein, D. Pergande, S. Greulich-Weber,  
and R. B. Wehrspohn, Experimental verification  
of apparent negative refraction in low-epsilon  
material in the microwave regime, *Journal of  
Applied Physics*, 2006, in press

B. Friedel and S. Greulich-Weber, Wide Bandgap  
Semiconductors - Nanowires of p- and n-type  
Silicon Carbide carbon, *Mater. Res. Soc. Symp.  
Proc.*, 2006 Materials Research Society, submit-  
ted

B. Friedel and S. Greulich-Weber, Spherical car-  
bon nanostructures - a versatile material for  
sensing and energy storage, *Mater. Res. Soc.  
Symp. Proc.*, 2006 Materials Research Society,  
submitted

#### **Weitere Funktionen**

Management Committee Member, COST P11,  
EU, Physics of linear, non-linear, and active  
photonic crystals

Member of the international EPR society

Auslandsbeauftragter des Departments Physik

Gutachtertätigkeiten für DAAD, Fachzeitschriften

#### **Forschungsprojekte**

„Korrelation von optisch induzierten Eigen-  
schaften und mikroskopischen Strukturen von  
Edelsteinen“, DAAD

„Elektronen-bestrahltes Siliziumkarbid“, DFG

„High-Field EPR with optical detection in semi-  
conductors“ Schwerpunktprogramm der DFG:  
High-field EPR in Biology, Chemistry and Phy-  
sics

„High Field multifrequency EPR and ODEPR  
study of the deep intrinsic defects in semi-insu-  
lating 6H- and 4H-SiC material“, INTAS-Projekt,  
Projektkoordinator: Greulich-Weber

„Nanostrukturierte Hybridsysteme für die Ener-  
giekonversion“, PROBRAL, DAAD

„Linkshängige Materialien für Mikro- und Tera-  
hertzwellen“, Promotions-Stipendium Elisabeth  
von Rhein

#### **Aktuelle Kooperationen**

G. Pensl, M. Hundhausen, Universität Erlangen

L. A. Cury, K. Krambrock, Instituto de Milenio,  
Department Physik, Universidade

Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brasi-  
lien

R. Alcalá, Instituto de Ciencia de Materiales de  
Aragón - Facultad de Ciencias,

Zaragoza, Spanien

M. Godlewski, University Warsaw, Polen

S. A. Omelchenko, Dnepropetrovsk University, Ukraine

E. N. Kalabukhova, S. N. Lukin, Institute for semiconductor physics, Kiev, Ukraine

E. N. Mokhov, Joffe Institute, St. Petersburg, Russland

U. Gerstmann, Laboratoire de Mineralogie-Cristallographie de Paris, Université

Pierre et Marie Curie, Frankreich

N. T. Son, University Lingköping, Schweden

## Patente

Verfahren zur Herstellung eines Gegenstandes zumindest teilweise mit Siliziumkarbidgefüge aus einem Rohling aus kohlenstoffhaltigen Material, S. Greulich-Weber, B. Friedel, 102006 055 469.8  
Photovoltaische Einrichtung, S. Greulich-Weber, B. Friedel, 102006 047 045.1

## Prof. Dr. Ralf Wehrspohn

### Publikationen

A.J. Flewitt, S. Lin, W.I. Milne, R.B. Wehrspohn, M.J. Powell, Characterization of defect removal in hydrogenated and deuterated amorphous silicon thin film transistors. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2006. 352: p. 1700-1703

T. Geppert, S.L. Schweizer, U. Gösele, R.B. Wehrspohn, Deep trench etching in macroporous silicon. *Appl. Phys. A*, 2006. A 84: p. 237-242

A. Bielawny, P.T. Miclea, A. v.Rhein, R.B. Wehrspohn, S. v.Riesen, S. Glunz, Dispersive elements for spectrum splitting in solar cell applications. *Proc. of SPIE*, 2006. 6197: p. 619704-1 - 619704-8

A.J. Flewitt, S. Lin, W.I. Milne, R.B. Wehrspohn, M.J. Powell, Mechanisms for Defect Creation and Removal in Hydrogenated and Deuterated Amorphous Silicon Studied using Thin Film Transistors. *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, 2006. 910: p. 0910-A19-01 - 12

H.W. Tan, H.M. van Driel, S.L. Schweizer, R.B. Wehrspohn, Phase and envelope characteristics of ultrashort pulses reflected from a two-dimensional silicon photonic crystal. *Phys.Rev. B*, 2006. 74: p. 035116-1 - 035116-6

R.B. Wehrspohn, A. v.Rhein, T. Geppert, Photonic Crystals: Principles and Applications. *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*, 2006. : p. 1-9

H. Hu, A.P. Milenin, R.B. Wehrspohn, H. Hermann, W. Sohler, Plasma etching of proton-exchanged lithium niobate. *J. Vac. Sci. Technol. A*, 2006. 24(4): p. 1012-1015

G. Sauer, G. Brehm, S. Schneider, H. Gräner, G. Seifert, K. Nielsch, J. Choi, P. Göring, U. Gösele, P. Miclea, R. Wehrspohn, Surface-enhanced Raman spectroscopy employing monodisperse nickel nanowire arrays. *Appl. Phys. Lett.*, 2006. 88(2): p. 23106-1 - 23106-3

2005

R.B. Wehrspohn, S. Lin, A.J. Flewitt, W.I. Milne, M.J. Powell, Absence of enhanced stability in fully deuterated amorphous silicon thin-film transistors. *J. Appl. Phys.*, 2005. 98: p. 054505-1 - 054505-7

R.B. Wehrspohn, Applications of silicon-based photonic crystals. *Proc. of IEEE International Conference Group IV Photonics*, 2005. : p. 39-41

R.B. Wehrspohn, Book Review Kinetic Processes - Crystal Growth, Diffusion, and Phase Transitions in Materials. *ChemPhysChem*, 2005. 6: p. 191

R. B. Wehrspohn, Book Review of Nanophotonics by Paras N. Prasad. *Small*, 2005. 1: p. 357-358

H.S. Kitzerow, G. Mertens, H. Matthias, H. Marsmann, R.B. Wehrspohn, S. Matthias, U. Gösele, S. Frey, H. Föll, Director fields of nematic liquid crystals in tunable photonic crystals. *Proc. of SPIE*, 2005. 5926: p. 592605-1 - 592605-10

K. Nielsch, R. Hertel, R.B. Wehrspohn, High-Density Nickel Nanowire Arrays. *Ordered porous nanostructures and application* Ed. by R.B. Wehrspohn (Springer, 2005), 2005. : p. 165-184

G. Sauer, G. Brehm, S. Schneider, H. Graener, G. Seifert, K. Nielsch, J. Choi, P. Göring, U. Gösele, P. Miclea, R.B. Wehrspohn, In situ surface-enhanced Raman spectroscopy of monodisperse silver nanowire arrays. *J. Appl. Phys.*, 2005. 97: p. 024308-1 - 024308-6

H.W. Tan, H.M. van Driel, S.L. Schweizer, R.B. Wehrspohn, Influence of eigenmode characteristics on optical tuning of a two-dimensional silicon photonic crystal. *Phys. Rev. B*, 2005. 72: p. 165115-1 - 165115-87

R.B. Wehrspohn, J. Schilling, Macroporous Silicon Photonic Crystals. *Ordered porous nanostructures and applications* Ed. by R.B. Wehrspohn (Springer, 2005), 2005. : p. 145-164

J. Choi, R.B. Wehrspohn, U. Gösele, Mechanism of guided self-organization producing quasinon-domain porous alumina. *Electrochimica Acta*, 2005. 50(13): p. 2591-2595

A.F. Koenderink, R. Wüest, B.C. Buchler, S. Richter, P. Strasser, M. Kafesaki, A. Rogach, R.B. Wehrspohn, C.M. Soukoulis, D. Erni, F. Robin, H. Jäckel, V. Sandoghdar, Near-field optics and control of photonic crystals. *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, 2005. 3: p. 63-74

H.W. Tan, H. van Driel, S.L. Schweizer, R.B. Wehrspohn, Non-linear femtosecond pulse tuning of 2D photonic crystals. *Proc. of SPIE*, 2005. 5971: p. 59710J-1 - 59710J-8

S.L. Schweizer, R.B. Wehrspohn, H.W. Tan, H.M. van Driel, Non-linear optical tuning in 2D silicon photonic crystals. *Proc. of SPIE*, 2005. 5926: p. C1-C6

U. Rehn, U. Gösele, R.B. Wehrspohn, P.T. Miclea, Optical characterization of multi-component Au-colloid-DNA complexes. *CLEO/Europe*, 2005. : p. 639

H.W. Tan, H.M. van Driel, S.L. Schweizer, R.B. Wehrspohn, Optically induced perturbations of photonic crystals. 2005 Quantum Electronics and Laser Science Conference (QELS), 2005. 1: p. 682-684

R.B. Wehrspohn, T.M. Geppert, S.L. Schweizer, A. v. Rhein, D. Pergande, T. Beyer, A. Lambrecht, Photonic crystal gas sensors. *Proceedings of SPIE - 17th International Conference on Optical Fibre Sensors*, 2005. 5855: p. 24-29

S. Richter, M. Stienhart, H. Hofmeister, M. Zacharias, U. Gösele, N. Gaponik, A. Eychmüller, A.L. Rogach, J.H. Wendorff, S.L. Schweizer, A. von Rhein, R.B. Wehrspohn, Quantum dot emitters in two-dimensional photonic crystals of macroporous silicon. *Appl. Phys. Lett.*, 2005. 87(14): p. 142107-1 - 142107-3

S. Frey, B. Gresillon, F. Ozanam, J.N. Chazalviel, J. Carstensen, H. Föll, R.B. Wehrspohn, Self-organized macrostructures in anodically formed mesoporous silica. *Electrochem. Sol. State Lett.*, 2005. 8(9): p. B25-B29

A.P. Milenin, C. Jamois, T. Geppert, U. Gösele, R.B. Wehrspohn, SOI planar photonic crystal fabrication. Etching through SiO<sub>2</sub>/Si/SiO<sub>2</sub> layer system using fluorocarbon plasmas. *Microelectronic Engineering*, 2005. 81(1): p. 15-21

H. Matthias, T. Röder, R.B. Wehrspohn, H.S. Kitzerow, S. Matthias, S.J. Picken, Spatially periodic liquid crystal director field appearing in a photonic crystal template. *Appl. Phys. Lett.*, 2005. 87: p. 241105-1 - 241105-3

S. Lin, A.J. Flewitt, W.I. Milne, R.B. Wehrspohn, M.J. Powell, Stability of fully deuterated amorphous silicon thin-film transistors. *Appl. Phys. Lett.*, 2005. 86(6): p. 63513-1 - 63516-3

P.T. Miclea, G. Sauer, G. Brehm, S. Schneider, H. Graener, G. Seifert, K. Nielsch, J. Choi, P. Göring, U. Gösele, S.L. Schweizer, R.B. Wehrspohn, Surface-enhanced Raman Spectroscopy of monodisperse silver and nickel nanowires. *Proc. of SPIE*, 2005. 5927: p. 01-06

A.P. Milenin, C. Jamois, R.B. Wehrspohn, M. Reiche, The SOI planar photonic crystal fabrication. Patterning of Cr using Cl<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> plasma etching. *Microelectronic Engineering*, 2005. 77: p. 139-143

G. Mertens, R. B. Wehrspohn, H.S. Kitzerow, Tunable defect mode in a three dimensional photonic crystal. *Appl. Phys.Lett.*, 2005. 87: p. 241108-1 - 241108-3

### Weitere Funktionen

Co-Editor von *Applied Physics A*, Elsevier

Mitglied im International Advisory Board der Fachzeitschrift „Photonics and Nanostructures“, Elsevier Publisher, NL

Koordinator des DFG-Programms „Photonic Crystals“, SPP 1113

### Forschungsprojekte

„Photonische Kristalle aus makroporösem Silizium: Herstellung und neuartige optische Experimente“, DFG

„Gradienten Nanoröhrchen“, DFG

„Nichtlineare Photonische Kristalle“, DFG-NSF

„Photonische Kristalle für Gasmesstechnik (PHOKISS)“, BMBF

„Nanostrukturierte Chemische und optische Sensoren (Nachos)“, BMBF

„Optische Nanostrukturen für die Photovoltaik (Nanovolt)“, BMBF

„Funktionelle Polymernanoröhren“, VW-Stiftung

## Aktuelle Kooperationen

University of Toronto ETH Zürich Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik Halle Infineon Technologies Dräger AG Fraunhofer Institut für physikalische Messtechnik Universität Kiel Universität Würzburg HHI Berlin ZIB Berlin Universität Erlangen UFMG – Univ. Belo Horizonte, Brasilien Univ. Zaragoza, Spanien Univ. Riga, Lettland

## Patente

„Emitter e.g. for qualitative and or quantitative analysis of composition of fluids, has photonic crystal where radiation is generated by local change of temperature of subrange of photonic crystal, LAMBRECHT ARMIN (DE); RHEIN ANDREAS (DE); WEHRSPHOHN RALF (DE) , DE200510008077, August 2006.

## PD Dr. Stefan Schweizer

### Publikationen

#### 2005

S. Schweizer, J.-M. Spaeth, M. Secu, A. Edgar, G. V. M. Williams  
Photostimulable defects in nano-crystallites in fluorozirconate glasses  
phys. stat. sol. (a) 202, No. 2, 243-249 (2005)

J. Selling, S. Schweizer, J.-M. Spaeth, G. Corradi, A. Edgar, G. V. M. Williams  
Radiation defects in Ce-doped BaCl<sub>2</sub> and fluorochlorozirconate glass-ceramic X-ray storage phosphors  
phys. stat. sol. (c) 2, No. 1, 592-595 (2005)

B. Henke, M. Secu, U. Rogulis, S. Schweizer, J.-M. Spaeth  
Optical and magneto-optical studies of Mn-activated LiBaF<sub>3</sub>  
phys. stat. sol. (c) 2, No. 1, 380-383 (2005)

N. da Silva, K. J. Guedes, M. V. B. Pinheiro, S. Schweizer, J.-M. Spaeth, K. Krambrock  
The (O)Al<sub>2</sub> centre in topaz and its relation to the blue colour  
phys. stat. solidi (c) 2, No. 1, 397-400 (2005)

Carissa Tudryn, Stefan Schweizer, Ralph Hopkins, Linn Hobbs, and Anthony Garratt-Reed  
Characterization of Si and CVD SiC to Glass Anodic Bonding Using TEM and STEM Analysis  
Journal of the Electrochemical Society 152, E131-E134 (2005)

S. Schweizer, L. W. Hobbs, M. Secu, J.-M. Spaeth, A. Edgar, G. V. M. Williams, J. Hamlin  
Photostimulated luminescence from fluorochlorozirconate glass ceramics and the effect of crystallite size  
J. Appl. Phys. 97, 083522 (2005)

Gang Chen, Jacqueline A. Johnson, Richard Weber, Stefan Schweizer, Douglas MacFarlane, John Woodford, Francesco De Carlo  
ZBLAN-based X-ray storage phosphors and scin-

tillators for digital X-ray imaging  
Medical Imaging 2005: Physics of Medical Imaging, edited by Michael J. Flynn,  
Proc. of SPIE Vol. 5745, 1351-1358 (2005)

J. Selling, G. Corradi, M. Secu, and S. Schweizer  
Comparison of the luminescence properties of the x-ray storage phosphors BaCl<sub>2</sub>:Ce<sup>3+</sup> and BaBr<sub>2</sub>:Ce<sup>3+</sup>  
Journal of Physics: Condensed Matter 17, 8069-8078 (2005)

#### 2006

B. Henke, U. Rogulis, and S. Schweizer  
Optically detected magnetic resonance investigation of a luminescent oxygen-vacancy complex in Mn-doped LiBaF<sub>3</sub>  
Journal of Physics: Condensed Matter 18, 1577-1583 (2006)

Stefan Schweizer, Bastian Henke, Stephanie Köneke, Jacqueline A. Johnson, Gang Chen, John Woodford  
Energy-dependent scintillation efficiency of fluorozirconate-based glass-ceramic x-ray detectors  
Medical Imaging 2006: Physics of Medical Imaging, edited by Michael J. Flynn, Jiang Hsieh,  
Proc. of SPIE Vol. 6142, 61422Y (2006)

Gang Chen, Jacqueline A. Johnson, Stefan Schweizer, John Woodford, Peter Newman, and Douglas MacFarlane  
Transparent BaCl<sub>2</sub>:Eu<sup>2+</sup> glass-ceramic scintillator  
Medical Imaging 2006: Physics of Medical Imaging, edited by Michael J. Flynn, Jiang Hsieh,  
Proc. of SPIE Vol. 6142, 61422X (2006)

G. Chen, J. Johnson, R. Weber, R. Nishikawa, S. Schweizer, P. Newman, D. MacFarlane  
Fluorozirconate-based nano glass ceramics for high-resolution medical x-ray imaging  
Journal of Non-Crystalline Solids 352, 610-614 (2006)

B. Henke, U. Rogulis, and S. Schweizer  
Luminescent oxygen-vacancy complex in Mn-doped LiBaF<sub>3</sub> investigated by optically detected magnetic resonance  
in: Proceedings of The Eighth International Conference on Inorganic Scintillators and Their Applications, Alushta, Crimea, Ukraine, September 19-23, 2005, ed. by A. Gektin and B. Grinyov (National Academy of Sciences of Ukraine, Ukraine – Kharkov, 2006), p. 70  
ISBN 9666-02-3884-3

S. Schweizer and S. Köneke  
Up-conversion of Nd-doped barium chloride  
in: Proceedings of The Eighth International Conference on Inorganic Scintillators and Their Applications, Alushta, Crimea, Ukraine, September 19-23, 2005, ed. by A. Gektin and B. Grinyov (National Academy of Sciences of Ukraine, Ukraine – Kharkov, 2006), p. 242  
ISBN 9666-02-3884-3

J. Selling, G. Corradi, M. Secu, and S. Schweizer  
Rare-earth doped barium halide x-ray storage phosphors and scintillators  
in: Proceedings of The Eighth International Conference on Inorganic Scintillators and Their Applications, Alushta, Crimea, Ukraine, September 19-23, 2005, ed. by A. Gektin and B. Grinyov (National Academy of Sciences of Ukraine, Ukraine – Kharkov, 2006), p. 415  
ISBN 9666-02-3884-3

A. Engel, C. Ottermann, U. Resch-Genger, K. Hoffmann, S. Schweizer, J. Selling, J.-M. Spaeth, and V. Rupertus  
Glass based fluorescence reference materials

used for optical and biophotonic applications  
Proc. of SPIE Vol. 6191, 619110 (2006)

Gang Chen, Jacqueline Johnson, John Woodford, and Stefan Schweizer  
Insights into phase formation in fluorochlorozirconate glass-ceramic storage phosphors  
Applied Physics Letters 88, 191915 (2006)

G. V. M. Williams, S. Schweizer, B. Henke, C. Dunford, and A. Edgar  
X-ray and UV Induced Photoluminescence from RbCdF<sub>3</sub>:Mn<sup>2+</sup>  
Current Applied Physics 6, 351-354 (2006)

A. Edgar, G. V. M. Williams, S. Schweizer, J.-M. Spaeth  
New spatial resolution of a glass-ceramic X-ray storage phosphor  
Current Applied Physics 6, 399-402 (2006)

C. Dotzler, G. V. M. Williams, A. Edgar, S. Schweizer, B. Henke, J.-M. Spaeth, A. Bittar, J. Hamlin, and C. Dunford  
The Effect of X-ray,  $\gamma$ -ray and UV Radiation on the Optical Properties of RbCdF<sub>3</sub>:Mn<sup>2+</sup>  
Journal of Applied Physics 100, 033102 (2006)

J. A. Johnson, S. Schweizer, B. Henke, G. Chen, J. Woodford, P. J. Newman, and D. R. MacFarlane  
Eu-activated fluorochlorozirconate glass-ceramic scintillators  
Journal of Applied Physics 100, 034701 (2006)

S. Schweizer, B. Henke, U. Rogulis, W. M. Yen  
Magneto-optical resonance investigations on Eu- and Nd-/Dy-doped CaAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> and SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> single crystals  
in: Science and Technology of Dielectrics in Emerging Fields and Persistent Phosphors (PV 2005-13), ed. by Worhoff, Misra, Mascher, Sundaram, Yen, and Capobianco (The Electrochemical Society, 2006), p. 191-198  
ISBN 1-56677-511-6

S. Schweizer and J. A. Johnson  
Fluorozirconate-based glass ceramic x-ray detectors for digital radiography  
Radiation Measurements (angenommen August 2006)

S. Schweizer, B. Henke, U. Rogulis, W. Yen  
Recombination processes in rare-earth doped MA<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (M = Ca, Sr) persistent phosphors investigated by optically-detected magnetic resonance  
Physica Status Solidi (a) (angenommen September 2006)

B. Henke, S. Schweizer, U. Rogulis  
Optical and electron paramagnetic resonance studies on radiation defects in Mn-activated RbCdF<sub>3</sub>  
Physica Status Solidi (c) (angenommen September 2006)

J. Selling, M. D. Birowosuto, P. Dorenbos, S. Schweizer  
Europium-doped barium halide x-ray scintillators  
Physica Status Solidi (c) (angenommen September 2006)

J. Selling, M. D. Birowosuto, P. Dorenbos, and S. Schweizer  
Europium-doped barium halide scintillators for x-ray and  $\gamma$ -ray detection  
Journal of Applied Physics (angenommen November 2006)

## Preise/Auszeichnungen

Forschungspreis 2005 der Universität Paderborn

## Forschungsprojekte

Kooperationsprogramm des BMBF  
„Deutsch-Baltisches Schwerpunktprogramm 2002: Optische Technologien“  
„Akkumulierendes Personendosimeter“ (LVA 01/004)

National Institutes of Health (NIH R21 EB002928-01)  
„Advanced High-Resolution Two-Dimensional X-Ray Detector“

Rahmenvereinbarung mit SCHOTT GLAS (Mainz) über Forschungs- und Beratungsleistungen

BMBF-Projekt FLUOPLEX (Förderkennzeichen: 13N8849)  
„Gesundheitsvorsorge durch Fluoreszenz-Multiplexing“  
Teilvorhaben: „Nanostrukturierte Fluoreszenzmarker für hochsensitive Multiparameter-Fluoreszenzmessverfahren in der Bioanalytik und medizinischen Diagnostik“

DFG (Az.: SCHW 721/6-1)  
Paketantrag: Optische Nanostrukturen für die Photovoltaik (PAK 88)  
Projekt: „Herstellung und Charakterisierung von leitfähigen photonischen Nanostrukturen aus ITO und Glaskeramiken für die Downkonversion“

## Aktuelle Kooperationen

Schott AG, Mainz

Smiths Heimann GmbH, Wiesbaden

Forschungszentrum Jülich, Institut für Photovoltaik, Jülich

Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Fachbereich Physik, Halle (Saale)

Interfaculty Reactor Institute, TU Delft, Delft, Die Niederlande

Advanced Photon Source, Argonne National Laboratory, Argonne, IL, USA

Northern Illinois University, Department of Physics, DeKalb, Illinois, USA

School of Chemistry, Monash University, Victoria, Australien

Institute of Solid State Physics, University of Latvia, Riga, Lettland

Materials Technology Group, Industrial Research Limited, Lower Hutt, Neuseeland

School of Chemical and Physical Sciences, Victoria University, Wellington, Neuseeland

Research Institute for Solid State Physics and Optics, Budapest, Ungarn

## Gastaufenthalte von Mitgliedern der Arbeitsgruppe

Stefan Schweizer: Visiting Scientist am Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, USA (Okt. 2005 – Dez. 2005)

Stefan Schweizer: Visiting Scientist am Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, USA (Jan. 2006 – Sept. 2006)

Julia Selling: DAAD-Auslandsstipendiat an der Northern Illinois University, DeKalb, Illinois, USA (Sept. 2006 – Nov. 2006)

## Patente

United States Provisional Patent Application, filed November 16, 2005  
J. A. Johnson, R. Weber, S. Schweizer, D. MacFarlane, P. Newman, G. Chen  
„Multi-radiation large area detector“

Invention Report, filed June 1, 2006 (Argonne National Laboratory)  
S. Schweizer, J. A. Johnson, A. R. Lubinsky  
„New Computed Radiography System for Mammography“

## Prof. Dr. Wolf Gero Schmidt

### Publikationen

#### 2005

P.H. Hahn, W.G. Schmidt, F. Bechstedt,  
„Molecular electronic excitations calculated from a solid-state approach: Methodology and numerics“,  
Phys. Rev. B 72, 245425 (2005).

F. Bechstedt, K. Seino, P.H. Hahn, W.G. Schmidt,  
„Quasiparticle bands and optical spectra of highly ionic crystals: AlN and NaCl“,  
Phys. Rev. B 72, 245114 (2005).

F. Ortman, W.G. Schmidt, F. Bechstedt,  
„Attracted by Long-Range Electron Correlation: Adenine on Graphite“  
Phys. Rev. Lett 95, 186101 (2005).

W.G. Schmidt,  
„Calculation of reflectance anisotropy for semiconductor surface exploration“,  
phys. stat. sol. (b) 242, 2751 (2005).

P.H. Hahn, K. Seino, W.G. Schmidt, J. Furthmüller, F. Bechstedt,  
„Quasiparticle and excitonic effects in the optical spectra of diamond, SiC, Si, GaP, GaAs, InP, and AlN“  
phys. stat. sol. (b) 242, 2720 (2005).

N. Esser, M. Rake, C. Cobet, W.G. Schmidt, W. Braun, M. Cardona,  
„VUV-ellipsometry on GaN: Probing conduction band properties by core level excitations“,  
phys. stat. sol. (b) 242, 2601 (2005).

F. Fuchs, W.G. Schmidt, F. Bechstedt,  
„Initial Stage of Si(001) Surface Oxidation from First-Principles Calculations“,  
J. Phys. Chem. B 109, 17649 (2005).

F. Fuchs, W.G. Schmidt, F. Bechstedt,  
„Understanding the optical anisotropy of oxidized

Si(001) surfaces“  
Phys. Rev. B 72, 075353 (2005).

M. Preuss, W.G. Schmidt, F. Bechstedt,  
„Coulombic Amino Group-Metal Bonding: Adsorption of Adenine on Cu(110)“  
Phys. Rev. Lett 94, 236102 (2005).

K. Seino, W.G. Schmidt,  
„Conformation-selective adsorption of 2,3-butenediol on Si(001)“,  
Surf. Sci. 585, 191 (2005).

R. Leitsmann, W.G. Schmidt, P.H. Hahn, F. Bechstedt,  
„Second-harmonic polarizability including electron-hole attraction from band-structure theory“,  
Phys. Rev. B 71, 195209 (2005).

A. Hermann, W.G. Schmidt, F. Bechstedt,  
„Optical response of  $\delta$ -conjugated molecular monolayer adsorbed on the semiconductor Si(001) surface: A first-principles study“,  
Phys. Rev. B 71, 153311 (2005).

A. Hermann, W.G. Schmidt, F. Bechstedt,  
„Phenanthrenequinone Adsorbed on Si(001): Geometries, Electronic Properties, and Optical Response“,  
J. Phys. Chem. B 109, 7928 (2005).

L. Töben, L. Gundlach, R. Ernstorfer, R. Eichberger, T. Hannappel, F. Willig, A. Zeiser, J. Förstner, A. Knorr, P.H. Hahn, W.G. Schmidt,  
„Femtosecond Transfer Dynamics of Photogenerated Electrons at a Surface Resonance of Reconstructed InP(100)“,  
Phys. Rev. Lett. 94, 067601 (2005).

P.H. Hahn, W.G. Schmidt, K. Seino, M. Preuss, F. Bechstedt, J. Bernholc,  
„Optical Absorption of Water: Coulomb Effects versus Hydrogen Bonding“,  
Phys. Rev. Lett. 94, 037404 (2005).

#### 2006

W.G. Schmidt, K. Seino, M. Preuss, A. Hermann, F. Ortman, F. Bechstedt,  
„Organic molecule adsorption on solid surfaces: chemical bonding, mutual polarisation and dispersion interaction“,  
Appl. Phys. A 85, 387 (2006).

S. Blankenburg, W.G. Schmidt,  
„Adsorption of phenylglycine on copper: Density functional calculations“,  
Phys. Rev. B 74, 155419 (2006).

M. Preuss, R. Miotto, F. Bechstedt, T. Rada, N.V. Richardson, W.G. Schmidt,  
„Structure, energetics, and vibrational spectra of perylene adsorbed on Si(001): First-principles calculations compared with STM and HREELS“,  
Phys. Rev. B 74, 045422 (2006).

C. Thierfelder, A. Hermann, P. Schwerdtfeger, W.G. Schmidt,  
„Strongly bonded water monomers on the ice Ih basal plane: Density-functional calculations“,  
Phys. Rev. B 74, 045422 (2006).

S. Biering, A. Hermann, W.G. Schmidt,  
„Adsorption of water on chlorine-terminated Si(111) from first principles: Substrate-induced ordering versus intermolecular interactions“  
Phys. Rev. B 73, 235429 (2006).

W.G. Schmidt, A. Hermann, F. Fuchs, F. Bechstedt,  
„Si(001) surface optical anisotropies induced by  $\delta$ -conjugated overlayers and oxidation“,  
Curr. Appl. Phys. 6, 525 (2006).



W.G. Schmidt, K. Seino,  
„Si(001)c(4x2)-p(2x2) surface phase transitions induced by electric fields and doping“,  
Curr. Appl. Phys. 6, 331 (2006).

F. Ortman, F. Bechstedt, W.G. Schmidt,  
„Semiempirical van der Waals correction to the density functional description of solids and molecular structures“,  
Phys. Rev. B 73, 205101 (2006).

K. Seino, W.G. Schmidt, A. Ohtake,  
„Ga-rich GaAs(001) surface from ab initio calculations: Atomic structure of the (4x6) and (6x6) reconstructions“,  
Phys. Rev. B 73, 035317 (2006).

M. Preuss, F. Bechstedt, W.G. Schmidt, J. Sochos, B. Schröter, W. Richter,  
„Clean and pyrrole-functionalized Si- and C-terminated SiC surfaces: Geometry and energetics“,  
Phys. Rev. B (accepted).

T. Letzig, F. Willig, P.H. Hahn, W.G. Schmidt,  
„Experimental and theoretical evidence for a hydrogen-stabilized c(2x2) reconstruction of the P-rich InP(001) surface“,  
Phys. Rev. B (accepted).

A.A. Stekolnikov, K. Seino, F. Bechstedt, S. Wippermann, W. G. Schmidt, A. Calzolari,  
„Hexagon versus trimer formation in In nanowires on Si(111): Energetics and quantum conductance“,  
Phys. Rev. Lett. (accepted).

S. Wippermann, W.G. Schmidt, A. Calzolari, M. Buongiorno Nardelli, A.A. Stekolnikov, K. Seino, F. Bechstedt,  
„Quantum conductance of In nanowires on Si(111) from first principles calculations“,  
Surf. Sci. (accepted).

## Weitere Funktionen

### Mitgliedschaften

Vorstand des Paderborner Zentrums für Paralleles Rechnen (PC2)

Vorstand des Departments Physik

Senatskommission für Planung und Finanzen

### Kooperationen

Prof. Dr. Friedhelm Bechstedt, Universität Jena

Prof. Dr. Norbert Esser, ISAS Berlin

Prof. Dr. Jerry Bernholc, North Carolina State University, USA

Prof. Dr. Ronei Miotto, University of Brazilia, Brasilien

Prof. Dr. Peter Schwerdtfeger, Massey University Auckland, Neuseeland

Prof. Dr. Neville Richardson, University of St. Andrews, Großbritannien

## Forschungsprojekte

DFG-Einzelprojekt SCHM1361/8  
„Ground- and excited-state properties of hydrogen-bonded water monomers“

DFG-Einzelprojekt SCHM1361/9  
„Substrate-modified molecular interactions analysed from first-principles calculations“

## Prof. Dr. Thomas Frauenheim

### Publikationen

Bai, J.; Cui, L.F.; Wang, J.L.; Yoo, S.H.; Li, X.; Jellinek, J.; Köhler, C.; Frauenheim, T.; Wang, L.S. & Zeng, X.C. (2006), 'Structural evolution of anionic silicon clusters Si-N (n 0 45)', J. Phys. Chem. A 110, 908.

Cuniberti, G.; Fagas, G. & Richter, K. Cuniberti, G.; Fagas, G. & Richter, K., ed. (2005), 'Introducing Molecular Electronics', Springer, Berlin.

Deak, P.; Gali, A.; Solyom, A.; Buruzs, A. & Frauenheim, T. (2005), 'Electronic structure of boron interstitial clusters in silicon', J. Phys.: Cond. Matter 17, S2141.

Dek, P.; Buruzs, A.; Gali, A. & Frauenheim, T. (2006), 'Strain-Free Polarization Superlattice in Silicon Carbide: A Theoretical Investigation', Phys. Rev. Lett. 96, 236803.

Dek, P.; Buruzs, A.; Gali, A.; Frauenheim, T. & Choyke, W.J. (2006), 'Silicon Carbide: a playground for 1D-modulation electronics', Materials Science Forum 527-529, 355.

Eckel, J.; Weiss, S. & Thorwart, M. (2006), "Eur. Phys. J. .

Fujita, N.; Jones, R.; Goss, J.P.; Briddon, P.R.; Frauenheim, T. & Oberg, S. (2005), 'Theoretical investigations of the diffusion of Nitrogen-pair defects in Silicon', Sol. Stat. Phen. 108, 407.

Fujita, N.; Jones, R.; Goss, J.P.; Briddon, P.R.; Frauenheim, T. & Oberg, S. (2005), 'Diffusion of nitrogen in silicon', Appl. Phys. Lett. 87, 021902.

Gagliardi, A.; Pecchia, A.; Niehaus, T.A.; Frauenheim, T. & Di Carlo, A. (2006), 'Quasiparticle correction for electronic transport in molecular wires', Nanoletters.

Gali, A.; Dek, P.; Son, N.T. & Janzn, E. (2005), 'Possibility for the electrical activation of the carbon antisite by hydrogen in SiC', Phys. Rev. B 71, 035213/1-6.

Gali, A.; Homos, T.; Dek, P.; Son, N.T.; Janzn, E. & Choyke, W.J. (2005), 'Activation of shallow boron acceptors in C/B co-implanted SiC - a theoretical study', Appl. Phys. Lett. 86, 102108/1-3.

He, M.X.; Zhang, R.Q.; Lee, S.T.; Niehaus, T.A. & Frauenheim, T. (2006), 'Sensitivity of hydrogenated silicon nanodot on small polar molecules', .

Heringer, D.; Niehaus, T.A.; Torralva, B. & Frauenheim, T. (2005), 'Importance of electronic self-consistency in the TDDFT based treatment of nonadiabatic molecular dynamics', Eur. Phys. J. D 35, 467.

Hoffmann, M.; Wanko, M.; Strodel, P.; Frauenheim, T.; Thiel, W.; Tajkhorshid, E.; Schulten, K. & Elstner, M. (2006), 'Color tuning in Rhodopsins: the molecular mechanism responsible for the blue shift between bacteriorhodopsin and

sensory rhodopsin II optical spectra', J. Am. Chem. Soc. 128, 10808.

Hourahine, B.; Sanna, S.; Aradi, B.; Köhler, C. & Frauenheim, T. (2006), 'A theoretical study of erbium in GaN', physica B-Cond. Mat. 376, 512.

Jackson, K.A.; Horoi, M.; Chaudhuri, I.; Frauenheim, T. & Shvartsburg, A.A. (2006), 'Statistical evaluation of the big bang search algorithm', Comp. Mat. Sci. 35, 232.

Jackson, K.A.; Yang, M.; Chaudhuri, I. & Frauenheim, T. (2005), 'Shape, polarizability and metallicity in silicon clusters', Phys. Rev. A 71, 033205.

Jalkanen, K.J.; Wuertz-Juergensen, V.; Claussen, A.; Rahim, A.; Jensen, G.M.; Wade, R.C.; Nardi, F.; Jung, C.; Degtyarenko, I.M.; Nieminen, R.M.; Herrmann, F.; Knapp-Mohammady, M.; Niehaus, T.A.; Frimand, K. & Suhai, S. (2006), 'The Use of Vibrational Spectroscopy to Study Protein and DNA Structure, Hydration, and Binding of Biomolecules: A Combined Theoretical and Experimental Approach', Int. J. Quant. Chem. 106, 1160.

Köhler, C. & Frauenheim, T. (2006), 'Molecular dynamics simulations of CF(x) (x=2,3) molecules at Si(3)N(4) and SiO(2) surfaces', Surf. Sci. 600, 453.

Köhler, C.; Seifert, G. & Frauenheim, T. (2006), 'Magnetism and the potential energy hypersurfaces of Fe(53) to Fe(57)', Comp. Mat. Sci. 35, 297.

Köhler, C.; Seifert, G. & Frauenheim, T. (2005), 'Density-Functional based calculations for Fe(n), (n(32))', Chem. Phys. 309, 23.

König, P.; Ghosh, N.; Hoffmann, M.; Elstner, M.; Tajkhorshid, E.; Frauenheim, T. & Cui, Q. (2006), 'Towards theoretical analysis of long-range proton transfer kinetics in biomolecular pumps', J. Phys. Chem. A 110, 548.

König, P.; Hoffmann, M.; Frauenheim, T. & Cui, Q. (2005), 'A critical evaluation of different QM/MM frontier treatments using SCC-DFTB as the QM method', J. Phys. Chem. B 109, 9082.

Karthäuser, S.; Lüssem, B.; Weides, M.; Alba, M.; Besmehn, A.; Oligschläger, R. & Waser, R. (2006), 'Resistive switching of rose bengal devices: a molecular effect?', J. Appl. Phys. 100, 094504.

Klein, P.; Gottwald, B.; Frauenheim, T.; Köhler, C. & Gemmler, A. (2005), 'Residual stresses modelled by MD simulation applied to PVD DC sputter deposition', Surface & Coatings Technology 200, 1600.

Knaup, J.; Dek, P.; Frauenheim, T.; Gali, A.; Hajnal, Z. & Choyke, J.W. (2005), 'The mechanism of dry oxidation of 4H-SiC', Phys. Rev. B 71, 235321.

Knaup, J.M.; Dek, P.; Frauenheim, T.; Gali, A.; Hajnal, Z. & Choyke, W.C. (2005), 'Defects in SiO(2) as the possible origin of near interface traps in the SiC/SiO(2) system -- A systematic theoretical study', Phys. Rev. B 72, 115323.

Knaup, J.M.; Dek, P.; Gali, A.; Hajnal, Z.; Frauenheim, T. & Choyke, C.W. (2005), 'The search for near interface oxide traps - First-principles calculations on intrinsic SiO(2) defects', Materials Science Forum 483-485, 569.

- Knaup, J.M.; Köhler, C.; Frauenheim, T.; Blumenau, A.T.; Amkreutz, M.; Schiffels, P.; Schneider, B. & Hennemann, O.D. (2006), 'Computational studies on polymer adhesion at the surface of  $O-Al(2)O(3)$ . I. The adsorption of adhesive component molecules from the gas phase', *J. Phys. Chem. B* 110, 20460.
- Koch, J.; Raikh, M.E. & Von Oppen, F. (2006), 'Pair tunneling through single molecules', *Phys. Rev. Lett.* 96, 056803.
- Koch, J.; Raikh, M.E. & Von Oppen, F. (2005), 'Full counting statistics of strongly non-Ohmic transport through single molecules', *Phys. Rev. Lett.* 95, 056801.
- Koch, J.; Semmelhack, M.; Von Oppen, F. & Nit-zan, A. (2006), 'Current-induced nonequilibrium vibrations in single-molecule devices', *Phys. Rev. B* 73, 155306.
- Koch, J. & Von Oppen, F. (2005), 'Effects of charge-dependent vibrational frequencies and anharmonicities in transport through molecules', *Phys. Rev. B* 72, 113308.
- Koch, J. & Von Oppen, F. (2005), 'Franck-Con-don Blockade and Giant Fano Factors in Trans- port through Single Molecules', *Phys. Rev. Lett.* 94, 206804.
- Koch, J.; Von Oppen, F. & Andreev, A.V. (2006), 'Theory of the Franck-Condon blockade', *cond- mat*, 0606512.
- Koch, J. & Von Oppen, F. (2006), 'Nonequili- brium charge-Kondo transport through negative- U molecules', *cond-mat*, 0610746.
- Koskinen, P.; Hakkinen, H.; Seifert, G.; Sanna, S.; Frauenheim, T. & Moseler, M. (2006), 'Den- sity-functional based tight-binding study of small gold clusters', *New J. Phys.* 8, 9.
- Kovts, A. & Dek, P. (2005), 'Gas composition at the substrate in MW-CVD diamond growth: an old problem revisited', *Diamond & Rel. Mater.* 14, 1517-1521.
- Krüger, T.; Amkreutz, M.; Schiffels, P.; Schnei- der, B.; Hennemann, O.D. & Frauenheim, T. (2005), 'Theoretical study of the interaction between selected adhesives and oxide surfaces', *J. Phys. Chem. B* 109, 5060.
- Krüger, T.; Elstner, M.; Schiffels, P. & Frauen- heim, T. (2005), 'Validation of the DFTB method for the calculation of reaction energies and other data', *J. Chem. Phys.* 122, 114110.
- Kronholz, S.; Karthäuser, S.; van der Hart, A.; Wandlowski, T. & Waser, R. (2006), 'Metallic Nanogaps with access windows for liquid based systems', *Microelectronics Journal* 37, 591-594.
- Kronholz, S.; Karthäuser, S.; Meszaros, G.; Wandlowski, T.; van der Hart, A. & Waser, R. (2006), 'Protected Nanoelectrodes of two diffe- rent metals with 30nm gapwidth and access window', *Microelectronic Engineering* 83, 1702-1705.
- Kulawik, M.; Nilius, N.; Rust, H.; Freund, H.; Mantooth, B. & Weiss, P.S. (2005), 'Interac- tion of CO molecules with surface state elec- trons on Ag(111)', *Surf. Sci.* 590, L253.
- Lüssem, B.; Karthäuser, S.; Haselier, H. & Waser, R. (2005), 'The Origin of Faceting of Ultraflat Gold Films Epitaxially Grown on Mica', *Applied Surface Science* 249, 197.
- Lüssem, B.; Müller-Meskamp, L.; Karthäuser, S.; Homberger, M.; Simon, U. & Waser, R. (2006), 'A STM study of mixed Alkanethio/Biphenyl- thiol Self Assembled Monolayers on Au(111)', *Langmuir* 22, 3021-3027.
- Lüssem, B.; Müller-Meskamp, L.; Karthäuser, S. & Waser, R. (2005), 'A New Phase of the  $c(4 \times 2)$  Superstructure of Alkanethiols Grown by Vapour Phase Deposition on Gold', *Langmuir* 21, 5256.
- Lin, C.S.; Zhang, R.Q.; Frauenheim, T. & Lee, S.T. (2006), 'Density functional theoretical study of FAD molecule interacting with carbon nanotu- be', *Sensors & Actuators*.
- Lin, C.S.; Zhang, R.Q.; Lee, S.T.; Elstner, M.; Frauenheim, T. & Wan, L.J. (2005), 'Simulation of water cluster assembly on a graphite surface', *J. Phys. Chem. B* 109, 14183.
- Müller-Meskamp, L.; Lüssem, B.; Karthäuser, S.; Prikhodovski, S.; Homberger, M.; Simon, U. & Waser, R. (2006), 'Molecular Structure of Fer- rocene-thiol Islands embedded into Alkanethiol Self-Assembled Monolayers by UHV-STM', *Phys. Stat. Sol. A* 203, 1448-1452.
- Müller-Meskamp, L.; Lüssem, B.; Karthäuser, S. & Waser, R. (2005), 'Rectangular  $(3 \times 2 \sqrt{3})$  Superlattice of a Dodecane- thiol Self-Assembled Monolayer on Au(111) observed by UHV-STM', *J. Phys. Chem B* 109, 11424.
- Makai, L.; Hrs, G.; Varga, G.; Fülöp, G. & Dek, P. (2005), 'Computer simulation of the operating pressure of tungsten halogen lamps', *J. Phys. D: Appl. Phys.* 38, 3217-3225.
- Makkai, Z.; Pcz, B.; Brsony, I.; Vida, G.; Pongrcz, A.; Josepovits, K.V. & Dek, P. (2005), 'Isolated SiC nanocrystals in SiO<sub>2</sub>', *Appl. Phys. Lett.* 86, 53109/1-3.
- Niehaus, T.A.; Rohlfing, M.; Della Sala, F.; Di Carlo, A. & Frauenheim, T. (2005), 'Quasiparti- cle energies for large molecules: a tight-binding GW approach', *Phys. Rev. A* 71, 022508.
- Nolan, M.; O'Callaghan, S.; Fagas, G.; Greer, J.C. & Frauenheim, T. (2006), 'Silicon Nanowire Band Gap Modification', *Nanoletters*.
- Nowack, K.C. & Wegewijs, M.R. (2005), 'Vibra- tion-assisted tunneling through competing molecular states', *cond-mat*, 0506552.
- Pascual, J.I. & Lorente, N. (2006), *Single Mole- cule Vibrational Spectroscopy and Chemistry*, World Scientific.
- Pascual, J.I. & Lorente, N. (2006), *Inelastic electron tunneling microscopy and spectroscopy of single molecules by STM*, Wiley-VCH.
- Pecchia, A.; Di Carlo, A.; Gagliardi, A.; Niehaus, T.A. & Frauenheim, T. (2005), 'Atomistic simu- lation of the electronic transport in organic nanostructures: electron-phonon and electron- electron interactions', *J. Comp. Electronics* 4, 79.
- Petit, S.; Jones, R.; Shaw, M.J.; Briddon, P.R.; Hourahine, B. & Frauenheim, T. (2005), 'Elec- tronic behavior of rare-earth dopants in AlN: A density-functional study', *Phys. Rev. B* 72, 073205.
- Rauls, E.; Gerstmann, U. & Frauenheim, T. (2005), 'Influence of the growth-surface on the incorporation of phosphorus in SiC', *Appl. Surf. Sci.* 243, 345.
- Riccardi, D.; König, P.; Yu, H.; Elstner, M.; Frau- enheim, T. & Qiang, C. (2006), '„Proton holes“ in long-range proton transfer reactions in solu- tion and enzymes: A theoretical analysis', *J. Am. Chem. Soc.*
- Sela, E.; Oreg, Y.; Von Oppen, F. & Koch, J. (2006), 'Fractional Shot Noise in the Kondo Regime', *Phys. Rev. Lett.* 97, 060501.
- Simdyankin, S.I.; Elstner, M.; Niehaus, T.A.; Frauenheim, T. & Elliott, S.R. (2005), 'Influen- ce of copper on the electronic properties of amorphous chalcogenides', *Phys. Rev. B* 72, 020202.
- Simdyankin, S.I.; Niehaus, T.A.; Natarajan, G.; Frauenheim, T. & Elliott, S.R. (2005), 'A new type of charged defects in amorphous chalco- genids', *Phys. Rev. Lett.* 94, 086401.
- Solomon, G.C.; Gagliardi, A.; Pecchia, A.; Frau- enheim, T.; Di Carlo, A. & Reimers, J.R. (2006), 'The symmetry of single-molecule conduction', *Chem. Phys.* 125, 184702.
- Solomon, G.C.; Gagliardi, A.; Pecchia, A.; Frau- enheim, T.; Di Carlo, A.; Reimers, J.R. & Hush, N.S. (2006), 'The molecular origins of conduction channels observed in shot noise measure- ments', *Nanoletters* 6, 2431.
- Solomon, G.C.; Gagliardi, A.; Pecchia, A.; Frau- enheim, T.; DiCarlo, A.; Reimers, J.R. & Hush, N.S. (2006), 'Understanding the inelastic elec- tron tunneling spectra of alkanethiols on gold', *J. Chem. Phys.* 124, 094704.
- Staab, T.E.M.; Nieminen, R.M.; Luysberg, M. & Frauenheim, T. (2005), 'Agglomeration of As antisites in As-rich LT-GaAs: Nucleation without a critical nucleus size?', *Phys. Rev. Lett.* 95, 125502.
- Svizhenko, A.; Mehrez, M.; Anantram, M.P.; Elst- ner, M. & Frauenheim, T. (2005), 'Analysis of band-gap formation in squashed armchair car- bon nanotubes', *Phys. Rev. B* 71, 155421.
- Thill, C.; Knaup, J.M.; Dek, P.; Frauenheim, T. & Choyke, W.J. (2006), 'Where would the elec- tronic states of a small graphite-like carbon island contribute to the SiC/SiO<sub>2</sub> interface state density distribution?', *Materials Science Forum* 527-529, 1019.
- Von Oppen, F. & Koch, J. (2006), *Novel quan- tum transport effects in single-molecule transis- tors*, Springer-Verlag, Berlin.
- Wang, X.; Zhang, R.Q.; Frauenheim, T. & Lee, S.T. (2006), 'Excited state properties of allyla- mine-capped silicon quantum dots', *J. Phys. Chem. B*.
- Wang, Y.J.; Fan, W.J.; Zhang, R.Q. & Frauenheim, T. (2006), 'Noncovalent modification of Car- bon Nanotubes by conjugated polymer', *Sen- sors & Actuators*.
- Wanko, M.; Hoffmann, M.; Frauenheim, T. & Elstner, M. (2006), 'Computational Photoche- mistry of Retinal Proteins', *Journal of Comp. aided Mol. Design*.
- Wanko, M.; Hoffmann, M.; Strodel, P.; Thiel, W.; Neese, F.; Frauenheim, T. & Elstner, M. (2005), 'Calculation absorption shifts for retinal pro- teins: Computational challenges', *J. Phys. Chem. B* 109, 3606.
- Wegewijs, M.R. & Nowack, K.C. (2005), 'Nucle- ar wavefunction interference in single-molecule electron transport', *New J Phys* 7, 239.

Yang, M.L.; Jackson, K.A.; Köhler, C.; Frauenheim, T. & Jellinek, J. (2006), 'Structure and shape variations in intermediate-size copper clusters', J. Chem. Phys. 124, 024308.

Yao, Y.; Liao, M.Y.; Köhler, T.; Frauenheim, T.; Zhang, R.Q.; Wang, Z.G.; Lifshitz, Y. & Lee, S.T. (2005), 'Diamond nucleation by energetic pure carbon bombardment', Phys. Rev. B 72, 035402.

Yoo, S.; Shao, N.; Köhler, C.; Frauenheim, T. & Zeng, X.C. (2006), 'Structures and relative stability of medium-sized silicon clusters. V. Low-lying endohedral fullerene-like clusters Si(31)-Si(40) and Si(45)', J. Chem. Phys. 124, 164311.

Zazunov, A.; Egger, R.; Mora, C. & Martin, T. (2006), ' ', Phys. rev. B 73, 214501.

Zhang, R.Q.; Lifshitz, Y.; Ma, D.D.; Zhao, Y.L.; Frauenheim, T.; Lee, S.T. & Tong, S.Y. (2005), 'Structures and Energetics of Hydrogen-Terminated Silicon Nanowire Surfaces', J. Chem. Phys. 123, 144703.

## Forschungsprojekte

DFG Forschergruppe 490 „Molecular Mechanisms of Retinal Protein Action: A Combination of Theoretical Approaches“ Antragsteller und Mittragsteller in drei von sechs Teilprojekten Projektleitung: • „DFTB QM/MM calculations of retinal protein excited states“ Mittragstellung bei den Projekten: • „Computersimulation of Conformation- Coupled Proton Transfer in Bacteriorhodopsin“ • „Excited state dynamics in the early stages of the bR and Rh photocycle“

DFG/Ung. Akademie-Zusammenarbeitsprojekte: mit Ungarn (TU-Budapest): Defekte und Defekt-komplexe in SiC (1999–2002), verlängert bis 2005

DFG-Graduiertenkolleg: zum Thema „Wissenschaftliches Rechnen“ unter gleichzeitiger Mitwirkung an der Gründung des PaSCO, Paderborn Institute for Scientific Computing (2001–2004)

EU-Netzwerk „RENIBEL“: Rare Earth doping of Nitrides for high Brightness Electroluminescent emitters (2002–2005)

BMBF mit IBM Mainz, Fraunhofer IGB-Stuttgart: Nanofunktionalisierung von Grenzflächen: Entwicklung von atomistischen Modellen zur Beschreibung der Nanofunktionalisierung mit organischen Precursoren (2003–2006)

Fraunhofer IFAM-Bremen, PB-Auftragnehmer: Entwicklung von Multiskalenmethoden für die Behandlung komplexer Polymer-Feststoff-Grenzflächen (2003–2006)

DFG-Forschergruppe mit Heidelberg und Duisburg „Molecular Mechanisms of Retinal Protein Action: 1) DFTB QM / MM calculations of retinal protein excited states and 2) Excited state dynamics in the early stages of the bR and Rh photocycles (2003–2006), Sprecherfunktion

DAAD-ARC: Struktur von Chalkogenidgläsern mit Universität Cambridge, Prof. Steven Elliott (2004-2005)

DAAD-ARC: Biomoleküle in Wechselwirkung mit anorganischen Substraten, University St. Andrews, Prof. Neville Richardson (2004-2005)

DFG-Schwerpunkt: Molekulare Modellierung und Simulation in der Verfahrenstechnik (2003–2005–2008)

DFG-Schwerpunkt: Nanodrähte und Nanoröhren: von der kontrollierten Synthese zur Funktion (2004–2006–2009)

## Europäische Netzwerkaktivitäten

RENIBEL: Rare Earth doping of Nitrides for high Brightness Electroluminescent emitters, mit Partnern: R. Jones (Universität Exeter), A. Eduardo (ITN-Lissabon), A. Vantomme (KULeuven), P. Ruterana (CRISMAT, CNRS-Caen), K. O'Donnell (University of Strathclyde, Glasgow)

## Aktuelle Kooperationen

Universität Kaiserslautern: Prof. Dr. H. Urbassek, amorphes Silizium (DFG)

TU-Dresden: Prof. Dr. G. Seifert, Methoden- und Programmentwicklung (DFG)

TU-Chemnitz: Prof. Dr. D. Zahn, Dr. M. Schreiber, Organisch/ anorganische Hybridsysteme für Bauelemente (DFG, EU)

DKFZ Heidelberg: Prof. Dr. A. Suhai, Dynamik in Biomolekülen (DKFZ, DFG)

Universität Heidelberg: Prof. Dr. J. Smith, Bio-computing, Retinal Proteine (DFG)

FhG-IFAM, Bremen: Prof. Dr. H. Hennemann, Dünnschicht und Hybridstrukturen (FhG, BMBF)

FhG-IBB, Stuttgart: Dr. Chr. Oehr, Dünnschicht und Hybridstrukturen (FhG, BMBF)

IBM Mainz: Dr. H. Hilgers, Dünnschicht und Hybridstrukturen (FhG, BMBF)

## Etablierte internationale Zusammenarbeiten

United Kingdom: Prof. R. Jones, P. Fowler (Universität Exeter), M. Heggie (Universität Sussex), D. Pettifor (Universität Oxford), Prof. S. Elliott (Universität Cambridge), Prof. N. Richardson (Universität St. Andrews)

Finnland: R. Nieminen, M. Kaukonen (Universität Helsinki) Italy: Prof. A. Di Carlo, P. Lugli (Universität Rom), L. Colombo (Universität Cagliari), Prof. M. Garavelli (Universität Bologna)

Korea: Y.-H. Lee (Universität Jeonbuk, Jeonsu)

China: S. T. Lee, D. Tong, S. Lifshitz (City University Hongkong)

Polen: B. Leysing (Universität Warschau)

Tschechien: P. Hobza (Karls Universität Prag)

USA: E. Kaxiras, M. Karplus (Harvard University), K. Schulten (University of Illinois Urbana), W. Yang (Duke University), K. Jackson (Central Michigan University), L. Curtiss, D. Gruen, P. Zapol (Argonne-NL), W. Gutowski (Pacific North-West NL), K. Morokuma (Emory University, Durham)

## Prof. Dr. Harald Overhof

### Publikationen

H. Overhof and J.-M. Spaeth, „Defect identification in the As<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> family in GaAs“ Phys. Rev. B 72, 115205 (2005).

U. Gerstmann, E.Rauls, H.Overhof, and Th. Frauenheim, „Ab initio calculation of shallow defects: Results for P-related donors in SiC“ Mat. Science Forum 483-485, 501 (2005).

M.V.B. Pinheiro, E. Rauls, U. Gerstmann, S. Greulich-Weber, J.-M- Spaeth, and H. Overhof, „Carbon related split-interstitials in electron-irradiated n-type 6H-SiC“ Mat. Science Forum 527-529, 551 (2006).

U. Gerstmann, E.Rauls, S. Sanna, Th. Frauenheim, and H. Overhof, „Co-doping of Er-doped SiC with Oxygen - a promising way towards efficient 1540 nm emission at room temperature?“ Mat. Science Forum 527 -529, 665 (2006).

## Prof. Dr. Jörg Neugebauer

### Publikationen

Hildebrandt, S., Lymperakis, L., Neugebauer, J. and Stutzmann, M., Eds.: „Proceedings of the 6th International Conference of Nitride Semiconductors (ICNS-6“, Wiley-VCH, Physica Status Solidi B-Basic Solid State Physics, 203, No. 7: (2006)

M. Albrecht, L. Lymperakis, J. Neugebauer, J.E. Northrup, L. Kirste, M. Leroux, I. Grzegory, S. Porowski, and H.P. Strunk, „Chemically ordered AlGa<sub>2</sub>N alloys: Spontaneous formation of natural quantum dots“, Phys. Rev. B 71, 035314 (2005).

P. Rinke, A. Qteish, J. Neugebauer, C. Freysoldt, and M. Scheffler, „Combining GW calculations with exact-exchange density-functional theory: an analysis of valence-band photoemission for compound semiconductors“, New J. Phys. 7, 126-160 (2005).

A. Qteish, A. I. Al-Sharif, M. Fuchs, M. Scheffler, S. Boeck and J. Neugebauer „Exact-exchange calculations of the electronic structure of AlN, GaN and InN“, Computer Physics Communications 169, 28-31 (2005).

L. Ismer, J. Ireta, S. Boeck, J. Neugebauer, „Phonon-spectra and thermodynamic properties of the infinite polyalanine alpha-helix: A DFT-based harmonic vibrational analysis“, Phys. Rev. E 71, 031911 (2005).

A.R. Smith, R. Yang, H.Q. Yang, A. Dick, J. Neugebauer, and W.R.L. Lambrecht, „Recent Advances in Atomic-Scale Spin-Polarized Scanning“, Micr. Res. and Techn. 66, 72–84 (2005).

J.E. Northrup and J. Neugebauer, „Metal-adlayer-stabilized ZnO(0001) surfaces: Towards a new growth mode for oxides“, Appl. Phys. Lett., 87, 141914 (2005)

J. Ireta, J. Neugebauer, M. Scheffler, A. Rojo, and M. Galván, „Structural transitions in the poly-

alanine  $\alpha$ -Helix under uniaxial strain", JACS 127 49 17241-17244 (2005)

A. Qteish, A. Al-Sharif, S. Boeck, J. Neugebauer and M. Scheffler, „Role of semicore states in the bandgaps of group-III nitrides: An exact exchange study", Phys. Rev. B 72, 155317 (2005)

J. I. Pascual, A. Dick, M. Hansmann, H.-P. Rust, J. Neugebauer, and K. Horn, „Bulk Electronic Structure of Metals Resolved with Scanning Tunneling Microscopy", Physical Review Letters, 96, 046801 (2006).

Rosa, AL and Neugebauer, J.: Polarity inversion of GaN (0001) surfaces induced by Si adsorption. Surface Science 600 (2), 335-229 (2006)

Rosa, AL and Neugebauer, J.: Understanding Si adsorption on GaN (0001) surfaces using first-principles calculations. Phys. Rev. B 73, 20, 205314 (2006)

Rosa, AL and Neugebauer, J.: First-principles calculations of the structural and electronic properties of clean GaN (0001) surfaces. Physical Review B 73 (20), 205346 (2006)

Van de Walle, C.G. and Neugebauer, J.: Hydrogen in Semiconductors, Ann. Rev. of Mat. Res. 36, 179 (2006)

Wahn, M. and Neugebauer, J.: Generalized Wannier functions: An efficient way to construct ab-initio tight-binding parameters for group-III nitrides. Physica Status Solidi B-Basic Solid State Physics B 243, 7, 1583-1587 (2006)

Yang, R., Yang, H., Smith, A.R., Dick, A., Neugebauer, J.: Energy-dependent contrast in atomic-scale spin-polarized scanning tunneling microscopy of Mn<sub>3</sub>N<sub>2</sub> (010): Experiment and first-principles theory Physical Review B, 74, 115409 (2006)

Rinke, P., Scheffler, M., Qteish, A., Winkelkemper, M. Bimberg, D., Neugebauer, J.: Band gap and band parameters of InN and GaN from quasiparticle energy calculations based on exact-exchange density-functional theory. Appl. Phys. Lett 89 (16), 161919 (2006)

Qteish, A., Rinke, P., Scheffler, M., Neugebauer, J.: Exact-exchange-based quasiparticle energy calculations for the band gap, effective masses, and deformation potentials of ScN. Phys. Rev. B 74 (24), 245208 (2006)

## Messen/Tagungen/Seminare

8.-10. Juni 2005, GeoMat 2005, Aachen, Germany, „Ab initio Simulations of Solid State Processes"

5.-9. Sept. 2005, E-MRS Fall Meeting, Symp. F, Warsaw, Poland, „Multiscale Simulations of Dislocations in GaN"

5.-9. Sept. 2005, European Conference on Surface Science (ECOSS 23), Berlin, Germany, „Surface Physics of Group III-Nitride Semiconductors"

11.-13. Sept. 2005, UCSB-MPG Workshop, Harnack-Haus Berlin, Germany, „Ab initio Thermodynamics: Concepts and Application on Bulk Properties and Epitaxial Growth"

10.-18. Sept. 2005: Int. Workshop on Crystal Growth Technology (IWCGT-3), Beatenberg, Switzerland, „Multiscale Crystal Growth Simulations"

13.-18. Feb. 2006 Parsem-Meeting Valbonne/France), „Ab-initio based multiscale growth simulations of group III-Nitrides"

7.-12. Mai 2006, ECS-Meeting Denver/USA, „CVD Growth of Group-III Nitride Semiconductors: An ab Initio Based Multiscale Study"

9.-13. Sept. 2006: IWMCG5 Workshop Bamberg: „Modeling of crystal growth on atomistic scale"

18.-20. Sept. 2006: EW3NS-Workshop Kreta/Greece: „Bandgap issues and universal alignment of hydrogen levels in group-III nitride semiconductors"

23.-26. Sept. 2006: PSI-K COST-Workshop Wroclaw, Poland „Extended Defects and Grain Boundaries in Al-based Materials"

14. Nov. 2006: Polimorphism in condensed Matter POLKOM, Dresden, „Ab initio modelling of crystal growth"

7. Jan. 2005: Anorganisch-Analytisch-Chemisches-Kolloquium, Ruhr-Universität Bochum, „Ab initio Multiskalensimulationen zum Wachstum und zur Defektstruktur von Gruppe-III-Nitriden"

20. Jan. 2005: SiC-Kolloquium, Universität Erlangen-Nürnberg, „Ab initio Multiskalensimulationen zu Defekten und zum Wachstum von breitlückigen Halbleitern"

2. Juni 2005, IWF Dresden, Institutsseminar, „Computergestütztes Materialdesign mittels ab initio Multiskalenmethoden"

17. Febr. 2006: Kolloquium IKZ Berlin: „Materialdesign auf dem Computer"

2.-7. Mai 2006: UCSB Santa Barbara/USA: „Ab-Initio Based Growth Simulations of Group-III-Nitrides"

2.-7. Mai 2006: UCSB Santa Barbara/USA, „Ab initio calculations of free energies and grain boundaries"

21. Juni 2006: Kolloquium TU Clausthal, „Ab initio Beschreibung von thermodynamischen, kinetischen und mikrostrukturellen Materialeigenschaften: Status und zukünftige Herausforderungen"

24.-26.7.2006: SFB-OTF Workshop Göttingen, „Ab initio multiscale simulation of materials"

1. Sept. 2006: Alumni-Meeting MPIE Düsseldorf, „Ab initio Modellierung von Materialeigenschaften und -prozessen"

7. Nov. 2006: Kolloquium, Universität Bochum, „Obtaining thermodynamic and kinetic properties of surfaces from first principles"

8. Dez. 2006: IMPRS/Surmat-Workshop MPIE Düsseldorf, „Ab initio based materials design"

## Forschungsprojekte

DFG-Projekt  
„Wachstum und Simulation von quaternären GaInAsN-Quantenpunkten"

VIVIMAT (Virtuelles Institut für Virtuelles Materialdesign)  
„Ab initio Simulationen von Grenzflächen"  
Kooperation zwischen Gießerei-Institut Aachen,

DLR-Zeus, ACCESS, IMM-Aachen und Uni Paderborn

PARSEM (Marie Curie Research Training Network supported by the European Community's Sixth Framework Programme)

„Interfacial Phenomena at Atomic Resolution and multiscale properties of novel III-V SEMI-conductors"

SPP1239 (DFG Schwerpunktprogramm)  
„Änderung von Mikrostruktur und Form fester Werkstoffe durch äußere Magnetfelder"  
mit Teilprojekt „Ab initio Investigation of Temperature Dependent Effects in Dimensionally Constrained Magnetic Memory Heusler Alloys"

DFG-Forschergruppe (Uni Bremen, externes Mitglied)

„Properties of nitride-based nanostructured light-emitting devices"  
mit Teilprojekt „Multiscale growth and doping simulations of nanostructured devices"

Triple-M (integriertes Projekt der Max-Planck-Gesellschaft)

„Max Planck Initiative on Multiscale Materials Modeling of Condensed Matter"

## Aktuelle Kooperationen

### Etablierte nationale Zusammenarbeiten:

Universität Bremen:

Prof. Dr. D. Hommel, Prof. Dr. F. Jahnke, Prof. Dr. G. Czycholl, Quantenpunktlaser (DFG)

IKZ-Berlin:

Prof. Dr. R. Fornari, Dr. M. Albrecht, verdünnte Nitride (DFG)

FHI Berlin:

Prof. Dr. M. Scheffler, selbstwechselwirkungs-freie Funktionale

Infineon:

Dr. H. Riechert, nitridbasierte Laserdioden (DFG)

ACCESS Aachen:

Dr. I. Steinbach, Phasenfeldsimulationen

IMM-Aachen:

Prof. Dr. G. Gottstein, Korngrenzen in Metallen

Universität Erlangen:

Prof. Dr. H. Strunk, TEM-Analyse ausgedehnter Defekte (DFG, EU)

### Etablierte internationale Zusammenarbeiten:

United Kingdom:

C. Humphreys (Cambridge)

Polen:

T. Suski (Unipress Warschau)

Frankreich:

B. Daudin (CEA Grenoble), P. Ruterana (LERMAT Caen)

Spain:

A. Serra (Barcelona)

USA:

J. Northrup (Xerox PARC)

C.G. Van de Walle (University of Santa Barbara)

A. Smith (Ohio State University)

W. Lambrecht (Case Western State University)

A. Qteish, Yarmouk-University, Jordan



## Jun.-Prof. Dr. Marcus Elstner

### Publikationen

N. Bondar, M. Elstner, J. Smith, S. Suhai, S. Fischer, J. Smith, S. Suhai, Direct proton transfer in Bacteriorhodopsin, *Phase Transitions* 78 (2005) 5-9.

M. Wanko, M. Hoemann, P. Strodel, A. Koslowski, W. Thiel, F. Neese, T. Frauenheim and M. Elstner, Calculating absorption shifts for retinal proteins: computational challenges, *J. Phys. Chem. B* 109 (2005) 3606.

T. Krüger, M. Elstner, P. Schiöels, T. Frauenheim, Validation of the densityfunctional based tight-binding approximation method for the calculation of reaction energies and other data, *J. Chem. Phys.* 122 (2005) 114110.

C. Lin, R. Q. Zhang, S. T. Lee, M. Elstner, T. Frauenheim, L. J. Wan, Simulation of water cluster assembly on a graphite surface, *J. Phys. Chem. B* 109 (2005) 14183.

H. Mehrez, A. Svizhenko, M. P. Anantram, T. Frauenheim, M. Elstner, Analysis of band-gap formation in squashed armchair carbon nanotubes, *Phys. Rev. B* 71 (2005) 155421.

S. Simdaynkin, M. Elstner, N. Niehaus, T. Frauenheim, S. R. Elliot, Influence of copper on the electronic properties of amorphous chalconides, *Phys. Rev. B* 72 (2005) 020202.

K. Range, D. Riccardi, Q. Cui, M. Elstner and D. M. York, Benchmark calculations of proton affinities and gas-phase basicities of molecules important in the study of biological phosphoryl transfer, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 7 (2005) 3070.

S. Irlé, G. Zheng, M. Elstner, K. Morokuma, High-Temperature Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations of Carbon Nanostructure Self-Assembly Processes, pp. 875-889, in *Theory and Applications of Computational Chemistry: The First 40 Years*, Ed. C. E. Dykstra, G. Frenking, K. S. Kim, G. E. Scuseria, Elsevier, 2005.

P. Koenig, N. Gosh, M. Hoemann, M. Elstner, T. Frauenheim, Q. Cui, Toward Theoretical Analysis of Long-Range Proton Transfer Kinetics in Biomolecular Pumps, *J. Phys. Chem. A* 110 (2006) 548.

D. Riccardi, P. Schaefer, Y. Yang, H. Yu, Nilanjan Ghosh, X. Prat-Resina, P. Koenig, G. Li, D. Xu, H. Guo, M. Elstner, Q. Cui, Development of Effective Quantum Mechanical/Molecular Mechanical (QM/MM) Methods for Complex Biological Processes, *J. Phys. Chem. B* 110 (2006) 6458.

G. Dolgonos, O. Lukin, M. Elstner, G.H. Peslherbe, J. Leszczynski, Toward a reversible isolation of a C-20 fullerene inside a tetraarecalix[4]arene dimer. A theoretical study, *J. Phys. Chem. A* 110 (2006) 9405.

M. Elstner, The SCC-DFTB method and its application to biological systems, *Theoretical Chemistry Accounts* 116 (2006) 316.

M. Hoffmann, M. Wanko, P. Strodel, T. Frauenheim, W. Thiel, E. Tajikhorshid, K. Schulten, and M. Elstner, Color tuning in Rhodopsins: the molecular mechanism responsible for the blue shift between bacteriorhodopsin and sensory rhodopsin II optical spectra, *J. Am. Chem. Soc.* 128 (2006) 10808.

M. Wanko, M. Hoffmann, T. Frauenheim, and M. Elstner, Computational Photochemistry of Retinal Proteins, *J. Computer-Aided Mol. Design*, 20 (2006) 511.

D. Riccardi, P. Koenig, X. Prat-Resina X, M. Elstner, T. Frauenheim, Q. Cui, Proton holes<sup>3n</sup> long-range proton transfer reactions in solution and enzymes: A theoretical analysis, *J. Am. Chem. Soc.* 128 (2006) 16302.

### Forschungsprojekte

DFG Forschergruppe 490 „Molecular Mechanisms of Retinal Protein Action: A Combination of Theoretical Approaches“ Antragsteller und Mitantragsteller in drei von sechs Teilprojekten  
*Projektleitung*: „DFTB QM/MM calculations of retinal protein excited states“  
*Mitantragsteller bei den Projekten*: „Computer Simulation of Conformation- Coupled Proton Transfer in Bacteriorhodopsin“  
„Excited state dynamics in the early stages of the bR and Rh photocycle“

### Wissenschaftliche Kooperationen

M. Karplus, Department of Chemistry and Chemical Biology, Harvard University, Cambridge MA, USA

E. Kaxiras, Department of Physics, Harvard University, Cambridge MA, USA

W. Yang, Department of Chemistry, Duke University, Durham, NC, USA  
K. Morokuma, Department of Chemistry, Emory University, Atlanta, USA

K. Schulten, Beckmann Institute of Advanced Science and Technology, University of Illinois at Urbana-Champaign, Illinois, USA

P. Hobza, Heyrovsky Institute, Academy of Sciences, Prag Q. Cui, Department of Chemistry, University of Madison, USA

A. Roitberg, Quantum Theory Project, University of Florida, USA  
D. York, Chemistry Department, University of Minnesota, USA

K.-S. Kim, Department of Chemistry, Pohang University, South Korea  
M. Garavelli, Chemistry Department, University Bologna, Italy

M. Meuwly, Theoretische Chemie, Universität Basel

K. Richter, G. Cuniberti, Fakultät für Physik, Universität Regensburg  
J. Hermans, Department of Biochemistry, University of North Carolina, USA

R. Manaa, Laurence Livermore National Laboratory, California, USA

J. Smith, Institut für wissenschaftliches Rechnen, Universität Heidelberg

F. Neese, MPI für Bioanorganische Chemie, Mülheim (Ruhr)  
W. Thiel, MPI für Kohleforschung, Mülheim (Ruhr)

V. Buss, Theoretische Chemie, Universität Duisburg

## Prof. Dr. Peter Reinhold

### Publikationen

Reinhold, P. (2006): Elementarisierung und didaktische Rekonstruktion. In: Mikelskis, H. F. (Hrsg.): *Physik-Didaktik. Praxishandbuch für die Sekundarstufe I und II*. Berlin: Cornelsen, S. 86-102

Reinhold, P. (2006): Physik. In: Arnold, K.-H., Sandfuchs, U., Wiechmann, J. (Hrsg.): *Handbuch Unterricht*. Bad Heilbrunn: Klinkhardt, S. 480 – 484

Reinhold, P. (2005): Fachdidaktische Forschung in der Lehrerbildung. In: A. Pitton (Hg.), *Vorträge auf der Jahrestagung der Gesellschaft für Didaktik der Chemie und Physik (GDGP)*, Heidelberg 2004. Münster: LIT, S. 17-43

Szabone Varnai, A., Reinhold, P. (2005): Computerunterstütztes kooperatives Lernen in physikalischer Lernumgebung. In: A. Pitton (Hg.), *Vorträge auf der Jahrestagung der Gesellschaft für Didaktik der Chemie und Physik (GDGP)*, Heidelberg 2004. Münster: LIT, S. 238-240

Szabone Varnai, A., Reinhold, P. (2006): Lernen mit Simulationen in face-to-face kooperativer Lernumgebung. In: D. Höttecke (Hg.), *Vorträge auf der Jahrestagung der Gesellschaft für Didaktik der Chemie und Physik (GDGP)*, Paderborn 2005. Münster: LIT, S. 45-47.

Fischer, T., Reinhold, P. (2006): Handlungsmuster von Lehrkräften beim Einsatz neuer Medien. In: D. Höttecke (Hg.), *Vorträge auf der Jahrestagung der Gesellschaft für Didaktik der Chemie und Physik (GDGP)*, Paderborn 2005. Münster: LIT, S. 144-146.

Friege, G., Neugebauer, C. & Reinhold, P. (2005): Lernen mit Simulationen und der Einfluss auf das Problemlösen in Physik. In: A. Pitton (Hg.), *Vorträge auf der Jahrestagung der Gesellschaft für Didaktik der Chemie und Physik (GDGP)*, Heidelberg 2004. Münster: LIT, S. 196-198.

Neugebauer, C., Friege, G. & Reinhold, P. (2005): Empirische Ergebnisse zum Projekt Lernen mit Simulationen. In: A. Pitton (Hg.), *Vorträge auf der Jahrestagung der Gesellschaft für Didaktik der Chemie und Physik (GDGP)*, Heidelberg 2004. Münster: LIT, S. 199-201.

Neugebauer, C., Reinhold, P. & Friege, G. (2006): Lernen mit Simulationen und der Einfluss auf das Problemlösen – Grundlagen und Ergebnisse zum Lernen mit Simulationen. In: D. Höttecke (Hg.), *Vorträge auf der Jahrestagung der Gesellschaft für Didaktik der Chemie und Physik (GDGP)*, Paderborn 2005. Münster: LIT, S. 42 – 44.

Suckut, S., Reinhold, P., Friege, G. (2006): Einfluss von Physik im Kontext auf die professionelle Entwicklung von Lehrkräften. In: D. Höttecke (Hg.), *Vorträge auf der Jahrestagung der Gesellschaft für Didaktik der Chemie und Physik (GDGP)*, Paderborn 2005. Münster: LIT, S. 147-149.

Suckut, S., Friege, G., Reinhold, P. (2006): Problemlösen und Aufgabenkultur - Arbeitsergebnis des piko-Set Ostwestfalen-Lippe (OWL). In: D. Höttecke (Hg.), *Vorträge auf der Jahrestagung der Gesellschaft für Didaktik der Chemie und Physik (GDGP)*, Paderborn 2005. Münster: LIT, S. 333-335

Suckut, S., Reinhold, P. (2006): The Impact of the Project „Physics in Context“ on the Professional Development of Teachers; ESERA Summer School 2006, Programme & Synopses, S. 59-62, Universidade do Minho, Braga, Portugal

## Forschungsprojekte

Kollaboratives Lernen mit neuen Medien in problemorientierten physikalischen Lernumgebungen. Eine empirische Studie mit experimentellem Design, abgeschlossen durch die Dissertation von Agnes Szabone Varnai September 2006.

Lernen mit Simulationen und der Einfluss auf das Problemlösen in Physik. Von der DFG im Normalverfahren geförderte empirische Studie mit experimentellem Design, abgeschlossen durch die Dissertation von Christoph Neugebauer Mai 2006.

Unterstützung der Wissensanwendung durch systematischen Einsatz von multiplen Repräsentationsformen und Vorgabe eines (trainierten) strukturierten Kooperationsformats. Zweijähriges post-doc-Projekt von Dr. Agnes Szabone Varnai, gefördert durch ein Stipendium des Rektorats der Universität Paderborn zur Förderung des weiblichen wissenschaftlichen Nachwuchses.

Veränderung der Unterrichtsskripts von Physiklehrkräften durch das Lehren und Lernen mit Simulationen. Eine empirische Untersuchung im Rahmen der Dissertation von Torsten Fischer. Förderung im Rahmen der Abordnung von Torsten Fischer aus der Schule.

Entwicklung und Erprobung von Aufgabensequenzen für Klassenstufe 9/10 Realschule und Übergangsproblematik nach Kl.11; Förderung der Aufgabenkultur; Unterstützung von Modellierungs- und Selbstregulationskompetenz beim Problemlösen; Einbettung von Physik in den Kontext moderner Technologien. Implementationsstudie im Rahmen des vom BMBF geförderten Projekts PIKO (Physik im Kontext).

92

## Aktuelle Kooperationen

Kooperation mit der Abteilung Physik des Leibniz-Instituts für die Pädagogik der Naturwissenschaften (IPN) und den Didaktik-Lehrstühlen an den Universitäten Berlin, Kassel und der Pädagogischen Hochschule Ludwigsburg im Rahmen des BMBF-Projekts piko (Physik im Kontext).

# Department Sport & Gesundheit

## Prof. Dr. Helmut Heseker

### Publikationen

Banasiak, U., Heseker, H., Sieke, C., Sommerfeld, C., Vohmann, C.: Abschätzung der Aufnahme von Pflanzenschutzmittel-Rückständen in der Nahrung mit neuen Verzehrsmengen für Kinder. Bundesgesundheitsbl – Gesundheitsforsch - Gesundheitsschutz 48: 84-98 (2005)

Heseker, H., Odenbach, V. (Hrsg.): Ernährung von Senioren und Pflegebedürftigen. Praxisleitfaden für eine bedarfsgerechte Versorgung im Alter. Behr's Verlag, Hamburg (2005)

Heseker, H., Möllenhoff, H., Weiß, M.: Muskelkräftigung für Senioren. Behr's Verlag, Hamburg (2005)

Stehle, P., Oberritter, H., Büning-Fesel, M., Heseker, H.: Grafische Umsetzung von Ernährungsrichtlinien – traditionelle und neue Ansätze. Ernährungs-Umschau 52: 128-135 (2005)

Erbersdobler, H., Heseker, H., Wolfram, G. (Hrsg.): Adipositas. Eine Herausforderung für's Leben. Wiss. Verlagsgesellschaft mbH Stuttgart (2005)

Heseker, H. (Hrsg.): Neue Aspekte der Ernährungsbildung. Umschau Zeitschriften Verlag, Frankfurt (2005)

Heseker, H.: Ernährung und Adipositas im Kindes- und Jugendalter. Sportunterricht 54: 356-361 (2005)

Heseker, H.: Die Ernährung der Zukunft. Herausforderungen an Erzeuger und Verarbeiter. S. 217-232. In: DLG (Hrsg.): Zukunftsstandort Deutschland. Strategien für die Landwirtschaft. DLG-Verlag, Frankfurt (2006)

Heseker, H.: Prävention der Mangelernährung im Alter. S. 423-429. In: Schauder, P., Berthold, H., Eckel, H., Ollenschläger, G. (Hrsg.): Zukunft sichern: Senkung der Zahl chronisch Kranker. Verwirklichung einer realistischen Utopie. Deutscher Ärzte-Verlag (2006)

Stahl, A., Heseker, H.: Wasser. Ernährungs-Umschau 53: 353-357 (2006)

Bauch, A., Mensink, G., Vohmann, C., Stahl, A., Fischer, J., Kohler, S., Six, J., Heseker, H.: Eskimo: Die Ernährungsstudie bei Kindern und Jugendlichen. Ernährungs-Umschau 53: 380-385 (2006)

Krawinkel, M., Brönstrup, A., Bechthold, A., Biesalski, H.K., Boeing, H., Elmadafa, I., Heseker, H., Kroke, A., Leschik-Bonnet, E., Oberritter, H., Stehle, P.: Strategien zur Verbesserung der Folatversorgung in Deutschland – Nutzen und Risiken. Ernährungs-Umschau 53: 424-429 (2006)

### Preise/Auszeichnungen

Prof. Dr. Helmut Heseker: Deutscher Präventionspreis 2005 (2. Platz) des Bundesministerium für Gesundheit und Soziales, der BzGA und der Bertelsmann Stiftung. Themenschwerpunkt: „Gesund in der zweiten Lebenshälfte“.

### Forschungsprojekte

Prävention von Mangelernährung und Verbesserung des Ernährungszustandes älterer Menschen unter Erhalt und Stärkung der körperlichen Mobilität (PATRAS). Förderung durch den Caritasverband für das Erzbistum Paderborn e.V. Laufzeit: 2003-2005

Modellprojekt: Reform der Ernährungs- und Verbraucherbildung in Schulen (REVIS). Förderung durch das BMELV. Laufzeit: 2003-2005

Bundesweite Ernährungsstudie im Rahmen des Kinder- und Jugendgesundheits surveys (ESKIMO) in Kooperation mit der Abteilung Epidemiologie und Gesundheitsberichterstattung des Robert Koch Instituts, Berlin. Laufzeit: 2005-2007

Entwicklungsprojekt: Paderborner Adipositas-Prävention und Intervention (PAPI) in Kooperation mit dem Arbeitsbereich Sport und Erziehung des Departments Sport&Gesundheit. Förderung durch das BMELV. Laufzeit: 2006-2009

Bundesweite Studie zur Ernährung in stationären Einrichtungen für Senioren und Seniorinnen (ESTESS) in Kooperation mit dem Institut für Ernährungs- und Lebensmittelwissenschaft der Universität Bonn. Förderung durch das BMELV. Laufzeit: 2005-2007

Untersuchungen zur Exposition durch Inhaltsstoffe von Verpackungsmaterial für Lebensmittel (ExposureMatrixProject) in Kooperation mit dem Bundesinstitut für Risikobewertung, Berlin (BfR). Förderung durch PlasticsEurope. Laufzeit: 2006-2007

### Aktuelle Kooperationen

Bundesforschungsanstalt für Ernährung und Lebensmittel, Karlsruhe (BFEL) Projekt: PAPI

Bundesinstitut für Risikobewertung, Berlin (BfR) Projekt: ExposureMatrixProject

Bundesministerium für Ernährung, Landwirtschaft und Verbraucherschutz, Bonn (BMELV) Projekte: REVIS

Caritasverband für das Erzbistum Paderborn e.V. Projekt: PATRAS

Institut für Ernährungs- und Lebensmittelwissenschaften der Universität Bonn Projekt: ESTESS

Ministerium für Schule und Weiterbildung, Düsseldorf (MSW) Projekt: OPUS

Robert Koch Institut, Berlin (RKI) Projekt: ESKIMO

## Prof. Dr. Kirsten Schlegel-Matthies

### Publikationen

Bartsch, S., B. Methfessel, K. Schlegel-Matthies: Pizza, Pasta und Döner Kebab – Mittelmeerkost im Alltag deutscher Jugendlicher. Historische und soziale Hintergründe (2006), in: Haushalt & Bildung 83,4, S. 17 – 26.

Methfessel, B., K. Schlegel-Matthies: Mittelmeerkost im Alltag deutscher Jugendlicher – Ein Lehr-Forschungsprojekt mit Studierenden in Heidelberg und Paderborn (2006), in: Haushalt & Bildung 83,4, S. 37 – 46.

Schlegel-Matthies, K.: Verschuldung – kein Problem für Mädchen? (2006), in: Betrifft Mädchen 19,1, S. 26 – 28.

Schlegel-Matthies, K.: Zur Analyse von Unterrichtsmaterialien für die Ernährungs- und Verbraucherbildung (2006), in: Haushalt & Bildung 83,1, S. 14 – 24. (Gemeinsam mit Barbara Methfessel)

Bartsch, S., B. Methfessel, K. Schlegel-Matthies: Pizza, Pasta and Döner Kebab: Mediterranean Dishes in the Everyday Life of German Young People, in: Mediterranean Food. Concepts and Trends. Proceedings of the 15th International Ethnological Food Research Conference, Dubrovnik, 27 September - 3 October, 2004 hg. v. Patricia Lysaght u. Nives Rittig-Beljak, Zagreb 2006, S. 149 – 172.

Schlegel-Matthies, K.: Neues Konsum- und Finanzmanagement (2005), in: Neue Hauswirtschaft. Ein Material für Multiplikator/innen der familien- und haushaltsbezogenen Bildung, hg. Verbraucherzentrale Bundesverband, Berlin, S. 64 – 85

Schlegel-Matthies, K.: Ernährung zwischen Natur und Kultur: Das Beispiel Fleisch (2005), in: Heseker, H. (Hg.): Neue Aspekte der Ernährungsbildung, Frankfurt: Umschau Zeitschriftenverlag, S. 36-43; S. 217 – 218.

Schlegel-Matthies, K.: Neue Orientierungen der Ernährungs- und Verbraucherbildung (2005), in: DGE (Hg.): Aktuelle Aspekte in der Ernährungsbildung und -beratung. Tagungsband der DGE-Arbeitstagung am 29. und 30. September in Paderborn, Bonn, S. 51 – 55.

Schlegel-Matthies, K.: Ernährungs- und Verbraucherbildung in der Reform (2005), in: „Pisa“ in der Verbraucherbildung. Sind wir alle Konsum-Analphabeten? Schriftenreihe des Verbraucherzentrale Bundesverbandes zur Verbraucherpolitik, Bd. 3, Berlin: BWV, S. 49 – 54.

Schlegel-Matthies, K.: Fachdidaktische Perspektiven auf den Umgang mit Heterogenität im haushaltsbezogenen Unterricht (2005), in: Karin Bräu/ Ulrich Schwerdt (Hg.): Heterogenität als Chance. Vom produktiven Umgang mit Gleichheit und Differenz in der Schule. Münster: LIT-Verlag, S. 197 – 217

Schlegel-Matthies, K.: Zwischen Selbstbestimmung und Verantwortung – Herausforderungen für Verbraucherbildung, in: Haushalt & Bildung 82,1 (2005), S. 25 – 33

Schlegel-Matthies, K.: Mahlzeiten im Wandel der Zeit, in: Die Medizinische Welt 4 (2005), S. 135 – 138

## Forschungsprojekte

Modellprojekt: Reform der Ernährungs- und Verbraucherbildung in Schulen (REVIS)  
Förderung durch das BMVEL  
Laufzeit: 2003 – 2005

Money & Kids. Finanzkompetenzen von Kindern im Grundschulalter  
Förderung durch das MUNLV des Landes NRW  
Beginn: 2006

Finanzkompetenzen von Berufsstartern  
Förderung durch das MUNLV des Landes NRW  
Beginn: 2006

## Aktuelle Kooperationen

Bundesministerium für Verbraucherschutz, Ernährung und Landwirtschaft  
Projekt: REVIS  
2003 – 2005

Ministerium für Naturschutz, Landwirtschaft und Verbraucherschutz des Landes NRW  
Projekt: MOKI und Berufsstarter  
Beginn: 2006

Ministerium für Schule und Weiterbildung des Landes NRW  
Projekt: OPUS

Workshop of Movement Science in Amsterdam, Niederlande 31.5.-1.6.2007

Baumeister J, Ries C, Liesen H, Weiss M: Influence of lateral leg dominance on a functional muscle balance ratio after ACL reconstruction. 2006 (submitted to J Athl Training – ID:JAT 0184-06)

Baumeister J, Herbarth B, Liesen H, Weiss M: Neurophysiological strategies in a golf putting task. 2006 (submitted to Int J Sports Med – ID: ISJM-11-2006-0356-bs)

Baumeister J, Reinecke K, Weiss M: Changed cortical activity due to anterior cruciate ligament reconstruction in a joint position paradigm: an EEG study. 2006 (submitted to Scand J Med Sci Sports – ID: SJMSS-0-297-06)

Weiss M, Barthel T, Falke W, Juneja LR, Geiss KR: L-theanine, a plant amino acid, supports recovery from physical stress as measured by EEG-mapping and correlations of EEG spectral power with blood stress hormones. (J Psychophysiol. in revision)

## Forschungsprojekte

Sportliche Belastungsauswirkungen im Abbild hirnelektrischer Veränderungen und Perspektiven für die sportmedizinische Forschung (Dissertationsprojekt)

Zentralnervöse und motorische Auswirkungen einer Verletzung und Rekonstruktion des vorderen Kreuzbandes bei sensomotorischen Aufgaben (Dissertationsprojekt)

Sportmotorische Zielbewegungen im Abbild elektrophysiologischer Messungen von Anfängern und Könnern am Beispiel des Golf-Putts

Physiologische Spielbeobachtung - Informationstechnologie zur Spielanalyse und Trainingssteuerung in Spielsportarten (Forschungspreis 2006 der Universität Paderborn)

Kognitive Beanspruchung im Abbild kortikaler elektrischer Aktivitäten und deren Beeinflussung durch functional-food Produkte (drittmittelunterstützt)

Kommunikation zwischen Muskel und Gehirn: eine kortiko-muskuläre Kohärenzanalyse (EEG) vor und nach einer sensomotorischen Trainingseinheit

Nachweis von oxidativem Stress durch Akutbelastung und rasche Trainingssteigerung und dessen Verhinderung zur verbesserten Trainingsadaptation durch funktionelle Nahrungsmittel (drittmittelunterstützt)

Senkung des Blutcholesterins und Stoffwechselfbeeinflussung durch ein Stanol-haltiges Fruchtsaftgetränk (Evaluationsstudie im Industriefauftrag)

## Prof. Dr. med. Heinz Liesen

### Publikationen

Amatulli F, Herwegen H. Beinarbeit beim vollen Golfschwung, Dtsch Z Sportmed, 56, S (7-8) 2005: 249

Grote O, Herwegen H, Liesen H. Körperliche Dispositionen und ihre Auswirkungen auf den Golfschwung, Dtsch Z Sportmed, 56, S (7-8) 2005: 250

Sander S, Herwegen, H. Symbiose von „Geist und Körper“ in der Sportart Golf – Wissenschaftlicher Hintergrund und praktischer Nutzen, Dtsch Z Sportmed, 56, S (7-8) 2005: 245

Amatulli F, Herwegen H. Moderne Trainingssteuerung des Freizeitsportlers, Dtsch Z Sportmed, 56, S (7-8) 2005: 235-236

Weist G, Redenius-Heber J, Gerlach E. Koordination und Technik - gezielt verbessern. fußball-training online, (2005) 23(12), 1-6.

Herwegen H. Training der Sinnesorgane, II. Interdisziplinärer Kongress Junge Naturwissenschaft und Praxis, Köln, 8.6.2006

Herbarth B, Herwegen H, Schlösser S. Ein komplexes Neuromonitoring zur Untersuchung der mentalen/psychischen Aktivierung vor einer sportlichen Bewegung am Beispiel der Golfschwungvorbereitung. In: Trainingswissenschaft im Freizeitsport, Ferrauti A, Remert H, dvs, 2006, 157: 140-144

Amatulli F, Herwegen H. Beinarbeit beim vollen Golfschwung. In: Trainingswissenschaft im Freizeitsport, Ferrauti A, Remert H, dvs, 2006, 157: 133-135

Herwegen H, Amatulli F. Moderne Trainingssteuerung des Freizeitsportlers. In: Trainingswissenschaft im Freizeitsport, Ferrauti A, Remert H, dvs, 2006, 157: 136-139

Herbarth B, Baumeister J, Herwegen H, Liesen H, Weiss M. Complex Neuromonitoring in a Golf Putting Task. 2006 (submitted to the American Congress of Sports Medicine, New Orleans, USA 30.5.-1.6. 2007)

Herbarth B, Baumeister J, Herwegen H, Liesen H, Weiss M. Neuromonitoring in a Golf Putting Task: Discrimination of skill level due to different conditions. 2007 (submitted to 3. European Workshop of Movement Science in Amsterdam, Niederlande 31.5.-1.6.2007)

## Prof. Dr. Wolf-Dietrich Brettschneider

### Publikationen

Brettschneider, W.-D., Brandl-Bredenbeck, H. P. & Hofmann, J. (2005). Sportpartizipation und Gewaltbereitschaft bei Jugendlichen. Aachen: Meyer & Meyer.

Naul, R. & Brettschneider, W.-D., (2005). Young peoples' lifestyles and sedentariness in Europe. In Acta Universitatis Carolinae, Kinanthropologica Vol. 41,2. (2005)

Brettschneider, W.-D., Heim, R., Brandl-Bredenbeck, H. P., Gerlach, E., Hofmann, J., Kussin, U., et al. (2005). Sportunterricht in Deutschland (SPRINT). Ausgewählte Ergebnisse im Überblick. Sportunterricht, 54(8), 227-230.

Brettschneider, W.-D. & Malek, C. (2005). „Walking bus“ – der aktive Schulweg. Sportunterricht, 54(12), 368-373.

## Prof. Dr. med. Michael Weiß

### Publikationen

Barthel T, Schnittker R, Peters P, Siebel T, Liesen H, Weiß M: Führen Kreuzbandrekonstruktionen zu Veränderungen im zentralen Nervensystem und in der kortikalen Bewegungsplanung? 7. Gemeinsames Symposium der dvs-Sektionen Biomechanik, Sportmotorik und Trainingswissenschaft in Bad Sassendorf 2006

Baumeister J, Ries C, Weiß M: Influence of limb dominance on knee flexor:extensor ratio of ACL reconstructed patients. Isokin Exerc Sci 12 (1) (2005), 59-60

Baumeister J, Ries C, Weiß M: Einfluß der Seitigkeit auf die funktionelle Kraftbalance bei Patienten mit rekonstruiertem vorderen Kreuzband. Dt Z Sportmed 56, 8 (2005), 284

Baumeister J, Barthel T, Reinecke K, Koplin S, Weiss M: Zentrale Aktivierung während einfachen motorischen, motorisch-mental und kognitiven Aufgabenstellungen. Gibt es charakteristische Merkmale? Dt Z Sportmed 56, 8 (2005), 300

Baumeister J, Reinecke K, Liesen H, Weiss M: Changes in brain activity patterns during a sensorimotor task due to ACL-reconstruction. 2006 (submitted to the American Congress of Sports Medicine, New Orleans, USA 30.5.-1.6. 2007)

Baumeister J, Reinecke K, Weiss M: Different cortical activation patterns due to two different proprioceptive modalities in ACL reconstructed patients. 2006 (submitted to 3. European



Brettschneider, W.-D. & Bünemann, A. (2005). Übergewicht: Zunehmendes „Markenzeichen“ der jungen Generation. Ganztagschulen als Chance für eine gesunde Entwicklung. Sportunterricht, 54(3), 73-77.

Brettschneider, W.-D. & Malek, C. (2006). „Walking bus“ – der aktive Schulweg. Praxis der Psychomotorik, 31(1), 33-36.

Schmidt, W., Hartmann-Tews, I. & Brettschneider, W.-D. (Eds.) (2006). Erster Deutscher Kinder- und Jugendsportbericht (2. unveränderte et.). Schorndorf: Hofmann.

Brandl-Bredenbeck, H. P., Brettschneider, W.-D., Gerlach, E. & Hofmann, J. (2006). Kinder- und Jugendsport. In H. Haag & B. Strauß (Hrsg.) (2006). Themenfelder der Sportwissenschaft (S. 113-129). Schorndorf: Hofmann.

Brettschneider, W.-D., Naul, R., Bünemann, A. & Hoffmann, D. (2006). Übergewicht und Adipositas bei Kindern und Jugendlichen. Ernährungsverhalten, Medienkonsum und körperliche (In-)Aktivität im europäischen Vergleich. Spectrum der Sportwissenschaften, 18(2), 25-45.

Brettschneider, W.-D. & Bünemann, A. (2006). Generation XXL. Übergewicht im Kindesalter: Prävalenz, Ursachen, Folgen. Forschungsforum Paderborn, 9, 12-16.

## Forschungsprojekte

Zur Situation des Schulsports in Deutschland (SPRINT)  
Förderer: DSB / NOK  
Laufzeit: 2003 – 2005

Kinder heute – Bewegungsmuffel, Fast Food Junkies, Medienfreaks?  
Förderer: Innenministerium des Landes NRW  
Laufzeit: 2006/2007

„Walking bus“ – der aktive Schulweg  
Förderer: AOK Westfalen-Lippe  
Laufzeit: 2005 - 2008

Paderborner Adipositas Prävention & Intervention (PAPI)  
(gemeinsam mit Prof. Dr. Heseke)  
Förderer: Bundesanstalt für Landwirtschaft und Ernährung  
Laufzeit: 2006 - 2009

## Prof. Dr. Norbert Olivier

### Publikationen

Baars, H., Jöllenbeck, T., Humburg, H., Schröder, J. (2006): Surface-EMG. Skin and subcutaneous fat tissue attenuate amplitude and frequency parameters. Schwameder, H., Strutzenberger, G., Fastenbauer, V., Lindinger, S. Müller, E. (Eds.): Proceedings of the XXIV International Symposium on Biomechanics in Sports, S. 131-134, Salzburg.

Freiwald, J., Jöllenbeck, T. & Olivier, N. (Hrsg.) (2007 i. D.). Prävention und Rehabilitation in Biomechanik, Sportmotorik und Trainingswissenschaft. Köln: Strauss.

Freiwald, J., Jöllenbeck, T., Baumgart, C. (2007 i. V.). Obere Sprunggelenkverletzungen, Prävention und Rehabilitation unter der Perspektive

der modernen Motorikforschung Neurologische Zusammenhänge zwischen OSG-Traumen und ZNS. Medizinisch-Orthopädische Technik.

Grüneberg, C., Jöllenbeck, T., Leyser, D., Mull, M., Classen, C. (2006). Field testing to determine biomechanical loading of the lower limb during nordic walking versus walking – comparison between nordic walking instructors and experienced nordic walkers. Journal of Biomechanics, 39, Suppl. 1, 185.

Hansen, M. (2006a i. D.). Künstliche Intelligenz (KI) zur Klassifizierung von Bewegungsmustern am Beispiel unterschiedlicher Riesenfelgen (RF). Bewegung und Training. Zugriff unter [www.ejournal-but.de](http://www.ejournal-but.de)

Hansen, M. (2006b). Wiedererkennung von Bewegungsmustern auf der Grundlage der Kinetik mit Hilfe von Fuzzy-Logik am Beispiel unterschiedlicher Riesenfelgentechniken. J. Edlmann-Nusser & K. Witte (Hrsg.), Sport und Informatik IX (S. 245-250). Aachen: Shaker Verlag.

Hansen, M. (2006c). Recognizing of Movement Samples on the Basis of the Kinetics by Fuzzy Logic by the Example of Different Giant Swings. International Journal of Computer Science in Sport, 5(2), 64-67. Zugriff am 20.12.2006 unter [www.iacss.org/ijcss/iacss\\_ijcss.html](http://www.iacss.org/ijcss/iacss_ijcss.html)

Jöllenbeck, T. & Olivier, N. (2007 i. D.). Die Teilbelastung in der orthopädisch-traumatologischen Rehabilitation. J. Freiwald, T. Jöllenbeck & N. Olivier (Hrsg.), Prävention und Rehabilitation in Biomechanik, Sportmotorik und Trainingswissenschaft. Köln: Strauss.

Jöllenbeck, T. (2007 i. V.). Biomechanische Messverfahren in der Rehabilitation. Sportverletzung – Sportschaden.

Jöllenbeck, T. (2007 i. V.). Die Rolle des Gleichgewichts im alpinen Skilauf in Vorbereitung und Praxis, SPORTS Band 2.

Jöllenbeck, T., Grüneberg, C. (2006). Prävention durch Nordic Walking – Gesundheitsbezogene Effekte für Bewegungsapparat und Herz-Kreislaufsystem, Sportorthopädie – Sporttraumatologie, 22, 132-138.

Jöllenbeck, T., Grüneberg, C., Leyser, D., Mull, M., Classen, C. (2006). Nordic walking versus walking – field testing to determine biomechanical loading of the lower limb. Journal of Biomechanics, 39, Suppl. 1, 185.

Jöllenbeck, T., Grüneberg, C., Leyser, D., Schönle, C. (2007 i. V.). Gelenkentlastung durch Nordic-Walking? Korrektur einer weit verbreiteten Meinung. Zeitschrift für Orthopädie und ihre Grenzgebiete.

Jöllenbeck, T., Leyser, D., Classen, C. Mull, M., Grüneberg C. (2006 i. D.). Nordic Walking - Eine Feldstudie über den Mythos Gelenkentlastung. Bewegung und Training. Zugriff unter [www.ejournal-but.de](http://www.ejournal-but.de)

Jöllenbeck, T., Leyser, D., Classen, C., Mull, M., Grüneberg, C. (2006). Biomechanical loading of the lower extremities during nordic walking – a field study. Schwameder, H., Strutzenberger, G., Fastenbauer, V., Lindinger, S. Müller, E. (Eds.): Proceedings of the XXIV International Symposium on Biomechanics in Sports, S. 624-627, Salzburg.

Jöllenbeck, T., Leyser, D., Grüneberg, C. (2006). Nordic walking - A field study of biomechanical loading of the lower extremities. Isokinetics and Exercise Science, 14, 2, 127.

Jöllenbeck, T., Schönle, C. (2005). Die Problematik der Teilbelastungsüberschreitung in der orthopädisch-traumatologischen Rehabilitation – Ursachen und Abhilfemöglichkeiten. Verband Deutscher Rentenversicherungsträger (Hrsg.), Rehabilitation im Gesundheitswesen, DRV-Schriften, 59, 280-281.

Jöllenbeck, T., Schönle, C. (2005). Die Teilbelastung nach Knie- oder Hüfttotalendoprothese – die Unmöglichkeit der Einhaltung und ihre Ursachen, Zeitschrift für Orthopädie und ihre Grenzgebiete, 143, 124-128.

Jöllenbeck, T., Schönle, C. (2007 i. V.). Die Teilbelastung nach Knie- oder Hüfttotalendoprothese – Risikofaktor Treppe. Zeitschrift für Orthopädie und ihre Grenzgebiete.

Jöllenbeck, T., Schönle, C. (2007 i. V.). Pedalkräfte auf dem Fahrradergometer - Gelenkbelastungen in der Startphase und bei konstanten Drehzahlen, Zeitschrift für Orthopädie und ihre Grenzgebiete.

Jöllenbeck, T., Schönle, C., Classen, C., Mull, M. (2006). Risikofaktor Treppe? Die Teilbelastungsproblematik nach Knie- oder Hüfttotalendoprothese beim Gang treppauf und treppab. Verband Deutscher Rentenversicherungsträger (Hrsg.), Rehabilitation und Arbeitswelt – Herausforderungen und Strategien, DRV-Schriften, 64, 348-349.

Krause, D., Erlmann, A., Hölzchen, T., Krug, G., Mull, M., & Wünnemann, M. (2006 i. D.). Teilbelastungstraining mit Unterarmgehstützen unter Kontext-Interferenz-Bedingungen. Bewegung und Training. Zugriff unter [www.ejournal-but.de](http://www.ejournal-but.de)

Krause, D., Wünnemann, M., Erlmann, A., Hölzchen, Mull, M., Olivier, N. & Jöllenbeck, T. (2007 i. V.). Biodynamic Feedback Training to Assure Partial Load Bearing. Archives of Physical Medicine and Rehabilitation.

Olivier, N. (2005). Grundlagen der Bewegungswissenschaft und Bewegungslehre – Lehrbuch und Online-Kurs. H. Gabler, U. Göhner & F. Schiebl (Hrsg.), Zur Vernetzung von Forschung und Lehre in Biomechanik, Sportmotorik und Trainingswissenschaft, S. 302. Hamburg: Czwalina.

Olivier, N., Büsch, D. & Marschall, F. (2007 i. D.). Grundlagen der Trainingswissenschaft und -lehre. Schorndorf: Hofmann.

Olivier, N., Büsch, D., Marschall, F. & Rockmann, U. (2007 i. V.). Grundlagen der Trainingswissenschaft und -lehre. Online-Kurs. [www.sportwissenschaft-akademie.de](http://www.sportwissenschaft-akademie.de)

Olivier, N., Hölzchen, T., Krug, G., Wünnemann, M., Erlmann, A., Krause, D., Mull, M. & Jöllenbeck, T. et al. (2005). Ein Trainingsverfahren zum Erlernen der vorgegeben Teilbelastung beim Gehen mit Gehstützen. Zeitschrift für Orthopädie, 143, 496-498.

Olivier, N., Jöllenbeck, T. (2007 i. V.). Biomechanisches Feedbacktraining zum Erlernen einer vorgegebenen Teilbelastung beim Gehen mit Gehstützen. Zeitschrift für Orthopädie und ihre Grenzgebiete.

Rockmann, U., Reiter, C. & Olivier, N. (2005). Internet-Lehrbuch-Integration in der Sportwissenschaft (ILIS) – Konzeption und Nutzungserfahrungen. J. Wiemeyer (Hrsg.), Education, Research and New Media - Changes and Challenges for Science, S. 128-132. Hamburg: Czwalina.

Rose, D. Witte, K., Jöllenbeck, T. (2006 i. D.). Entwicklung und Einsatz eines komplexen biomechanischen Ganganalysesystems zur Analyse des Rehabilitationsverlaufes bei Patienten mit Hüfttotalendoprothesen. Bewegung und Training. Zugriff unter [www.ejournal-but.de](http://www.ejournal-but.de)

Rose, D., Jöllenbeck, T. (2006 i. D.). 3D-Bewegungsanalyse mit Sofortinformation - Einsatz des Zebris-Systems in der Rehabilitation. Bewegung und Training. Zugriff unter [www.ejournal-but.de](http://www.ejournal-but.de)

Schmalfeld, K., Olivier, N., Jöllenbeck, T., Duntz, C., Meier, S., Telljohann, M. (2007 i. V.). Inter- and intramuscular compensations in high-stress isometric muscle actions of m. brachioradialis and m. biceps brachii with varying intensity. European Journal of Applied Physiology.

Schönle, C., Jöllenbeck, T. (2007 i. D.). Die Belastung mit 2-fachem Körpergewicht ist eine „Teilbelastung“ der Hüfte. Tagungsband 9. Dortmunder Unfallchirurgie- und Orthopädie-Tagung, „Homo Reparandus, Dortmund.

Schönle, C., Jöllenbeck, T. (2007 i. D.). Kommunikation über erlaubte Kraffteinwirkungen in der Physiotherapie bei Implantaten und Osteosynthesen. Tagungsband zur 9. Dortmunder Unfallchirurgie- und Orthopädie-Tagung, „Homo Reparandus“, Dortmund.

Thierer, R. (2006). Sportspiele im Studienbereich Theorie und Praxis der Sportarten – Konsequenzen durch die Umstellung auf BA/MA. Tagungsband 5. Sportspiel-Symposium, Schriftenreihe Human Performance and Sport (2), S. 182 – 184.

Witte, K., Freiwald, J., Jöllenbeck, T., Paes, P. (2007 i. V.). Das Arbeitssimulationsgerät ERGOS® - Differenz zwischen berufsbezogenem Anforderungsprofil und tatsächlicher Leistungsfähigkeit.

Witte, K., Jöllenbeck, T., Freiwald, J., Paes, P. (2006 i. D.). Bestimmung der individuellen Leistungsfähigkeit im berufsbezogenen Tätigkeitsfeld mithilfe des Arbeitssimulationsgerät ERGOS® am Beispiel von LKW-Fahrern. Bewegung und Training. Zugriff unter [www.ejournal-but.de](http://www.ejournal-but.de)

Wünnemann, M., Erlmann, A., Hölzchen, T., Krause, D., Krug, G., & Mull, M. (2006 i. D.). Teilbelastungstraining beim Gehen mit Unterarmgehstützen. Bewegung und Training. Zugriff unter [www.ejournal-but.de](http://www.ejournal-but.de)

## Preise/Auszeichnungen

### *Nachwuchspreis der Deutschen Vereinigung für Sportwissenschaft*

Für ihre Untersuchungen zum Teilbelastungstraining beim Gehen mit Gehstützen wurde der Arbeitsgruppe André Erlmann, Timo Hölzchen, Daniel Krause, Garvin Krug, Melanie Mull, und Martin Wünnemann der Nachwuchspreis der Deutschen Vereinigung für Sportwissenschaft verliehen.

### *Paderborner Preis der Sportwissenschaft*

Für ihre Untersuchungen zum Teilbelastungstraining beim Gehen mit Gehstützen wurde der Arbeitsgruppe André Erlmann, Timo Hölzchen, Daniel Krause, Garvin Krug, Melanie Mull, und Martin Wünnemann ebenfalls der Preis der Paderborner Sportwissenschaft verliehen.

## Messen/Tagungen/Seminare

*Prävention und Rehabilitation in Biomechanik, Sportmotorik und Trainingswissenschaft*  
Vom 16. – 18.02.2006 wurde unter der wissenschaftlichen Leitung von Prof. Dr. Norbert Olivier, PD Dr. Thomas Jöllenbeck und Prof. Dr. Jürge Freiwald das 7. gemeinsame Symposium der Sektionen Biomechanik, Sportmotorik und Trainingswissenschaft der Deutschen Vereinigung für Sportwissenschaft in Bad Sassendorf durchgeführt. Zum Schwerpunktthema „Prävention und Rehabilitation“ kamen mehr als 300 Teilnehmer nach Bad Sassendorf.

## Weitere Funktionen (in Gremien, Ausschüssen)

DFG-Sondergutachter Sportwissenschaft 2006 – 2009 für die Teildisziplin Sportmotorik (Prof. Dr. Norbert Olivier)

Vorstandsmitglied der Arbeitsgemeinschaft Schneesport an Hochschulen (ASH) (Reinhard Thierer)

Mitglied des Direktoriums des Departments Sport & Gesundheit (Marc Hansen)

Mitglied im wissenschaftlichen Beirat der Zeitschrift Sportorthopädie – Sporttraumatologie (Thomas Jöllenbeck)

Mitglied im Scientific Comitee der ISBS-Tagung 2007 (= International Society of Biomechanics in Sports) (Thomas Jöllenbeck)

## Forschungsprojekte

### *Zum Einfluss der Darstellungsperspektive beim sportmotorischen Bildschirmtraining* (Daniel Krause)

Beim sportmotorischen Bildschirmtraining werden dynamisch-visuelle Darstellungen zur Bewegungsinstruktion und/oder Videoaufnahmen der Bewegungsausführungen des Übenden unmittelbar mit seinen ausgeführten Übungsversuchen kombiniert. Im Allgemeinen sollte der Betrachtungswinkel dabei orthogonal zur Hauptbewegungsebene stehen. Ist aber mehr als eine Bewegungsebene für die Lernaufgabe relevant, stellt sich die Perspektivenfrage differenzierter.

In einer experimentellen Untersuchung werden derzeit Fragen zu den zu bevorzugenden Darstellungsperspektiven beim Bildschirmtraining untersucht. Gelernt werden soll dabei eine Sprungdrehbewegung. Drei ausgewählte Perspektiven sowie Perspektivenkombinationen werden in verschiedenen Versuchsgruppen variiert.

### *Teilbelastungs-Training beim Gehen mit Unterarmgehstützen in der orthopädisch-traumatologischen Rehabilitation* (Thomas Jöllenbeck, Daniel Krause, Martin Wünnemann)

Nach endoprothetischem Gelenkersatz wird häufig eine Teilbelastung der operierten Extremität verordnet, um eine frühzeitige Lockerung des Implantats zu vermeiden. In der klinischen Praxis wird beobachtet, dass Patienten ihre Teilbelastungsvorgabe durchschnittlich um 125% überschreiten. Bisherige Methoden scheinen keine ausreichende Teilbelastungseinstellung zu gewährleisten.

Es wurde ein Teilbelastungstraining für verschiedene Bewegungen (Gehen, Treppesteigen) mit Videoinstruktionen und biomechanischem Feedbacktraining entwickelt, dessen Wirksamkeit in mehreren Experimenten mit physisch

unbeeinträchtigten Studenten, älteren Erwachsenen sowie mit operierten Patienten bestätigt wurde.

### *Stabilisationstraining zur Prävention von Sprunggelenksverletzungen* (Martin Wünnemann)

Eine Strategie zur Prävention von Sprunggelenksverletzungen ist die Durchführung eines Stabilisationstrainings, das aus Übungen auf instabilen Untergründen (Wackelbrett, Therapiekreisel, Weichbodenmatte, etc.) besteht. Die Wirkungen dieses Trainings sind bisher nicht ausreichend untersucht worden. Ob motorische Lerneffekte auftreten, die möglicherweise für präventive Effekte verantwortlich sind, ist ungeklärt.

Es wird experimentell untersucht, ob durch ein Stabilisationstraining positive Transfereffekte auf eine Simulation der Verletzungssituation „seitliches Umknicken“ auftreten.

### *Zum Einfluss hoher neuromuskulärer Beanspruchungen auf Parameter der Bewegungsausführung und der motorischen Kontrolle* (Karin Schmalfeld, Marc Hansen)

Bei hohen neuromuskulären Beanspruchungen können Kompensationen des motorischen Systems auf intra- und intermuskulärer Ebene stattfinden, um das Bewegungsergebnis zu sichern. Wenn durch einen anderen Muskeleinsatz jedoch veränderte resultierende Gelenk-Drehmomente generiert werden, kommt es zu Modifikationen des Bewegungsablaufs. Diese Effekte müssten im Koordinationstraining Berücksichtigung finden. Die Zusammenhänge zwischen intra- und intermuskulären Kompensationen und der Veränderung zeitlicher und räumlicher Parameter der Bewegung werden 3D-videometrisch und elektromyographisch bei zyklischen Ellenbogenbeugungen und -streckungen untersucht.

In einem zweiten Ansatz sollen mit Hilfe neuraler Netze diese beanspruchungsbedingten Veränderungen im Bewegungsablauf erkannt und kategorisiert werden.

### *Betriebliches Gesundheitsmanagement am Beispiel von Bildschirmarbeitsplätzen* (Stefan Meyer)

Das Projekt befasst sich mit der Entwicklung und Evaluation von Konzepten zur Reduktion von Rückenschmerzen und Personalausfallkosten bei Bildschirmarbeitsplätzen. Präventive und gesundheitsfördernde Ansätze zur Vermeidung und Reduzierung von Rückenschmerzen sind vor allem im Arbeitsumfeld und der physischen Konstitution zu finden. Die Konzepte berücksichtigen die Analyse des Gesundheitszustandes und der Arbeitsplatzverhältnisse unter ergonomischen Gesichtspunkten sowie ein körperliches Trainingsprogramm zur Aktivierung der wirbelsäulenstabilisierenden Muskulatur.

Ziel ist es zu zeigen, dass gesundheitsfördernde Maßnahmen in Unternehmen integriert werden können und sich gesundheitliche sowie wirtschaftliche Interessen bei einem minimalen Eingriff in den laufenden Arbeitsprozess ergänzen können.

### *Der menschliche Gang in der orthopädisch-traumatologischen Rehabilitation* (Thomas Jöllenbeck)

In einer ersten Projektphase sollen die biomechanischen Parameter bestimmt werden, die den „normalen“ menschlichen Gang von einem durch Hüft- bzw. Knieoperationen veränderten menschlichen Gang unterscheiden lassen. Im zweiten Schritt soll ein Trainingsverfahren entwickelt werden, um operierten Patienten schnell und stabil zu einem für sie „normalen“ Gang zu verhelfen.

## Kooperationen

### *Klinik Lindenplatz, Bad Sassendorf*

Es besteht eine wissenschaftliche Kooperation mit der Klinik Lindenplatz in Bad Sassendorf. Die Kooperation bezieht sich auf die gegenseitige Unterstützung in der Forschung, auf die Bereitstellung von Praktikumsplätzen und auf die Unterstützung der universitären Lehre (PD Dr. Thomas Jöllenbeck) durch die Klinik Lindenplatz.

### *contemplas GmbH, Durach*

Es besteht eine Industriekooperation mit der contemplas GmbH in Durach. Die Kooperation bezieht sich auf die Produktion eines Trainingssystems zum Erlernen von Teilbelastungen beim Gehen mit Gehstützen.

### *Jonas Gesundheitsmanagement GbR*

Es besteht eine wissenschaftliche Kooperation mit der Jonas Gesundheitsmanagement GbR. Ziel der Kooperation ist die gegenseitige Unterstützung bei der Entwicklung, Durchführung und Evaluation von Konzepten zum Gesundheitsmanagement.

## Unternehmensgründungen

Jonas Gesundheitsmanagement GbR (Stefan Meyer)

## Prof. Dr. Dr. Sebastian Braun

### Publikationen

Braun, Sebastian (in Druck). Das Vereinswesen als alternative Steuerungsressource zur Bewältigung sozialer und politischer Herausforderungen. Konzepte, Kontroversen, Perspektiven. In Susanne Frank, Hartmut Häußermann & Jens Wurtzbacher (Hrsg.), Perspektiven der Gesellschaft: Zukunft der Stadt. Wiesbaden: VS-Verlag für Sozialwissenschaften.

Braun, Sebastian (in Druck). Das Assoziationswesen der Bürgergesellschaft. Integrationsleistungen freiwilliger Vereinigungen zwischen normativen Ansprüchen und empirischer Wirklichkeit. In Thomas Edeling, Werner Jann & Dieter Wagner (Hrsg.), Modern Governance. Koordination und Organisation zwischen Konkurrenz, Hierarchie und Solidarität. Opladen: Leske + Budrich.

Braun, Sebastian (in Druck). Warum man sich engagiert. Sozialtheoretische Diskurse im Spiegel empirischer Ergebnisse. In Jutta Allmendinger (Hrsg.), Entstaatlichung und soziale Sicherheit. Verhandlungen des 31. Kongresses der Deutschen Gesellschaft für Soziologie in Leipzig 2002. Opladen: Leske + Budrich.

Braun, Sebastian, Hansen, Stefan, Ritter, Saskia, Slipe, Katrin & Weiß, Christina (i.V.). Sozialkapital und Bürgerkompetenz - soziale und politische Integrationsleistungen von Vereinen. Eine theoretische und empirische Untersuchung. Wiesbaden: VS-Verlag für Sozialwissenschaften.

Braun, Sebastian & Weiß, Christina (in Druck). Sozialkapital. In Stefan Gosepath, Wilfried Hinsch & Beate Rössler (Hrsg.), Handbuch der politischen Philosophie und Sozialphilosophie. Berlin: Walter de Gruyter.

Braun, Sebastian, Hansen, Stefan & Ritter, Saskia (2007). Vereine als Katalysatoren sozialer und politischer Kompetenzen? Ergebnisse einer qualitativen Untersuchung. In Lilian Schwab & Heike Walk (Hrsg.), Blackbox Governance – Lokales Engagement im Aufwind? (S. 109-130). Wiesbaden: VS-Verlag für Sozialwissenschaften.

Braun, Sebastian, Heidebrecht, Marcus & Wiert-Wehkamp, Hans (2007). Selbstorganisation und bürgerschaftliches Engagement von Migranten in der Stadt Paderborn. Eine empirische Studie zur Bildung von Sozialkapital (hrsg. von der Stadt Paderborn – Sozialamt – Integrationsbüro). Paderborn: Stadt Paderborn.

Braun, Sebastian (2006). Die Wiederentdeckung des Vereinswesens im Windschatten gesellschaftlicher Krisen. Konzepte, Kontroversen, Perspektiven. In Jochen Franzke (Hrsg.), Making Civil Societies Work – Zivilgesellschaft und gesellschaftliche Praxis (S. 26-40). Potsdam: Universitätsverlag Potsdam.

Braun, Sebastian (2006). Engagement Civique et crise de l'Etat Providence. Les rives de l'iriv (La Lettre trisannuelle de l'Institut de recherche et d'information sur le volontariat), numéro 8, 10-11.

Braun, Sebastian (2006). Umbau des Sozialstaats und organisierter Sport. Sport und Gesellschaft – Sport and Society, 3, 124-129.

Braun, Sebastian (2006). Selbst ist der Bürger. Y. Magazin der Bundeswehr, März 2006, 96-97.

Braun, Sebastian (2006). Aktiv und engagiert. Dialog. E.ON intern, 2/2006, 1-2.

Braun, Sebastian (2006). Soziale und politische Integration durch Vereine? Theoretische Ansätze und empirische Ergebnisse. In Karl-Siebert Rehberg unter Mitarbeiter von Dana Gieseke, Susanne Kappler & Thomas Dumke (Hrsg.), Soziale Ungleichheit - Kulturelle Unterschiede, Verhandlungen des 32. Kongresses der Deutschen Gesellschaft für Soziologie in München 2004 (S. 4498-4508). Frankfurt am Main: Campus.

Braun, Sebastian (2006). Der engagierte Bürger – ein gesellschaftlicher Hoffnungsträger. Olympisches Feuer, (3) 2006, 43-45.

Braun, Sebastian (2006). Die Wiederentdeckung des Vereinswesens im Windschatten gesellschaftlicher Krisen. Gemeinde und Sport, (3) 2006, 78-86.

Braun, Sebastian (2006). Soziale und politische Integration durch Vereine? In Michael Krüger & Bernd Schulze (Hrsg.), Fußball in Geschichte und Gesellschaft (S. 171-179). Hamburg: Czwalina.

Braun, Sebastian (2006). Soziale und politische Integration und Vereine? Sport und mehr, März 2006, 8-11.

Braun, Sebastian & Kemper, Susanne (Red.) (2006). Sporttalente im Karrierekonflikt. Aachen: Meyer & Meyer.

Braun, Sebastian (2005). Bürgergesellschaft und sozialer Zusammenhalt. Theoretische Überlegungen und empirische Befunde zu den Integrationsleistungen von freiwilligen Vereinigungen im Dritten Sektor. In Karl Birkhölzer, Ansgar Klein, Eckhard Priller & Annette Zimmer (Hrsg.), Dritter Sektor/Drittes System: Theorie, Funktionswandel und zivilgesellschaftliche Perspektiven (S. 131-160). Wiesbaden: VS-Verlag für Sozialwissenschaften.

Braun, Sebastian (2005). Was können Vereine zur gesellschaftlichen Modernisierung beitragen? In Deutscher Sportbund & Führungsakademie des Deutschen Sportbundes (Hrsg.), Sport gestaltet Zukunft mit den Menschen vor Ort (S. 127-132). Frankfurt am Main: Deutscher Sportbund.

Braun, Sebastian (2005). Volunteering in Sport. In European Commission (Ed.), The EU & Sport. Matching expectations (p. 1-12). Brussels: European Commission.

Braun, Sebastian (2005). Sozialstaat und organisierter Sport rücken enger zusammen. DSB Jahresmagazin 2005/2006, 48-51.

Braun, Sebastian & Nagel, Michael (2005). Zwischen Solidargemeinschaft und Dienstleistungsorganisation. Mitgliedschaft, Engagement und Partizipation im Sportverein. In Thomas Alkemeyer, Bero Rigauer & Gabriele Sobiech (Hrsg.), Organisationsentwicklungen und De-Institutionalisierungsprozesse im Sport (S. 123-150). Schorndorf: Hofmann.

## Messen/Tagungen/Seminare

*Steuerung im organisierten Sport*  
Der Arbeitsbereich „Sport und Gesellschaft“ organisierte unter der Leitung von Prof. Dr. Dr. Sebastian Braun die Jahrestagung 2006 der Sektion Sportsoziologie der Deutschen Vereinigung für Sportwissenschaft (dvs). Vom 25. bis 27. September kamen rund 140 Teilnehmer aus Wissenschaft, Sportpraxis und –verwaltung in den Paderborner Ahorn-Sportpark. Mit einer Verbindung von Forschung und Praxis eröffnete die Tagung ein Forum, das die teilnehmenden Experten intensiv zu einem konstruktiven Dialog über Steuerungsfragen im organisierten Sport genutzt haben.

## Weitere Funktionen

Wissenschaftlicher Beirat zum „Freiwilligen Survey 2004“ beim Bundesministerium für Familie, Senioren, Frauen und Jugend (BMFSFJ)

Wissenschaftlicher Beirat zum Forschungsprojekt „CIVICUS – World Alliance for Citizen Participation“ beim Maecenata Institut für Philanthropie und Zivilgesellschaft

Arbeitskreis Bürgergesellschaft und Aktivierender Staat bei der Friedrich-Ebert-Stiftung

Berliner Kreis für Forschung und Lehre im Dritten Sektor

Europäischer Forschungsverbund Third Sector European Policy

Vorstandsmitglied im „Kompetenzzentrum Sport und gesunde Lebensführung OWL“

## Forschungsprojekte

Gesellschaftliches Engagement von Unternehmen in Deutschland. Eine sozialwissenschaftliche Bestandsaufnahme der Potenziale unternehmerischen bürgerschaftlichen Engagements. Förderung: Bundesministerium für Familien, Senioren, Frauen und Jugend (BMFSFJ)

Sozialkapital und Bürgerkompetenz – soziale und politische Integrationsleistungen von Vereinen. Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft

(DFG) im Rahmen des „Emmy-Noether-Programms“

Bürgerschaftliches Engagement in der „Wohlfahrtsgesellschaft“. Eine empirische Untersuchung über die neue Verantwortungsteilung zwischen Staat und Gesellschaft im kommunalen Raum.

Auftraggeber: Initiative Neue Soziale Marktwirtschaft (INSM)

Corporate Citizenship in Deutschland – freiwilliges gesellschaftliches Engagement von Wirtschaftsunternehmen.

Partner: Centrum für Corporate Citizenship Deutschland.

„Corporate Volunteering“ eines deutschen Großunternehmens. Eine Evaluationsstudie zum freiwilligen gesellschaftlichen Engagement der E.ON Westfalen Weser AG im Bereich der Personalarbeit.

Auftraggeber: E.ON Westfalen Weser AG.

Selbstorganisation von Migranten: Selbstverständnis und Potenziale der sozialen Integration. Eine Evaluationsstudie im Rahmen des Projekts „Komm-In – NRW – Innovation in der kommunalen Integrationsarbeit“ in der Stadt Paderborn.

Auftraggeber: Stadt Paderborn

Bürgerschaftliches Engagement von Frauen mit Migrationshintergrund. Wissenschaftliche Begleitung des Wettbewerbs „Migrantinnen mischen mit“ des Landes NRW.

Auftraggeber: Ministerium für Generationen, Familien, Frauen und Integration (MGFFI) NRW

## Aktuelle Kooperationen

98

Holger Backhaus-Maul (Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Fachgebiet Recht, Verwaltung und Organisation)

Jürgen Baur, Prof. Dr. (Universität Potsdam, Arbeitsbereich Sportsoziologie, Sportanthropologie)

Klaus Cachay, Prof. Dr. (Universität Bielefeld, Institut für Sportwissenschaft)

Michel Forsé, Dr. (Directeur de recherche, Centre National de la Recherche Scientifique, IRES-CO, LASMAS, Frankreich)

Brad Googins, Prof. Dr. (Boston College, Center for Corporate Citizenship, USA)

Bénédicte Halba, Dr. (Institut de Recherche et d'Information sur le Volontariat Paris, Frankreich)

David Halley, Dr. (Business in the community, Großbritannien)

Dieter H. Jütting, Prof. Dr. (WWU Münster, Institut für Sportkultur und Weiterbildung)

Pierre Lanfranchi, Prof. Dr. (De Monfort University, Department of Historical & International Studies, Großbritannien)

Marc Morjé Howard, Assistant Prof. (Georgetown University, Department of Government, USA)

Eckhard Priller, Dr. sc. (Wissenschaftszentrum Berlin, Abt. Ungleichheit und soziale Integration)

Roland Roth, Prof. Dr. (Hochschule Magdeburg-Stendal, Professur für Politikwissenschaft)

Wolfgang Seibel, Universität Konstanz, Lehrstuhl Innenpolitik und öffentliche Verwaltung)

Erhard Stölting, Prof. Dr. (Universität Potsdam, Lehrstuhl für Allgemeine Soziologie)

Charles Suaud, Prof. Dr. (Université de Nantes, Institut de Sociologie, Frankreich)

John Sugden, Prof. Dr. (University of Brighton, Chelsea School, Großbritannien)

Ansgar Thiel, Prof. Dr. (Universität Tübingen, Institut für Sportwissenschaft)

Annette Zimmer, Prof. Dr. (WWU Münster, Institut für Politikwissenschaft)



#### **Impressum**

##### **Herausgeber**

Fakultät für Naturwissenschaften  
Universität Paderborn

##### **Redaktion und Koordination**

Dr. Christian Hennig, Geschäftsführung Fakultät  
für Naturwissenschaften  
Dr. Christof Hoentzsch, Department Physik  
Prof. Dr. Manfred Grote, Department Chemie  
Marc Kukuk, Department Sport & Gesundheit

##### **Anschrift**

Universität Paderborn  
Fakultät für Naturwissenschaften  
Warburger Straße 100  
33098 Paderborn

Telefon +49-5251-60 2679

Telefax +49-5251-60 3216

<http://www.upb.de/nw>

##### **Realisierung und Herstellung**

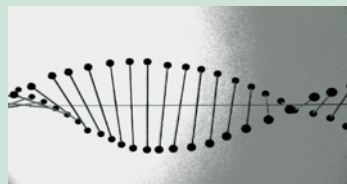
Ida Lorenz  
Wiebke Marx

##### **Druck**

Bonifatius GmbH, Druck - Buch - Verlag  
<http://www.bonifatius.de/druck/>

##### **Berichtszeitraum**

1. Januar 2005 bis 31. Dezember 2006



DEPARTMENT  
CHEMIE

DEPARTMENT  
PHYSIK

DEPARTMENT  
SPORT & GESUNDHEIT



Fakultät für Naturwissenschaften

Warburger Straße 100  
33098 Paderborn

Telefon +49-5251-60 2679  
Telefax +49-5251-60 3216

<http://www.upb.de/nw>