



UNIVERSITÄTS-
BIBLIOTHEK
PADERBORN

Universitätsbibliothek Paderborn

Forschung & Praxis

Universität Paderborn

Paderborn, 1993/96(1997)

Fachbereich 13

urn:nbn:de:hbz:466:1-29509

Chemie und Chemietechnik

Leiter/in

Dekan Prof. Dr. Hans-Jürgen Haupt (Tel. 05251/60-2146)

Dekanat

Raum J 2.319,

Universität-Gesamthochschule Paderborn

Fachbereich 13

Warburger Str. 100,

33098 Paderborn,

Telefon 05251/60-2145, Telefax 05251/60-3485,

URL <http://www.uni-paderborn.de/extern/fb/13/index.html>

Fachgebiete

Allgemeine Chemie / Computeranwendung in der Chemie¹

Angewandte Chemie

Anorganische und Analytische Chemie

Biologie

Chemie und Technologie der Beschichtungsstoffe

Didaktik der Chemie

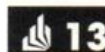
Organische Chemie

Physikalische Chemie

Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik

Kunststoffe

¹ Informationen zu diesem Fachgebiet erhalten Sie unter der
Telefonnummer 05251/60-2145



Angewandte Chemie

Warburger Straße 100, 33098 Paderborn,
J5.212, Tel. 05251/60-2193, Fax 05251/60-3549

Kommissarischer Leiter

Prof. Dr. Hans-Jürgen Haupt, Tel. 05251/60-2494, Fax 05251/60-3423

Kontaktperson(en)

Priv.-Doz. Dr. Manfred Grote
(Tel. 05251/60-2191, E-Mail mg@chemie.uni-paderborn.de)

Wissenschaftlich Mitarbeitende

Dipl.-Chem. Glenn Damkröger (seit März 1996);
Dipl.-Chem. Gerhard Disse (seit Januar 1994);
Dipl.-Chem. Andreas Hils (seit Dezember 1994);
Dr. Jens Hofele (von Juli 1994 - September 1996);
Dipl.-Chem. Jens Kowalzik (von Januar 1995 - Oktober 1996);
Dr. Andreas Krumbiegel (von Oktober 1991 - November 1994);
Dr. Maria Guadalupe Sanchez Loredó (von April 1993 - Juni 1996);
Dr. Uta Schumacher (von Januar 1994 - Dezember 1996);
Dipl.-Chem. Jörg Steffan (seit Februar 1996); Dr. Hubert Stenner;
Dr. Klaus-Dieter Topp (von April 1994 - Dezember 1996); Dr. Heinz Weber

Dauergäste

Pascale Chevallier (Université Du Mainé, Faculté des Sciences, Le Mans, Frankreich,
Oktober 1995 - Januar 1996);
Dr. Veronique Montembault (Université Du Mainé, Faculté des Sciences, Le Mans,
Frankreich, April - August 1996)

Promotionen

- Andreas Krumbiegel, November 1994, *Trägergebundene Tetrazoliumsalze als Redoxreagentien - ihre Darstellung, Reaktivität und Anwendbarkeit in der Vitamin C-Analytik*;
- Uta-Maria Schumacher, Juni 1996, *Bipolare Ionenaustauscher auf der Basis acider Tetrazoliumsalze - ihre Darstellung, Struktur und Eigenschaften*;
- Maria G. Sanchez Loredó, Juni 1996, *Extraktive Eigenschaften acider S-Decyl-Derivate des Dithizons und ihre Anwendbarkeit in Flüssig-Membranen*;
- Jens Hofele, September 1996, *Untersuchungen zur Beryllium-Aufnahme durch Gerste - Verteilung und Bindungsformen*;
- Klaus Dieter Topp, Oktober 1996, *Synthese, Charakterisierung und Anwendbarkeit 1,2,4,5-Tetrazin - modifizierter Polymere*

Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

Analytik polychlorierter Verbindungen (z.B. Dioxine) in Umweltkompartimenten
(Prof. Dr. H.-J. Haupt, Dr. H. Weber).

Arbeitskreis Priv.-Doz. Dr. Grote: Entwicklung und analytische Anwendung selektiver und reaktiver Trennphasen (z.B. Ionenaustauscherharze, Membrane); Metallspezies-analytik in Umweltkompartimenten

Arbeitsgebiete im einzelnen:

- Untersuchungen zum Verhalten von polychlorierten Dibenzo-p-dioxinen und Dibenzofuranen bei der aeroben und anaeroben Fermentation von Klärschlämmen und der aeroben Kompostierung
- Darstellung und Eigenschaften bipolarer Ionenaustauscherharze
- Darstellung und Eigenschaften tetrazin-modifizierter Harze
- Trennphasen für toxisch wirkende Metalle (Edelmetalle, Arsen, Selen)
- Trägergebundene Redoxsysteme und ihre Anwendung in der klinisch-chemischen Analytik
- Untersuchungen zur Pflanzenverfügbarkeit toxisch wirkender Metalle (Beryllium, Vanadium) sowie ihrer Bindungsformen
- Aluminiumspeziesanalytik in der Waldschadensforschung
- Lichtleitergekoppelte Hohlfasermembranen als Schwermetallsensoren

Gastaufenthalte von Mitgliedern dieses Fachgebiets

Priv.-Doz. Dr. Manfred Grote (Central Iron and Steel Research Institute, Peking, V.R. China 11.10.-14.10.1994)

Gutachtertätigkeiten

Priv.-Doz. Dr. M. Grote:

- Erstellung von Einzelgutachten über Forschungsanträge an das Kultusministerium des Landes Sachsen-Anhalt
- Referee mehrerer Fachzeitschriften der Fachrichtung „Analytische Chemie - Ionenaustauscher“
- Gutachter und Mitglied der Promotionskommission der Université Du Mainé, Faculté des Sciences, Le Mans, Frankreich (Promotion von Pascale Chevallier, Oktober 1996)

**Preise für Mitglieder dieses Fachgebiets**

Vergabe des Förderpreises für ausländische Studierende des DAAD an Dzevad Mustavic, Verleihung u.a. auf Grund der hervorragenden Leistung in der Diplomarbeit (HI) im integrierten Studiengang Chemie (Mai 1995)

Mitgliedschaften

Priv.-Doz. Dr. M. Grote:

Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh)

- Fachgruppe „Analytische Chemie“
- Fachgruppe „Geschichte der Chemie“
- Arbeitskreis „Archäometrie“

Gesellschaft Deutscher Metallhütten- und Bergleute, GDMB (bis 1993)

- Chemikerausschuß
- Arbeitsausschuß „Edelmetalle“
- Arbeitsausschuß „Umwelt- und Arbeitsschutzanalytik“

Leistungsangebot für die Praxis

Untersuchungen und Gutachten sind über umweltanalytische bzw. spurenanalytische Problemstellungen möglich.

Forschungsarbeiten - werden im Rahmen der Arbeitsgebiete durchgeführt.

Diplom- und Doktorarbeiten - sind in Kooperation mit Wirtschafts- bzw. Industriepartnern möglich.

Ausstattung / Geräte / Methoden

- Grundausstattung an chromatographischen Methoden (Gaschromatographie, HPLC, Ionenchromatographie);
- hochauflösendes GC/MS-System (Dioxinanalytik)

Weitere Angaben

Priv.-Doz. Dr. M. Grote:

Kooperation im Rahmen der Hochschulpartnerschaft mit Prof. Jean-Claude Brosse, Université Du Mainé, Faculté des Sciences, Laboratoire de Chimie Organique Macromoléculaire, Le Mans, Frankreich

Forschungsprojekte

Methods of determination of ascorbic acid and dehydroascorbic acid in blood plasma and their application in clinical chemistry and nutrition sciences

Methoden zur Bestimmung von Ascorbinsäure und Dehydroascorbinsäure im Blutplasma und ihre Anwendungen in klinischer Chemie und Ernährungswissenschaft

Leitung / Koordination:	Priv.-Doz. Dr. Manfred Grote
Weitere Ansprechpartner:	Dipl.-Chem. Jörg Steffan
Kooperierende Wissenschaftler:	Prof. Dr. med. Michael Weiß, Sportmedizinisches Institut der Universität-GH Paderborn

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik: in Vorbereitung

Laufzeit: Beginn: 1996

Es werden analytische Verbundverfahren mit der HPLC zur Bestimmung von Ascorbinsäure und Dehydroascorbinsäure im Blutplasma entwickelt. Die Validierung der Verfahren erfolgt in Zusammenarbeit mit dem Sportmedizinischen Institut der Universität-GH Paderborn. U.a. werden die Verfahren im Rahmen von Stoffwechseluntersuchungen bei oxidativem Belastungsstreß unter Berücksichtigung der Ernährungssituation angewendet.

Synthesis and characterization of 1, 2, 4, 5-tetrazine-modified polymers

Darstellung und Charakterisierung 1, 2, 4, 5-Tetrazin-modifizierter Polymere

Leitung / Koordination:	Priv.-Doz. Dr. Manfred Grote
Weitere Ansprechpartner:	Dr. Klaus-Dieter Topp

Kooperation mit

Einrichtungen der Wirtschaft

a) in der Bundesrepublik: Bayer AG, Leverkusen

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik: in Vorbereitung

Laufzeit: Beginn: 1994

Die Eigenschaften Tetrazin-modifizierter Polymere resultieren aus der reversiblen Redoxaktivität des 1,2,4,5-Tetrazin/1,2-Dihydotetrazin-Systems und aus dem komplexchemischen Verhalten freier Tetrazine. Es gelang erstmalig, derartig funktionalisierte Ionenaustauscher darzustellen, die sich als effektive Pd-Spurenfänger eignen. Als besonders aussichtsreich erweist sich die Anwendung der Tetrazin-

Harze als Festphasenextraktanden in Verbindung mit der Bestimmung von Palladium-Spurengehalten in biologischen Proben („Biomonitoring“). Zukünftig werden tetrazinmodifizierte Kieselgele und faserartige Materialien synthetisiert, die ebenfalls analytisch einsetzbar sein sollen.

Acidic S-Decyl-derivatives of dithizone - their synthesis and application as solvent extractands and carriers for palladium in liquid membrane systems

Acide S-Decyl-Derivate des Dithizons - ihre Darstellung und Anwendung als Solvent-Extraktanden und Palladium-Carrier in Flüssig-Membran-Systemen

Leitung / Koordination: Priv.-Doz. Dr. Manfred Grote
 Weitere Ansprechpartner: Dr. Maria Guadalupe Sanchez Loreda
 Förderinstitution/en
 a) in der Bundesrepublik: Deutscher Akademischer Austauschdienst, Bonn

Laufzeit: Beginn: 1993

Durch Einführung acider COOH-Substituenten in die Phenylringe des S-Decyl-Dithizons gelingt es, im Vergleich zur unsubstituierten Ausgangsverbindung eine höhere Selektivität für Pd(II) und einen beschleunigten Extraktionsverlauf zu erreichen. Da sich das metallbeladene ortho-Carboxy Derivat regenerieren läßt, ist diese Verbindung in Flüssig-Membransystemen als Carrier einsetzbar. Die Ausnutzung der Carrier-Eigenschaften in trägergestützten Flüssigmembranen und mögliche analytische Anwendungen sind Gegenstand weiterer Untersuchungen.



Investigations on the phytoavailability of toxic metals - their distribution and element speciation in agricultural plants

Untersuchungen zur Pflanzenverfügbarkeit toxisch wirkender Metalle - ihre Verteilung und Bindungsformen in Agrarpflanzen

Leitung / Koordination: Priv.-Doz. Dr. Manfred Grote
 Weitere Ansprechpartner: Dr. Jens Hofele, Dipl.-Chem. Jens Kowalzik (FB 8, Abteilung Höxter)

Kooperierende Wissenschaftler: Prof. Dr. Manfred Sietz (FB 8 Technischer Umweltschutz, Abteilung Höxter der Universität-GH Paderborn)

Kooperationen mit wissenschaftlichen Institutionen
 a) in der Bundesrepublik:

Bundesanstalt für Getreide-, Kartoffel- und Fettforschung, Detmold;
 Hessische Landwirtschaftliche Versuchsanstalt, Kassel-Harleshausen

Laufzeit: Beginn: 1994

Da bislang über die Wirkungsweise toxisch wirkender Metalle in Pflanzen nur wenig Erkenntnisse vorliegen, ist das Ziel unserer Studie, zunächst am Beispiel der Elemente Beryllium und Vanadium die Verfügbarkeit und Aufnahmepfade bei verschiedenen Agrarpflanzen zu untersuchen. Sowohl unter Hydrokulturbedingungen als auch auf definiert metalldotierten Böden werden u.a. Gerstenkeimlinge, Radieschen sowie Welsches Weidelgras angezogen, die Verteilung der Metalle auf die Pflanzen- und Zellkompartimente analysiert sowie einzelne Bindungsformen isoliert und strukturchemisch charakterisiert.

Speciation of aluminium in seep water of wooded areas Aluminiumspeziation in Sickerwässern eines Waldgebietes

Leitung / Koordination: Priv.-Doz. Dr. Manfred Grote
Weitere Ansprechpartner: Dipl.-Chem. Andreas Hils
Kooperierende Wissenschaftler: Dr. Enno Janßen (Hessische Landwirtschaftliche
Versuchsanstalt, Kassel Harleshausen);
Priv.-Doz. Dr. Jürgen Eichhorn (Hessische
Landesanstalt für Forsteinrichtung,
Waldforschung und Waldökologie,
Hann. Münden)

Förderinstitution/en
a) in der Bundesrepublik: Hessische Landesanstalt für Forsteinrichtung,
Waldforschung und Waldökologie,
Hann. Münden

Laufzeit: Beginn: 1994
Dieses Projekt umfaßt zunächst als analytische Zielsetzung die Trennung und den Nachweis anorganischer sowie organischer Bindungsformen des Aluminiums in Bodenwässern. Die dazu erforderlichen Analysenmethoden erfordern u.a. den Einsatz der ICP-MS-Technik. Die entwickelten Verfahren zur Aluminium-spezies-Bestimmung werden auf bestimmte Problemstellungen bei der Waldschadensforschung angewendet. Von der Speziation verschiedener Aluminiumorganyle in Abhängigkeit vom jahreszeitlichen Verlauf werden Erkenntnisse über den Einfluß des Aluminiums auf die Humusdynamik erwartet.

Development of heavy metal sensitive sensors based on hollow fibre membranes coupled to fibre optics

Entwicklung von Schwermetallsensoren auf der Basis lichtleitergekoppelter Hohlfasermembranen

Leitung / Koordination: Priv.-Doz. Dr. Manfred Grote
Weitere Ansprechpartner: cand. phys. Ralf Zirkler
Kooperierende Wissenschaftler: Prof. Dr. Wolfgang Sohler, FB6 Angewandte
Physik der Universität-GH Paderborn;
Dr. Sophia Belfer, Ben-Gurion University of the
Negev, The Institutes for Applied Research,
Beer-Sheva, Israel

Förderinstitution/en
a) in der Bundesrepublik: in Vorbereitung
Laufzeit: Beginn: 1996

Dieses Projekt befaßt sich mit der Entwicklung eines neuartigen Schwermetall-Sensortyps, der die metallbindenden Eigenschaften bestimmter Hohlfasermembranen durch Lichtleiterkopplung mit einem Faseroptik-Spektrometer analytisch ausnutzt. Ziel ist es, sensitive und selektive Sensoren für die Bestimmung von Spurenkonzentrationen an Schwermetallionen zu erhalten, die zur „vor Ort“-Analyse von Wässern (Grund-, Trink-, Oberflächenwasser, Abwasser) oder zum Monitoring metallhaltiger Prozeßlösungen geeignet sind.

Investigation of the behaviour of polychlorinated dibenzo-p-dioxines and dibenzofuranes in aerobic and anaerobic fermentation processes of sewage sludge and aerobic composting
Untersuchung zum Verhalten von polychlorierten Dibenzo-p-dioxinen und Dibenzofuranen bei aeroben und anaeroben Fermentationsprozessen von Klärschlämmen und der aeroben Kompostierung

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Hans-Jürgen Haupt
 Weitere Ansprechpartner: Dr. Heinz Weber, Dipl.-Chem. Gerhard Disse
 Laufzeit: Beginn: 1993
 Ziel des Projektes ist eine Bilanzierung der Gehalte von PCDD und PCDF bei aeroben und anaeroben Fermentationsprozessen im Hinblick auf eine Minimierung der Dioxinbelastung landwirtschaftlich auszubringender Klärschlämme und Komposte

Synthesis and properties of bipolar ion exchangers
Darstellung und Eigenschaften bipolarer Ionenaustauscher

Leitung / Koordination: Priv.-Doz. Dr. Manfred Grote
 Weitere Ansprechpartner: Dr. Uta Schumacher;
 Dipl.-Chem. Glenn Damkröger
 Förderinstitution/en
 a) in der Bundesrepublik: Deutsche Forschungsgemeinschaft
 Laufzeit: 1993 - 1997

Ziel des Forschungsvorhabens ist es, nach einer neuartigen Synthesestrategie strukturell und morphologisch definierte Ionenaustauscherharze mit bipolaren funktionellen Gruppen (Tetrazoliumkationen mit aciden Substituenten) zu erhalten. Dabei sollen unter Einbeziehung des „Molecular Modeling“ Struktur-Wirkungsbeziehungen für sog. snake-cage-artige Eigenschaften erkannt und die Anwendbarkeit der Polymere in Trennverfahren exemplarisch untersucht werden.

Ausgewählte Publikationen

Artikel:

- M. Grote, A. Krumbiegel, U. Behle: *Studies on the oxidation of ascorbic acid by polymer bonded tetrazolium groups and analytical applications.* in: Abstract „International Conference on Reactive Polymers“, 8.-11.10.1994 Xi'an, V.R. China, pp 82
- Zhang Bao-Wen, Zhang Ye, M. Grote, A. Kettrup: *Studies on macroporous crosslinked polyacroleine-styrene resin I. Synthesis of polyacrylic aldehyde-hydrazone and polyacroleine-phenylhydrazone resins and their chelating properties for gold and platinum group metals.* Reactive Polymers, 22 (1994) 115
- G. Disse, H. Weber, R. Hamann, H.-J. Haupt: *Comparison of PCDD and PCDF concentrations after aerobic and anaerobic digestion of sewage sludges.* Chemosphere, Vol. 31, No 7, 1995, 3617
- H. Weber, G. Disse, R. Hamann, H.-J. Haupt: *Influence of the aerobic and anaerobic digestion on the levels of chlorinated dibenzofurans and dibenzodioxins in sewage sludge.* Tagungsband Dioxin'95, Edmonton 1995, Vol. 24, 81
- H. Weber, R. Hamann, G. Disse, H.-J. Haupt: *Einfluß der aeroben und anaeroben Fermentation auf die Gehalte von polychlorierten Dibenzo-p-dioxinen und Dibenzofuranen in Klärschlämmen.* Korrespondenz Abwasser 41, 6 (1995) 1073
- J. Hofele, M. Sietz, M. Grote, E. Janßen: *Untersuchungen zu Berylliumgehalten von Kartoffeln und Böden.* Agribiological Research 47 (1995) 273
- M. Grote, P. Schildmann-Humberg: *Microdeterminations of capacity values by pH-titration - a critical analytical investigation.* Ind. Eng. Chem. Res. 34 (1995) 2712



- M Grote, P. Schildmann-Humberg: *On the reliability of capacity determinations in the microscale - miniaturized methods of moisture-content determination and pH-titration*. In: "Ion Exchange Developments And Applications", J. A. Greig (Ed.); Proceedings of IEX'96, The Royal Society of Chemistry, Cambridge (1996) p. 217 f
- Uta Schumacher, M. Grote: *Novel bipolar ion-exchange resins - their preparation and characterization*. In: "Ion Exchange Developments And Applications", J. A. Greig (Ed.); Proceedings of IEX'96, The Royal Society of Chemistry, Cambridge (1996) p. 201 f
- K.-D. Topp, M. Grote: *Synthesis and characterization of a 1, 2, 4, 5-tetrazine modified ion exchange resin*. *Reactive and Functional Polymers*, 31 (1996) 117

Anorganische Chemie

Leiter

Prof. Dr. Heinrich Christian Marsmann, Tel. 05251/60-2571,
E-Mail hcm@ac16.uni-paderborn.de

Promotionen

Dr. rer. nat. Uwe Dittmar, Januar 1994, *Funktionalisierte Silsesquioxane - Modellverbindungen für oberflächenmodifizierte Kieselgele*

Dr. rer. nat. Benedikt Hendan, Juni 1995, *Octa-(organylsilsesquioxane) mit gemischten Funktionalitäten*

Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

Die Arbeitsgruppe befaßt sich mit der Chemie des Siliciums bzw. der Kernresonanzspektroskopie insbesondere der Heterokerne.

Arbeitsgebiete im einzelnen:

- Herstellung von Kieselgelen
- Modellverbindungen für organisch modifizierte Kieselgeloberflächen
- Hochauflösungs- und MAS-Kernresonanzspektroskopie von Siliciumverbindungen
- Hochauflösungskernresonanzspektroskopie von Metallen wie z.B. Zinn

Gutachtertätigkeiten

ja

Leistungsangebot für die Praxis

Eigentlich alles was kommt

Ausstattung / Geräte / Methoden

Kernresonanzspektrometer Bruker AMX300 für die Strukturaufklärung anorganischer und organischer Verbindungen

Forschungsprojekte

Silicic acid esters as complex ligands

Kieselsäurekomplexe

Leitung / Koordination:

Prof. Dr. Heinrich Christian Marsmann

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik:

Deutsche Forschungsgemeinschaft Ma 783/5-1

Laufzeit:

1990 - 1993

Cyclische und polycyclische Kieselsäure- und Siliconsäurederivate wurden im Hinblick auf ihre Fähigkeit untersucht, Alkalimetallionen komplex zu binden. Diese Verbindungen zeigten Eigenschaften, die ähnlich den Kronenäthern waren. Es ergab sich eine Korrelation der Komplexbindungskonstanten mit der Größe des Alkaliions und des Durchmessers des Ringes in cyclischen Derivaten, während bei den Silsesquioxanen eine Beteiligung von exocyclischen Sauerstoffatomen an der Bindung der Ionen notwendig war. Dies konnte mit der Geometrie der Verbindungen erklärt werden.

Silsesquioxane

Leitung / Koordination:

Prof. Dr. Heinrich Christian Marsmann

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik:

Deutsche Forschungsgemeinschaft

Ma 783/8-1 Ma783/8-2

Laufzeit:

1995 bis jetzt

Oligomere Silsesquioxane bilden kleine Käfigmoleküle, in denen die Siliciumatome beispielsweise auf den Ecken eines Würfels sitzen und die Sauerstoffatome dessen Kanten bilden. Die meisten Vertreter dieser Verbindungen sind gut in den üblichen organischen Lösemitteln löslich und können daher gut mit den Methoden der Molekülanalytik untersucht werden. Deshalb sind sie gut geeignet als Modellsubstanzen für oberflächenmodifizierte Kieselgele zu dienen, die als chromatographisches Material oder zum Beispiel als Katalysatoren Verwendung finden.

Ausgewählte Publikationen

Artikel:

- M. Weidenbruch, P. Will, K. Peters, H.G. von Schnering, H. Marsmann: *Silylene and disilylene reactions with electron-poor 1,3-dienes: new ring systems and complete degradation of a CF₃-group*. J. Organomet. Chem. 521, 355-62 1996
- E. Kroke, S. Wilms, M. Weidenbruch, W. Saak, S. Pohl, H. Marsmann: *Siliranes: Formation, Isonitrile Insertions, and Thermal Rearrangements*. Tetrahedron Lett., 37, 3675-8, 1996
- H. C. Marsmann: *Silicon-29 NMR in Encyclopedia of Nuclear Magnetic Resonance*. p. 4386-98, Wiley & Sons Ltd, Chichester, 1996
- H. C. Marsmann, U. Dittmar, E. Rikowski: *New Functionalized Silsesquioxanes by Substitutions and Cage Rearrangements of Octa[(3-chloropropyl)-silsesquioxane]*. Organosilicon Chemistry II, N. Auner, J. Weis ed., p. 691, VCH Verlag, Weinheim, 1996
- B. J. Hendan, H.C. Marsmann: *Silsesquioxanes of mixed Functionality - Octa-(3-chloropropyl)-n-propyl- silsesquioxanes and Octa[(3-mercaptopropyl)-n-propyl-silsesquioxanes] as Models of Organomodified Silica Surfaces*. Organosilicon Chemistry II, N. Auner, J. Weis ed., p. 685, VCH Verlag, Weinheim, 1996
- E. Kroke, M. Weidenbruch, W. Saak, S. Pohl, H. Marsmann: *Reactions of a Disilene and a Silylene with Cyclopentadiene, Furan, and Thiophene: [2+4]-Cycloadditions versus Chalcogen Abstraction*. Organometallics 14, 5695-9, 1995
- M. Weidenbruch, H. Kilian, K. Peters, H. G. von Schnering and H. Marsmann: *A Tetraarydistannene with a Long Tin-Tin Multiple Bond and Differing Environments of the Tin Atoms*. Chem. Ber., 128, 983-5, 1995
- M. Weidenbruch, A. Pellmann, S. Pohl, W. Saak, H. Marsmann: *Oxidation and Cycloaddition Reactions of an Unsymmetrically Substituted Disilene*. Chem. Ber., 128, 935-9, 1995
- M. Weidenbruch, E. Kroke, S. Pohl, W. Saak, H. Marsmann: *The different modes of decomposition of hexa-t-butylcyclotrisilane*. J. Organomet. Chem., 499, 229-34, 1995
- G. Masuch, H. C. Marsmann: *Encyclopedia of Analytical Science, Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy, Proton nuclear magnetic resonance*. p. 3470-7, Academic Press, London, 1995

Anorganische und Analytische Chemie

Warburger Straße 100, 33098 Paderborn,
J6.219, Tel. 05251/60-2495, Fax 05251/60-3423

Leiter

Prof. Dr. Hans-Jürgen Haupt, Tel. 05251/60-2494, Fax 05251/60-3423

Kontaktperson(en)

Dr. Ulrich Flörke (Tel. 05251/60-2496, E-Mail uf@chemie.uni-paderborn.de)

Wissenschaftlich Mitarbeitende

Dipl.-Chem. Nicole Balten (bis 1995); Dipl.-Chem. Günther Beckers (bis 1995);
Dipl. Chem. Ingrid Boß (bis 1994); Dipl.-Chem. Gerd Disse;
Dipl. Chem. Hans Egold (seit 1994); Dr. Ulrich Flörke;
Dipl.-Chem. Claus Gohlke (bis 1994); Dipl.-Chem. Ulrich Jüptner (bis 1993);
Dipl.-Chem. Susanne Kamp (seit 1995); Dipl.-Chem. Ines Kuhlmann (seit 1996);
Dipl.-Chem. Olaf Krampe (bis 1996); Dipl.-Chem. Thimo Lothert (bis 1994);
Dipl.-Chem. Uwe Ortmann (bis 1993); Dipl.-Chem. Jürgen Schniedermeier (bis 1995);
Dipl.-Chem. Meinhard Schwefer (bis 1994); Dr. Tarimala Seshadri;
Dipl.-Chem. Rolf Siefert (seit 1995); Dipl.-Chem. Jörg Uebe (bis 1994);
Dipl.-Chem. Ingo Vollmering (seit 1994); Dipl.-Chem. Ralf Wittbecker (seit 1994)



Promotionen

Dr. Ulrich Jüptner, 1993, Mehrkernige hydrido/phosphidoverbrückte Rheniumkomplexe: Synthese, Selektivität und katalytische Eigenschaften;
Dr. Uwe Ortmann, 1993, Rhodium(I)-Komplekxkatalysatoren mit Liganden vom Typ $o-C_5H_4N(CH_2)_2P(C_6H_5)(CH_2)_3XR$;
Dr. Ingrid Boß, 1994, Beiträge zur Kinetik und zum Mechanismus der Hydrosilylierung von Ketonen mit C2-symmetrischen chiralen Liganden am Rhodium(I)komplekxkatalysator;
Dr. Thimo Lothert, 1994, Beiträge zur Kinetik von Deprotonierungsreaktionen zweikerniger hydrido/phosphidoverbrückter Übergangsmetallcarbonylderivate;
Dr. Meinhard Schwefer, 1994, Zur Konzeption chiraler heteronuklearer Metallatomcluster;
Dr. Hans-Günther Beckers, 1995, Beiträge zur Koordinationschemie von Rhodium(I) in heterometallischen Dreiringen;
Dr. Nicole Balten, 1995, Entwicklung eines Konzepts für einen quantitativen Bornachweis auf immunologischer Basis;
Dr. Jürgen Schniedermeier, 1995, Rhodium(I)-Diolefinkomplexe mit Amidinliganden zur Polymerisation von Phenylacetylen;
Dr. Olaf Krampe, 1996, Darstellung und Reaktionen dihydrophosphanverbrückter Dimangan- und Dirheniumcarbonylderivate

Habilitationen

Dr. Phalguni Chaudhuri, 1996, Austauschwechselwirkungen in mehrkernigen Übergangsmetallkomplexen.

Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

Arbeitsgebiete im einzelnen:

- Koordinationschemie
- Metallorganische Komplekxkatalyse
- Elementorganische Chemie
- Strukturchemie

Ausstattung / Geräte / Methoden

Massenspektrometer, Einkristall-Diffraktometer.

Forschungsprojekte

Coordination chemistry

Koordinationschemie

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Hans-Jürgen Haupt
Weitere Ansprechpartner: Dr. Flörke, Dr. Egold, Dipl.-Chem. Siefert
Laufzeit: 1/1993 - 12/1996

Untersuchungen zur Synthese, Struktur und Eigenschaften molekulartiger Metall-atomcluster mit kovalenter Metall-Metall-Bindung. Von besonderem Interesse waren solche Bindungen mit (d-Block)-Übergangsmetallen der Gruppen (6-10) und den (s,p-Block)-Metallen der Gruppe 11 und 12 im Periodensystem der Elemente, deren Strukturchemie, Bindungstyp und Reaktivität in mehrkernigen metallorganischen Verbindungen bestimmt wurden. Dabei kamen als Präparationstechniken zur Gewinnung derartiger Verbindungen zur Anwendung: Thermische, photochemische und Druckverfahren mit und ohne Schutzgastechiken. Zur Sicherung strukturchemischer Daten derartiger Metall-Metallaggregate wurden Einkristall-Röntgenstrukturanalysen, zur Charakterisierung fluktuierender Mangan-Gold-Bindungssysteme NMR-spektroskopische, zur Ermittlung der Redoxeigenschaften cyclovoltammetrische und zu Elektronenabsorptionsvorgängen UV/VIS-spektroskopische Messungen durchgeführt.

Catalyses with organometallic complexes

Metallorganische Komplexkatalyse

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Hans-Jürgen Haupt
Laufzeit: 1/1993 - 12/1996

Grundlagenforschung zu Homogenkatalysatoren (Hydrierung, Hydrosilylierung) und präparative Entwicklungsarbeiten zur Gewinnung heterobifunktionaler Oxosynthese sowie Polymerisationskatalysatoren (Phenylacetylen, PA) wurden im Berichtszeitraum vorgenommen. Beispielsweise wurden neue unsymmetrische Chelatliganden für Rhodium(I)-Zentralatome dargestellt, deren Polymerisationseigenschaften für PA bekannte Systeme deutlich übertroffen haben.

Structural chemistry

Strukturchemie

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Hans-Jürgen Haupt
Weitere Ansprechpartner: Dr. Ulrich Flörke
Kooperierende Wissenschaftler: Prof. Dr. H.-F. Klein, TH Darmstadt

Kooperationen mit wissenschaftlichen Institutionen

a) in der Bundesrepublik: Anorganische Chemie I, TH Darmstadt
Laufzeit: 1/1993 - 12/1996

Stereochemie von homo- und heteronuklearen mehrkernigen Kobalt-, Nickel- und Palladiumkomplexen

Structural chemistry

Strukturchemie

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Hans-Jürgen Haupt
Weitere Ansprechpartner: Dr. Ulrich Flörke

Kooperierende Wissenschaftler: Dr. habil. Phalguni Chaudhuri
(Max-Planck-Institut für Strahlenchemie,
Mülheim)

Kooperationen mit
wissenschaftlichen Institutionen
a) in der Bundesrepublik:

Max-Planck-Institut für Strahlenchemie,
Mülheim/Ruhr

Laufzeit: 1/1993 - 12/1996
Strukturchemie von mehrkernigen Brückenkomplexen mit unterschiedlichem
Magnetismus

Metallomesogenes with ferri-electric properties

Metallomesogene mit ferrielektrischen Eigenschaften

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Hans-Jürgen Haupt

Weitere Ansprechpartner: Dr. Tarimala Seshadri,
Dipl.-Chem. Ingo Vollmering

Kooperierende Wissenschaftler: Dr. Karl Hiltrop (Physikalische Chemie,
Universität-GH Paderborn)

Laufzeit: 6/1994 - 12/1996

Präparation flüßigkristalliner Metallkomplexe mit optisch aktiven Gruppen, um
Struktur-Eigenschaftsbeziehungen kennenzulernen. Auch in achiralen S_c -Phasen
können durch Dotierung mit chiralen Substanzen wie Metallmesogenen
ferroelektrische S_c^- -Phasen induziert werden.



Ausgewählte Publikationen

Artikel:

H.-J. Haupt, A. Merla, U. Flörke: Heterometallische Clusterkomplexe der Typen
 $Re_2(\mu-PR_2)(CO)_8(HgY)$ und $ReMo(\mu-PR_2)(C_5H_5)(CO)_6(HgY)$ ($R = Ph, Cy$; $Y = Cl,$
 $W(C_5H_5)(CO)_3$). *Z. anorg. allg. Chem.* (1994). **620**, 999-1005.

H.-J. Haupt, U. Flörke, H.-G. Beckers: Structural Study of Triangulated
Heterometallic Metal Clusters with a Molecular Fragment $(\mu-PR_2)Re_2M$ in Re_2
 $(\mu-PR_2)(CO)_8[\mu-M(CO)_8-PPh_3]$ ($M(I)=Rh, Ir$; $R=Ph, Cy$) and in $Re_2Rh(\mu-CO)_2$
 $(\mu-PR_2)(CO)_6(PPh_3)_2$ with a Rhenium Rhodium Double Bond. *Inorg. Chem.* (1994).
33, 3481-3486.

H.-J. Haupt, G. Disse, U. Flörke: Einführung eines terminalen Halogenoliganden in
diorgano-verbrückte Dirhenium- und Molybdän-Rheniumkomplexanionen in
Gegenwart eines Amidinkations. *Z. anorg. allg. Chem.* (1994). **620**, 1664-1668.

H.-J. Haupt, M. Schwefer, U. Flörke: Reactivity of deprotonated $Mn_2(\mu-H)$
 $(\mu-PCyH)(CO)_8$: Valence Isomerization and Rearrangement of $Mn_2(AuPR_3)$
 $(\mu_4-PCy)(CO)_8$ and $Mn_2(\mu-AuPR_3)(\mu_3-PCy(AuPR_3))(CO)_8$ ($R=Ph, p-C_6H_4F, p-MeOPh,$
 $Cy, Et, EtCN$). *Inorg. Chem.* (1994). **34**, 292-297.

H.-J. Haupt, M. Schwefer, U. Flörke: Zur Selektivität des isolobalen Protonen-
austausches im hydrido/phosphido-verbrückten Dirheniumkomplex $Re_2(\mu-H)$
 $(\mu-PCyH)(CO)_8$. *Z. anorg. allg. Chem.* (1995). **621**, 1098-1105.

H.-G. Beckers, U. Flörke, H.-J. Haupt: Erste Verbindungsbeispiele für die
Koordinationszahl 3 mit Y-förmiger Ligandenanordnung am Rhodium(I)-Atom in
Festkörpern vom Typ $M^1M^2(\mu-PCy_2)(CO)_8Rh(PPh_3)$ ($M^1=Mn, M^2=Re$; $M^1=M^2=Re$;
 $M^1=M^2=Mn$),
Angew. Chem. (1995). **107**, 1464-1466.

Angew. Chem. Eng. Ed. (1995). **107**, 1325-1327.

H.-J. Haupt, M. Schwefer, H. Egold, U. Flörke: Reactivity of Deprotonated $Mn_2(\mu-H)$
 $(\mu-PCyH)(CO)_8$: Selective Monoauration to $Mn_2(\mu-AuPR_3)(\mu-PCyH)(CO)_8$ and
 $Mn_2(\mu-H)(\mu-PCy(AuPR_3))(CO)_8$ ($R = Cy, Ph, p-C_6H_4F, p-C_6H_4OMe$) and Kinetic
Studies of their Conversion. *Inorg. Chem.* (1995). **34**, 5461-5467

- J. Schniedermeier, H.-J. Haupt: New rhodium(I)-chelate complexes with coordinated amidine bases (dbu, dbn) and their catalytic properties to polymerize phenylacetylene. *J. organomet. Chem.* (1996) **506**, 41-47.
- H.-J. Haupt, R. Wittbecker, U. Flörke: Cluster catalysis trends in the hydrogenation and isomerization behaviour of 1-hexene with trinuclear or tetranuclear diorganophosphido and hydrido bridged rhenium carbonyl clusters with respect to the change of the organyl substituent from phenyl to parafluorophenyl. *J. organomet. Chem.* (1996) **518**, 213-219.
- U. Flörke, H.-J. Haupt, R. Siefert: Unusual bonding pattern for formally divalent HgPPh_3 fragment in a triangular cluster compound (Ph = phenyl). *Z. Kristallogr.* (1996) **211**, 695-699.

Biologie

Leiter

Stud. Prof. Dr. Georg Masuch, Tel. 05251/ 60-2492, -2491, Fax 05251/ 60-3423,
E-Mail bio@chemie.uni-paderborn.de

Kontaktperson(en)

Stud. Prof. Dr. Georg Masuch (Tel. 05251/ 60-2492)

Wissenschaftlich Mitarbeitende

Thomas Franz (von Jan. 1993 - Dez. 1996)

Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

Pollen und Luftschadstoffe
Ökologie und Populationsbiologie der Milben



Arbeitsgebiete im einzelnen:

- Erstellung von Pollenflugkalendern
- Wirkung von Luftschadstoffen auf den Allergengehalt von Pollen
- Erfassung der Hausstaub- und Vorratsmilbenfauna in ländlichen und städtischen Wohn- und Arbeitsbereichen
- Ermittlung von Abundanz- und Stetigkeitswerten der Milbenpopulationen
- Reinzucht von Milbenspezies-Populationen
- Ermittlung milbenspezifischer Pheromone

Gutachtertätigkeiten

Erstellung von Gutachten zur Milbenpopulation im Wohn- u. Arbeitsbereich für
Landwirtschaftl. Berufsgenossenschaft und für Kliniken

Preise für Mitglieder dieses Fachgebiets

Dr.-Karl-Heyer-Förderpreis 1994 für Arbeiten aus dem Gebiet der klinischen
Allergologie für Herrn Jörg-Thomas Franz

Mitgliedschaften

Mitglied im Deutschen Institut für Bildung und Wissen

Leistungsangebot für die Praxis

Gutachten, Beratung zur Milbenbelastung und Pollenallergie

Ausstattung / Geräte / Methoden

Raster- und Transmissions-Elektronenmikroskopie
Lichtmikroskopie
Fluoreszenzmikroskopie

Forschungsprojekte

Mite fauna in German farms and urban dwellings Milbenfauna auf deutschen Bauernhöfen und in städtischen Wohnungen

Leitung / Koordination: Stud. Prof. Dr. Georg Masuch
Weitere Ansprechpartner: Jörg-Thomas Franz
Kooperierende Wissenschaftler: Prof. Dr. Karl-Christian Bergmann, Allergie- und Asthma-Klinik, Bad Lippspringe;
Dr. Horst Müsken, Allergie- und Asthma-Klinik, Bad Lippspringe;
Dr. Enrice Fernandez-Caldas, C.B. F. Leti, S.A., Tres Cantos, Spanien;
Dr. Stefan Schulz, Institut für Organische Chemie, Hamburg

Kooperationen mit wissenschaftlichen Institutionen
a) in der Bundesrepublik:

Allergie- und Asthma-Klinik,
33175 Bad Lippspringe;
Institut für Organische Chemie,
Universität Hamburg

b) im Ausland:
Förderinstitution/en

C.B.F. Leti, S. A., Tres Cantos, Spanien

a) in der Bundesrepublik:

Kur- und Forschungsanstalten GmbH,
Bad Lippspringe;
Allergie- und Asthma-Klinik,
39175 Bad Lippspringe;
Techniker Krankenkasse, Hamburg;
P. G. Unna-Stiftung, Düsseldorf;
Hannoversche Landwirtschaftliche
Berufsgenossenschaft, Hannover;
Westfälische Landwirtschaftliche
Berufsgenossenschaft, Münster;
Forschungskommission Universität-
Gesamthochschule Paderborn
seit 1/1993 fortlaufend

Laufzeit:

Neben den als Auslöser allergischer Erkrankungen bekannten Hausstaubmilben (HSM) treten auch Vorratsmilben (VRM) als potentielle Allergieauslöser im menschlichen Umfeld auf. Zur Erweiterung der noch ungenügenden Kenntnisse über das Artenspektrum in Deutschland und zur dringend notwendigen Verbesserung der allergologisch-klinischen Diagnostik wurde ein langfristiges Forschungsprojekt initiiert, das kooperativ mit der Allergie- und Asthma-Klinik Bad Lippspringe durchgeführt wird. Auf Bauernhöfen wurden bisher 34 Milbenarten nachgewiesen (davon 36 VRM, 4 HSM), im rein städtischen Wohnumfeld bisher 25 (davon 15 VRM, 4 HSM). Die große Mehrheit dieser Arten ist allergologisch noch völlig unbekannt.

Effect of ozone on group 5 allergen content of grasses Wirkungen von Ozon auf den Gruppe-5-Allergen-Gehalt von Gräsern

Leitung / Koordination: Stud. Prof. Dr. Georg Masuch
Weitere Ansprechpartner: Jörg-Thomas Franz; Dr. Karin Schoene
Kooperierende Wissenschaftler: Prof. Dr. Karl-Christian Bergmann, Allergie- und Asthma-Klinik, Bad Lippspringe;
Dr. Horst Müsken, Allergie- und Asthma-Klinik, Bad Lippspringe

Kooperationen mit
wissenschaftlichen Institutionen

a) in der Bundesrepublik:

Allergie- und Asthma-Klinik, Bad Lippspringe;
Stiftung Deutscher Polleninformationsdienst,
Bad Lippspringe

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik:

Stiftung Deutscher Polleninformationsdienst,
33175 Bad Lippspringe

Laufzeit:

seit 3/1994 fortlaufend

Es wurden Allergengehalte von Gruppe 5 Allergen in den Antheren und Pollen von *Lolium perenne* am Industriestandort Schwerte/Ruhr und am Reinluftstandort Velmerstot im Eggegebirge untersucht. Hauptimmitent ist Ozon mit $87 \mu\text{g}/\text{m}^3$ im Monatsmittel für Juni 1994 im Eggegebirge und mit $53 \mu\text{g}/\text{m}^3$ in Schwerte. Der Allergengehalt der Pollen im Eggegebirge war um 60% erhöht. In einem experimentellen Simulationsversuch betrug die Erhöhung an Allergenen an Freiland-Wildgräsern gegenüber Kultur in gefilterter Luft im Eggegebirge 76%. Dieser Effekt konnte auch in Freiland-Klimakammern bestätigt werden. Unter dem Einfluß von Ozon erhöht sich der Allergengehalt in *Lolium*-Gräsern.

Ausgewählte Publikationen

Artikel:

- Franz, J.-Th.; Masuch, G.; Müsken, H.; Bergmann, K.-Ch.: *Untersuchungen zur Vorratsmilbenfauna von Bauernhöfen in Nordrhein-Westfalen: Ostwestfalen*. Allergologie 1 (1995). S. 25-30.
- Müsken, H.; Wahl, R.; Franz, J.-Th.; Masuch, G.; Bergmann, K.-Ch.: *Häufigkeit von Sensibilisierungen gegen die Raubmilbe Cheyletus eruditus und Vorratsmilben bei Patienten mit Hausstaubmilben Sensibilisierung*. Allergologie 1 (1996), S. 29-34.
- Franz, J.-Th.; Burghartz, M.; Masuch, G.; Müsken, H.; Bergmann, K.-Ch.: *House dust mites are common allergen sources in chicken stables*. European Journal of Allergy and Clinical Immunology 31 (1996). S. 64.
- Franz, J.-Th.; Masuch, G.; Müsken, H.; Bergmann, K.-Ch.: *Entwicklung und Entwicklungsstadien der Vorratsmilbe Blomia tjobodas (Oudemans, 1910): Raster-elektronenmikroskopische Studien*. Allergo Journal 2 (1996). S. 77-83.
- Franz, J.-Th.; Masuch, G.; Müsken, H.; Bergmann, K.-Ch.: *Untersuchung zur Milbenfauna im rein städtischen Wohnmilieu: Eine Pilotstudie*. Allergo Journal 5 (1996). S. 43.
- Franz, J.-Th.; Masuch, G.; Müsken, H.; Bergmann, K.-Ch.: *Jahreszeitliche Vorratsmilbenbelastung unterschiedlich bewirtschafteter Schweineställe*. Allergo Journal 5 (1996). S. 44.
- J.-Th. Franz: *Nachweis bisher unbekannter Milben im landwirtschaftlichen Bereich*. 20. Tagung der Deutschen Gesellschaft für Allergie- und Immunitätsforschung, Freiburg, 2.-5.10.1996. Proceedings-Band (1996).
- Franz, J.-Th.; Masuch, G.; Müsken, H.; Bergmann, K.-Ch.: *Domestic mite fauna of German farms*. European Journal of Allergy and Clinical Immunology 26 (1995). S. 338-339.
- Franz, J.-Th.; Masuch, G.; Müsken, H.; Bergmann, K.-Ch.: *Wirksamkeit von Benzylbenzoat auf die Vorratsmilben Blomia tjobodas und Thyreophagus entomophagus*. Allergo Journal 2 (1995). S. 38.
- Franz, J.-Th.; Masuch, G.; Müsken, H.; Bergmann, K.-Ch.: *Entwicklung und Entwicklungsstadien der Vorratsmilbe Lepidoglyphus destructor: Raster-elektronenmikroskopische Untersuchungen*. Allergo Journal 4 (1993), S. 55-60.

Chemie und Technologie der Beschichtungs- stoffe

Warburger Straße 100, 33098 Paderborn,
NW 1.732, Tel. 05251/60-3620,
Fax 05251/ 60-3244,
E-Mail md@chemie.uni-paderborn.de

Leiter

Prof. Dr. rer. nat. Artur Goldschmidt, Tel. 05251/60-2590, -3621, Fax 05251/60-3244,
E-Mail mm@chemie.uni-paderborn.de

Kontaktperson(en)

Dipl.-Ing. Manfred Koch (E-Mail md@chemie.uni-paderborn.de);
Dipl.-Chem.-Ing. René Mattern (E-Mail rm@chemie.uni-paderborn.de);
Martina Müller (E-Mail mm@chemie.uni-paderborn.de)

Wissenschaftlich Mitarbeitende

Dr. Dipl.-Chem. Dipl.-Chem.-Ing. Günter Hohmann (bis Dez. 1994);
Dipl.-Chem.-Ing. René Mattern (ab März 1994)

Promotionen

Dr. Dipl.-Chem. Dipl.-Chem.-Ing. Günter Hohmann, März 1994, *Beschreibung und Beeinflussung der Filmbildung von Pulverlacken durch chemische und verfahrenstechnische Maßnahmen*

Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

Durch die Aufklärung und Beschreibung des rheologischen Verhaltens von Pulverlacken während der Filmbildungsphase sollen die Möglichkeiten einer gezielten Beeinflussung der Fließeigenschaften geschaffen werden. Ziel dieses Projekts ist es, mit Hilfe dieser Erkenntnisse, unter Verringerung der Schichtdicke, die optischen Eigenschaften von Pulverlacken, wie Verlauf (Oberflächenglätte) und Glanz, dem derzeitigen Leistungsvermögen konventioneller, lösemittelhaltiger Systeme bzw. den Wasserlacken anzugleichen. Diese Optimierung darf aber keinesfalls die chemisch-physikalischen Eigenschaften (z.B. chemische Resistenz, Wetterbeständigkeit) beeinträchtigen. Damit soll für die genannten Systeme auch in Bereichen, die ein besonderes Anforderungsprofil an die optischen Eigenschaften der Beschichtungsstoffe stellen, mit den Pulverlacken eine ernsthafte Alternative geschaffen werden. Es gilt also, das Potential der Pulverlacke auszuschöpfen und die Anwendungsbereiche zu erweitern.

Das Projekt läßt sich dabei in drei Teilgebiete einordnen, mit den oben angegebenen Zielen.

Es handelt sich zum einen um das Gebiet der Filmbildung. Durch die Kenntnis der rheologischen Eigenschaften von Pulverlacken soll der Verlaufsprozeß während des Aushärtungsprozesses verbessert bzw. gezielt beeinflusst werden. Mit Hilfe eines geeigneten Filmbildemodells wird dabei der Viskositätsverlauf beschrieben und somit werden Prognosen bezüglich des Verlaufes möglich. Hierzu müssen bekannte Filmbildemodelle überprüft und anhand dieser Ergebnisse muß gegebenenfalls ein neues Modell erstellt werden. Zur schnellen Aufbereitung der Meßdaten, zur Berechnung der Verlaufskennzahl sowie zur Simulation des Viskositätsverlaufes muß ein Rechnerprogramm erstellt werden. Weiterhin soll eine Korrelation zwischen den berechneten Verlaufskennzahlen und dem tatsächlichen Verlauf (optische und mechanische Abtastverfahren) gefunden werden.

Im zweiten Teilgebiet werden reaktive Verdüner auf Basis von Uretdionen synthetisiert. Diese werden in Pulverlacksysteme eingearbeitet und sollen dort während des Aushärtungsprozesses die Viskosität herabsetzen. Bei fortschreitender Aushärtung reagieren sie dann mit den Harzkomponenten und verbleiben somit als fester Bestandteil in der Beschichtung. Die mechanisch-technologischen Eigenschaften dürfen dabei nicht nachteilig beeinflusst werden.

Das dritte Teilgebiet beschäftigt sich mit der Herstellung von Pulverlacken mit Hilfe der Ultraschallstehwellenerstäubungstechnik. Hierdurch könnte der aus energetischer Sicht ungünstige „konventionelle“ Mahlprozeß ersetzt werden. Da das Prinzip dieser Technik im Hinblick auf die Polymerzerstäubung noch weitgehend ungeklärt ist, werden im Rahmen dieses Projektes Grundsatzuntersuchungen durchgeführt und somit die Zusammenhänge zwischen den Stoff- und Verfahrensparametern bezüglich der Zerstäubungsergebnisse erforscht.

Gutachtertätigkeiten

Sondergutachter für das AiF sowie für das IPA (Stuttgart), Prof. Dr. Goldschmidt

Mitgliedschaften

Vorstandsvorsitzender der Deutschen Forschungsgesellschaft für Oberflächenbehandlung e.V.



Leistungsangebot für die Praxis

Technologieberatung

Gutachten

lacktechnische Prüfungen

Durchführung von Diplomarbeiten in Zusammenarbeit mit der Industrie

Drittmittel Forschungsprojekte:

- Einsatz der Ultraschallstehwellenerstäubung in der Lackiertechnik
- Aufklärung der rheologischen Eigenschaften von Pulverlacken in Abhängigkeit von der chemischen Struktur der Filmbildner und der Morphologie der Pulverpartikel zur Verbesserung des optischen Eigenschaftsprofils

Forschungsprojekte

Explanation of rheological properties of powder coatings with dependence of chemical structure of the film former and morphology of powder particles for the improvement of the optical characteristics

Aufklärung der rheologischen Eigenschaften von Pulverlacken in Abhängigkeit von der chemischen Struktur der Filmbildner und der Morphologie der Pulverpartikeln zur Verbesserung des optischen Eigenschaftsprofils

Leitung / Koordination:

Prof. Dr. Artur Goldschmidt

Weitere Ansprechpartner:

Dipl.-Chem.-Ing. René Mattern

Kooperationen mit

wissenschaftlichen Institutionen

a) in der Bundesrepublik:

Institut für Polymerforschung (IPF), Dresden
 Institut für Produktionstechnik und
 Automatisierung (IPA), Stuttgart
 Institut für Werkstofftechnik (IWT), Bremen
 Institut für Holztechnologie, Dresden

Institut für Lacke und Farben e.V.
Institut für Kunststoffprüfung, Stuttgart

Kooperation mit
Einrichtungen der Wirtschaft
a) in der Bundesrepublik:

Fa. BASF Lacke und Farben AG, Münster;
Fa Bayer, Leverkusen;
Fa. Hüls, Marl;
Fa. Branson Ultraschall, Dietzenbach;
Fa. VW, Wolfsburg;
Fa. Mercedes-Benz, Stuttgart;
Fa. Herberts, Wuppertal / Landshut;

b) im Ausland:
Förderinstitution/en

...
Fa. Volvo, Göteborg, Schweden

a) in der Bundesrepublik:
Laufzeit:

BMBF, Bonn
1.11.1993 - 30.4.1996

Durch die Aufklärung und Beschreibung des rheologischen Verhaltens von Pulverlacken während der Filmbildungsphase sollen die Möglichkeiten einer gezielten Beeinflussung der Fließeigenschaften geschaffen werden. Ziel dieses Projekts ist es, mit Hilfe dieser Erkenntnisse, unter Verringerung der Schichtdicke, die optischen Eigenschaften von Pulverlacken, wie Verlauf (Oberflächenglätte) und Glanz, dem derzeitigen Leistungsvermögen konventioneller, lösemittelhaltiger Systeme bzw. den Wasserlacken anzugleichen. Diese Optimierung darf aber keinesfalls die chemisch-physikalischen Eigenschaften (z.B. chemische Resistenz, Wetterbeständigkeit) beeinträchtigen. Damit soll für die genannten Systeme auch in Bereichen, die ein besonderes Anforderungsprofil an die optischen Eigenschaften der Beschichtungstoffe stellen, mit den Pulverlacken eine ernsthafte Alternative geschaffen werden. Es gilt also, das Potential der Pulverlacke auszuschöpfen und die Anwendungsbereiche zu erweitern.

Das Projekt läßt sich dabei in drei Teilgebiete einordnen, mit den oben angegebenen Zielen.

Es handelt sich zum einen um das Gebiet der Filmbildung. Durch die Kenntnis der rheologischen Eigenschaften von Pulverlacken soll der Verlaufsprozeß während des Aushärtungsprozesses verbessert bzw. gezielt beeinflußt werden. Mit Hilfe eines geeigneten Filmbildemodells wird dabei der Viskositätsverlauf beschrieben und somit werden Prognosen bezüglich des Verlaufes möglich. Hierzu müssen bekannte Filmbildemodelle überprüft und anhand dieser Ergebnisse muß gegebenenfalls ein neues Modell erstellt werden. Zur schnellen Aufbereitung der Meßdaten, zur Berechnung der Verlaufskennzahl sowie zur Simulation des Viskositätsverlaufes muß ein Rechnerprogramm erstellt werden. Weiterhin soll eine Korrelation zwischen den berechneten Verlaufskennzahlen und dem tatsächlichen Verlauf (optische und mechanische Abtastverfahren) gefunden werden.

Im zweiten Teilgebiet werden reaktive Verdünnern auf Basis von Uretdionen synthetisiert. Diese werden in Pulverlacksysteme eingearbeitet und sollen dort während des Aushärtungsprozesses die Viskosität herabsetzen. Bei fortschreitender Aushärtung reagieren sie dann mit den Harzkomponenten und verbleiben somit als fester Bestandteil in der Beschichtung. Die mechanisch-technologischen Eigenschaften dürfen dabei nicht nachteilig beeinflußt werden.

Das dritte Teilgebiet beschäftigt sich mit der Herstellung von Pulverlacken mit Hilfe der Ultraschallstehwellenzerstäubungstechnik. Hierdurch könnte der aus energetischer Sicht ungünstige „konventionelle“ Mahlprozeß ersetzt werden. Da das Prinzip dieser Technik im Hinblick auf die Polymerzerstäubung noch weitgehend ungeklärt ist, werden im Rahmen dieses Projektes Grundsatzuntersuchungen durchgeführt und somit die Zusammenhänge zwischen den Stoff- und Verfahrensparametern bezüglich der Zerstäubungsergebnisse erforscht.

Employment of Ultrasound Standing Wave Atomization (USWA) in coating technology

Einsatz der Ultraschallstehwellenerstäubung in der Lackiertechnik

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Artur Goldschmidt
 Weitere Ansprechpartner: Dipl.-Chem.-Ing. René Mattern
 Kooperierende Wissenschaftler: Prof. Dr. Nikolaus Risch;
 Dr. Dipl.-Chem. Sivia Dohmeier-Fischer

Kooperationen mit wissenschaftlichen Institutionen
 a) in der Bundesrepublik:

Institut für Polymerforschung, Dresden;
 Institut für Produktionstechnik und Automatisierung (IPA), Stuttgart;
 Institut für Werkstofftechnik (IWT), Bremen;
 Institut für Holztechnologie, Dresden;
 Institut für Lacke und Farben e.V.;
 Institut für Kunststoffprüfung, Stuttgart;
 Hochschule für Wirtschaft und Technik, Dresden

Kooperation mit Einrichtungen der Wirtschaft
 a) in der Bundesrepublik:

Fa. BASF Lacke und Farben AG, Münster;
 Fa Bayer, Leverkusen;
 Fa Akzo Nobel Powder Coatings, Reutlingen;
 Fa. Dow, Rheinmünster;
 Fa. Hüls, Marl;
 Fa. Merck, Darmstadt;
 Fa. Herberts, Wuppertal/Landshut;
 Fa. Branson Ultraschall, Dietzenbach;
 Fa. Haake, Karlsruhe;
 Fa. BMW, München;
 Fa. VW, Wolfsburg;
 Fa. Mercedes-Benz, Stuttgart;

b) im Ausland:

.....
 Fa. Volvo, Göteborg, Schweden

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik:

BMBF, Bonn

Laufzeit:

1.9.1996 - 31.8.1998

Dieses Forschungsvorhaben dient dazu, die Einsatzmöglichkeiten der Ultraschallstehwellenerstäubungstechnik (USZ) in der Polymerzerstäubung zu untersuchen. Neben der Erarbeitung der wissenschaftlich-technischen Grundlagen steht das Prototyping im Vordergrund. Die Auslegung der Zerstäuberanlage und die technische Realisierung erfolgen dergestalt, daß zum einen thermoplastische und duroplastische Pulverlacke hergestellt werden können und desweiteren diese hergestellten Lacke direkt auf ein Lackierobjekt aufgetragen werden können. Die Elektrifizierung der Ultraschallstehwellenanlage ermöglicht dabei den elektrostatisch unterstützten Direktauftrag von Fluiden und gewährleistet sehr hohe Material- und Energienutzungsgrade.

Insbesondere soll das Potential dieser Zerstäubungstechnik hinsichtlich ihrer energie-sparenden und umweltschonenden Betriebsweise unter Berücksichtigung der erzielbaren Qualität der Beschichtung quantifiziert werden.

Um die Leistung der USZ-Technik bei der Zerstäubung von Polymerschmelzen (Pulverlacke) vollständig nutzen zu können, müssen auch die chemischen Komponenten weiterentwickelt werden. Hierzu gehört die Synthese von reaktiven Verdünnern, die durch ihre viskositätsabsenkenden Eigenschaften das Zerstäubungsergebnis positiv beeinflussen und zugleich den Verlauf der Beschichtung während des Einbrennprozesses verbessern. Während des F&E-Programms (Erweiterung der Anwendung von Pulverlacken, Förderkennzeichen 01 ZH 9308) konnten bereits



erfolgversprechende Produkte synthetisiert werden. Die Modifizierungen dieser Substanzen sowie die Suche nach weiteren Verbindungen sind jedoch unumgänglich, um neben der viskositätserniedrigenden Wirkung auch die geforderten mechanisch-technologischen Eigenschaften einzustellen.

Diese Reaktivverdünner werden zunächst in Laborversuchen designed, analysiert und charakterisiert. Geeignete Verbindungen sollen danach in größeren Mengen hergestellt und die Synthesewege optimiert werden. Diese Substanzen werden in Pulverlacksysteme eingearbeitet und anschließend mittels USZ-Technik appliziert. Die Bewertung der optischen und mechanisch-technologischen Eigenschaften der Beschichtung erfolgen im Anschluß und werden mit den konkurrierenden Zerstäubungsverfahren verglichen, damit eine verlässliche Zukunftsprognose und Beurteilung der Chance im Markt getroffen werden können.

Ausgewählte Publikationen

Monographien:

Dr. Dipl.-Chem. Dipl.-Chem.-Ing. Günter Hohmann: *Beschreibung und Beeinflussung der Filmbildung von Pulverlacken durch chemische und verfahrenstechnische Maßnahmen*, Paderborn, VDI-Verlag, 1994

Artikel:

Prof. Dr. rer. nat. Artur Goldschmidt: *Fortschritte bei der Pulverbeschichtung durch koordinierte Forschung und Entwicklung*. Tagungsband, Pulverlackkongreß, Sept. 1996, pp. 11-20, Herausgeber: Verband der Lackindustrie e.V. Fachgruppe Pulverlacke

Dr. rer. nat. Günter Hohmann: *Möglichkeiten der Ultraschallstehwellenerstäubung von Pulverlacken*. Berichtsband Nr. 26, Neue Entwicklungen in der Pulverlackiertechnik, Okt. 1994, pp. 87-98. Herausgeber: Deutsche Forschungsgesellschaft für Oberflächenbehandlung e.V.

Dipl.-Chem.-Ing. René Mattern: *Computergestützte Simulation des Viskositätsverlaufes von thermoreaktiven Pulverlacksystemen während des Aushärtungsprozesses*. Berichtsband Nr. 26, Neue Entwicklungen in der Pulverlackiertechnik, Okt. 1994, pp. 37-50, Herausgeber: Deutsche Forschungsgesellschaft für Oberflächenbehandlung e.V.

Dipl.-Chem.-Ing. René Mattern: *Untersuchungen zur Beeinflussung des Verlaufes von Pulverlacksystemen*. Berichtsband Nr. 28, Neue Entwicklungen in der Pulverlackiertechnik, Okt. 1995 pp. 129-136. Herausgeber: Deutsche Forschungsgesellschaft für Oberflächenbehandlung e.V.

Didaktik der Chemie

Warburger Straße 100, 33098 Paderborn,
Raum CU 125, Tel. 05251/60-3654, Fax 05251/60-2765,
E-Mail becker@ac16.uni-paderborn.de,
URL <http://www.uni-paderborn.de/extern/fb/13/fachgeb/ddc/becker.html>

Sprecher

Prof. Dr. Hans-Jürgen Becker, Tel. 05251/60-2766, 05251/60-3654,
Fax 05251/60-2765, E-Mail becker@ac16.uni-paderborn.de

Kontaktperson(en)

Dr. Karl-Heinz Ohrbach
(Tel. 05251/60-2766, E-Mail ohrbach@ac16.uni-paderborn.de)

Wissenschaftlich Mitarbeitende

Henry Hildebrandt (ab 15.5.1996)

Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

- Voraussetzungen und Entscheidungen von Chemieunterricht
- Systematisierung chemiedidaktischer Erkenntnisse
- Effektivität der chemiedidaktischen Lehre

Arbeitsgebiete im einzelnen:

- Schüler- und Lehrerverhalten
- Chemie im reflektierten Alltag als Forschungsparameter und Unterrichtsgegenstand
- Forschung in der Lehre
- Bestandsaufnahme chemiedidaktischer Lehre und Forschung

Weitere Angaben

Mitglied in universitären Gremien

- Betreuung der Rubriken „inländische und ausländische Zeitschriften“ in „Praxis der Naturwissenschaften - Chemie“

Leistungsangebot für die Praxis

Beratung von Chemielehrern

Literaturrecherchen zu Chemieunterricht (über unsere Datenbank „FADOK“) -
Internetadresse siehe oben

Ausstattung / Geräte / Methoden

ja

Weitere Angaben

ja



Forschungsprojekte

State (of knowledge) in achievements of didactics of chemistry Bestandsaufnahme chemiedidaktischer Erkenntnisleistungen

Leitung / Koordination:

Prof. Dr. Hans-Jürgen Becker

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik:

Senator für Arbeit und Soziales, Berlin
(ABM-Stelle)

Laufzeit:

fünf Jahre (1989-1994)

Der Erkenntnisstand der Fachdidaktik Chemie wird systematisch beschrieben. Dadurch werden chemiedidaktische Theorieelemente kristallisiert. Voraussetzung war u. a. eine EDV-Datei chemiedidaktischer Zeitschriftenpublikationen mit ca. 12.000 Einträgen (derzeit 24.000 Einträge). Die derzeitigen Forschungsleistungen beantworten einen Teil jener Fragen, die Anfang der 70er Jahre gestellt wurden (Buchpublikation liegt vor).

Motives for student attitudes towards chemistry teaching

Motive für Schülereinstellungen zum Chemieunterricht

Leitung / Koordination:

Prof. Dr. Hans-Jürgen Becker

Kooperierende Wissenschaftler:

Dr. Bündler (Institut für Pädagogik der
Naturwissenschaften, Kiel)

Kooperationen mit
wissenschaftlichen Institutionen

a) in der Bundesrepublik:

siehe kooperierende Wissenschaftler

Laufzeit:

drei Jahre (ab 1996)

Chemieunterricht wird von Schülern mehr abgelehnt als bevorzugt. Nur wenige Schüler nehmen am Chemieunterricht der Oberstufe teil. Sie sind an Chemie sehr interessiert. Bislang sind eher Motive jener Schüler mit negativen Einstellungen zum Chemieunterricht beachtet worden (eigenes Forschungsprojekt im Zeitraum 1975 - 1982). Oberstufenschüler, die an dem Wettbewerb „Chemie-Olympiade“ teilnehmen, sollen deshalb nach Motiven für die vermuteten positiven Einstellungen befragt werden. Dazu werden spezielle Untersuchungsverfahren entwickelt.

(Promotionsvorhaben Bettina Labahn)

Didactics of chemistry and scientific character of teaching

Chemiedidaktik und Unterrichtswissenschaftlichkeit

Leitung / Koordination:

Prof. Dr. Hans-Jürgen Becker

Kooperationen mit
wissenschaftlichen Institutionen

a) in der Bundesrepublik:

alle Institutionen, die Chemielehrer ausbilden

Laufzeit:

zwei Jahre (ab 1996)

Die chemiedidaktische Lehre muß den Gegenstand Chemieunterricht unterrichtswissenschaftlich abbilden. Eine entsprechende Bestandsaufnahme soll zum einen präzisieren, ob entsprechende Forschungsleistungen relevante Studieninhalte sind. Zum anderen soll ein Konsens für eine unterrichtswissenschaftliche Lehrstruktur an deutschen Hochschulen angeregt werden. Dazu werden unterschiedliche Forschungsmittel (Fragebögen, Literaturrecherchen, Vorlesungsverzeichnisse) kombiniert.

Die Fragestellungen werden im Rahmen einer Dissertation bearbeitet (Henry Hildebrandt).

Ausgewählte Publikationen

Monographien:

- H.-J. Becker: *Verbraucherdialoge im Chemieunterricht - Lebensmittel*. Berlin: PZ-Verlag 1993
- H.-J. Becker: *Chemiedidaktische Entwicklungen in der Bundesrepublik Deutschland - Situationsanalyse und Bilanz*. Frankfurt/Main: P. Lang-Verlag 1994
- H.-J. Becker: *Lehrerverhalten - allein entscheidend?* In: Jäckel u. a. (Hrsg.), *Der Wandel im Lehren und Lernen von Mathematik und Naturwissenschaften*. Bd. II: *Naturwissenschaften* Weinheim: Beltz-Verlag 1994, S. 209-212
- H.-J. Becker: *Chemische Alltagsdialoge - auch ein methodisches Hilfsmittel im Chemieunterricht*. In: Autorenteam (Hrsg.), *Naturwissenschaftsdidaktik*. Magdeburg: Westarp-Verlag 1994, S. 114-121
- H.-J. Becker: *Beispiele für Leistungskontrollen in der reformorientierten Oberstufe*. In: W. Glöckner (Hrsg.), *Materialien zum Kursunterricht Chemie*. Bd. 1,2,3. Köln: Aulis 1994, 2. Auflage.

Artikel:

- H.-J. Becker: *Chemie in Verbraucherdialogen - Beispiel „Lösungsmittel“ und „Plastik“*. Die Realschule; 1993; S. 112-114
- H.-J. Becker: *Forschung in der Lehre - im Unterrichtspraktikum (chimica Studienbericht)*. chimica didactica; 1995; H. 1, S. 58-60
- H.-J. Becker: *„Aus der Schule für das Leben“ - Das Lebensmittel „Milch“ in der familialen Diskussion*. Praxis der Naturwissenschaften - Chemie. 1995; H. 7; S. 28-33
- H.-J. Becker und H. Hildebrandt: *„Chemie im Haushalt“ - lebensweltliche Zugänge am Beispiel der Behandlung von Rohrreinigern*. Praxis der Naturwissenschaften - Chemie. 1996. H. 1, S. 26-31
- H.-J. Becker, H. Hildebrandt, B. Labahn: *Unterrichtsvorbereitung mit der Literaturliste „FADOK“ - Beispiel „Korrosion“*. Praxis der Naturwissenschaften - Chemie. 1996; H. 5; S. 34-38
- H.-J. Becker: *Stellungnahme zu Peter Bucks pointiertem Beitrag „Über die allmähliche Überwindung des Irrtums, es ginge im Chemieunterricht um Naturerkenntnis“*. chimica didactica; 1996; H. 2; S. 184-185
- H.-J. Becker, J. T. Karst: *Einstiege in den Chemieunterricht. Routine schon in der Ausbildung*. In: *Naturwissenschaften im Unterricht - Chemie*. 1993. H. 17, S. 44-45
- H.-J. Becker, M. Schürer, G. Sieg, H. Hildebrandt: *Konservierungsstoffe im Unterricht. Skizze eines studentischen Projekts*. In: *Naturwissenschaften im Unterricht - Chemie*. 1993. H. 19, S. 31-33
- H.-J. Becker: *Thema „Zusatzstoffe in Lebensmitteln“*. Ein Verbraucherdialog als Grundlage für die Unterrichtsgestaltung. In: *Chemie in der Schule*. 1993. H. 7/8, S. 275-279
- H.-J. Becker und H. Hildebrandt, D. Köhler: *Die Verwirklichung einer Idee: Systematische Erfassung und Nutzung chemiedidaktischer Zeitschriftenliteratur*. In: *Chemie konkret*. 1995. H. 4, S. 180-182

Organische Chemie

Warburger Str. 100, 33098 Paderborn,
J4.203, Tel. 05251/60-2181, Fax 05251/60-3245,
URL <http://ac16.uni-paderborn.de/fels/index.html>

Leiter

Prof. Dr. Gregor Fels, Tel. 05251/60-2181, -2173, Fax 05251/60-3245,
E-Mail gf@chemie.uni-paderborn.de

Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

Anwendung organisch-chemischer Methoden und Computeranwendungen auf
medizinische und ökologische Fragestellungen

Arbeitsgebiete im einzelnen:

- Protein-Ligand Wechselwirkungen
- Ökologische Aspekte der Rüstungsalasten
- Computeranwendungen in der organischen Chemie
- Radioisotopentechnik

Patente

Fels, G., Ewald, G., Verfahren und Vorrichtung zur Herstellung eines Nitrocellulose-
Phlegmatisats, **1993**, DE 41 35 160.6;
Fels, G., Ewald, G., Verfahren und Vorrichtung zur Verringerung der Korngröße von
kristallinem Explosivstoff, **1993**, DE 42 00 743.7;
Fels, G., Ewald, G., Sprengstoff, insbesondere Wettersprengstoff, Verfahren zu seiner
Herstellung, **1993**, DE 42 04 442.1;
Fels, G., Ewald, G., Aufbereitung wachshaltiger Explosivstoffe, **1994**, DE 42 37 580.0;
Fels, G., Ewald, G., Verfahren zur Herstellung eines Pulver-Vorproduktes, **1994**,
DE 42 33 629.5;
Fels, G., Ewald, G., Verringerung der Korngröße von kristallinem Explosivstoff, **1996**,
EP 92 91 83 87.9

Eigene Tagungen

11. CIC Workshop, 17.-19.11.1996, Paderborn

Leistungsangebot für die Praxis

Forschungs- und Entwicklungsarbeiten

- werden im Rahmen der Arbeitsgebiete durchgeführt

Diplom- und Doktorarbeiten

- können auch in Kooperation mit Wirtschaftspartnern durchgeführt werden

Ausstattung / Geräte / Methoden

Einrichtungen zur Durchführung von Molecular Modeling Untersuchungen;
Radioisotopenlabor;
Organisch-chemisches Syntheselabor

Forschungsprojekte

Structure and function of CNS-active muscle relaxants

Struktur und Funktion zentral wirkender Muskelrelaxantien

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Gregor Fels
 Weitere Ansprechpartner: Axel Dietrich
 Kooperierende Wissenschaftler: Prof. Dr. Alfred Maelicke
 (Inst. für Physiologische Chemie und Pathobiochemie, Universität Mainz, Deutschland)
 Prof. Dr. Alexander Tropsha (Laboratory for Molecular Modeling, School of Pharmacy, University of North Carolina at Chapel Hill, USA)

Kooperationen mit wissenschaftlichen Institutionen
 a) in der Bundesrepublik:

Institut für Physiologische Chemie und Pathobiochemie, Johannes Gutenberg Universität Mainz, Mainz

b) im Ausland:

Laboratory for Molecular Modeling, School of Pharmacy, University of North Carolina at Chapel Hill, Chapel Hill, NC, USA

Kooperation mit Einrichtungen der Wirtschaft
 a) in der Bundesrepublik:

Strathmann AG, Hamburg

Laufzeit:

seit 1/1996

Wirkort und Wirkungsweise der zentralen Muskelrelaxantien sind im Gegensatz zu den entsprechenden peripher angreifenden neuromuskulären Blockern bisher nur wenig untersucht. Wir beschäftigen uns mit dieser Fragestellung am Beispiel der Verbindung Tolperison, einem zugelassenen Muskelrelaxans, das einerseits stereochemische Aspekte einbringt und zum anderen wegen seiner Wirkung auf zentralnervöse und periphere Synapsen besonders interessant erscheint. Als Methodenspektrum werden dabei chemische, radiochemische und biochemische Methoden verwendet. Auf der Basis struktureller Parameter arbeiten wir darüber hinaus mit Hilfe von Computermethoden an einer Klassifizierung der chemisch sehr heterogenen Gruppe der zentralen Muskelrelaxantien, um über die Struktur-Wirkungs-Beziehungen zusätzliche Aussagen zur Bindungsweise dieser Pharmaka zu erhalten.

Evaluation of Galanthamine and derivatives in a new approach to drug therapy of Alzheimer's dementia

Untersuchung von Galanthamin und seinen Derivaten als neuer Ansatz zur Alzheimer Therapie

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Gregor Fels
 Weitere Ansprechpartner: Christian Pilger, Ingo Brunberg
 Kooperierende Wissenschaftler: Prof. Dr. Alfred Maelicke (Inst. für Physiologische Chemie und Pathobiochemie, Universität Mainz, Deutschland);
 Prof. Dr. Alexander Tropsha (Laboratory for Molecular Modeling, School of Pharmacy, University of North Carolina at Chapel Hill, USA);
 Prof. Dr. Ulrich Jordis und
 Prof. Dr. Johannes Fröhlich
 (Technische Universität Wien)



Kooperationen mit wissenschaftlichen Institutionen

a) in der Bundesrepublik:

Institut für Physiologische Chemie und Pathobiochemie, Johannes Gutenberg Universität Mainz, Mainz

b) im Ausland:

Laboratory for Molecular Modeling, School of Pharmacy, University of North Carolina at Chapel Hill, Chapel Hill, NC, USA;
Institut für Organische Chemie, Technische Universität Wien, Österreich

Kooperation mit Einrichtung der Wirtschaft

b) im Ausland:

Waldheim Pharmazeutika, Wien, Österreich
seit 10/1996

Laufzeit:

Alzheimer-Demenz (AD) ist eine Erkrankung des zentralen Nervensystems, bei der es durch eine Degeneration von cholinergen Neuronen zu Konzentrations- und Aktivitätsverlusten von nicotinischen Acetylcholinrezeptoren (nAChR) des Gehirns kommt. Galanthamin stellt als Acetylcholinesterase-Inhibitor eines der wenigen bisher zugelassenen Alzheimer-Medikamente dar. Für Galanthamin ist aber kürzlich auch eine allosterisch potenzierende Wirkung (APL) auf den nAChR entdeckt worden, ein Mechanismus, der einen neuen therapeutische Ansatz zur AD-Bekämpfung auf der Linie der cholinergen Hypothese ermöglicht. Ziel unserer Arbeiten ist die Bereitstellung von Galanthamin-Derivaten mit hoher Substratspezifität für eine APL-Wirkung am nAChR. Durch eine iterative Optimierung der Galanthamin-Struktur in alternierenden Sequenzen aus Molecular Modeling Untersuchungen, chemischen Synthesen und Wirksamkeitsanalysen soll eine Veränderung des Galanthamins in Richtung auf eine spezifische Verstärkung der APL-Wirkung erreicht werden.

Ecological aspects of environmental contamination by military explosives

Ökologische Aspekte der Rüstungsaltslasten

Leitung / Koordination:

Prof. Dr. Gregor Fels

Kooperierende Wissenschaftler:

Dr. Detlef Bahnemann, Dr. Ralf Dillert
(Institut für Solarenergieforschung GmbH (ISFH), Hannover, Deutschland)

Kooperationen mit wissenschaftlichen Institutionen

a) in der Bundesrepublik:

Institut für Solarenergieforschung GmbH (ISFH), Hannover

Laufzeit:

seit 1/1995

Trinitrotoluol (TNT) ist nach wie vor der dominierende militärische Sprengstoff, durch dessen massiven Einsatz - vor allem in den beiden Weltkriegen - es zur Verunreinigung von Böden und Gewässern gekommen ist. Die Lokalisierung, Analyse und Dekontamination dieser Rüstungsaltslast stellen heute weltweit eine chemische und technologische Herausforderung dar. Wir synthetisieren nachgewiesene und potentielle Abbauprodukte von Nitroaromaten, um sie als Referenzverbindungen für die Beurteilung solcher Kontaminationen sowie auch für die Beurteilung biologischer und chemischer Abbauprodukte bereitzustellen. Gleichzeitig bearbeiten wir Aspekte des photokatalytischen Abbaus von Nitroaromaten, wobei wir u.a. radioaktiv markiertes Material (z.B. C-14 -TNT) verwenden, um die Mineralisierung zu bilanzieren.

Visualization of organic molecules and reactions**Visualisierung organischer Moleküle und Reaktionen**

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Gregor Fels
 Weitere Ansprechpartner: Sabine Volbracht
 Kooperierende Wissenschaftler: Prof. Dr. Gitta Domik (FB 17 - Mathematik und Informatik, Universität-Gesamthochschule Paderborn, Deutschland);
 Dr. Rene Deplanque (Fachinformationszentrum Chemie (FIZ Chemie), Berlin)

Kooperationen mit wissenschaftlichen Institutionen a) in der Bundesrepublik:

Fachbereich Mathematik und Informatik der Universität-Gesamthochschule Paderborn
 FIZ Chemie, Berlin

Förderinstitution/en a) in der Bundesrepublik:
 Laufzeit:

FIZ Chemie, Berlin
 seit 5/1995

Computerverfahren haben sich in den letzten Jahren als hervorragendes Hilfsmittel bei der theoretischen Untersuchung chemischer Prozesse bewährt. In einem interdisziplinären Ansatz wollen wir gemeinsam mit Informatikern Tools entwickeln, die dazu beitragen, den Weg weg von der Flachformelchemie hin zur 3D-Darstellung zu erleichtern und die zu einem besseren Verständnis organisch chemischer Moleküle und Reaktionen führen sollen. Hierzu werden sowohl käufliche Softwareprodukte eingesetzt (z.B. Biosym/MSI, Spartan, HyperChem u.a.) sowie eigene Programm-entwicklungen erarbeitet (z.B. auf der Basis von Molecular Inventor, IDL u.a.).

**Ausgewählte Publikationen****Artikel:**

- Fels, G.: Tolperisone: Evaluation of the Lidocaine-Like Activity by Molecular Modeling. *Arch. Pharm. Pharm. Med. Chem.*, **1996**, 329, 171-178.
- Volbracht, S., Shahrabaki, K., Domik, G. and Fels, G.: Perspective Viewing, Anaglyph Stereo or Shutter Glass Stereo? *IEEE Visual Languages*, Sept. **1996**.
- Volbracht, S., Domik, G., Shahrabaki, K. and Fels, G.: An Experimental Comparison of 3D Display Modes. *IEEE Visualization 96*, Oct. 30-31 **1996**, Late Braking Hot Topic Papers, pp. 8-11.
- Dillard, R., Nahen, M., Fels, G. and Bahnemann, D.: Photocatalytic Treatment of TNT-polluted Water. In Vogelpohl, A. (Ed.) *Oxidation Technologies for Water and Wastewater Treatment: International Conference, Goslar, 1996*, CUTEC-Schriftenreihe Nr. 23, Papierflieger, Clausthal-Zellerfeld, **1996**.
- Nahen, M. Dillard, R., Bahnemann, D. and Fels, G.: Photocatalytic Degradation of TNT: Reductive and oxidative pathways. *J. Photochem. Photobiol.*

Organische Chemie

Warburger Straße 100, 33098 Paderborn,
J 4.205, Tel. 05251/60-2173, Fax 05251/60-3245,
URL <http://www.uni-paderborn.de/extern/fb/13/fachgeb/oc/risch.html>

Leiter

Prof. Dr. Nikolaus Risch, Tel. 05251/60-2176, Fax 05251/60-3245 oder -3919,
E-Mail nr@chemie.uni-paderborn.de

Wissenschaftlich Mitarbeitende

Dr. T. Hohberg (1/1993 bis 6/1995); Frau Dr. U. Mackenbrock (1/1993 bis 4/1993);
Dr. R. Keuper (11/1993 bis 10/1996); Frau Dr. U. Hesse (10/1993 bis 9/1996);
Dr. M. Arend (11/1993 bis 12/1996); Dipl.-Chem. D. Mölm (1/1994 bis 12/1996);
Dipl.-Chem. R. Gauler (10/1994 bis 12/1996);
Frau Dipl.-Chem. C. Wittland (10/1994 bis 12/1996);
Frau Dipl.-Chem. B. Merla (10/1994 bis 12/1996);
Dipl.-Chem. J. Grumbach (4/1995 bis 12/1996); Dr. J. Kiene (8/1995 bis 9/1996);
Frau Dr. S. Dohmeier-Fischer (11/1996 bis 12/1996)

Promotionen

Dr. Thomas Hohberg, 19.5.1994, „*Neue präparative Fragmentierungsreaktionen. Planung, Selektivität und Anwendungen*“;

Dr. Ralf Keuper, 28.3.1996, „*IMINIUMSALZE. Schlüsselbausteine in neuartigen Dominoreaktionen zum Aufbau polycyclischer Stickstoffheterocyclen*“;

Frau Dr. Ulrike Hesse, 28.3.1996, „*Photodynamische Therapie mit natürlichen Tetrapyrrolderivaten: Präparative und analytische Untersuchungen an HPD und ausgewählten Modellsensibilisatoren*“;

Dr. Michael Arend, 13.8.1996, „*Regio- und stereoselektive Synthese von Mannich-Basen durch Addition von Enaminen und Iminen an Iminiumsalze*“

Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

Präparative Organische Chemie
Stereochemie
Naturstoffchemie
Methodenentwicklung
Analytik

Arbeitsgebiete im einzelnen:

- Entwicklung moderner Anwendungen der Mannich-Reaktion
- Regio-, diastereo- und enantioselektive Mannich-Reaktionen
- Stereokontrollierte Synthese von 1,3-Aminoalkoholen und 1,3-Diaminen
- Ternäre Iminiumsalze als Synthesebausteine
- Die silyloge Mannich-Reaktion
- Tandem-Reaktionen zur effizienten Synthese von Heterocyclen
- Darstellung und Chemie substituierter 1-Azaadamantane
- Neuartige Fragmentierungsreaktionen
- Leistungsfähige Synthesen kondensierter Pyridine, Chinoliniumsalze etc.
- (Protonenschwämme, Toranden, Bausteine für die Supramolekulare Chemie)
- Selektivität bei Polymersynthesen
- Konfigurationsermittlung von Naturstoffen
- Synthese und Strukturermittlung di- und oligomerer Tetrapyrrolfarbstoffe (Porphyrine) Stichwort: Photodynamische Therapie
- NMR-Spektroskopie

Patente

Thomas Müller, Eberhard Ammermann, Gisela Lorenz, Volker Harries, Nikolaus Risch und Ulrich Westerwelle: Verwendung von substituierten Dipyridin-Derivaten zur Bekämpfung von Schädlingen. (Patentanmeldung von 11.12.1993), BASF AG/93120038.0

Weitere Angaben

Wissenschaftliche Kooperationen mit Firmen (Anwendungen):

BASF AG, Ludwigshafen (Wirkstoffe, Heterocyclen);
 Fa. ORGA Kartensysteme GmbH, Paderborn;
 Fa. JOWAT, Detmold (Klebstoffe);
 Fa. SEELAB, Heide (Photodynamische Therapie);
 Fa. CibaVision, Aschaffenburg/Großostheim (Monomere, Polymere);
 Fa. INTERORGANA, Köln (Polymere);
 Fa. Dewert (Bielefeld)

Gutachtertätigkeiten

Gutachtertätigkeit bei verschiedenen Forschungsförderern (national und international) und als Referee für Zeitschriften wie

- Angewandte Chemie
- Journal Organic Chemistry
- Synthesis
- Chemical Reviews
- Chemistry



Mitgliedschaften

Mitglied der GDCh;
 Mitglied der Fachgruppe Magnetische Resonanz der GDCh;
 Mitglied der Liebig-Vereinigung für Organische Chemie;
 Mitglied im Fachbeirat des Allgemeinen deutschen Hochschulsportverbandes adh

Leistungsangebot für die Praxis

in den oben genannten Arbeitsgebieten:

- Gutachten und Untersuchungen
- Forschungs- und Entwicklungsarbeiten
- Beratung
- Diplom-/Doktorarbeiten in Kooperation mit Wirtschaftspartnern

Ausstattung / Geräte / Methoden

Organisch-präparative Geräteausstattung;
 Gaschromatographie;
 IR-Spektroskopie;
 NMR-Spektroskopie

Forschungsprojekte

Elektrodialytische Regeneration von Chromsäureelektrolyten

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Nikolaus Risch
 Kooperierende Wissenschaftler: Dr. Thomas Hohberg, Universität Paderborn

Kooperation mit

Einrichtungen der Wirtschaft

a) in der Bundesrepublik:

Fa. Jatzke Hartchrom (Bielefeld)

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik:

Deutsche Bundesstiftung Umwelt

Laufzeit:

1.4.1993 - 31.3.1995

Ziel des Projekts war die Entwicklung eines Verfahrens zur elektrodialytischen Regeneration von Chromsäureelektrolyten.

Die bei der Verchromung, der Chromatierung von Zink und auch während der Beize bzw. Reinigung von Metalloberflächen im Chromsäurebad anfallenden Verunreinigungen (hervorgerufen durch aus dem Werkstoff herausgelöste Metallkationen) können mittels der von uns entwickelten Techniken entfernt werden. Mit dem von uns im Labormaßstab erarbeiteten und auch in einer Pilotanlage erfolgreich getesteten Verfahren ist somit ein Weg zu einer nahezu abfallfreien Regeneration verschiedener Chromsäurelösungen gefunden worden.

Iminium-Salze: Mannich-Reagenzien und Bausteine in der Heterocyclenchemie

Leitung / Koordination:

Prof. Dr. Nikolaus Risch

Kooperierende Wissenschaftler:

Dr. Ralf Keuper, Universität Paderborn

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik:

DFG

Laufzeit:

Mai 1994 - April 1996

Einsatzmöglichkeiten (insbesondere) ternärer Iminiumsalze zum Aufbau von Heterocyclen. Dominosequenzen zu Chinolinium-Salzen, Di- und Terpyridinsystemen und deren Verwendung in der Supramolekularen Chemie.

Modern Mannich Reactions Moderne Mannich-Reaktionen

Leitung / Koordination:

Prof. Dr. Nikolaus Risch

Kooperierende Wissenschaftler:

Dr. Michael Arend, Universität Paderborn

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik:

DFG

Laufzeit:

7/1996 - 6/1998

α -Aminoketone (Mannich-Basen) und ihre Derivate sind attraktive, vielfältig einsetzbare Verbindungen, die z.B. Anwendung in der Medizin, im Pflanzenschutz oder als Synthesebausteine finden. Das Ziel unseres Projektes ist die Entwicklung moderner Verfahren zur Aminoalkylierung, die nicht die gravierenden Nachteile der klassischen Mannich-Reaktion aufweisen und zudem eine wesentlich größere Anwendungsbreite besitzen. Hierzu sollen einfache und schonende Methoden zur hochregio- und stereoselektiven Synthese von α -Aminoketonen geschaffen werden. Zu diesem Zweck planen wir Aminoalkylierungen von Iminen und Enaminen mit chiralen Iminiumsalzen bzw. Umsetzungen chiraler Imine und Enamine mit vorgeformten oder quantitativ in situ erzeugten Iminiumsalzen. Die von uns entwickelten Methoden sollen zur Wirk- und Naturstoffsynthese eingesetzt werden. Geplant ist z.B. die enantioselektive Darstellung natürlicher und unnatürlicher 2-Amino-4-hydroxybuttersäuren zur Synthese von Nikkomycinen - ein wichtiger Schritt zum Verständnis der Struktur-Wirkungs-Beziehungen von Peptid-Nukleosid-Antibiotika.

Photodynamic Therapy Photodynamische Therapie

Leitung / Koordination:

Prof. Dr. Nikolaus Risch

Kooperierende Wissenschaftler:

Dr. Ulrike Hesse, Dipl.-Chem. Rainer Gauler

Kooperation mit

Einrichtungen der Wirtschaft

a) in der Bundesrepublik: Fa. Seelab (Heide)

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik: DFG

Laufzeit: 6/1995 - 5/1997

Untersuchungen zur „Photodynamischen Therapie (PDT)“ präsentieren sich weltweit als ein hochaktuelles Arbeitsgebiet. Die Hoffnung auf eine prinzipiell verbesserte Therapie von Tumorerkrankungen bildet den Ausgangspunkt. Das Hematoporphyrinderivate (HPD) ist die wirksame Komponente in der Photodynamischen Therapie und liegt als außerordentlich komplexes Gemisch mono- und oligomerer Tetrapyrrole vor. Zur Aufklärung der intensiv und kontrovers diskutierten Strukturproblematik haben wir durch Kombination von a) chemischen Abbaumethoden, b) organisch-präparativer Synthesechemie und c) chromatographischen Untersuchungen wichtige neue Erkenntnisse gewonnen. Erste Versuche zur Darstellung geeigneter Modellverbindungen unter Verwendung natürlicher Porphyrine waren erfolgreich. Ein weiteres Ziel ist es, den Einsatzbereich der PDT durch Verwendung längerwellig absorbierender Sensibilisatoren entscheidend zu erweitern.

Pulverlacke

Leitung / Koordination:

Prof. Dr. Arthur Goldschmidt

Kooperierende Wissenschaftler:

Prof. Dr. Nikolaus Risch, Dipl.-Ing. Rene Matern,
Dr. Sylvia Dohmeier-Fischer

Kooperation mit

Einrichtungen der Wirtschaft

a) in der Bundesrepublik: DFO

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik: BMBF

Laufzeit: ab 11/1996

Ausgewählte Publikationen

Monographien:

1. in
Houben-Weyl, Methods of Organic Chemistry,
Vol. E21b, Stereoselective Synthesis
(Eds.: G. Helmchen, R.W. Hoffmann, J. Mulzer, E. Schaumann),
Thieme, Stuttgart, 1995, 1833-1893
- a) Addition of -Type Organometallic Compounds to Imino Groups
Nikolaus Risch und Michael Arend
Stereoselective Synthesis of Organic Compounds:
C-C Bond Formation by Addition to C=N-Groups,
in;
- b) Addition of Allylic and Allenic Organometallic Compounds to Imino Groups
Nikolaus Risch und Michael Arend
Ibid., 1894-1907;
- c) Addition of Enolates and Related Compounds to Imino Groups
Nikolaus Risch und Michael Arend
Ibid., 1908-1929.
2. MOLECULES - Bonds and Reactions
Nikolaus Risch
Chapt. 2 in Bergmann-Schaefer, Lehrbuch der Experimentalphysik,
Bd 7 „Constituents of Matter: Atoms, Molecules, Nuclei and Particles“ ,
Hrsg. Wilhelm Raith, Verlag Walter de Gruyter, 1996.

Artikel:

- Nikolaus Risch, Bernd Meyer-Roscher und Maria Langhals: *3,5-Di-tert-butylstyrole: Synthese sterisch anspruchsvoller Polymerbausteine*. Z. Naturforsch. **49b**, 141-144 (1994).
- Nikolaus Risch und Michael Arend: *Diastereomerenreine Mannich-Basen durch Addition von Enaminen an ternäre Iminiumsalze*. Angew. Chem. **1994**, 106, 2531-2533; Angew. Chem. Int. Ed. Engl. **1994**, 33, 2422-2423.
- Ulrich Westerwelle, Ralf Keuper und Nikolaus Risch: *Novel Iminium Compounds from N-Alkylanilinium Perchlorates and Aldehydes and their Unexpected (Domino Type) Reactions*. J. Org. Chem. **1995**, 60, 2263-2266.
- Detlef Mölm und Nikolaus Risch: *Resolution of Racemic 1-Azaadamantane Derivatives via Pig Liver Esterase Catalysis*. Liebigs Ann. Chem. **1995**, 1901-1902.
- Michael Arend und Nikolaus Risch: *Regio- und diastereoselektive Synthese von (-Aminoketonen durch Addition von Iminen an Iminiumsalze*. Angew. Chem. **1995**, 107, 2861-2862; Angew. Chem. Int. Ed. Engl. **1995**, 34, 2639-2640.
- Claudia Wittland, Michael Arend und Nikolaus Risch: *Domino Reactions via Azomethynylides, I: Synthesis of 2,4,5-Triphenyl Substituted Oxazolidine and 2,5-Diphenyl Substituted Pyrrolidine Derivatives*. Synthesis **1996**, 367-371.
- Ralf Keuper, Nikolaus Risch, Ulrich Flörke und Hans-Jürgen Haupt: *A Versatile Domino Synthesis to Novel S- and U-shaped Terpyridines. Synthesis, Properties and Crystal Structure*, Liebigs Ann. Chem. **1996**, 705-715.
- Hans-Joachim Grumbach, Michael Arend und Nikolaus Risch: *Aminoalkylation of Elektron-rich Aromatic Compounds Using Preformed Iminium Salts Derived from Aldehydes other than Formaldehyde*. Synthesis **1996**, 883-887.
- Nikolaus Risch, Ulrike Hesse, Andrea Josephs, Rainer Gauler: *Oxidative Degradation Studies: Direct Analysis and Determination of Ether- and Ester-Linkages in Porphyrindimers and -oligomers of Hematoporphyrin Derivative (HPD)*. Liebigs Ann. Chem. **1996**, 1871-1874.
- Rainer Gauler und Nikolaus Risch: *Derivates of Natural Tetrapyrroles for the Photodynamic Therapy. Synthesis of Carbon-carbon Linked Porphyrinoligomers by Utilization of Heck-type Coupling of Natural Tetrapyrroles*. Tetrahedron Lett. **1996**, 223-224.

Organische Chemie

Warburger Straße 100, 33098 Paderborn,
J4.208, Tel. 05251/60-2173,
E-Mail kk@chemie.uni-paderborn.de,
URL <http://www.uni-paderborn.de/extern/fb/13/fachgeb/oc/krohn.html>

Leiter

Prof. Dr. Karsten Krohn, Tel. 05251/60-2172, -2173, Fax 05251/60-3245,
E-Mail kk@chemie.uni-paderborn.de

Kontaktperson(en)

AOR Dr. Ulrich Wolf (Tel. 05251/60-2128)

Wissenschaftlich Mitarbeitende

Dr. Horst Adam (von Januar 1993 - Dezember 1994);
Dr. Frank Ballwanz (von Juli 1991 - März 1994);
Christiane Bäuerlein (von September 1995 - Oktober 1997);
Sven Bernhard (von Juni 1996 - Januar 1998);
Dr. Norbert Böker (von Oktober 1993 - August 1996);
Carsten Biele (von Juni 1994 - Juni 1997);
Karsten Beckmann (von Februar 1995 - April 1997);
Dr. Kai Brüggmann (Januar 1993 - Dezember 1994);
Dr. Guido Börner (Januar 1993 - Dezember 1994);
Dr. Detlef Döring (von Januar 1993 - April 1995);
Karl-Heinz Drogies (von März 1995 - Februar 1997);
Dr. Wolfgang Dröge (Juli 1991 - März 1994);
Christian Freund (Juni 1996 - Mai 1998);
Uwe Höfker (April 1994 - Dezember 1996);
Markus John (Juni 1996 - Mai 1998);
Jochen Küpke (Juni 1996 - Mai 1998);
Oliver Kamp (Juni 1996 - November 1998);
Dr. Karamali Khanbabaee (April 1993 - März 1996);
Dr. Christine Kliche-Spory (Juli 1991 - Juli 1996);
Dr. Jürgen Kiene (Januar 1995 - Juni 1995);
Dr. Birgit Knauer (Oktober 1993 - Dezember 1995);
Dr. Andreas Michel (Januar 1993 - Dezember 1995);
Jörg Micheel (Mai 1995 - Juli 1997);
Gisbert Schäfer (November 1993 - August 1996);
Ina Terstiege (Oktober 1993 - Oktober 1996);
Dr. Michael Top (Oktober 1991 - April 1994);
Dr. Ingeborg Vinke (Oktober 1994 - Juni 1996);
Frank Werner (Januar 1995 - August 1997);
Jörg Wunschhofer (Juni 1993 - Dezember 1996);
Gregor Zimmermann (April 1994 - März 1997)



Dauergäste

Dr. V. H. Deshpande (National Chemical Laboratory, Pune - 411 008, Indien,
Oktober - Dezember 1994);
Dr. Priyono Suwsarso (University of Indonesia, Depok, Indonesien,
September 1995 - November 1995);
Dr. Paolo Lupattelli (Univ. La Sapienza, Roma, Italien, Oktober 1994 - Juni 1995)

Promotionen

- Horst Adam, 20.4.1995, *Übergangsmetall-katalysierte Dehydrogenierung von nichtaktivierten und sekundären Alkoholen zu Carbonylverbindungen*;
- Norbert, Böker, 16.4.1996, *Biomimetische Totalsynthesen von Angucyclinonen des Tetrangomycin-Typs*;
- Frank Ballwanz, 8.6.1995, *Synthese eines Daunomycinon-Rabelomycin Hybrids*;
- Kai Brüggmann, 8.6.1994, *Neue Übergangsmetall-katalysierte Oxidationsreaktionen an -substituierten Aromaten*;
- Guido Börner, 7.4.1994, *Synthese von enantiomerenreinen polyhydroxylierten Carbocyclen aus Zuckern durch intramolekulare nucleophile Substitutionsreaktion von 1, 3-Dithianen*;
- Peter D. Dapprich, 10.9.1996, *Untersuchungen zur morphologischen und molekularbiologischen Charakterisierung der Gräserendophyten *Acremonium lolii* und *A uncinatum* und deren Auswirkungen auf ihren Wirt*;
- Detlev Döring, 20.6.1996, *Untersuchungen zum Aufbau funktionalisierter Benz[a]anthrachinone*;
- Wolfgang Dröge, 8.6.1995, *Synthese des Rubiginons B₂ durch Cyclisierung von Anthrachinon-Vorstufen*;
- Jürgen Kiene, 10.3.1995, *Untersuchungen zur Synthese des C-glycosidischen Teils von Nogalamycin aus D-Glucose*;
- Andreas Michel, 13.5.1994, *Isolierung Strukturaufklärung und Syntheseversuche biologisch aktiver Sekundärmetabolite aus Coelo- und Hyphomyceten*;
- Birgit Knauer, 12.5.1995, *Untersuchungen einer neuen Meerwein-Ponndorf-Verley-Variante zur Dia- und Enantioselektivität*;
- Ina Gedrath, geb. Kortmann, 29.3.1996, *Enantiomerenreine β -Ketoester - Biokatalytische Synthese und präparative Anwendungen*;
- Karamali Khanbabaee, 24.9.1993, *Totalsynthese der natürlich vorkommenden Chinone Hallachrom und (\pm)-Rabelomycin*;
- Michael Top, 27.1.1995, *Synthese von Desoxyaklanonsäure und ²H- und ¹³C-markierten Derivaten*;
- Vinke, Ingeborg, 7.11.1996, *Übergangsmetall-katalysierte Dehydrierungen und Halogenierungen von Alkoholen und Enolaten mit Hydroperoxiden*

Habilitationen

Dr. Dietmar Kuck, 12. Juli 1995, *Centropolyindane, Entwicklung einer neuen Klasse von dreidimensional kondensierten organischen Polycyclen*

Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

Organische Synthesechemie, Naturstoff-Forschung

Arbeitsgebiete im einzelnen:

1. Synthese von Chinon-Antibiotika (Anthracycline, Angucycline);
2. Entwicklung neuer Synthesemethoden (Übergangsmetall-katalysierte Oxidationen und Reduktionen);
3. Zuckerchemie (Synthese von O- und C-Glycosiden, Konvertierung von Zuckern zu Carbocyclen);
4. Naturstoffisolierung und Strukturaufklärung (Isolierung und Strukturaufklärung von biologisch aktiven Wirkstoffen aus phytopatogenen und endophytischen Pilzen)

Gastaufenthalte von Mitgliedern dieses Fachgebiets

Prof. Dr. Karsten Krohn, Lab. de Chimie Organique 3, Université de Nancy I, PB 239, F-54506 Vandoeuvre-lès-Nancy Cédex, Frankreich, Frankreich, Mai 1996

Eigene Tagungen

Second International Conference on Harmful and Beneficial Microorganisms in Grassland, Pastures and Turf, Paderborn 22.-24.11.1995;
DFG-Schwerpunkttagung: Peroxidchemie- Mechanistische und präparative Aspekte des Sauerstofftransfers, Paderborn, 17.-19.11.1996

Gutachtertätigkeiten

Gutachter im Referee-System von etwa einem Dutzend Zeitschriften aus dem Bereich der Organischen Synthesechemie

Mitgliedschaften

Mitgliedschaft in der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) und der American Chemical Society (ACS)

Weitere Angaben

Vertrauensdozent des Fonds der Chemischen Industrie für den Ortsverband Paderborn der GDCh

**Forschungsprojekte****Übergangsmetallkatalysierte Oxidationsreaktionen**

Leitung / Koordination:	Professor Dr. Karsten Krohn
Förderinstitution/en	
a) in der Bundesrepublik:	Volkswagen-Stiftung, 3000 Hannover 81
Laufzeit:	1991- März 1994

Synthese von Rhein-analogen Anthrachinonen und Anthronen mit komplexierungsfähigen Seitenketten

Leitung / Koordination:	Professor Dr. Karsten Krohn
Weitere Ansprechpartner:	Dipl.-Chem. Frank Werner
Kooperierende Wissenschaftler:	Dr. W. Thorwart, Kalle AG, Wiesbaden, Deutschland
Kooperation mit	
Einrichtungen der Wirtschaft	
a) in der Bundesrepublik:	Hoechst AG, Werk Kalle-Albert, Rheingastr. 190, D-65174 Wiesbaden
Förderinstitution/en	
a) in der Bundesrepublik:	Hoechst AG
Laufzeit:	September 1994 bis 31.8.1997
Synthese und biologische Evaluation von Rhein-analogen Anthrachinonen zum Einsatz als Medikament in der Arthritis	

Synthese von Angucyclinen über Diels-Alder-, Michael- und biomimetische Reaktionen

Leitung / Koordination:	Professor Dr. Karsten Krohn
Weitere Ansprechpartner:	Dipl.-Chem. C. Freund; Dipl.-Chem. S. Bernhardt, Dr. N. Böker

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik: Deutsche Forschungsgemeinschaft DFG,
Bonn - Bad Godesberg

Die Totalsynthese der Aglycone und auch der glycosidischen Vertreter aus der Klasse der Angucyclin-Antibiotika wird angestrebt. Nach erfolgter Synthese sollen die biologische Eigenschaften geprüft werden.

Molekulare Wechselwirkungen zwischen Targets und Naturstoffen als Werkzeug zur Identifizierung neuer Wirkstoffe und Wirkstoffmodelle für Pflanzenschutz und Pharma

Leitung / Koordination: Professor Dr. Karsten Krohn
Weitere Ansprechpartner: Dipl.-Chem. C. Biele, K. Beckmann,
K.-H. Drogies, M. John

Kooperation mit

Einrichtungen der Wirtschaft

a) in der Bundesrepublik: BASF AG, 67056 Ludwigshafen

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik: BMBF

Laufzeit: 1994 - 1997

Die Isolierung, Charakterisierung und Strukturaufklärung neuer Naturstoffe als Leitstrukturen für den Pflanzenschutz wird angestrebt. Es sollen ungewöhnliche endophytische Pilze aus Pflanzen mit ausgeprägtem Sekundärstoffwechsel aus folgenden Familien getestet werden: Schmetterlingsblütler (Fabaceae), Doldengewächse (Apiaceae), Mohngewächse (Papaveraceae) und Nachtschattengewächse (Solanaceae). Die Teilschritte zur Isolierung und Identifizierung der Naturstoffe greifen ineinander und lassen sich in Verfahrensschritte gliedern: 1. Isolierung, 2. Trennung und Reinigung, 3. Charakterisierung und Identifizierung, 4. Reinisolierung.

Übergangsmetall-katalysierte Oxidation von Phenolen, Enolaten und Alkoholen mit *tert*-Butylhydroperoxid (TBHP)

Leitung / Koordination: Professor Dr. Karsten Krohn
Weitere Ansprechpartner: Dipl.-Chem. J. Küpke

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)
Bonn - Bad Godesberg

Laufzeit: 1.12.1993 - 1997

Entwicklung neuer katalytischer Oxidationsverfahren für Alkohole und Phenole in der präparativen Organischen Chemie mit Sauerstoffquellen wie *tert*-Butylhydroperoxid. Vorangegangene Untersuchungen mit Molybdän-, Titan-, Vanadium- und Zirkonium-Katalysatoren haben gezeigt, daß Phenole stereospezifisch zu Ortho-Chinonen oxigeniert werden. Als Nebenreaktion wurde eine Kupplung zu Biarylen beobachtet, die jetzt auch im Hinblick auf die Generierung axialer Chiralität untersucht werden soll. Es soll die für Benzylalkohole gezeigte glatte Dehydrierung zu Benzaldehyden auf nicht aktivierte Alkohole ausgeweitet werden. Dazu bedarf es der Synthese hochaktiver und weitgehend hydrolysestabiler neuer Katalysatoren, wobei Komplexe des Zirkoniums und Hafniums im Mittelpunkt stehen sollen.

Calcitriol

Leitung / Koordination: Professor Dr. Karsten Krohn
Kooperierende Wissenschaftler: Dr. G. Neef, Scheering AG, Berlin

Kooperation mit

Einrichtungen der Wirtschaft

a) in der Bundesrepublik: Schering Aktiengesellschaft, 13342 Berlin

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik:

Schering Aktiengesellschaft, 13342 Berlin

Laufzeit:

April 1995 - März 1996

Synthese eines für den konvergenten Zugang zu Calcitriolabkömmlingen geeigneten A-Ring-Bausteins aus D(+)-Mannose auf der Grundlage eines Verfahrens, das der Auftragnehmer konzipiert hat.

Ausgewählte Publikationen

Monographien:

Krohn, K.; Paul, V. H.; Thomas, J. (Hrsg.): *International Conference on Harmful and Beneficial Microorganisms in Grassland, Pastures and Turf*. IOBC/WPRS Bulletin 1994

Krohn, K.; Paul, V. H. (Hrsg.): *The Second International Conference on Harmful and Beneficial Microorganisms in Grassland, Pastures and Turf*. IOBC/WPRS Bulletin 1996

Krohn, K.; Wolf, U.: *Kurze Einführung in die Chemie der Heterocyclen*. Stuttgart: B. G. Teubner 1994

Artikel:

Krohn, K.; Roemer, E.; Top, M.; Wagner, C: *Total Synthesis of Aklanonic Acid and Microbial Conversion of 4-Deoxyaklanonic Acid to Anthracyclines*. *Angew. Chem.*; 1993; pp. 1220-1221

Krohn*, K.; Khanbabaee, K.; Flörke, U.; Jones, P. G.; Chrapkowski, A: *Synthetic Angucyclines, 3. First Total Synthesis of Rabelomycin*. *Liebigs Ann. Chem.*; 1994; pp. 471-477

Knauer, B.; Krohn*, K: *A Reinvestigation of the Meerwein-Ponndorf-Verley Reduction: Highly Efficient Variation Using Zirconium Catalysts*. *Liebigs Ann. Chem.*; 1995; pp. 677-683

Krohn, K.; Börner, G: *From Sugars to Carbocycles 2. Three- to Seven-Membered Rings from Mannose by Addition of 1,3-Dithiane Followed by Intramolecular Displacement Reaction*. *J. Org. Chem.*; 1994; pp. 6063-6068

Krohn, K.; Khanbabaee, K: *Total Synthesis of Angucyclines, 4. Synthesis of rac-Tetrangomycin*. *Liebigs Ann. Chem.*; 1994; pp. 1109-1112

Krohn, K.; Michel, A.; Flörke, U.; Aust, H.-J.; Draeger, S.; Schulz, B: *Biologically Active Metabolites from Fungi, 4. Palmarumycins CP₁ to CP₄ from Coniothyrium palmarum: Isolation, Structure Elucidation and Biological Activity*. *Liebigs Ann. Chem.*; 1994; pp. 1093-1097

Krohn, K.; Gringard, S.; Börner, G: *From Sugars to Carbocycles. 4. Exclusive Seven-membered Ring formation from D-Glucose*. *Tetrahedron: Asymmetry*; 1994; pp. 2485-2492

Krohn, K.; Vinke, I.; Adam, H: *Transition-Metal Catalysed Oxidations, 7. Zirconium-Catalyzed Oxidation of Primary and Secondary Alcohols with Hydroperoxides*. *J. Org. Chem.*; 1996; pp. 1467-1472

Krohn, K.; Bernhard, S: *Transition Metal-Catalysed Oxidation. 8. Allylsubstituted 1,2-Naphthoquinones via Tandem ortho Phenoloxygenation and Oxycope Rearrangement*. *Synthesis*; 1996; pp. 699-701

Krohn, K.; Knauer, B.; K pke, J.; Seebach, D.; Beck, A. K.; Hayakawa, M: *Zirconium Alkoxide-catalysed Oppenauer Oxidation using Chloral as the Hydride Acceptor*. *Synthesis*; 1996; pp. 1341-1344



Organische Chemietechnik

Warburger Straße 100, 33098 Paderborn,
J 4.205, Tel. 05251/60-2173

Leiter

Dr. Karamali Khanbabaee, Tel. 05251/ 60-2151, -2175

Kontaktperson(en)

Dr. Karamali Khanbabaee (Tel. 05251/60-2151)

Wissenschaftlich Mitarbeitende

Dipl.-Chem. Kerstin Lötzerich (ab Februar 1996)

Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

Totalsynthese von Naturstoffen, die pharmakologisch wirksam sind

Arbeitsgebiete im einzelnen:

Die in der Natur in winzigen Mengen vorkommenden, pharmakologisch interessanten Naturstoffe werden totalsynthetisiert, um die Substanzen in größerer Menge verfügbar zu machen

Leistungsangebot für die Praxis

Forschungsarbeiten werden im Rahmen der Arbeitsgebiete durchgeführt

Forschungsprojekte

Untersuchung zur Totalsynthese von Lagerstannin

Leitung / Koordination:

Dr. Karamali Khanbabaee

Weitere Ansprechpartner:

Dipl.-Chem. Kerstin Lötzerich

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik:

DFG, Forschungskommission der
Universität-GH Paderborn

Laufzeit:

ab Februar 1996

Die in der Natur in winzigen Mengen vorkommenden, pharmakologisch interessanten Naturstoffe werden totalsynthetisiert, um die Substanzen in größerer Menge verfügbar zu machen.

Organische Chemie

Leiter

Dr. Bernhard Westermann, Tel. 05251/60-2178, -2185, Fax 05251/60-3245,
E-Mail bw@chemie.uni-paderborn.de

Kontaktperson(en)

Dipl.-Chem. Silke Dubberke (Tel. 05251/60-2185, E-Mail sd@chemie.uni-paderborn);
Dipl.-Chem. Nicole Diedrichs
(Tel. 05251/60-2185, E-Mail nd@chemie.uni-paderborn.de);
Dipl.-Chem. Birte Krebs (Tel. 05251/60-2168, E-Mail bk@chemie.uni-paderborn.de)

Wissenschaftlich Mitarbeitende

Dipl.-Chem. Nicole Diedrichs (seit November 1995);
Dr. rer. nat. Dipl.-Chem. Ina Gedrath (Feb. 1993 Feb. 1996);
Dipl.-Chem. Birte Krebs (seit März 1996); Dipl.-Chem. Silke Dubberke (seit März 1994)



Promotionen

Dr. rer. nat. Dipl.-Chem. Ina Gedrath, 29.3.1996, *Enantiomerenreine-Ketoester
Biokatalytische Synthese und präparative Anwendungen*

Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

Herstellung enantiomerenreiner Synthesebausteine mittels biokatalytischer Verfahren
und deren Einsatz in Synthesen zu Naturstoffen und biologisch aktiver Substanzen
Analytik und Bestimmung allergener Proteine

Arbeitsgebiete im einzelnen:

- Darstellungen enantiomerenreiner Produkte mit stereogenen, quaternären Zentren
durch Einsatz von Enzymen (PLE, Lipasen)
- Darstellungen nicht-proteinogener Aminosäuren, potentielle Bausteine für
Peptidmimetika
- Versuche zur Totalsynthese von Nagilactonen mit einer Diels-Alder-Reaktion als
Schlüsselschritt
- Synthese potentiell ferroelektrischer Flüssigkristalle

Eigene Tagungen

5. Nachwuchswissenschaftlertagung „Bioorganische Chemie“,
Universität-GH Paderborn, 16.-18. Sept. 1996

Gutachtertätigkeiten

Referee der *Angewandten Chemie*, *Synlett* und *Tetrahedron: Asymmetry*

Preise für Mitglieder dieses Fachgebiets

Preis der Fachschaften für herausragende Qualität in der Lehre, 1995;
Studienabschlußstipendium des Fonds der Chemischen Industrie für Dr. Ina Gedrath

Forschungsprojekte

Synthesis of optically pure β -ketoesters

Synthese enantiomerenreiner β -Ketoester

Leitung / Koordination: Dr. Bernhard Westermann
Weitere Ansprechpartner: Dr. Ina Gedrath, Dipl.-Chem. Silke Dubberke,
Dipl.-Chem. Nicole Diedrichs

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik: DFG, Fonds der Chemischen Industrie
Laufzeit: 10/1993 - 10/1996

Kinetische Racematspaltung von, α -disubstituierten β -Ketoestern mit Hilfe von Schweineleberesterase führt zu Bausteinen mit einem quaternären, stereogenen Zentrum. Diese können vielfältig in Naturstoffsynthesen eingesetzt werden, so zu den Giffroschalkaloiden Histronicotoxin und Gephyrotoxin. Andere Anwendungsbeispiele sind die Synthese der pharmakologisch wichtigen Nagilactone sowie nicht proteinogener Aminosäuren.

Synthesis of enantiomerically pure tertiary alcohols

Synthese enantiomerenreiner tertiärer Alkohole

Leitung / Koordination: Dr. Bernhard Westermann
Weitere Ansprechpartner: Dipl.-Chem. Birte Krebs
Laufzeit: ab 6/1996

Mittels Lipasen-katalysierter Racematspaltung können tertiäre Alkohole hergestellt werden, die vielfältige Anwendungen zu Synthesen homochiraler Produkte finden.

Ausgewählte Publikationen

Artikel:

- B. Westermann, H. Große Scharmann, I. Kortmann: *PLE-catalyzed Resolution of α -substituted β -Ketoesters, Application to the Synthesis of (+)-Nitramine and (-)-Isonitramine*. *Tetrahedron Asymmetry* 1993, 4, 2119-2122
- B. Westermann, I. Kortmann: *Preparation of optically active β -Ketoesters via PLE-catalyzed Resolution*. *Biocatalysis* 1994, 10, 289-294
- I. Kortmann, B. Westermann: *Synthesis of α -substituted Cyclobutane β -Keto Esters*. *Synthesis* 1995, 931-933
- B. Westermann, I. Gedrath: *Synthesis of completely protected enantiomerically pure α , β -disubstituted α -Amino Acids*. *Synlett* 1996, 665-666.

Physikalische Chemie

Warburger Straße 100, 33098 Paderborn,
J3.205, Tel. 05251/60-2157, Fax 05251/60-2582

Leiter

Prof. Dr. Peter Pollmann, Tel. 05251/60-2158, -2159, Fax 05251/60-2582,
E-Mail pp@chemie.uni-paderborn.de

Kontaktperson(en)

AOR Dr. Karl Hiltrop (Tel. 05251/60-2133, E-Mail KH@chemie.Uni-Paderborn.de)

Wissenschaftlich Mitarbeitende

AOR Dr. Karl Hiltrop; Dr. Jürgen Hollmann (von April 1991 bis Februar 1993);
Dr. Eberhard Voß (von August 1992 bis Dezember 1995);
Dipl.-Chem. Bernd Neumann (ab Dezember 1994)

Promotionen

Eberhard Voß, Juli 1995, *Prätransformations- und Phasenverhalten der flüssig-kristallinen Blauen Phasen bei erhöhten Umwandlungsdrücken und -temperaturen*



Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

Arbeitsgebiete

Das „Hochdrucklabor“ der Physikalischen Chemie befaßt sich mit dem Hochdruckverhalten von Flüssigkristallen, insbesondere im Zusammenhang mit kritischen Phänomenen. Ein Schwerpunkt bildet die Druckabhängigkeit von physikalischen Eigenschaften derartiger Mesophasen.

Einen weiteren Schwerpunkt bildet die UV-Visible-Spektroskopie unter hohen Drücken. Mit ihrer Hilfe wird u.a. das Aggregationsverhalten ionoider Farbstoffe erforscht, die in höherer Konzentration einen besonderen Typ lyotroper Flüssigkristalle bilden können, die sogenannten „Chromonics“.

Arbeitsgebiete im einzelnen:

- das Phasenverhalten von Flüssigkristallen bei hohen Drücken
- die Druckabhängigkeit optischer Eigenschaften von Flüssigkristallen
- Druck-Volumen-Temperatur-Verhalten von Flüssigkristallphasen
- das Aggregationsverhalten ionoider Cyaninfarbstoffe bei hohen Drücken

Gutachtertätigkeiten

Erstellung von Einzelgutachten über Forschungsanträge für die DFG;
Beratungstätigkeit für DFG-Schwerpunktprogramm;
Referee für Ber. Bunsenges. Phys. Chem.

Mitgliedschaften

Mitglied im Fachausschuß „Hochdruck-Verfahrenstechnik“ der Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen - Prozeß und Umwelttechnik - im VDI

Leistungsangebot für die Praxis

Gutachten, Beratung - zu Untersuchungen des Hochdruckverhaltens von physikalischen Eigenschaften

Forschungs- und Entwicklungsarbeiten - werden im Rahmen der Arbeitsgebiete durchgeführt

Diplom-/Doktorarbeiten - sind in Kooperation mit Forschungsinstituten und Industriebetrieben möglich

Ausstattung / Geräte / Methoden

- Cary 17 DH UV/VIS und Perkin-Elmer UV/VIS/NIR Lambda 19 Spektralphotometer für Hochdruckuntersuchungen mit Druckerzeugungseinrichtungen bis 400 MPa;
- Polarimeter nach Lippich-Landolt mit Druckerzeugungseinrichtungen bis 300 MPa zur Messung der Druck- und Temperaturabhängigkeit der optischen Aktivität

Forschungsprojekte

Measurement of pressure- and temperature dependence of the optical activity of highly chiral liquid crystals in the isotropic liquid pretransitional region of blue phases

Messung der Druck- und Temperaturabhängigkeit der optischen Aktivität von Flüssigkristallen hoher Chiralität im isotropflüssigen Prätransformationsbereich zur „Blauen Phase“

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Peter Pollmann
Kooperierende Wissenschaftler: Prof. Dr. G. M. Schneider,
Physikalische Chemie II, Ruhr-Universität,
Bochum, Deutschland;
Prof. Dr. P. J. Collings, Department of Physics
and Astronomy, Swarthmore College,
Swarthmore, Pennsylvania, U.S.A.;
Dr. E. Demikhov, Institute of Solid State Physics,
Russian Academy of Sciences, Chernogolovka,
Russia

Förderinstitution/en
a) in der Bundesrepublik: DFG
Laufzeit: 6/1989 - 2/1993

Im isotropflüssigen Zustandsbereich von chiralen organischen Substanzen, die flüssigkristalline Phasen ausbilden können, wird eine optische Aktivität gefunden, die weit über der molekularen Aktivität liegt. Die im Projekt durchgeführten Messungen der Druck- und Temperaturabhängigkeit der optischen Aktivität sowie die theoretische Beschreibung der Meßergebnisse leisteten einen Beitrag zur strukturellen Aufklärung dieses Prätransformationsphänomens.

Pressure- and temperature behaviour of physical properties of liquid crystalline blue phases

Druck- und Temperaturverhalten physikalischer Eigenschaften von flüssigkristallinen Blauen Phasen

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Peter Pollmann
Kooperierende Wissenschaftler: Prof. Dr. G.M. Schneider,
Physikalische Chemie II, Ruhr-Universität,
Bochum, Deutschland;
Prof. Dr. P.J. Collings, Department of Physics
and Astronomy, Swarthmore College,
Swarthmore, Pennsylvania, U.S.A.;
Dr. E. Demikhov, Institute of Solid State Physics,
Russian Academy of Sciences, Chernogolovka,
Russia

Förderinstitution/en
a) in der Bundesrepublik: DFG
Laufzeit: 1/1994 - 12/1995

Chirale organische Substanzen können in ihrem flüssigkristallinen Zustandsbereich bis zu drei verschiedene „Blaue Phasen“ ausbilden. Die im Projekt durchgeführten Messungen der Druck- und Temperaturabhängigkeit der optischen Aktivität derartiger Phasen leisteten einen Beitrag zum Einfluß der Chiralität auf diesen Polymorphismus.

Ausgewählte Publikationen

Artikel:

- Demikhov, E.; Hollmann, J.; Pollmann, P.: *Influence of pressure on pretransitional phenomena in the isotropic liquid of a chiral liquid crystal* Europhys. Lett. 21, 581-586 (1993)
- Hollmann, J.; Pollmann, P.; Collings, P. J.: *High pressure optical measurements on BP III and the isotropic phase of a highly chiral liquid crystal*. Liquid Crystals 15, 651-658 (1993)
- Voß, E.; Pollmann, P.; Hollmann, J.: *Druckabhängigkeit der optischen Aktivität in der isotropen Phase eines chiralen Flüssigkristalls*. Ber. Bunsenges. Phys. Chem., 97, 1205-1208 (1993)
- Neumann, B.; Pollmann, P.: *Aggregation of pseudoisocyanine chloride in aqueous solutions at high pressures*. Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 100, 15-19 (1996)

Physikalische Chemie

Warburger Str. 100, 33098 Paderborn,
J3.205, Tel. 05251/60-2157, Fax 05251/60-2582

Leiter

Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Horst Stegemeyer, Tel. 05251/60-2156, -2157,
Fax 05251/60-2582, E-Mail stg@chemie.uni-paderborn.de

Kontaktperson(en)

Prof. Dr. Horst Stegemeyer
(Tel. 05251/60-2156; E-Mail stg@chemie.uni-paderborn.de)

Wissenschaftlich Mitarbeitende

Dipl.-Chem. Alice Becker (ab 1/1994); Dr. rer. nat. Klaus Berger (3/1991 - 12/1995);
Dipl.-Chem. Karsten Diekmann (ab 12/1993);
Dipl.-Chem. Egbert Figgemeier (ab 6/1995); Dipl.-Chem. Peter Fortmeier (ab 6/1995);
Dr. rer. nat. Erhard Hoffmann (12/1992 - 3/1996);
Dr. rer. nat. Uwe Hoffmann (6/1989 - 4/1996);
Dr. rer. nat. Ulrich Kaeder (9/1989 - 12/1994);
Dr. rer. nat. Roland Meister (6/1989 - 9/1993); Dipl.-Chem. Martin Pape (ab 6/1995);
Dipl.-Chem. Janusch Partyka (ab 6/1993);
Dr. rer. nat. Matthias Schumacher (ab 6/1992);
Dr. rer. nat. Andreas Sprick (4/1992 - 9/1995); Dipl.-Chem. Frank Stöckel (ab 4/1992)

Dauergäste

Dr. Eugen Demikhov (Institut für Festkörperphysik, Russische Akademie der
Wissenschaften, Chernogolovka, Rußland, ab 1991)

Promotionen

Dr. rer. nat. Klaus Berger, 6/1995. *Charakterisierung von Strukturumwandlungen der hexagonalen in die lamellare Phase lyotroper Flüssigkristalle.*
Dr. rer. nat. Erhard Hoffmann; 3/1996, *Ferroelektrizität in ultradünnen freistehenden Filmen smektischer flüssigkristalliner Phasen.*
Dr. rer. nat. Uwe Hoffmann; 10/1993, *Ferroelektrische Eigenschaften chiraler flüssigkristalliner Phasen.*
Dr. rer. nat. Ulrich Kaeder; 6/1994, *Statische und zeitaufgelöste Fluoreszenz-Untersuchungen an mizellaren, wäßrigen Tensid/Gegenion Systemen.*
Dr. rer. nat. Roland Meister; 7/1993, *Zur Ferroelektrizität flüssigkristalliner induzierte S_C^* -Phasen.*
Dr. rer. nat. Matthias Schumacher; 9/1996, *Phasenordnungskinetik in flüssigkristallinen Blauen Phasen.*
Dr. rer. nat. Andreas Sprick; 3/1995, *Wirtsphaseneinfluß auf die spontane Polarisierung in ferroelektrischen flüssigkristallinen S_C^* -Phasen*

Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

Arbeitsgebiete

Ziel der Flüssigkristallforschung ist die Untersuchung der Beziehung zwischen Molekülstruktur und Phasenverhalten thermotrop mesogener Materialien, ihrer optischen Eigenschaften und ihrem Verhalten in elektrischen und magnetischen Feldern. Schwerpunkte sind

- a) ferroelektrische Flüssigkristalle und die Optimierung ihres „molekularen Designs“ im Hinblick auf ihre Anwendungen in schnell schaltenden elektrooptischen Anzeigeelementen und Speichern

- b) das physikalische Verhalten in Flüssigkristall-Systemen von eingeschränkter Dimension (2D-Systeme),
- c) die Phasenordnungskinetik in Flüssigkristallen.

Arbeitsgebiete im einzelnen

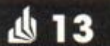
- Molekülstruktur und spontane Polarisierung in ferroelektrischen Flüssigkristallen
- Gast/Wirt-Wechselwirkung in ferroelektrischen Flüssigkristallen
- Molekulare und kollektive Dynamik in Flüssigkristallen
- Ultradünne freistehende Flüssigkristall-Filme im Nanometer-Bereich
- Kinetik der Phasenordnung in flüssigkristallinen Blauen Phasen
- Aggregation und flüssigkristalline Strukturen in wässrigen Farbstoff-Lösungen

Patente

Horst Stegemeyer, Eugen Demikhov: „Elektrisch schaltbares Verzögerungselement“, DE 42 41 544 C 2, 16.6.1994

Eigene Tagungen

Bunsen-Tagung „Neue Eigenschaften und Anwendungen von Flüssigkristallen“, Leipzig 19.-22.5.1993;
65. Bunsen-Kolloquium „Lyotrope Flüssigkristalle“, Paderborn 14.-15.10.1996



Gutachtertätigkeiten

Gutachter der DFG, Volkswagen-Stiftung;
Referee für Physical Review, Ber. Bunsen-Gesellschaft, Liquid Crystals, Angewandte Chemie, Chemische Berichte

Preise für Mitglieder dieses Fachgebiets

Preis der Universitätsgesellschaft Paderborn 1996 für die herausragende Promotion von Dr. Andreas Sprick

Mitgliedschaften

Berliner Wissenschaftliche Gesellschaft;
International Liquid Crystal-Society (Board of Directors)

Leistungsangebot für die Praxis

Gutachten, Beratung - über Materialeigenschaften von Flüssigkristallen
Weiterbildungsangebote - Vorträge über Flüssigkristalle und ihre Anwendung

Weitere Angaben

Vertrauensdozent des Verbandes der Chemischen Industrie

Forschungsprojekte

Molecular origin of the spontaneous polarization in ferroelectric liquid crystals

Einfluß der Molekülstruktur auf die spontane Polarisierung in ferroelektrischen Flüssigkristallen

Leitung / Koordination:	Prof. Dr. Horst Stegemeyer
Weitere Ansprechpartner:	Peter Fortmeier, Alice Becker
Kooperierende Wissenschaftler:	Dr. Mikhail Osipov (Institut für Kristallographie, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau);

Doc. Dr. Wojciech Kuczynski (Institut für Molekülphysik, Polnische Akademie der Wissenschaften, Posen)

Kooperationen mit wissenschaftlichen Institutionen

a) in der Bundesrepublik:

Universität Leipzig, Fakultät für Physik;
Universität Halle, Institut für
Physikalische Chemie

b) im Ausland:

Institute of Molecular Physics
(Polish Academy of Science, Poznan/Polen)

Kooperation mit Einrichtungen der Wirtschaft

a) in der Bundesrepublik:

Hoechst AG, Frankfurt/Main;
E. Merck, Darmstadt

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik:

DFG, Fonds der Chemischen Industrie
1/1993 - 6/1996

Laufzeit:

Chirale Moleküle mit Querdipolen bewirken in getilten smektischen Flüssigkristallen infolge Symmetriebruchs eine spontane dielektrische Polarisation P_s . Der darauf aufbauende elektrooptische Effekt findet Anwendung zur Informationsdarstellung und -speicherung sowie in schnellen Schaltern. Größe und Vorzeichen von P_s hängen von der Struktur der chiralen Gastmoleküle ab; bei bestimmten Strukturen wird P_s auch von der Natur der Wirtsphase beeinflusst.

In einem mikroskopischen Modell konnten die Effekte sowie die Temperaturabhängigkeit von P_s durch Ordnungsphänomene der chiral-polaren Gastmoleküle erklärt werden, die aus ihrer sterisch gehinderten Längsachsenrotation resultierten.

Ferroelectricity in ultrathin free standing films of chiral smectic liquid crystals

Ferroelektrizität in ultradünnen, freistehenden Filmen chiraler smektischer Flüssigkristalle

Leitung / Koordination:

Prof. Dr. Horst Stegemeyer

Weitere Ansprechpartner:

Peter Fortmeier, Alice Becker

Kooperierende Wissenschaftler:

Dr. Mikhail Osipov (Institut für Kristallographie, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau);

Doc. Dr. Wojciech Kuczynski (Institut für Molekülphysik, Polnische Akademie der Wissenschaften, Posen)

Kooperationen mit wissenschaftlichen Institutionen

a) in der Bundesrepublik:

Universität Leipzig, Fakultät für Physik;
Universität Halle, Institut für Physikalische Chemie

b) im Ausland:

Institute of Molecular Physics, Polish Academy of Science, Poznan/Polen

Kooperation mit Einrichtungen der Wirtschaft

a) in der Bundesrepublik:

Hoechst AG, Frankfurt/Main;
E. Merck, Darmstadt

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik:

DFG, Fonds der Chemischen Industrie
7/1993 -

Laufzeit:

Chirale smektische Flüssigkristalle, die aus monomolekularen Schichten aufgebaut sind, lassen sich in Form von ultradünnen, freistehenden Filmen präparieren, so daß der Einfluß fester Substratoberflächen ausgeschlossen werden kann. Es wurde die Ferroelektrizität solcher Filme gemessen und gezeigt, daß die Polarisation P_s mit

abnehmender Zahl N der smektischen Schichten zunimmt. Bei $N = 6$ ist P_s doppelt so groß wie im Bulk. Dieser Effekt konnte auf Grenzflächeneffekte zurückgeführt werden, da in den smektischen Randschichten an der Grenze Film/Luft infolge erhöhter Oberflächenspannung die polare Ordnung der Querdipole größer ist als im Innern des Films.

Collective dynamics in chiral smectic liquid crystal films

Kollektive Dynamik in chiralen smektischen Flüssigkristallfilmen

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Horst Stegemeyer
 Weitere Ansprechpartner: Peter Fortmeier, Alice Becker
 Kooperierende Wissenschaftler: Dr. Mikhail Osipov (Institut für Kristallographie, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau);
 Doc. Dr. Wojciech Kuczynski (Institut für Molekülphysik, Polnische Akademie der Wissenschaften, Posen)

Kooperationen mit wissenschaftlichen Institutionen

- a) in der Bundesrepublik:
 b) im Ausland:

Universität Leipzig, Fakultät für Physik;
 Institute of Molecular Physics, Polish Academy of Science, Poznan/Polen



Kooperation mit Einrichtungen der Wirtschaft

- a) in der Bundesrepublik:

Hoechst AG, Frankfurt/Main;
 E. Merck, Darmstadt

Förderinstitution/en

- a) in der Bundesrepublik:

DFG, Fonds der Chemischen Industrie
 2/1995 -

Laufzeit:

Die Kenntnis der kollektiven Dynamik in ferroelektrischen Flüssigkristallen ist zum Verständnis des anwendungstechnisch interessanten sehr schnellen elektrischen Schaltens (msec-Bereich) wichtig. Es wird die kollektive Dynamik chiraler smektischer Flüssigkristalle mit Helixstruktur in sehr dünnen freistehenden Filmen als Funktion der elektrischen Feldfrequenz untersucht. Im erwarteten Frequenzbereich wurde die Goldstone-Mode nachgewiesen (große thermische Direktorfluktuationen in der Helix). Weiteres Ziel ist, die Existenz der bei höheren Frequenzen zu erwartenden Soft-Mode (thermische Tiltwinkelfluktuationen) im Film nachzuweisen.

Kinetics of phase ordering during phase transition in liquid crystals

Phasenordnungskinetik bei Phasenumwandlungen in

Flüssigkristallen

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Horst Stegemeyer
 Weitere Ansprechpartner: Dr. Matthias Schumacher, Karsten Diekmann
 Kooperierende Wissenschaftler: Dr. Mikhail Osipov (Institut für Kristallographie, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau);
 Doc. Dr. Wojciech Kuczynski (Institut für Molekülphysik, Polnische Akademie der Wissenschaften, Posen)

Kooperationen mit wissenschaftlichen Institutionen

- a) in der Bundesrepublik:
 b) im Ausland:

Universität Leipzig, Fakultät für Physik
 Institute of Molecular Physics, Polish Academy of Science, Poznan/Polen

Kooperation mit
Einrichtungen der Wirtschaft
a) in der Bundesrepublik:

Hoechst AG, Frankfurt/Main;
E. Merck, Darmstadt

Förderinstitution/en
a) in der Bundesrepublik:
Laufzeit:

DFG, Fonds der Chemischen Industrie
9/1993 -

Der Mechanismus der Bildung einer höher geordneten Phase durch Temperatur- oder Feldsprung aus einer von geringerer Ordnung ist ein aktuelles Thema der statistischen Physik. Es wurde die Kinetik der Phasenordnung an flüssigkristallinen Modellsystemen, vornehmlich kubischen Blauen Phasen polarisationsmikroskopisch und mit Hilfe der Bragg-Streuung untersucht, und zwar für den frühen Prozeß der Keimbildung und den späten Prozeß der Domänenvergrößerung. Das theoretisch vorhergesagte Wachstumsgesetz $L = A t^n$ für die Änderung der Domänengröße L mit der Zeit t wurde für verschiedene Phasenumwandlungen bestätigt. Die gefundenen Exponenten n sind bei den kubischen Blauen Phasen richtungsunabhängig, variieren aber stark mit unterschiedlichen Parametern, wie Direktorfeldern oder Quenchtiefe. Die Resultate erfordern eine Erweiterung der theoretischen Ansätze der Phasenordnung um neue Systemklassen.

Ausgewählte Publikationen

Monographien:

Horst Stegemeyer: *Liquid Crystals* (Topics in Physical Chemistry, Vol. 3),
Steinkopff-Verlag Darmstadt, 1994

Artikel:

- H. Stegemeyer, R. Meister, U. Hoffmann, A. Sprick u. A. Becker: *Ferroelectricity of Induced Smectic C* Phases*. J. Mater. Chem., 5, 2183-2193 (1995)
- H. Stegemeyer, R. Meister: *An Extended Microscopic Model of the Spontaneous Polarization in Ferroelectric Liquid Crystals*. Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 97, 1242-1246 (1993)
- H. Stegemeyer, M. A. Osipov u. R. Meister: *A microscopic model considering the effect of molecular biaxiality on ferroelectric ordering of liquid crystalline smectic C* phases*. Liquid Crystals 16, 173-183 (1994)
- H. Stegemeyer, M. A. Osipov und A. Sprick: *Molecular origin of ferroelectricity in induced smectic C* liquid crystalline phases*. Phys. Rev. E 54, 6387-6403 (1996)
- H. Stegemeyer, A. Sprick, W. Kreiser u. A. Weber: *Relations between structure and material properties in ferroelectric smectic C* phases*. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 263, 1-11 (1995)
- H. Stegemeyer, A. Sprick, M. A. Osipov, V. Vill u. H.-W. Tünger: *Sign inversion of the spontaneous polarization in induced liquid crystalline smectic C* phases*. Phys. Rev. E 51, 5721-5724 (1995)
- H. Stegemeyer, F. Stöckel: *Anisotropic Structures in Aqueous Solutions of Aggregated Pseudoisocyanine Dyes*. Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 100, 9-14 (1996)
- H. Stegemeyer, E. Hoffmann: *Ferroelectricity in Free Standing Films of Smectic Liquid Crystals*. Ferroelectrics, 179, 1-8 (1996)
- H. Stegemeyer, E. Hoffmann: *Surface order induced ferroelectricity in ultrathin films of the smectic A phase of a chiral liquid crystal*. Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 100, 1250 (1996)
- H. Stegemeyer, E. Demikhov u. Th. Blümel: *Domain growth laws for the phase ordering of chiral liquid crystals*. Phys. Rev. E 49, R 4787-R4790 (1994)

Physikalische Chemie

Dr. rer. nat. Dipl.-Phys. Karl Hiltrop, Tel. 05251/60-2133, -2157, Fax 05251/60-2582, E-Mail kh@chemie.uni-paderborn.de

Wissenschaftlich Mitarbeitende

Dr. Ulrich Kaeder (April 1990 - Mai 1994); Dr. Klaus Berger (Nov. 1991 - Juni 1995);
Dipl.-Chem. Janusch Partyka (seit Febr. 1994);
Dipl.-Chem. Martin Pape (seit Jan. 1996);
Dipl.-Chem. Egbert Figgemeier (seit März 1996)

Promotionen

Dr. Ulrich Kaeder, Mai 1994, *Statische und zeitaufgelöste Fluoreszenz-Untersuchungen an mizellaren, wäßrigen Tensid/Gegenion Systemen*;

Dr. Klaus Berger, Juli 1995, *Charakterisierung von Strukturumwandlungen der hexagonalen in die lamellare Phase lyotroper Flüssigkristalle*



Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

Die Arbeitsgruppe „Lyotrope Flüssigkristalle“ befaßt sich mit Strukturuntersuchungen an Mesophasen, die sich in wäßrigen Lösungen von Tensiden bilden. Hierbei liegt u.a. die Form, Größe, Ladung etc. des Strukturbausteins,...., der Micellen im Blickpunkt. Ein weiteres Themafeld stellt die Phasenchiralität lyotroper Flüssigkristalle dar. Insbesondere in nematischen Phasen läßt sich durch Zumischen chiraler Dotierstoffe eine helicoidale Überstruktur der Vorzugsorientierung der Mizellen induzieren, deren physikalisch-chemische Ursache nicht bekannt ist.

Arbeitsgebiete im einzelnen:

- Strukturaufklärung mit Hilfe von Kleinwinkelstreuungsmethoden
- Mizellengrößenbestimmung durch Fluoreszenzlebensdaueremessungen
- Struktur/Eigenschaftsbeziehungen zwischen lyotropen, achiralen Wirtsphasen und chiralen Gastmolekülen
- Molecular Modeling von chiralen Molekülen

Dauergäste

Prof. Dolganov, Institute of Solid State Physics, Russian Academy of Sciences

Eigene Tagungen

65. Bunsen-Kolloquium „Lyotrope Flüssigkristalle“, Paderborn, 14.-15. Oktober 1996, 1. Westeuropäische Tagung über lyotrope Flüssigkristalle

Gutachtertätigkeiten

Referee für „Langmuir“ und „Berichte der Bunsengesellschaft Physikalische Chemie“

Leistungsangebot für die Praxis

Gutachten und Untersuchungen, Forschungs- und Entwicklungsarbeiten, Beratung zu den folgenden Themengebieten:

- Tenside, lyotrope und thermotrope Flüssigkristalle, allgemeine physikalisch-chemische Fragestellungen

Ausstattung / Geräte / Methoden

- Röntgenkleinwinkelstreuung mit Kratky-Kamera
- Fluoreszenzspektroskopie
- UV/VIS-Absorptionsspektroskopie
- Polarimetrie
- Fluoreszenzlebensdauer messung
- Differential Scanning Calorimetrie
- Densitometrie (Meßunsicherheit 10^{-5})
- Tensiometrie (Ring-Methode)
- Polarisationsmikroskopie
- Molecular Modeling

Forschungsprojekte

Characterization of structural transitions of the hexagonal to the lamellar phase of lyotropic liquid crystals

Charakterisierung von Strukturumwandlungen der hexagonalen in die lamellare Phase lyotroper Flüssigkristalle

Leitung / Koordination: Dr. Karl Hiltrop

Es wurde am Modellsystem Natriumdodecylsulfat (SLS)/Alkohol/Wasser untersucht, wie und über welche Abstufungen die gekrümmte Aggregatoberfläche der hexagonalen Phase in den ebenen Bilayer einer klassischen Lamelle übergeht. Dabei wurde eine lamellare Defektstruktur gefunden; die ebenfalls beobachtete nematische Phase besitzt offenbar die gleiche Struktur.

Aggregation numbers of micelles in the isotropic and in the nematic phase of lyotropic systems

Aggregationszahlen von Mizellen in der isotropen und in der nematischen Phase lyotroper Systeme

Leitung / Koordination: Dr. Karl Hiltrop

Weitere Ansprechpartner: Dipl.-Chem. Janusch Partyka

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik: DFG

Laufzeit: bis April 1998

Mizellare Lösungen werden mit einer sehr geringen Menge Pyren (als Fluoreszenzlabel) sowie z. B. Dimethylbenzophenon (als Fluoreszenzlöcher) dotiert. Aus den Fluoreszenzlebensdauern (nsBereich) kann auf die Mizellgröße (Aggregationszahl) geschlossen werden. Diese ändert sich am Phasenübergang isotrop/nematisch wider alle Erwartung nur wenig.

Structure/property relations of nematic host phases and chiral dopants studied by means of induced phase chirality

Struktur/Eigenschaft-Beziehungen nematischer Wirtsphasen sowie chiraler Dotierstoffe untersucht mit Hilfe der induzierten Phasenchiralität

Leitung / Koordination: Dr. Karl Hiltrop

Weitere Ansprechpartner: Dipl.-Chem. Egbert Figgemeier und
Dipl.-Chem. Martin Pape

Kooperierende Wissenschaftler: Prof. V.K. Dolganov (Institute of Solid State
Physics, Chernogolovka, Russland)

Die Entstehung von Phasenchiralität in lyotropen Flüssigkristallen soll anhand von Struktur/Eigenschaftsbeziehungen von chiralen Dotierstoffen bzw. achiralen Wirtsphasen aufgeklärt werden. Im Brennpunkt des Interesses stehen die folgenden Fragen:

- a) An welchem Aufenthaltsort in/an der Mizelle wirkt molekulare Chiralität?
- b) Wie kann molekulare Chiralität quantisiert werden?
- c) Welche physikalisch-chemischen Eigenschaften eines chiralen Moleküls begünstigen induzierte Phasenchiralität?

Ausgewählte Publikationen

Monographien:

Karl Hiltrop: *Lytropic Liquid Crystals*, in: Topics in Physical Chemistry, „Liquid Crystals“, Steinkopff Darmstadt & Springer New York, 1994

Artikel:

Dr. Karl Hiltrop:

On the Alignment of Thermotropic Nematic and Smectic Liquid Crystals on Lecithin Coated Surfaces. Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 98, 209 (1994)

Characterization of a Structural Transition in the SLS/Decanol/Water System. Colloid Polym. Sci. 274, 269 (1996)

Rheo-Small Angle Light Scattering Investigation of Shear Induced Structural Changes in a Lyotropic Lamellar Phase. J. Colloid Interface Sci, 181, 521 (1996)

On the Chirality Induction in Lyotropic Nematic Liquid Crystals. Liq. Cryst. 20, 611 (1996)



Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik

Warburger Str. 100, 33098 Paderborn,
NW1.717, Tel. 05251/60-3615,
Fax 05251/60-3244,
E-Mail TCSEK@chemie.uni-paderborn.de

Leiter

apl. Prof. Dr.-Ing. Hans-Joachim Warnecke,
Tel. 05251/60-3613, -3615, Fax 05251/60-3244,
E-Mail mwarn1@tc15.uni-paderborn.de

Kontaktperson(en)

Dipl.-Chem. Dirk Meier (Tel. 05251/60-3619, E-Mail mmeie1@tc15.uni-paderborn.de)

Wissenschaftlich Mitarbeitende

Dipl.-Chem. Mike Bobert (seit 1995); Dipl.-Chem. Dirk Jakobs (seit 1996);
Dipl.-Chem. Frank Sitter (seit 1995); Dipl.-Chem. Olaf Decreßin (seit 1993);
Dipl.-Chem. Kordula Forell (seit 1994); Dipl.-Chem. Melanie Wiebe (seit 1994);
Dipl.-Chem. Dirk Meier (seit 1994); Dipl.-Chem. Ursula Gerigh (seit 1996);
Dipl.-Chem. Andreas Steinkemper (seit 1995); Dipl.-Chem. Guido Koschut (seit 1996);
Dipl.-Chem. Matthias Schäfer (seit 1995); Dipl.-Chem. Thomas Blume (seit 1993);
Dipl.-Chem. Matthias Berling (seit 1994); Dipl.-Chem. Thorsten Waatsack (seit 1994);
Dipl.-Chem. Said Nurdin (seit 1995); Dipl.-Chem. Oliver Smits (seit 1996);
Dipl.-Chem. Bernhard Kamp (seit 1996); Dipl.-Chem. Jürgen Kümmel (seit 1993)

Dauergäste

Prof. Dr. Chen Zhong (Wuhan Institute of Chemical Technology, Wuhan, China,
1994-1996)

Promotionen

Dr. Frank Reinecke, 1993, *Gasdispersion im aerosolbetriebenen Strahldüsen-Schlaufenreaktor.*

Dr. Alfons Ludwig, 1994, *Emulsionsbildung im Schnecken-Schlaufenreaktor.*

Dr. Komala Pontas, 1994 *Brauchwasseraufbereitung mittels UV-aktiviertem Wasserstoffperoxid.*

Dr. Manfred Brinkmann, 1995, *Wechselwirkung von Hydrodynamik, Stofftransport und chemischer Reaktion im G-L-Strahldüsen-schlaufenreaktor.*

Dr. Chen Zhong, 1995, *Ein mathematisches Modell zur Beschreibung der Tropfen-größenverteilung in dispersen Systemen.*

Dr. Rita Schmieding, 1996, *Reaktionstechnische Untersuchungen des Styrolabbaus im Biofilter*

Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

- a) Desodorierung von Restmonomeren aus Polymerdispersionen/Extraktion von Restlösemitteln aus Polymergranulat
- b) Biologische Abluftreinigung
- c) Chemisch-physikalische Prozeßanalyse und -modellierung
- d) Brauchwasserrecycling
- e) Aufbereitung organisch belasteter Abwässer (SIMOX)
- f) Nutzung nachwachsender Rohstoffe

Arbeitsgebiete im einzelnen:

- zu a) Gestiegene Anforderungen an die Reinheit von Polymerisationsprodukten und an die Minimierung der von gelösten Reststoffen ausgehenden Belastung, erfordern deren Eliminierung. Ziel des Projektes ist modellmäßige Beschreibung (Dreiphasenmodell) beider Prozesse, um die Auslegung bzw. Optimierung neuer Anlagen durch Parameterermittlung aus kostengünstigen Laborversuchen zu ermöglichen.
- zu b) Zur Beseitigung von geruchsbelästigenden Schadstoffen aus der Luft/Abluft bietet sich das Biofilterverfahren als kostengünstige Reinigungsmethode an. Die Abluft wird durch eine Schütttschicht mit aufwachsenden Mikroorganismen geleitet. Sie verwerten die Schadstoffe als Nahrungs- und Energiequelle und setzen sie zu Wasser und Kohlendioxid um. Im Rahmen des Projektes werden die Auslegungsgrundlagen für Biofilter weiter entwickelt.
- zu c) Mehrphasenprozesse sind in der gewerblichen und industriellen Anwendung häufig anzutreffen. Die Prozeßauslegung am Beispiel einer reaktiven Mehrkomponenten-Gasabsorption im Zweiphasenströmungsrohr ist Gegenstand der Forschungsarbeiten. Der Einfluß vereinfachender Modellannahmen und die Parametersensitivität eindimensionaler Modelle wird untersucht und Ergebnissen aus dreidimensionalen Simulationen mittels kommerzieller Software-Pakete (CFX, Fluent) auf Basis der Navier-Stokes-Gleichungen gegenübergestellt.
- zu d) Das Abwasser eines fleischverarbeitenden Unternehmens soll in diesem Projekt wirtschaftlich aufbereitet werden, um es als Brauchwasser innerbetrieblich wiederverwenden zu können. Dabei wird als Reinigungsziel „Trinkwasserqualität“ gefordert. Die Hauptkomponenten der Anlage sind dabei ein Hochleistungs-Kompakt-Membranbioreaktor und eine auf Membrantrennverfahren beruhende Endreinigungsstufe.
- zu e) Das Simox-Verfahren zur Reinigung organisch belasteter Abwässer kombiniert Abbauprozesse durch elektrochemische Mittel mit denen durch chemische Oxidationsmittel, wobei das Oxidationspotential chromhaltiger Galvanikabfälle mit Hilfe der Elektrolyse aktiviert wird. Auf diese Weise ist der notwendige Energieeintrag deutlich niedriger als für den Fall der reinen elektrolytischen oder chemischen Oxidation.
- zu f) Die Epoxidation ist eine Möglichkeit zur Modifizierung von Ölen bzw. Fettsäuren aus nachwachsenden Rohstoffen für den Einsatz in der chemischen Industrie (z.B. in Shampoos). Eine neue Variante - die enzymatische Epoxidation - soll reaktionstechnisch analysiert und optimiert werden.

**Gastaufenthalte von Mitgliedern dieses Fachgebiets**

Dr. Manfred Brinkmann (Universität von Turin, Turin, Italien)

Messeaktivitäten

Achema '94, Juni 1994, Frankfurt am Main, Deutschland

Gutachtertätigkeiten

Gutachter für folgende Zeitschriften:

- Chemical Engineering Journal
- Canadian Journal of Chemical Engineering

Mitgliedschaften

Westfälisches Umwelt Zentrum (WUZ)

Leistungsangebot für die Praxis

Gutachten, Untersuchungen, Forschungs- und Entwicklungsarbeiten, Beratung sowie Diplom-/Doktorarbeiten in Kooperation mit Wirtschaftspartnern zu folgenden Themen:

- Umweltanalytik:
DIN-Verfahren zur Bestimmung von Inhaltsstoffen fester, flüssiger und gasförmiger Proben
- Physikalische, Chemische und Biologische Verfahren zur Eliminierung von Schadstoffen aus Abluft und Abwässern:
A) Physi- und Chemisorption von Gasen; B) Oxidative Gaswäsche;
C) Biologische Abluftreinigung (Biofilter); D) Anaerobe Abwasseraufbereitung;
E) Chemische Oxidation von Abwasserinhaltsstoffen; F) Brauchwasserrecycling
- Prozeß- und Reaktorentwicklung:
A) Mathematisch-mechanistische Modellierung physikalisch-chemischer und biologischer Prozesse; B) Methodenentwicklung zur Parameterbestimmung;
C) Ermittlung thermodynamischer, kinetischer und hydrodynamischer Daten von Mehrphasenprozessen; D) Maßstabsvergrößerung (Scaling up)
- Nachwachsende Rohstoffe:
Erzeugung reaktiver Zwischenprodukte natürlicher Öle als Vorstufe abbaubarer polymerer Werkstoffe

Ausstattung / Geräte / Methoden

High Pressure Liquid Chromatography (HPLC);
Gaschromatographie (GC);
Headspace Gaschromatographie (Headspace-GC);
Fouriertransform Infrarot Spektroskopie (FTIR);
Ultraviolett-Spektroskopie (UV);
Atom-Adsorptions-Spektroskopie (AAS);
Inductive-Coupled-Plasma (ICP)

Forschungsprojekte

Deodorization of remainder monomers from polymer dispersions / Extraction of remainder solvent from polymer granulates Desodorierung von Restmonomeren aus Polymerdispersionen / Extraktion von Restlösemitteln aus Polymergranulat

Leitung / Koordination:	Dipl.-Chem. Dirk Meier
Kooperierende Wissenschaftler:	Prof. Dr. Jan Prüß (Angewandte Mathematik der Universität Halle, Halle, Deutschland); Dr. Alfons Ludwig (BASF, Ludwigshafen, Deutschland); Prof. Dr. Chen Zhong (Wuhan Institute of Chemical Technology, Wuhan, China)

Kooperation mit Einrichtungen der Wirtschaft	
a) in der Bundesrepublik: Förderinstitution/en	BASF AG, Ludwigshafen, Deutschland
a) in der Bundesrepublik: Laufzeit:	BASF AG, Ludwigshafen, Deutschland seit Juli 1994

Gestiegene Anforderungen an die Reinheit von Polymerisationsprodukten und an die Minimierung der von gelösten Reststoffen ausgehenden Belastung, erfordern deren Eliminierung. Ziel des Projektes ist modellmäßige Beschreibung (Dreiphasen-

modell) beider Prozesse, um die Auslegung bzw. Optimierung neuer Anlagen durch Parameterermittlung aus kostengünstigen Laborversuchen zu ermöglichen.

Biological waste air treatment Biologische Abluftreinigung

Leitung / Koordination: Dipl.-Chem. Olaf Decreßin
 Weitere Ansprechpartner: Dipl.-Chem. Kordula Forell
 Kooperierende Wissenschaftler: Prof. Dr. Jan Prüß (Angewandte Mathematik der Universität Halle, Halle, Deutschland)

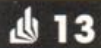
Kooperation mit

Einrichtungen der Wirtschaft

a) in der Bundesrepublik: Zimmermann GmbH, Gütersloh, Deutschland
 Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik: Zimmermann GmbH, Gütersloh, Deutschland
 Laufzeit: seit 1993

Zur Beseitigung von geruchsbelästigenden Schadstoffen aus der Luft/Abluft bietet sich das Biofilterverfahren als kostengünstige Reinigungsmethode an. Die Abluft wird durch eine Schüttschicht mit aufwachsenden Mikroorganismen geleitet. Sie verwerten die Schadstoffe als Nahrungs- und Energiequelle und setzen sie zu Wasser und Kohlendioxid um. Im Rahmen des Projektes werden die Auslegungsgrundlagen für Biofilter weiter entwickelt.



Chemical and physical process analysis and modelling Chemisch-physikalische Prozeßanalyse und -modellierung

Leitung / Koordination: Dipl.-Chem. Matthias Schäfer
 Kooperierende Wissenschaftler: Prof. Dr. Jan Prüß (Angewandte Mathematik der Universität Halle, Halle, Deutschland);
 Dr. Meinolf Weidenbach
 (Dow Chemical, Stade, Deutschland)

Kooperation mit

Einrichtungen der Wirtschaft

a) in der Bundesrepublik: Dow Chemical, Stade, Deutschland
 Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik: Dow Chemical, Stade, Deutschland
 Laufzeit: seit 1995

Mehrphasenprozesse sind in der gewerblichen und industriellen Anwendung häufig anzutreffen. Die Prozeßauslegung am Beispiel einer reaktiven Mehrkomponenten-Gasabsorption im Zweiphasenströmungsrohr ist Gegenstand der Forschungsarbeiten. Der Einfluß vereinfachender Modellannahmen und die Parametersensitivität eindimensionaler Modelle wird untersucht und Ergebnissen aus dreidimensionalen Simulationen mittels kommerzieller Software-Pakete (CFX, Fluent) auf Basis der Navier-Stokes-Gleichungen gegenübergestellt.

Waste water recycling Brauchwasserrecycling

Leitung / Koordination: Dipl.-Chem. Mike Bobert
 Weitere Ansprechpartner: Dipl.-Chem. Dirk Jakobs
 Kooperierende Wissenschaftler: Prof. Dr. Chmiel (Umweltkompatible Prozeßtechnik der Universität Saarbrücken, Saarbrücken, Deutschland);
 Prof. Dr. Jan Prüß (Angewandte Mathematik der Universität Halle, Halle, Deutschland)

Kooperation mit

Einrichtungen der Wirtschaft

a) in der Bundesrepublik:

Hoppe GmbH, Wünnenberg, Deutschland

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik:

Hoppe GmbH, Wünnenberg, Deutschland

Laufzeit:

seit 1995

Das Abwasser eines fleischverarbeitenden Unternehmens soll in diesem Projekt wirtschaftlich aufbereitet werden, um es als Brauchwasser innerbetrieblich wiederverwenden zu können. Dabei wird als Reinigungsziel „Trinkwasserqualität“ gefordert. Die Hauptkomponenten der Anlage sind dabei ein Hochleistungs-Kompakt-Membranbioreaktor und eine auf Membrantrennverfahren beruhende Endreinigungsstufe.

Regeneration of organic loaded waste water (SIMOX)

Aufbereitung organisch belasteter Abwässer (SIMOX)

Leitung / Koordination:

Dipl.-Chem. Frank Sitter

Weitere Ansprechpartner:

Dipl.-Chem. Bernhard Kamp

Kooperierende Wissenschaftler:

Prof. Dr. D. Wabner (Angewandte Elektrochemie der TU München, München, Deutschland);
Prof. Dr. Jan Prüß (Angewandte Mathematik der Universität Halle, Halle, Deutschland)

Kooperationen mit

wissenschaftlichen Institutionen

a) in der Bundesrepublik:

Angewandte Elektrochemie der TU München, München, Deutschland

Kooperation mit

Einrichtungen der Wirtschaft

a) in der Bundesrepublik:

Zimmermann GmbH, Gütersloh, Deutschland

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik:

Zimmermann GmbH, Gütersloh, Deutschland

b) im Ausland:

Life, EU-Kommission

Laufzeit:

seit 1995

Das Simox-Verfahren zur Reinigung organisch belasteter Abwässer kombiniert Abbauprozesse durch elektrochemische Mittel mit denen durch chemische Oxidationsmittel, wobei das Oxidationspotential chromhaltiger Galvanikabfälle mit Hilfe der Elektrolyse aktiviert wird. Auf diese Weise ist der notwendige Energieeintrag deutlich niedriger als für den Fall der reinen elektrolytischen oder chemischen Oxidation.

Utilization of recreational natural resources

Nutzung nachwachsender Rohstoffe

Leitung / Koordination:

Dipl.-Chem. Melanie Wiebe

Kooperierende Wissenschaftler:

Prof. Dr. S. Warwel (Bundesanstalt für Kartoffel- und Getreideforschung, Münster, Deutschland);
Prof. Dr. Jan Prüß (Angewandte Mathematik der Universität Halle, Halle, Deutschland)

Kooperationen mit

wissenschaftlichen Institutionen

a) in der Bundesrepublik:

Bundesanstalt für Kartoffel- und Getreideforschung, Münster, Deutschland

Förderinstitution/en

a) in der Bundesrepublik:

Universität-GH Paderborn

Laufzeit:

seit 1995

Die Epoxidation ist eine Möglichkeit zur Modifizierung von Ölen bzw. Fettsäuren aus nachwachsenden Rohstoffen für den Einsatz in der chemischen Industrie

(z.B. in Shampoos). Eine neue Variante - die enzymatische Epoxidation - soll reaktionstechnisch analysiert und optimiert werden.

Ausgewählte Publikationen

Artikel:

- H. J. Warnecke, J. Prüß, G. Tamm, M. Brinkmann: *The influence of recycling on mass transfer and reaction in a G-L jet loop reactor with variable interfacial area*, Chemical Engineering and Technology, 16 (1993), 58-61
- H. J. Warnecke, J. Prüß, T. Blume: *Zur Bestimmung bei chemischen Prozessen*, Chemie-Ingenieur-Technik, 65 (1993), 914-920
- H. J. Warnecke, J. Prüß, M. Brinkmann, D. Meier: *Influences of liquid viscosity on hydrodynamics and mass transfer in a G-L jet loop reactor*, GVC VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen, Schwerte, 1994
- H. J. Warnecke, G. Emig, F. Kern, S. Ruf: *Vapour-phase trimerisation of formaldehyde to trixane catalysed by 1-vanado-11-molybdophosphoric acid*, Applied Catalysis A: General, 118 (1994), L17-L20
- H. J. Warnecke, Ch. Kube, J. Prüß: *Chemicalabsorption of mercaptan in an aerosol operated loop reactor*, The Canadian Journal of Chemical Engineering, 72 (1994), 1000-1006
- H. J. Warnecke, Ch. Kersting, J. Prüss: *Residence time distribution of a screw loop reactor: Experiments and modeling*, Chemical Engineering Science, 50 (1995), 299-308
- H. J. Warnecke, D. Hübinger, R. Minges, J. Prüß: *Modellierung des Stoffaustausches von flüchtigen, organischen Verbindungen in hochviskosen Medien*, Chemie Ingenieur Technik, 67 (1995), 570-577
- H. J. Warnecke, H.-J. Kersting, J. Kümmel, U. Flechtner: *Untersuchung zur Charakterisierung des Mischsystems Sojaöl/epoxidiertes Sojaöl mittels FTIR/h-ATR Spektroskopie*, Fat Science and Technology, 97 (1995), 60-64
- H. J. Warnecke, J. Duffy, H. Güldener, J. Prüß: *Cooling of extruder strands*, Plastics Rubber and Composites, Processing and Applications, 23 (1995), 305-310
- H. J. Warnecke, M. Brinkmann, J. Prüß: *Modellierung reaktiver Stoffaustauschprozesse*, Chemie Ingenieur Technik, 68 (1996), 239-253

Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik / Kunststoffe

Warburger Straße 100, 33098 Paderborn,
NW 1.717, Tel. 05251/60-3615, Fax 05251/60-3244

Leiter

Prof. Dr. Hans Christoph Broecker, Tel. 05251/60-3616, -3615, Fax 05251/60-3244

Kontaktperson(en)

Ing. grad. Hans-Joachim Wolf (Tel. 05251/60-2143)

Forschungsschwerpunkte und Arbeitsgebiete

Technologie der Kunststoffe

Mitgliedschaften

Mitglied der DPG;
Mitglied des Hochschulverbandes

Leistungsangebot für die Praxis

- Untersuchungen zur stofflichen Zusammensetzung von Kunststoffen
- Messungen physikalischer und physiko-chemischer Eigenschaften von Kunststoffen
- Durchführung von Probeextrusionen
- Diplom- und Doktorarbeiten in Kooperation mit Industriepartnern

Ausstattung / Geräte / Methoden

IR-, NMR-Spektrometer;
Physikalisches Prüflabor;
Laborextruder;
Viskosimetrie, Osmometrie;
DSC

Forschungsprojekte

Oberflächen- und Grenzflächenspannungen in kompatibler Polymerblends

Leitung / Koordination:	Prof. Dr. Hans Christoph Broecker
Weitere Ansprechpartner:	Dipl.-Ing. Martin Bastian (Fachgebiet Kunststoffverarbeitung, FB-10, Universität Paderborn)
Kooperierende Wissenschaftler:	Prof. Dr. Helmut Potente (Fachgebiet Kunststoffverarbeitung, FB-10, Universität Paderborn)
Kooperationen mit wissenschaftlichen Institutionen	
a) in der Bundesrepublik:	IPF Dresden e. V., an der Technischen Universität Dresden, Hohe Str. 6, 01069 Dresden
Laufzeit:	Mehrere Jahre
Entwicklung experimenteller und theoretischer Methoden zur Ermittlung der Grenzflächenspannung zwischen unverträglichen Polymeren	

Untersuchungen zur Rheologie und Reaktionskinetik von Polyurethanen bei Spritzgußverarbeitung

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Hans Christoph Broecker
Weitere Ansprechpartner: Dipl.-Ing. A. Hannemann
(Fachgebiet Mechanische Verfahrenstechnik,
FB 10, Universität Paderborn)
Kooperierende Wissenschaftler: Prof. Dr. Manfred Pahl
(Fachgebiet Mechanische Verfahrenstechnik,
FB 10, Universität Paderborn)
Kooperation mit
Einrichtungen der Wirtschaft
a) in der Bundesrepublik: Industriepartner in der BRD
Laufzeit: Mehrere Jahre
Untersuchung und Modellierung des Viskositätsverlaufes bei der Synthese
vernetzender Polyurethane

Funktionalisierung von Kleberkomponenten bei Zweikomponentenklebern

Leitung / Koordination: Prof. Dr. Hans Christoph Broecker
Kooperation mit
Einrichtungen der Wirtschaft
a) in der Bundesrepublik: Industriepartner in der BRD
Laufzeit: Mehrere Jahre
Entwicklung von Verfahren zur Funktionalisierung von Kleberkomponenten bei der
Reaktivextrusion



