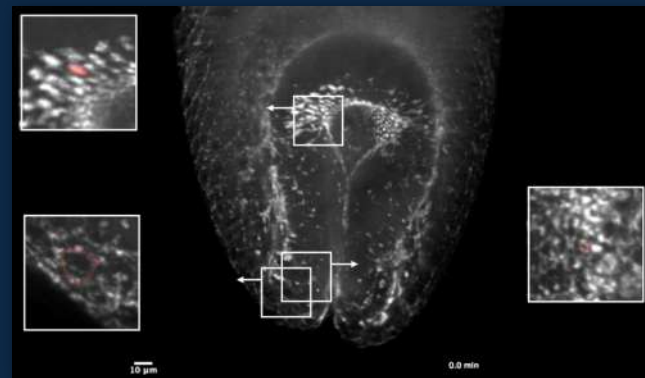
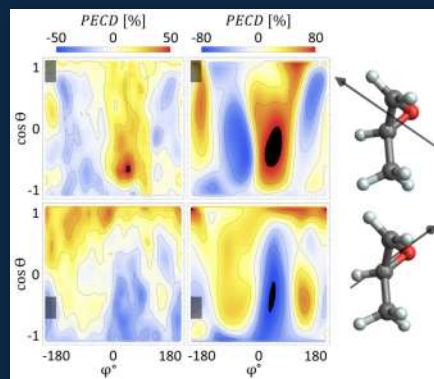
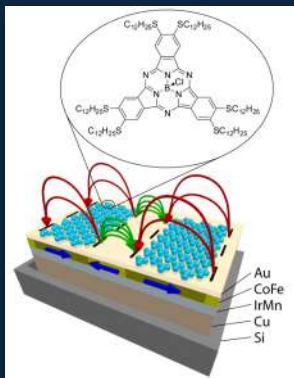
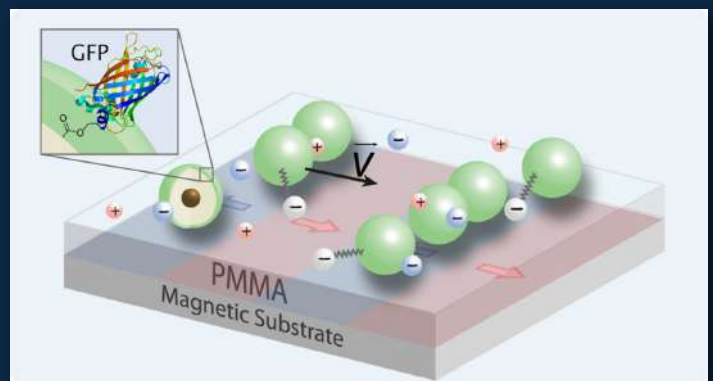
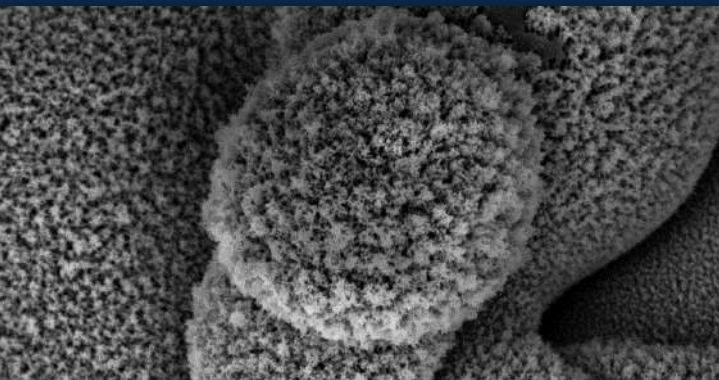


2002 - 2022

# 20 Jahre



**CINSaT** Center for  
Interdisciplinary Nanostructure  
Science and Technology

U N I K A S S E L  
V E R S I T Ä T









# Festschrift

zum 20-jährigen Bestehen des **C**enter of Interdisciplinary  
**N**anostructure **S**ciene **a**nd **T**echnology (CINSaT)

**CINSaT** Center for  
Interdisciplinary Nanostructure  
Science and Technology

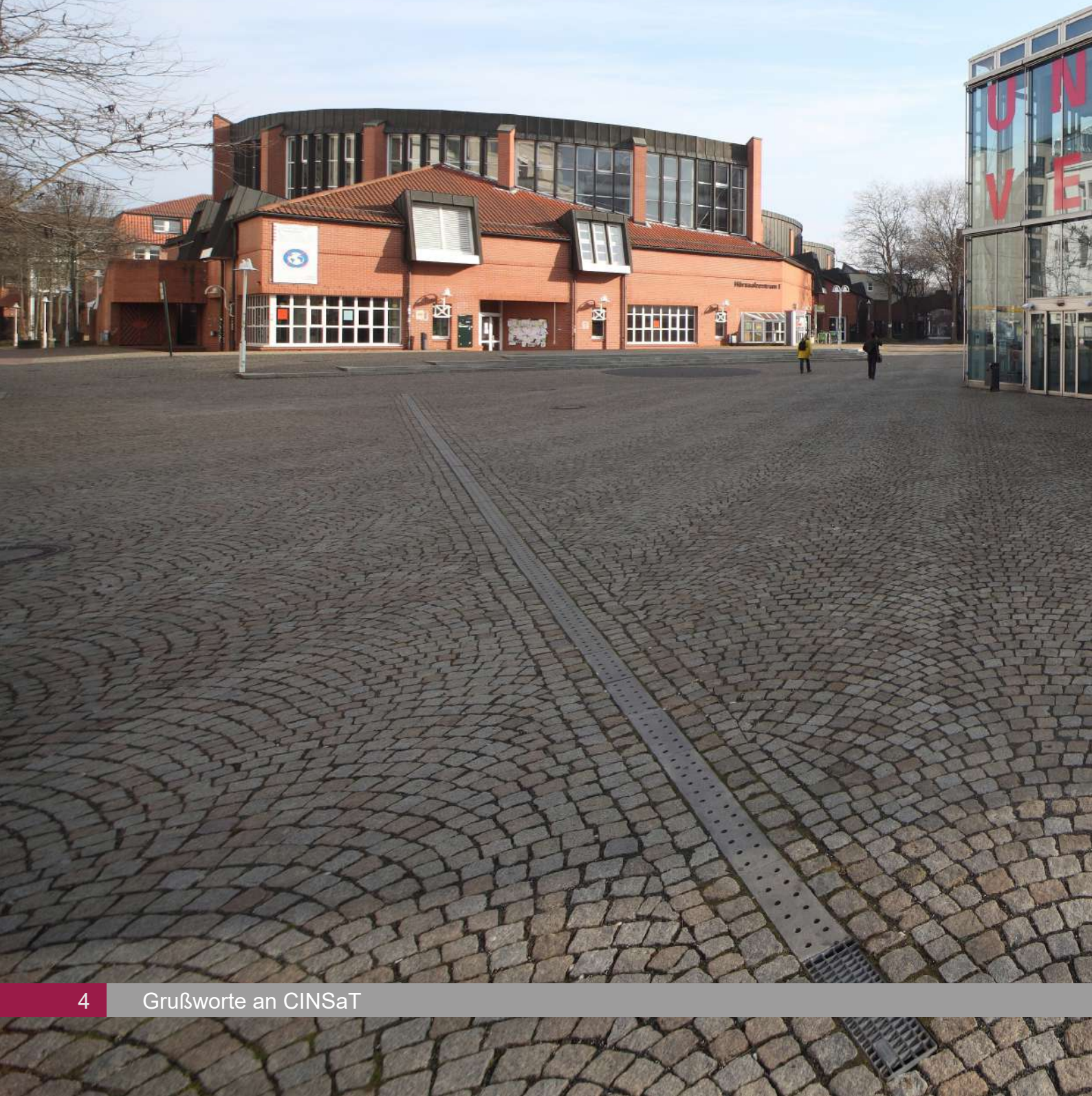
# INHALT

<b>1. Grußworte an CINSaT</b>	<b>4</b>
Grußworte von Volker Bouffier (Hessischer Ministerpräsident).....	6
Grußworte von Angela Dorn (Hessische Ministerin für Wissenschaft und Kunst).....	8
Grußworte von Christian Geselle (Oberbürgermeister Kassel).....	10
Grußworte von Prof. Dr. Ute Clement (Präsidentin der Universität Kassel).....	12
Grußworte von Prof. Dr. Hans-Joachim Freund (Internationaler wissenschaftlicher Beirat).....	14
<b>2. CINSaT im Portrait</b>	<b>17</b>
Begrüßung durch den CINSaT Sprecher .....	18
Historie .....	20
CINSaT-Schwerpunkte .....	26
Struktur des CINSaT .....	32
CINSaT in Zahlen.....	34
Die Zukunft des CINSaT .....	36
CINSaT in Bildern.....	38
<b>3. Forschung im CINSaT</b>	<b>40</b>
Bildende Kunst .....	42
Biochemie.....	47
Biophysik .....	54
Chemie mesoskopischer Systeme .....	58
Chemische Hybridmaterialien .....	61

Entwicklungsgenetik .....	65
Femtosekundenspektroskopie & Ultraschnelle Laserkontrolle .....	70
Funktionale dünne Schichten & Physik mit Synchrotronstrahlung .....	75
Institut für Werkstofftechnik, Fachgebiet Kunststofftechnik .....	81
Laborastrophysik .....	86
Licht-Materie-Wechselwirkung .....	90
Makromolekulare Chemie & Molekulare Materialien .....	94
Metallische Werkstoffe .....	98
Metallorganische Chemie .....	103
Messtechnik .....	107
Mikrobiologie .....	112
Nanophotonik .....	116
Oberflächenphysik.....	121
Technische Elektronik.....	125
Technische Physik.....	132
Theoretische Atom- & Molekülphysik .....	148
Theoretische Festkörper- & Ultrakurzzeitphysik.....	152
Theorie nanostrukturierter Materialien .....	157
Tierphysiologie .....	162
Trennende & Fügende Fertigungsverfahren .....	171
Werkstoffe des Bauwesens & Bauchemie.....	174
Zellbiologie .....	180
Zoologie.....	186

# Grußworte an CINSaT

*Greetings towards CINSaT*







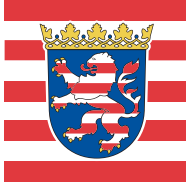


# Hessischer Ministerpräsident

*Hessian Prime Minister*

Volker Bouffier

HESSEN



Erkenntnisse aus Wissenschaft und Forschung kommen uns allen zugute. Sie tragen entscheidend dazu bei, Lösungen für die komplexen Herausforderungen unserer Zeit zu entwickeln. Anders ausgedrückt: Die Forschung von heute sind die Arbeitsplätze, Produkte und

Dienstleistungen von morgen. Gleichzeitig ist die Wissenschaft auch ein wichtiger Teil unserer Kultur. Sie ist unverzichtbar für die Weiterentwicklung der Menschheit; nur durch wissenschaftlichen Fortschritt werden wir die Lebensqualität und Zukunftsfähigkeit unserer Gesellschaft und unseres Landes nachhaltig sichern können.

Hessen gehört zu den innovativsten Regionen Europas. Dies haben wir nicht zuletzt Institutionen wie dem Center for Interdisciplinary Nanostructure Science and Technology (CINSaT) zu verdanken. Seit 2002 forschen in dem an der Universität Kassel beheimateten Zentrum Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler verschiedener Fachbereiche gemeinsam an der Zukunft der Nanotechnologie. Diese Interdisziplinarität ist nicht nur eine der großen Stärken von CINSaT und damit ein wesentlicher Faktor für die erfolgreiche Weiterentwicklung einer der Schlüsseltechnologien unserer Zeit, sondern kann auch für viele andere Bereiche beispielgebend sein.

Ich freue mich sehr, anlässlich des 20-jährigen Bestehens meine Verbundenheit mit CINSaT ausdrücken zu können und wünsche dem Zentrum und allen, die dafür tätig sind, alles Gute für die Zukunft und weiterhin viel Erfolg bei ihrer wichtigen Arbeit.



Volker Bouffier  
Hessischer Ministerpräsident

---

*Findings from science and research benefit us all. They make a decisive contribution to developing solutions for the complex challenges of our time. In other words, today's research is tomorrow's jobs, products, and services. At the same time, science is also an important part of our culture. It is indispensable for the advancement of mankind; only through scientific progress we will be able to ensure the quality of life and future viability of our society and our country in the long term.*

*Hessen is one of the most innovative regions in Europe. We owe this not least to institutions such as the Center for Interdisciplinary Nanostructure Science and Technology (CINSaT). Since 2002, scientists from various departments have been researching the*

*future of nanotechnology in the center at the University of Kassel. This interdisciplinarity is not only one of the great strengths of CINSaT and thus an essential factor for the successful further development of one of the key technologies of our time but can also be exemplary for many other areas.*

*I am very pleased to be able to express my attachment to CINSaT on its 20th anniversary and I wish the center and everyone who works for it all the best for the future and continued success in their important work.*

*Volker Bouffier  
Hessian Prime Minister*

# Hessische Ministerin für Wissenschaft und Kunst

*Hessian Minister for Science and Art*

Angela Dorn

Sehr geehrte Damen und Herren,

mit Wissenschaft und Forschung begegnen wir den großen Herausforderungen unserer Zeit. Dabei hat sich aber das Bild der Forscherin oder des Forschers, die oder der allein im Labor Entdeckungen auf der Spur ist, lange überholt. Wissenschaft lebt vom Austausch – und diesen Grundsatz setzt das Center for Interdisciplinary Nanostructure Science and Technology (CINSaT) an der Universität Kassel seit nun 20 Jahren um. Herzlichen Glückwunsch zu diesem Geburtstag!

Das CINSaT bietet Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern aus vielen Fachgebieten in mehr als 30 Arbeitsgruppen ein Forum. Sie formulieren, entwickeln und diskutieren hier Ideen, aus denen sich langjährige Kooperationen und unterschiedliche Projekte ergeben. Dass sie an aktuell relevanten Themen im Grenzgebiet zwischen Grundlagenforschung und Anwendung – zum Beispiel in Form von Möglichkeiten der sicheren Datenübertragung oder Optimierung von Displays – arbeiten, ist interessant für externe Anfragen, wie Drittmittel in Höhe von jährlich rund zehn Millionen Euro unterstreichen. Auch wir als hessische Landesregierung unterstützen die Mitglieder des CINSaT regelmäßig, zum Beispiel durch die Förderungen von Ausrüstungsgegenständen.



Zum 20-jährigen Bestehen gratuliere ich allen Mitgliedern, Unterstützerinnen und Unterstützern des CINSaT. Ich wünsche weiterhin viel Erfolg und Elan bei der Entwicklung und Umsetzung der innovativen Ideen und bei der bedeutsamen Arbeit, mit der Sie auch einen wesentlichen Beitrag zur Profilierung der Universität Kassel leisten.

Ihre

Angela Dorn

Hessische Ministerin für Wissenschaft und Kunst



---

*Dear Ladies and Gentlemen,*

*With science and research, we meet the great challenges of our time. However, the image of the researcher who is alone in the lab on the trail of discoveries has long been outdated. Science thrives on exchange - and the Center for Interdisciplinary Nanostructure Science and Technology (CINSaT) at the University of Kassel has been implementing this principle for 20 years now. Happy birthday to you!*

*The CINSaT offers a forum for scientists from many disciplines in more than 30 working groups. Here they formulate, develop, and discuss ideas that result in long-term cooperation and various projects. The fact that they are working on currently relevant topics in the border area between basic research and application - for example in the form of possibilities for secure data transmission or optimization of displays - is interesting for external*

*inquiries, as underlined by third-party funds of around ten million euros annually. As Hessian state government, we also regularly support the members of the CINSaT, for example by funding equipment.*

*I would like to congratulate all members and supporters of the CINSaT on its 20th anniversary. I wish you continued success and enthusiasm in the development and implementation of the innovative ideas and in the important work with which you also make a significant contribution to the profile of the University of Kassel.*

*Yours,*

*Angela Dorn*

*Hessian Minister for Science and Art*

# Oberbürgermeister von Kassel

*Mayor of Kassel*

Christian Geselle

## Kassel documenta Stadt

Die Universität Kassel prägt seit einem halben Jahrhundert durch Lehre, Forschung und Wissenstransfer unsere Stadt Kassel und hat sich zu einem attraktiven und bedeutenden Wissenschafts- und Forschungsstandort entwickelt – ebenso national wie international renommiert und beachtet.

Diese Entwicklung wurde insbesondere möglich, weil sich die Universität Kassel seit jeher mit Weitblick breit aufgestellt hat. So wurde auch das Wissenschaftliche Zentrum „Center for Interdisciplinary Nanostructure Science and Technology“ (CINSaT) vorausschauend gegründet und begeht in diesem Jahr bereits sein 20-jähriges Jubiläum.

Im CINSaT werden interdisziplinär Wissenschaften, Technologien und Forschungsgebiete miteinander verzahnt. Dies bildet den Rahmen für eine enge Kooperation von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern und die Basis für eine der zukunftsweisenden Schlüsseltechnologien des 21. Jahrhunderts, der Nanotechnologie. So wird Grundlagenforschung „Made in Kassel“, unter anderem mit jährlich über 200 Veröffentlichungen und zwischen 20 bis 30 durch Mitglieder des CINSaT betreuten Promotionen, in die Welt getragen. Den Wissenschaftlerinnen



und Wissenschaftlern kann man nicht genug danken, dass sie mit Disziplin, Forscherdrang sowie Engagement und Herzblut unermüdlich Antworten auf die Fragen von Morgen suchen, denn nur so kann sich unser Alltag immer wieder den Herausforderungen der Zukunft stellen.

Ich gratuliere dem CINSaT herzlich zum 20-jährigen Jubiläum und wünsche dem Forschungszentrum weiterhin eine dynamische Entwicklung und viel Erfolg.

Herzlichst Ihr Christian Geselle  
Oberbürgermeister

---

*The University of Kassel has been shaping our city of Kassel for half a century through teaching, research and knowledge transfer and has developed into an attractive and important science and research location - renowned and respected both nationally and internationally.*

*This development was made possible because the University of Kassel has always positioned itself with foresight. The scientific center "Center for Interdisciplinary Nanostructure Science and Technology" (CINSaT) was forward-looking founded and is already celebrating its 20th anniversary this year.*

*In the CINSaT, interdisciplinary sciences, technologies and research areas are interlinked. This forms the framework for close cooperation between scientists and the basis for one of the future-oriented key technologies of the 21st century, nano-technology. In this way, basic research "Made in Kassel" is carried*

*out into the world, among others with over 200 scientific publications and between 20 and 30 doctorates supervised by members of the CINSaT each year.*

*We cannot thank the scientists enough for the tireless search for answers to the questions of tomorrow with discipline, a thirst for research, commitment, and passion, because this is the only way our everyday life can face the challenges of the future again and again.*

*I would like to congratulate the CINSaT on its 20th anniversary and wish the research center continued dynamic development and much success.*

*Sincerely,  
Christian Geselle  
Mayor of Kassel*

# Präsidentin der Universität Kassel

*President of the University of Kassel*

Prof. Dr. Ute Clement

Liebe Leserinnen und Leser,

„Interdisziplinarität“ ist ein Schlagwort der Stunde. Nach ihr wird in Anträgen bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft gefragt und sie ist omnipräsent in wissenschaftsjournalistischen Beiträgen. Echte interdisziplinäre Strukturen sind jedoch weniger häufig, als all dies glauben macht.

In Kassel haben wir ein Zentrum, das seit 20 Jahren von der Idee der Interdisziplinarität lebt – und das sehr erfolgreich. Im CINSaT treffen sich Biologie und Experimentalphysik, arbeiten Architektinnen und Materialwissenschaftler zusammen, und selbst ein Philosoph hat schon zum Erkenntnisgewinn über Nanostrukturen beigetragen. Auch Internationalität ist hier gelebte Praxis.

Zahlreiche Forschungsverbünde, die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des CINSaT eingeworben haben, zeugen von der Vitalität des Zentrums, zuletzt der Sonderforschungsbereich ELCH, der LOEWE-Schwerpunkt SMolBits und das DFG-Graduiertenkolleg Multiscale Clocks. Das CINSaT ist ein Aktivposten in der Forschungslandschaft der Universität Kassel und ein Ausrufezeichen in der Forschungslandschaft Hessens. Nanowissenschaft ist seit zwei Jahrzehnten eng mit der Universität Kassel verbunden.



Zum Jubiläum kann das CINSaT mit Freude in Zukunft blicken: Wir werden die Forschungsbedingungen noch verbessern und mithilfe des Landes Hessen in die Infrastruktur investieren. Am Campus Holländischer Platz wachsen in den nächsten Jahren moderne Gebäude in die Höhe, die einen Laborkomplex auf höchstem Niveau enthalten. Das geplante Nano Technology Center soll unter dem Schirm des CINSaT auch anderen Forscherinnen und Forschern offenstehen und so unseren Profilschwerpunkt Multifunktionale Materialien stärken. Das nützt der Forschung, aber auch der Wahrnehmbarkeit der gesamten Universität und wird auch auf die Möglichkeiten wirken, die wir Studierenden und dem wissenschaftlichen Nachwuchs bieten.

Prof. Dr. Ute Clement  
Präsidentin der Universität Kassel

---

*Dear readers,*

*"Interdisciplinarity" is the buzzword of the day. It is asked for in applications to the German Research Foundation and is omnipresent in science journalistic articles. However, genuine interdisciplinary structures are less common than all this would lead one to believe.*

*In Kassel, we have a centre that has been living on the idea of interdisciplinarity for 20 years - and very successfully at that. At CINSaT, biology and experimental physics meet, architects and material scientists work together, and even a philosopher has already contributed to gaining knowledge about nanostructures. Internationality is common practice here as well.*

*Numerous research collaborations that CINSaT scientists have acquired testify to the centre's vitality, most recently the Collaborative Research Centre ELCH, the LOEWE focus SMolBits and the DFG Research Training Group Multiscale*

*Clocks. The CINSaT is an asset in the research landscape of the University of Kassel and an exclamation mark in the research landscape of Hesse. Nanoscience has been closely associated with the University of Kassel for two decades now.*

*On its anniversary, CINSaT can look to the future with joy: We will improve the research conditions even further and invest in the infrastructure with the help of the state of Hesse. Over the next few years, modern buildings will rise up on the Holländischer Platz campus, containing a laboratory complex of the highest standard. The planned Nano Technology Centre will also be open to other researchers under the umbrella of CINSaT and thus strengthen our profile focus on multifunctional materials. This benefits research, but also the visibility of the entire university and will also have an effect on the opportunities we offer students and young scientists.*

*Prof. Dr. Ute Clement*

*President of the University of Kassel*

# Internationaler wissenschaftlicher Beirat

*International scientific advisory board*

Prof. Dr. Hans-Joachim Freund

**FRITZ-HABER-INSTITUT**  
MAX-PLANCK-GESELLSCHAFT



Die Nanostrukturwissenschaft und -technologie ist einer der Schlüsselbereiche der aktuellen Forschung im Allgemeinen. Dieses Feld kann nur durch eine starke interdisziplinäre Anstrengung angemessen abgedeckt werden. Das Center for Interdisciplinary Nanostructure Science and Technology (CINSaT), das 2002 von 8 Partnern aus Naturwissenschaften und Elektrotechnik gegründet wurde, ist bis heute enorm gewachsen und umfasst derzeit Dutzende von Fakultätsmitgliedern aus 7 verschiedenen Fachbereichen, die gemeinsam zu aktuellen Fragenstellungen der Nanotechnologie forschen, mit internationaler und nationaler, wissenschaftlicher und technologischer Bedeutung. CINSaT ist ein an einer Universität angesiedeltes Zentrum mit dem Ziel, sowohl ein Umfeld für exzellente Wissenschaft zu schaffen als auch dieses Ziel gleichzeitig in moderne Bildungsplattformen innerhalb des Bachelor-/Master-Portfolios einer Bildungseinrichtung zu integrieren. Insofern ist CINSaT mit seinem interdisziplinären, fakultätsübergreifenden Forschungsprogramm ein innovatives Konzept und unterscheidet sich von reinen außeruniversitären Forschungseinrichtungen. Neben Exzellenz in der Forschung initiiert das Zentrum die Umstrukturierung von Forschungsbereichen innerhalb der Universität, unterstützt die Ausbildung von Studenten und jungen Forschern in den Nanowissenschaften und verbessert die internationale und lokale Sichtbarkeit der Nanostrukturwissenschaft und -technologie.

Die wissenschaftlichen Konzepte haben sich im Laufe der Jahre aufgrund der Identifizierung neuer aufkommender Themen und der Anpassung an den entwickelten interdisziplinären Ansatz der Mitglieder geändert. Ebenso wurde die Organisation des Zentrums ständig an die sich ändernden Bedürfnisse des stark interdisziplinären (Physik, Chemie, Biologie und Ingenieurwissenschaften) CINSaT-Konsortiums angepasst, einschließlich starker Bemühungen, die Biologie als Schlüsseldisziplin zu integrieren.



Der Wissenschaftliche Beirat stand mit dem Vorstand sowie der Wissenschaftlichen Koordinierungsrunde immer wieder in kritischem und doch harmonischem Kontakt, und es war ein äußerst fruchtbarer Austausch, der zu einer stetigen Weiterentwicklung des Zentrums im Hinblick auf interdisziplinäre Forschung und Ausbildung von Studenten und jungen Wissenschaftlern führte. Der Wissenschaftliche Beirat wünscht CINSaT zu seinem 20-jährigen Jubiläum die Flexibilität, neue wissenschaftliche Richtungen einzuschlagen, basierend auf ausreichender Finanzierung durch eine Vielzahl von Förderinstitutionen und der lokalen Universität, sowie stetig wachsenden Erfolg und Einfluss in der interdisziplinären Nanostrukturwissenschaft und -technologie mit zunehmender nationaler und internationaler Wirkung für die kommenden Jahre.

Prof. Dr. Hans-Joachim Freund (Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft)

im Namen der Mitglieder des Wissenschaftlichen Beirats CINSaT:

Prof. Dr. Efrat Lifshitz (Technion),

Prof. Dr. Andreas Offenhäuser (FZ Jülich),

und Prof. Dr. Ulrike Woggon (TU Berlin)

---

*Nanostructure Science and Technology is one of the key areas of current research in general. This field can be covered appropriately only by a strong interdisciplinary effort. The Center for Interdisciplinary Nanostructure Science and Technology (CINSaT) which was established in 2002 by 8 partners from natural sciences and electrical engineering, grew tremendously until today and currently includes tenths of faculty members from 7 different departments, that are carrying out together state-of-the-art research with international and national scientific and technological impact. CINSaT is a Center located at a university, aiming at creating both an environment for excellent science and at the same time to integrate this goal in modern educational platforms within the bachelor/master portfolio of an educational institution. In this respect CINSaT with its interdisciplinary, cross-faculty research program is an innovative concept and differs from pure non-university research institutions. Beside excellence in research, the center initiates re-structuring of research fields within the University, supports the education of students and young researchers in nanoscience and enhances international and local visibility of Nanostructure Science and Technology.*

*The scientific concepts have changed through the years, due to identification of new emerging topics and adaptation to the developed interdisciplinary approach of the members. Likewise, the organization of the center has been constantly adapted to the*

*changing needs of the strongly interdisciplinary (physics, chemistry, biology, and engineering) CINSaT consortium, including a strong effort to integrate biology as a key discipline.*

*The advisory board has been in critical and yet harmonic contact with the Executive Board as well as the Scientific Coordination Committee consistently, and it has been an extremely fruitful interaction, that led to a constant development of the center with respect to interdisciplinary research and education of students and young scientists. The advisory Board wishes CINSaT on its 20th anniversary the flexibility to adopt new scientific directions based on sufficient funding from a variety of funding agencies and the home university, as well as ever increasing success and influence in interdisciplinary nanostructure science and technology with expanding national and international impact for the coming years.*

*Prof. Dr. Hans-Joachim Freund (Fritz-Haber-Institut der Max-Planck Gesellschaft)*

*in the name of the members of the Scientific Advisory Board CINSaT:*

*Prof. Dr. Efrat Lifshitz (Technion),*

*Prof. Dr. Andreas Offenhäuser (FZ Jülich),*

*and Prof. Dr. Ulrike Woggon (TU Berlin)*







# CINSaT im Portrait

*Portrait of CINSaT*

# Begrüßung durch den CINSaT Sprecher

## *Greetings from the CINSaT Speaker*

Prof. Dr. Johann Peter Reithmeier

Als aktueller Sprecher des CINSaT gebührt mir die Ehre die Festschrift anlässlich des zwanzigjährigen Bestehens dieses wissenschaftlichen Forschungszentrums der Universität zu präsentieren. Ich danke den Vorgängern in dieser Funktion, Herrn Prof. Frank Träger und seinem Nachfolger, Prof. Arno Ehresmann, und den jeweiligen Vorstandsmitgliedern für ihr großes Engagement die Nanostrukturwissenschaften und -technologien an unserer Universität, aber auch national wie international etabliert zu haben. Als ich das Amt im Jahr 2016 übernahm, hatte ich das Glück, dass meine Vorgänger bereits wesentliche Hürden in der Interaktion zwischen den Fachdisziplinen überwinden konnten und die Früchte in herausragenden interdisziplinären Verbundprojekten eingefahren werden konnten, auf die auch in der historischen Betrachtung eingegangen wird. Leider gab es im Laufe einer solchen langen Zeitspanne nicht nur positives zu vermelden. Ich möchte bei dieser Gelegenheit auch aufmerksam machen, dass der langjährige Sprecher des Beirats und sehr guter Kollege von mir, Prof. Markus-Christian Amann, unerwartet durch einen tragischen Unfall 2018 verstorben ist. Ebenfalls erst Anfang 2022 ist auch der Gründungsvorstand Prof. Frank Träger von uns gegangen. Wir bedauern den Fortgang der langjährigen Unterstützer des CINSaT und werden Ihnen auch in Zukunft gedenken.

Diese Festschrift soll jedoch nicht nur in der Vergangenheit verankert sein, sondern soll auch aufzeigen, dass die mutige Entscheidung, die vor 20 Jahren gefällt wurde, die Nanostrukturwissenschaften als Forschungsschwerpunkt zu fördern von Nachhaltigkeit geprägt ist und im hohen Maße zukunftsfähig sein wird für die nächsten Dekaden. Im Gegenteil, die besten Zeiten sollten erst noch kommen. Als großes Zeichen des Vertrauens ist auch die Neubauintiative der Universität einzuordnen, die nur durch eine große monetäre Anstrengung des Landes Hessen aus dem Heureka-Programm realisiert werden kann. Dafür möchte sich das CINSaT auch bei der jetzigen Regierung bedanken, die Weitsicht zeigt hier viel Geld in die Hand zu nehmen für den Neubau der Mathematik und Naturwissenschaften und eines neuen Nanotechnologiezentrums (NTC). Der 1. Bauabschnitt befindet sich aktuell in der Planung und umfasst die Physik und das NTC als Reinraumgebäude. Mit dem Neubau des NTCs wird sowohl für die Universität Kassel und das Land Hessen eine einzigartige Infrastruktur aufbauen, die



sowohl national als auch international für die nächsten Jahrzehnte konkurrenzfähig sein wird.

Damit Verbunden ist eine wesentliche Umstrukturierung des CINSaTs, das sich in den nächsten Jahren von einem rein virtuellen zu einem realen Forschungszentrum wandeln wird, mit eigener Infrastruktur und Betriebspersonal. Zudem ist geplant dieses NTC als DFG-Technologiezentrum zu qualifizieren, das auch den Zugang externer Kollegen erlaubt. Damit wird es in Zukunft mehr Möglichkeiten geben der interdisziplinären Vernetzung und wissenschaftlichen Zusammenarbeit.

Ich freue mich deshalb besonders sowohl an der bisherigen Erfolgsgeschichte des CINSaT teilhaben zu können und an der zukünftigen Ausrichtung und Weiterentwicklung des CINSaT beitragen zu dürfen. Insbesondere möchte ich mich für die Unterstützung des aktuellen Vorstands (Prof. Herberg, Prof. Fuhrmann-Lieker und Prof. Niendorf) als auch des langjährigen, aber vor kurzem ausgeschiedenen, Vorstandsmitglieds Prof. Witzigmann bedanken. Ich werde auch weiterhin mit vollem Engagement daran arbeiten, das CINSaT voranzubringen und den Wandel zu einem realen Forschungszentrum erfolgreich zu begleiten. Dafür baue ich auch weiterhin auf die Unterstützung des Vorstands und aller Mitglieder als auch des Präsidiums.

Bei der Gelegenheit möchte ich mich bei der Geschäftsführung und allen Beteiligten bedanken, die es ermöglicht haben in relativ kurzer Zeit diese Festschrift zu verfassen.



Lassen Sie uns gemeinsam das 20jährige Bestehen des CINSaT feiern. Ich möchte Sie als Leser der Festschrift insbesondere einladen, neben den einführenden Worten und Überblicksabschnitten, auch ein Gefühl für die Vielfältigkeit der Forschung des CINSaTs mitzubekommen, indem Sie sich auch die Beiträge

der CINSaT-Mitglieder anschauen. Ich wünsche Ihnen viel Spaß bei der Lektüre und lassen Sie es mich wissen, falls es Ihnen gefallen hat.

Johann Peter Reithmaier

*As the current speaker of the CINSaT, I have the honor of presenting the commemorative publication on the occasion of the twentieth anniversary of this scientific research center of the university. I would like to thank the predecessors in this function, Prof. Frank Träger and his successor, Prof. Arno Ehresmann, and the respective board members for their great commitment to having established nanostructure sciences and technologies at our university, but also nationally and internationally. When I took over the office in 2016, I was fortunate that my predecessors were already able to overcome significant hurdles in the interaction between the disciplines and the fruits were reaped in outstanding interdisciplinary joint projects, which are also discussed in the historical analysis. Unfortunately, in the course of such a long period of time, there were not only positive things to report. I would also like to take this opportunity to draw attention to the fact that the long-standing speaker for the Advisory Board and a very good colleague of mine, Prof. Markus-Christian Amann, died unexpectedly in a tragic accident in 2018. Also at the beginning of 2022, the founding board member Prof. Frank Träger left us. We regret the loss of the long-standing supporters of the CINSaT and will remember them in the future.*

*However, this commemorative publication should not only be anchored in the past, but should also show that the courageous decision made 20 years ago to promote nanostructure sciences as a research focus is characterized by sustainability and will be highly future-proof for the coming decades. On the contrary, the best times are yet to come. The university's new building initiative, which can only be realized through a large monetary effort from the Heureka program by the state of Hesse, can also be classified as a great sign of trust. The CINSaT would also like to thank the current government for this, which shows the foresight to spend a lot of money on the new building for mathematics and natural sciences and a new nanotechnology center (NTC). The 1st construction phase is currently in the planning stage and includes physics and the NTC as a clean room building. With the new construction of the NTC, a unique infrastructure will be built for*

*the University of Kassel and the state of Hesse, which will be competitive both nationally and internationally for the next few decades.*

*Associated with this is a major restructuring of the CINSaT, which will change over the next few years from a purely virtual to a real research center with its own infrastructure and operating staff. In addition, it is planned to qualify this NTC as a DFG technology center, which will also allow access for external colleagues. This means that there will be more opportunities for interdisciplinary networking and scientific collaboration in the future.*

*I am therefore particularly pleased to be able to participate in the CINSaT success story to date and to be able to contribute to the future orientation and further development of the CINSaT. I would like to thank the current board (Prof. Herberg, Prof. Fuhrmann-Lieker and Prof. Niendorf) and the long-standing, but recently retired, board member Prof. Witzigmann for their support. I will continue to work with full commitment to advance the CINSaT and to successfully accompany the change to a real research center. For this I continue to rely on the support of the board and all members as well as the executive committee.*

*I would like to take this opportunity to thank the management, and everyone involved in making it possible to write this commemorative publication in a relatively short time.*

*Let's celebrate the 20th anniversary of the CINSaT together. In particular, I would like to invite you as a reader of the commemorative publication, in addition to the introductory words and overview sections, to get a feeling for the diversity of research at CINSaT by also looking at the contributions of the CINSaT members. I hope you enjoy reading it and let me know if you enjoyed it.*

Johann Peter Reithmaier

# Historie

## History

CINSaT 2002 bis 2022

Ein 1996 vom Hessischen Ministerium für Wissenschaft und Kunst in Auftrag gegebenes Konzept sah die Einstellung des Diplomstudienganges Chemie und den Abbau vieler Chemiestellen an der Universität Kassel vor. Da der Erhalt dieser Grundlagenwissenschaft für die Forschungsentwicklung der Natur- sowie Ingenieurwissenschaften an der Universität Kassel jedoch als immens wichtig erachtet wurde, galt es eine neue Schwerpunktsetzung vorzunehmen, die langfristige Perspektiven bot, die Stärken der Naturwissenschaften aufgriff und Lehre und Forschung unterschiedlicher Fachgebiete miteinander verband. Infolgedessen wurden erste Überlegungen und Kooperationen von Biologie, Chemie und Physik in Hinsicht auf die Gründung eines interdisziplinären Forschungsschwerpunkts „Nanostrukturwissenschaften“ angestellt, der durch externe Gutachten als förderungswürdig erachtet wurde.

Mit der Ausrichtung der drei geschaffenen chemischen Fachgebiete Makromolekulare Chemie, Metallorganische Chemie und Chemie mesoskopischer Systeme, die bis 2003 besetzt wurden, wurde bereits kurz nach der Einstellung des Diplomstudienganges Chemie im Jahr 1997 die Entwicklung eines neuen Studienganges Nanostrukturwissenschaften vorangetrieben.

Am 04.07.2000 erfolgte in einer Gründungsversammlung die Konstituierung des Center for Interdisciplinary Nanostructure Science and Technology (CINSaT) als loser Zusammenschluss von Wissenschaftlern, aber erst zwei Jahre später wurde das wissenschaftliche Zentrum CINSaT durch die Universität Kassel gegründet und am 14.11.2002 durch die Hessische Staatsministerin für Wissenschaft und Kunst, Ruth Wagner, und den Universitäts-Präsidenten, Prof. Rolf-Dieter Postlep, feierlich eröffnet. Im Gegensatz zu anderen Nanozentren, die meist federführend von der Physik gegründet wurden, zeichnete sich das CINSaT von Anfang an durch seine Interdisziplinarität aus. Die 8 Gründungsmitglieder - neben dem (damaligen) CINSaT-Sprecher Prof. Frank Träger waren dies die Professoren Baumert, Hillmer, Kassing, Maniak, Nellen, Salbeck und Siemeling - boten mit ihren 6 schon laufenden, interdisziplinären Projekten, die in den drei Projektbereichen „Synthese und Anwendung neuartiger Strukturen“, „Analyse von Nanostrukturen mit optischen Methoden“ und „Entwicklung von Rastersonden-

mikroskopien“ zusammengefasst wurden, den Kondensationskeim für die Arbeit des CINSaT.

Ihre Motivation war eine enge Kooperation von Wissenschaftlern aus Biologie, Chemie, Elektrotechnik und Physik zur Erstellung neuartiger Nanostrukturen, sowie zur Messung ihrer außergewöhnlichen Eigenschaften und zur Nutzung in Zusammenarbeit mit industriellen Partnern aufzubauen. Die Integration neuer Mitglieder - auch aus anderen Fachgebieten wie den Ingenieurwissenschaften und der Kunst - und die Nachwuchsförderung durch Aufnahme von promovierten Wissenschaftlern mit eigenen Forschungsprojekten unterstützten dabei das Ziel der Intensivierung interdisziplinärer Kooperationen. Und der Erfolg spricht für sich: Nach nur einem Jahr war die Mitgliederzahl auf 19 angewachsen und die Projektliste hatte sich um ein Vielfaches verlängert.

Der schon ab 1997 geplante Studiengang „Nanostrukturwissenschaft - Nanostructure and Molecular Sciences“ wurde zum Wintersemester 2003 erstmalig angeboten und bedurfte von Beginn an einer Zulassungsbeschränkung, da mit anfangs 80 Anmeldungen doppelt so viele Studenten Interesse zeigten wie Kapazität vorhanden war. Auch nach vielen Jahrgängen von Absolventen des Studiengangs zeigt der Studiengang nachhaltiges Interesse, obwohl mittlerweile viele Universitäten ähnliche Studiengänge aufgelegt haben. Einzigartig in Kassel ist aber nach wie vor die ausgewogene Beteiligung der drei naturwissenschaftlichen Fächer Physik, Chemie, Biologie.

Die enorme Präsenz und Bedeutung der Schlüsseltechnologie „Nanostrukturwissenschaften“ im 21. Jahrhundert spiegelte sich auch in den zahlreichen Besuchen des CINSaT von Personen aus Politik und Wissenschaft wieder. Neben dem damaligen hessischen Ministerpräsidenten Roland Koch besuchten der Kasseler Oberbürgermeister Georg Lewandowski, der hessische Wirtschaftsminister a.D. Dieter Posch, der hessische Wissenschaftsminister Udo Corts, sowie diverse Mitglieder von Landtag und Bundestag das wissenschaftliche Zentrum der Universität Kassel. Zusätzlich wurde der Bekanntheitsgrad des CINSaT durch die Präsenz bei etlichen Messen wie der HannoverMesse, der NanoTech (Tokio) oder der NanoSolution (Köln) in der Region Kassel, in Hessen, Deutschland und diversen anderen Ländern

wie China, den USA und Japan gestärkt. Für die Öffentlichkeits- und Nachwuchsarbeit wurden in Einkaufszentren, Schulen und öffentlichen Veranstaltungen diverse Ausstellungen und Vorträge durchgeführt und an Tagen der offenen Tür die beteiligten Fachgebiete des CINSaT vorgestellt. Seit 2004 werden zudem jährlich CINSaT-Kolloquien organisiert, die den wissenschaftlichen Austausch der Forscher durch Vorträge von internen und externen Gastrednern sowie fachlichen Diskussionen fördern und sehr hohen Anklang gefunden haben.

Mit der Bewilligung weiterer, finanzieller Unterstützung der Universität Kassel wurde das CINSaT 2006 in das NanoNetzwerk Hessen, ein Kooperationsprojekt der hessischen Universitäten und Fachhochschulen mit Unterstützung des Hessischen Ministeriums für Wissenschaft und Kunst, eingegliedert. Die zentrale Koordination wurde infolgedessen auch von Kassel übernommen. Im selben Jahr wurden die Forschungsschwerpunkte des CINSaT für die folgenden Jahre den sich veränderten Projektthematiken zu den Themen „Molekulare Interaktion und Mechanik“ und „Elektronensysteme und elektromagnetische Felder“ zusammengefasst.

Acht Jahre nach Gründung des wissenschaftlichen Zentrums wurde 2010 vom wissenschaftlichen Beirat eine Evaluation des CINSaT durchgeführt. Die dabei getätigte Empfehlung zur Fortführung der Arbeiten wurde von der Universität Kassel entsprochen und eine Neuausrichtung durchgeführt: Neuer CINSaT-Vorstand waren die Professoren Faust und Witzigmann, zusammen mit ihrem Sprecher Prof. Ehresmann, der die Aufgaben von Prof. Frank Träger übernahm. Neben der sich anschließenden Überarbeitung der CINSaT-Geschäftsordnung mit der eindeutigen Unterscheidung zwischen ordentlichen und assoziierten Mitgliedern – inzwischen besaß das CINSaT 25 Mitglieder – wurde wegen ablaufender Amtszeit und Krankheit ein neuer wissenschaftlicher Beirat unter dem Vorsitzenden Prof. Markus C. Amann eingesetzt und folgende neue Forschungsschwerpunkte mit Schwerpunktssprechern gefunden: „Drei-dimensionale Nanostrukturen“, „Biosensorik“, „Photooxidative Nanopartikel“, „Photonik“ und „Nanostrukturwissenschaften in den Naturwissenschaften, Ingenieurwissenschaften und der Kunst“. Das CINSaT-Kolloquium wurde zeitlich auf zwei Tage ausgedehnt, um viel mehr Zeit für Vorstellungen von Projekten, Ideen und Techniken sowie Diskussionen zu haben, die das Kolloquium so erfolgreich machen.

Zum 10-jährigen Jubiläum, das am 17.10.2012 im Konzertsaal der Universität Kassel gefeiert wurde, betrug die Mitgliederzahl des CINSaT mit 28 mehr als dreimal so viel wie bei der Gründung. Neben den Grußworten des hessischen Staatssekretärs Ingmar Jung, des Universitätspräsidenten Prof. Rolf-Dieter Postlep, des Vorsitzenden vom wissenschaftlichen Beirat des CINSaT Prof. Markus C. Amann und des Direktors des Nanotechnologiezentrum Shanghai Prof. Li-Yi Shi, trug Dr. Karl-Heinz Haas von der Fraunhofer Allianz Nanotechnologie einen spannenden Grundsatzvortrag über die aktuelle Forschung und die Zukunft der Nanotechnologie vor. Abgerundet wurde die Feierlichkeit mit einem Streichtrio und einem anschließenden, gemütlichen Beisammensein mit Buffet. Zusätzlich zu den Feierlichkeiten „10 Jahre CINSaT“ fand eine spezielle, vom CINSaT organisierte, zweitägige Konferenz mit dem bisher einzigartigen Thema der 3D-Nanostrukturen statt, zu der hochrangige Wissenschaftler aus dem In- und Ausland kamen.

Die zweite Evaluation wurde 2013 vom wissenschaftlichen Beirat unter der Leitung von Prof. Dr. Markus Christian Amann durchgeführt. Der aufstrebende Trend des CINSaT wurde gelobt und die Neuausrichtung der Forschungsschwerpunkte von 2010 als richtig befunden. Einzig der Schwerpunkt „Photooxidative Nanopartikel“ wurde aufgrund vom Ausscheiden teilnehmender Gruppen auf Empfehlung des Beirats aufgegeben und durch den Schwerpunkt „Chirale Strukturen“, der seine Grundlage maßgeblich aus dem vom Land Hessen unterstützten LOEWE-Projekts „Elektronendynamik chiraler Systeme (ELCH)“ zieht, ersetzt.

Durch den Amtsantritt des Sprechers Prof. Ehresmann als Vizepräsident der Universität Kassel mit Beginn des WS 2015/16 erfolgte in der Mitgliederversammlung im Februar 2016 eine Neuwahl des Vorstands und des Sprechers. Neuer CINSaT-Vorstand sind die Professoren Herberg, Fuhrmann-Lieker und Witzigmann mit ihrem neuen Sprecher Prof. Reithmaier, der die Aufgaben von Prof. Ehresmann übernahm. Im Zuge der strukturellen Weiterentwicklung und Professionalisierung des CINSaT wurde die CINSaT Ordnung von 2013 komplett überarbeitet und u.a. mit der Forschungskoordination ein neues Instrument geschaffen, um koordinierte Forschungsprojekte zu initialisieren und stärker zu fördern. Die Neufassung der CINSaT Ordnung wurde im August 2016 vom Präsidium der Universität Kassel beschlossen. Um mehr Präsenz in der Öffentlichkeit zu

zeigen, wurde 2016 beschlossen, dass das CINSaT jedes Semester einen Newsletter veröffentlicht, in denen sich die einzelnen Gruppen präsentieren, neue Mitglieder sich vorstellen, aber auch aktuelle Forschungsarbeiten und Veröffentlichungen vorgestellt werden können. Die Newsletter sind in gedruckter und in digitaler Form verfügbar.

Zum Jahr 2017 wurde das Forschungsfeld des CINSaT um einen weiteren Schwerpunkt erweitert. Durch die Berufung von Prof. Singer an die Universität Kassel und seine zügige Aufnahme als CINSaT Mitglied wurde durch sein Engagement der Schwerpunkt „Quantentechnologie“ geschaffen. Nachdem 2019 der Schwerpunkt „Biosensorik“ in „Multiscale Bioimaging“ umbenannt wurde und 2021 die Umbenennung und thematische Fokussierung des Schwerpunkts „Nanostrukturwissenschaften in den Naturwissenschaften, Ingenieurwissenschaften und der Kunst“ in „Nanomaterialien“ folgte, hat das CINSaT seine bis heute bestehende Organisationsstruktur erhalten. Sechs Schwerpunkte, welche die breite interdisziplinäre Aufstellung und die Aktualität der Forschungsinteressen unserer Mitglieder mehr als verdeutlicht.

Den Erfolg der Idee des CINSaT, Keimzelle zu sein von koordinierten Projekten zeigt sich insbesondere in der jüngsten Zeit durch erfolgreiche Einwerbung folgender kooperativer Forschungsprojekte:

2013: LOEWE-Schwerpunkt ELCH (Sprecher: Arno Ehresmann)

2018: DFG-Sonderforschungsbereich ELCH (Sprecher: Thomas Baumert)

2019: LOEWE-Schwerpunkt SMolBits (Sprecher: Johann Peter Reithmaier)

2022: DFG-Graduiertenkolleg "Multiscale Bioclocks" (Sprecherin: Monika Stengl)

Weitere Initiativen in der Quantenoptik und den Nanomaterialien sind in Planung.

Wie beschrieben hat sich das Center for Interdisciplinary Nanostructure Science and Technology (CINSaT) seit seiner Gründung im Jahr 2002 enorm weiterentwickelt und gefestigt. Die Mitgliederzahl ist inzwischen auf 36 angewachsen und die Erfolge sind beachtlich: jedes Jahr veröffentlichen die Mitglieder des CINSaT rund 200 Artikel in wissenschaftlichen Fachzeitschriften, etwa 20 Promotionen werden erfolgreich abgeschlossen und um die 10 Millionen Euro an Drittmitteln werden eingeworben. Das CINSaT und seine Mitglieder haben Spuren in der Wissenschaftslandschaft hinterlassen und diese werden immer tiefer und nachhaltiger.

*In 1996 the Hessian State Ministry of Higher Education, Research and the Arts commissioned a conception to cease the diploma degree course "Chemistry" and to reduce the related scientific staff at the University of Kassel. But as the maintenance of that basic science was considered to be crucial for the research development in natural and engineering sciences at the University of Kassel, a new setting of priorities was necessary which offered a long term vision based on the strength and expertises of groups in natural sciences with focus on the interdisciplinary education and research. Hence, first considerations and collaborations between Chemistry, Biology and Physics were made trying to launch an interdisciplinary study "Nanostructure Science" which was evaluated as worthy of support by external reports.*

*With the orientation of the three created chemical departments of macromolecular chemistry, organometallic chemistry and chemistry of mesoscopic systems, which were occupied until 2003, the development of a new course in nanostructure sciences was promoted shortly after the discontinuation of the diploma course in chemistry in 1997.*

*At the founders' assembly on the 4th of July 2000 the Center for Interdisciplinary Nanostructure Science and Technology was constituted as a loose association of scientists. Two years later the scientific center CINSaT was founded by the University of Kassel and was established with a solemn ceremony by the Hessian State Minister of Higher Education, Research and the Arts, Ruth Wagner, and the University President, Prof. Dr. Rolf-Dieter Postlep. In contrast to other Nano-Centers often leadingly founded by the department of Physics, CINSaT was characterized by interdisciplinary nature from the beginning. With the six interdisciplinary, ongoing projects in the project areas "Synthesis and application of novel structures", "Analysis of nanostructures by optical methods" and "Development of scanning probe microscopies" the 8 founding members – the (former) head of CINSaT Prof. Frank Träger and the Professors Baumert, Hillmer, Kassing, Maniak, Nellen, Salbeck and Siemeling – set the condensation nucleus for the tasks of CINSaT.*

*Their motivation was a close collaboration between scientists from the departments of Biology, Chemistry, Electrical Engineering and Physics to create and measure the extraordinarily characteristics of novel nanostructures leading to applications by communication with industry partners. Due to the integration of new members – not only from natural sciences but also from departments like engineering and the arts – and the inclusion of young graduated scientists with own research projects, the interdisciplinary collaborations were supported and intensified. The success speaks for itself: Only one year after the founding the number of members ran up to 19 and the list of projects became considerably larger.*

*During the winter semester of 2003/2004 the long awaited study program "Nanostrukturwissenschaft - Nanostructure and Molecular Sciences" was offered for the first time and it needed an admission restriction: there were twice as many registrations (80 students) as capacity. Even after many years of graduates of the program, it attracts lasting interest, although many universities have now launched similar courses. What is still unique in Kassel, however, is the balanced participation in the three natural science subjects of Physics, Chemistry and Biology.*

*The enormous presence and importance of the key technology "Nanostructure Science" in the 21st century was also reflected by the large number of persons from politics and science visiting the CINSaT. In addition to the Hessian Prime Minister, Roland Koch, the Mayor of Kassel, Georg Lewandowski, the retired Hessian Economics Minister, Dieter Posch, the Hessian Minister of Science, Udo Corts, have visited the scientific center of the University of Kassel as well as miscellaneous members of the Landtag and Bundestag. The awareness level of CINSaT in Kassel, in Hesse, in Germany and many other countries like China, USA or Japan was increased by the presence at several exhibitions and trade fairs such as HannoverMesse (Hannover), NanoTech (Tokyo) or NanoSolution (Cologne). To support the public relations and junior programs CINSaT performed expositions and talks in malls, schools and public events and the departments involved to CINSaT were introduced at open-door days. Since 2004 annual CINSaT colloquia are organized to strengthen the scientific exchange and professional discussions with talks of internal and external guests.*



With granting of additional financial support given by the University of Kassel CINSaT was included into the "Nano-netzwerk Hessen" – a cooperation project of the Hessian universities and advanced technical colleges with support of the Hessian Ministry of Science and Arts – in 2006. The central coordination was taken over by Kassel. In the same year the CINSaT research foci were regrouped to "Molecular interaction and mechanics" and "Electron systems and electromagnetic fields" due to changed project topics.

In 2010 – eight years after the foundation – the scientific advisory board evaluated the scientific center CINSaT. The University of Kassel followed the given advice to continue the research and a realignment took place: Additional to the new head of CINSaT Prof. Ehresmann who undertook the tasks from Prof. Frank Träger, the Professors Faust and Witzigmann were elected to form the new executive board. Besides the revision of the CINSaT rules of procedure where the explicit distinction between full and associate members were decided – CINSaT consisted of 25 members at that time – a new scientific advisory board was installed under the leadership of Prof. Markus C. Amann. Also the existing research foci were replaced by the following five topics: "threedimensional nanostructures", "biosensing", "photooxidative nanoparticles", "photonics" and "nanostructure science in natural sciences, engineering sciences and the arts". The CINSaT colloquium were extended to two days to have plenty of time for presentations of projects, ideas and techniques and for discussions to make the colloquium very successful.

On the 17th of October 2012 the tenth anniversary was celebrated in the Konzertsaal of the University of Kassel. The Hessian state secretary Ingmar Jung, the University President Prof. Dr. Rolf-Dieter Postlep, the head of the CINSaT scientific advisory board Prof. Markus-Christian Amann and the Director of the Nanotechnology Center Shanghai Prof. Li-Yi Shi participated the ceremony and presented greetings, whereas Dr. Karl-Heinz Haas (Fraunhofer Alliance Nanotechnology) gave an interesting and fundamental talk about the current research and the future of nanotechnology. The ceremony was complemented with music by a string trio. Afterwards the internal and external participants from science, politics, religion and industry were invited to a cozy get-together with buffet. Additional to the ceremony a special two-day conference on the unique at that time topic 3D nanostructures was organized by CINSaT. Here, several high-

level scientists from Germany and abroad participated and gave lectures.

The second evaluation took place in 2013. The scientific advisory board with its head Prof. Dr. Markus-Christian Amann commended the emerging trend of CINSaT and the new orientation of the research foci in 2010 was found to be correct. Due to the retreat of participating groups the research focus "photooxidative nanoparticles" was cancelled and replaced by the new research focus "chiral systems" which is significantly based on the LOEWE project "electron dynamics of chiral systems (ELCH)" – a research initiative funded by the state of Hesse.

Due to the inauguration of Prof. Ehresmann as vice president of the University of Kassel since the beginning of the winter semester 2015/16, a new executive board was elected by the members' meeting. The CINSaT executive board members were Prof. Herberg, Prof. Fuhrmann-Lieker and Prof. Witzigmann together with the new head of CINSaT Prof. Reithmaier, who took over the tasks from the former head Prof. Ehresmann. In the course of structural development and professionalization of CINSaT, the CINSaT regulations from 2013 were completely revised and, among others, the "Forschungskoordination" was established as a new instrument to initialize and promote coordinated research projects. The reformulation of the CINSaT regulation was passed by the presidium of the University of Kassel in August 2016. To show more public presence, it was decided in 2016 that the CINSaT would publish a newsletter every semester in which the individual groups could present themselves, new members introduce themselves, but current research work and publications could also be presented. The newsletters are available in printed or digital form.

In 2017, the research field of the CINSaT was enriched with a further focus. With the appointment of Prof. Singer at the University of Kassel and his rapid acceptance as a CINSaT member, the focus on "quantum technology" was created through his commitment. After the focus "Biosensorics" was renamed "Multiscale Bioimaging" in 2019 and the renaming of the focus "Nanostructure Sciences in the Natural Sciences, Engineering Sciences and Art" in "Nanomaterials" in 2021, the CINSaT has obtained its organizational structure that still exists today. The six focal points illustrate the broad interdisciplinary structure and the topicality of the research interests of our members.



*The success of the CINSaT idea of being the nucleus of coordinated projects is particularly evident in the recent past through the successful acquisition of the following cooperative research projects:*

*2013: LOEWE focus ELCH (Speaker: Arno Ehresmann)*

*2018: DFG Collaborative Research Center ELCH (Speaker: Thomas Baumert)*

*2019: LOEWE focus SMolBits (Speaker: Johann Peter Reithmaier)*

*2022: DFG Research Training Group "Multiscale Bioclocks" (Speaker: Monika Stengl)*

*Further initiatives in quantum optics and nanomaterials are being planned.*

*As described, the Center for Interdisciplinary Nanostructure Science and Technology (CINSaT) has developed and consolidated enormously since it was founded in 2002. The number of members has now grown to 36 and the successes are remarkable: the members of the CINSaT publish around 200 articles in scientific journals, around 20 doctorates are successfully completed and around 10 million euros in third-party funds are raised each year. The CINSaT and its members have left their mark on the scientific landscape, and these are becoming ever deeper and more lasting.*

# CINsaT-Schwerpunkte

## *CINsaT Focal Points*

### Schwerpunkt 1

#### 3-dimensionale Nanostrukturen

Aktuelle Materialtechnologien oder Synthesesysteme im Nano-maßstab basieren meistens auf Oberflächen-manipulationen, die in 2-dimensionalen funktionalen Systemen resultieren. Eine große Herausforderung in der Nanotechnologie stellt die kontrollierte Anordnung von nanoskaligen Bausteinen in drei Dimensionen dar. Dies führt zu funktionalisierten Materialien, deren chemische und physikalische Eigenschaften maßgeschneidert werden und mit denen letztendlich künstliche Materialien geschaffen werden können. 3-dimensionale Nanostrukturen werden molekulare Schaltkreise, ultradichte Magnetspeicher oder photonische Metamaterialien, z.B. für die

Anwendung bei optischen Tarnkappen ermöglichen. Im CINsaT werden dafür 3D Nanoimprint Lithografie, die 3D-Anordnung von Quantenpunkten, 3D-Hybridmaterialien und selbstorganisierende 3D-Strukturen untersucht sowie Strukturierung durch fs-Laserpulse und zukünftig auch 3D-Techniken zur Charakterisierung der Strukturen entwickelt. Technologien sind die Nanoimprint Lithographie oder die Selbstorganisation von Nanostrukturen. Mehrere Gruppen im CINsaT arbeiten auf dem Gebiet der Synthese, der Charakterisierung und der Anwendung von 3-dimensionalen Nanostrukturen.

### Schwerpunkt 2

#### Multiscale Bioimaging

Der Schwerpunkt "Multiscale Bioimaging" dient als Plattform für Interaktionen und Initiativen an der Schnittstelle zwischen Lebenswissenschaften, Physik, Materialwissenschaften und Ingenieurwesen. Der Schwerpunkt leitet sich aus dem früheren Schwerpunkt „Biosensorik“ ab, in dem Methoden und Technologien zur Detektion und Analyse von biologischen Prozessen und Substanzen (Biomarker, Metabolite) entwickelt wurden. Diese können als biomedizinische Marker für die Diagnostik bei HIV, Krebs, neurodegenerativen Erkrankungen und der persönlichen Gesundheitsüberwachung verwendet werden und spiegeln den gesellschaftlichen Trend der

patientennahen Diagnostik im medizinischen Bereich wider. Der neue Schwerpunkt "Multiscale-Bioimaging" zielt darauf ab, die Expertise von Biologen und Physikern für die Struktur- und Funktionsanalyse biologischer Systeme zu bündeln. Ziel dieses Schwerpunktes ist es, neue Methoden zur dynamischen Bildgebung biologischer Systeme über verschiedene Zeitskalen und bis hin zur nanoskaligen Auflösung im Raum zu entwickeln. Die Biowissenschaften behandeln Fragen zu Proben von der organismischen bis zur atomaren Ebene und beinhalten dynamische Prozesse, die innerhalb sehr kurzer bis sehr langer Zeitskalen liegen.

### 3-dimensional nanostructures

Current nano-scale material technologies or synthesis systems are mostly based on surface manipulations that result in 2-dimensional functional systems. A major challenge in nanotechnology is the controlled arrangement of nanoscale building blocks in three dimensions. This leads to functionalized materials whose chemical and physical properties are tailored and with which artificial materials can ultimately be created. 3-dimensional nanostructures will enable molecular circuits, ultra-dense magnetic storage or photonic metamaterials, e.g. For use

in optical stealth cloaks. At CINSaT, 3D nanoimprint lithography, the 3D arrangement of quantum dots, 3D hybrid materials and self-organizing 3D structures are being investigated, as well as structuring using fs laser pulses and, in the future, 3D techniques for characterizing the structures will also be developed. Technologies are nanoimprint lithography or the self-organization of nanostructures. Several groups in the CINSaT are working on the synthesis, characterization and application of 3-dimensional Nanostructures.

### Multiscale Bioimaging

The focal point "multiscale bioimaging" serves as a platform of interactions and initiatives at the interface between the life sciences and physics, material sciences and engineering. It is derived from the former focal point "biosensing" that served to develop methods and technologies with which biological processes and substances (biomarkers, metabolites) can be detected and analyzed. These can be used as biomedical markers for diagnostics in HIV, cancer, neurodegenerative diseases, and personal health monitoring, reflecting the societal trend of near-patient diagnostics in the medical field. The new

focal point 'multiscale bioimaging' aims at combining the expertise of biologists and physicists to engage in the structural and functional analysis of biological systems. The objective within this focal point will be to develop novel methods for imaging biological systems in a dynamic fashion over different time scales and up to nanoscale resolution in space. The life sciences laboratories contribute biological questions concerning samples from the organismal to the atomic level and covering dynamics that range within very short to long time scales.

## Photonik

Mit nanostrukturierten Materialien kann die Licht-Materie-Interaktion stark beeinflusst werden, mit breiten Anwendungsmöglichkeiten in der Optik und Optoelektronik. Mit nanostrukturierten Materialien kann man sowohl die Freiheitsgrade von Elektronen als auch die Ausbreitung von Licht in Materie kontrollieren bzw. einschränken bis zur vollständigen Lokalisierung von Elektronen und Photonen. Damit erreicht man auch eine drastische Erhöhung der Wechselwirkungsstärke zwischen Licht und Materie, wie sie mit makroskopischen Materialien nicht erreicht werden kann. Dazu werden sowohl Halbleiter,

dielektrische Materialien als auch Metalle eingesetzt, um z.B. elektronische Quantenpunkte, optische Mikrokavitäten bzw. plasmonische Effekte in metallischen Nanostrukturen zu realisieren. Mit diesen Ansätzen eröffnen sich neue Möglichkeiten sowohl für eine neue Generation von hocheffizienten optischen und optoelektronischen Bauelementen, als auch für einen fundamental neuen Bereich der optisch basierten Quanteninformationsverarbeitung, bei der die Information nur noch in der Eigenschaft von einzelnen Quantenteilchen, wie Elektronen, Photonen bzw. gekoppelten Quantensystemen, gespeichert wird.

## Chirale Strukturen

In fast allen Gebieten der Grundlagenwissenschaft und Angewandten Wissenschaft spielt die Chiralität eine wichtige Rolle, da das Zusammenspiel chiraler Objekte häufig von ihrer Händigkeit abhängt. Bekannte Beispiele aus der Moleküllwissenschaft sind die Wechselwirkung eines chiralen Medikamentes mit den entsprechenden chiralen Rezeptoren im menschlichen Körper und den sich daraus ergebenden unterschiedlichen Folgereaktionen, sowie die Wechselwirkung zirkular polarisierten Lichtes mit chiralen Molekülen die unterschiedlichste chiroptische Effekte hervorruft. Das erste

Beispiel verdeutlicht die Wichtigkeit ultraempfindliche und schnelle Analysemethoden zu entwickeln, während das zweite einen bequemen Weg dazu aufzeigt. CINSaT-Gruppen arbeiten an der Synthese, grundlegender theoretischer Beschreibung und neuartigen Detektionsmethoden wechselwirkender chiraler Systeme - auch jenseits der Moleküllwissenschaft. CINSaT-Mitglieder können chirale Systeme mit strukturiertem Licht vom XUV bis in den THz Bereich beleuchten, wobei die zeitliche Präzision bis in den Zeptosekundenbereich reicht.

## Photonics

*With nanostructured materials the light-matter interaction can be strongly influenced resulting in a broad application potential in optics and optoelectronics. With nanostructured materials the degree of freedom of electrons and the propagation of light in matter can be controlled and restricted down to a full localization of electrons and photons. With that one can obtain a drastic enhancement of the light-matter interaction not achievable in macroscopic materials. For that purpose semiconductor,*

*dielectric materials and metals are used to realize, e.g., Electronic quantum dots, optical microcavities or plasmonic effects in metallic nanostructures. These approaches open new possibilities for a new generation of highly efficient optical and optoelectronic devices as well as for a new area of optically based quantum information technology, in which the information is only stored in single particle properties like electrons, photons or coupled quantum systems.*

## Chiral Systems

*Chirality plays an important role in nearly all areas of fundamental and applied science, as often the interaction of chiral objects with each other depends on their handedness. Prominent examples taken from molecular sciences are the interaction of chiral drugs with the corresponding chiral receptors in the human body giving rise to different follow-up reactions or the interaction of circularly polarized light with chiral molecules giving rise to different chiroptical effects. The first example highlights the importance of*

*developing ultrasensitive and fast methods for chiral analysis and the second hints to a convenient way to perform such an analysis. Groups in CINSaT work on the synthesis, fundamental modelling and novel analysis schemes of interacting chiral systems in and beyond molecular sciences. CINSaT members can shine structured light on chiral systems ranging from the XUV to THz regime down to zeptosecond temporal precision.*

## Quantentechnologie

Der 2017 eingeführte Schwerpunkt „Quantentechnologie“ befasst sich mit der Anwendung von Quanteneffekten zur Realisierung von technologischen Objekten, die mit klassischen Methoden nicht erreichbar sind. In Kombination mit nanoskaligen Herstellungstechniken können Festkörperquantensysteme hergestellt werden, um maßgeschneiderte Quantentechnologien zu realisieren. Ionenfallen-basierte Quantensysteme ermöglichen die Erzeugung von Quantenbits mit hoher Wiedergabetreue. Dies ist die ideale Testplattform für neue Quantentechnologien. Im weiteren Fokus stehen atomare Maschinen, mit denen sich Quantenressourcen effizienter nutzen lassen. Zu diesem Zweck wurde bereits eine Einzelionen-Wärmekraftmaschine erfolgreich implementiert. Da diese Quantentechnologie jedoch mit

zunehmender Anzahl von Qubits nicht gut skaliert, ist es erforderlich, die bewährten Konzepte auf andere Quantensysteme zu übertragen. Ein wichtiges Ziel des Fokus der Quantentechnologie ist daher der Aufbau skalierbarer Quanteninformationsplattformen.

Ein Ansatz besteht darin, molekulare Quantensysteme der Seltenen Erden mit photonischen Systemen zu verbinden, um ein skalierbares Quantensystem zu realisieren und zu integrieren. Der Schwerpunkt kann auf eine breite Expertise in Physik, Chemie und Elektronik zurückgreifen. Eine Synergie aus Theorie, numerischer Methodik und Experimenten ist erforderlich, um neue Quantentechnologien zu entwickeln.

## Nanomaterialien

Die Materialwissenschaften und die Werkstofftechnik in Bereichen der Natur- und Ingenieurwissenschaften haben in den letzten Jahren erheblich an Bedeutung gewonnen. Im Fokus steht vorrangig die grundlagenorientierte Charakterisierung des strukturellen Aufbaus von Werkstoffen auf Nanostrukturebene, von welcher die chemisch-physikalischen und mechanischen Eigenschaften abhängen. Neben der Charakterisierung von Werkstoffen auf nanoskopischer Ebene ist die Entwicklung, Herstellung und Verarbeitung von Konstruktionswerkstoffen und

Funktionsmaterialien unter Einsatz von Nanomaterialien zentraler Punkt der Aktivitäten des Schwerpunkts Nanomaterialien. Auf Basis der Summe der entsprechenden Initiativen und der weithin strahlenden Sichtbarkeit der Thematik hat die Universität Kassel als einen von zwei Forschungsschwerpunkten das Thema Molekulare, Nano- und Mikro-komponenten für multifunktionale Werkstoffe, Bauelemente und Systeme gesetzt. Der Schwerpunkt Nanomaterialien beinhaltet die Aktivitäten des CINSaT rund um das Thema Materialforschung.

## Quantum Technology

The "Quantum Technology" focal point, introduced in 2017, deals with the application of quantum effects for the realization of technological objects that cannot be achieved with classical methods. In combination with nanoscale manufacturing techniques, solid-state quantum systems can be fabricated to realize customized quantum technologies. Ion trap-based quantum systems enable the generation of high-quality quantum bits. This is the ideal test platform for new quantum technologies. A further focus is on atomic machines with which quantum resources can be used more efficiently. A single-ion heat engine has already been successfully implemented for this purpose. However, since this quantum technology does not scale well with

an increasing number of qubits, it is necessary to transfer the proven concepts to other quantum systems. An important goal of the focus of quantum technology is therefore the construction of scalable quantum information platforms.

One approach is to combine rare earth molecular quantum systems with photonic systems to realize and integrate a scalable quantum system. The focus can draw on broad expertise in physics, chemistry, and electronics. A synergy of theory, numerical methodology and experiments is required to develop new quantum technologies.

## Nanomaterials

Materials science and materials technology in the fields of natural and engineering sciences have gained significantly in importance in recent years. The focus is primarily on the basic characterization of the structural composition of materials at the nano-structural level, on which the chemical-physical and mechanical properties depend. In addition to the characterization of materials at the nanoscopic level, the development, manufacture and processing of construction and functional materials using nano-

materials is a central point of the activities of the nanomaterials focal point. Based on the sum of the corresponding initiatives and the largely radiant visibility of the topic, the University of Kassel has set the topic of molecular, nano and micro components for multifunctional materials, building elements and systems as one of two main research areas. The focal point nanomaterials includes the activities of the CINSaT on the subject of materials research.

# Struktur des CINSaT

*CINSaT Organization Structure*

**CINSaT Mitgliederversammlung**  
*CINSaT Members General Assembly*

**Forschungskoordinationsrunde**  
*Scientific Coordination Committee*

**Vorstand**  
*Executive Board*

**Sprecher / Speaker**



Prof. Dr.  
J. P. Reithmaier



Prof. Dr.  
T. Fuhrmann-Lieker



Prof. Dr.  
T. Niendorf



Prof. Dr.  
F. W. Herberg

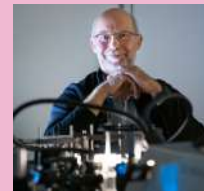
**Schwerpunktssprecher**  
*Focal Point Speakers*



Prof. Dr. H. Hillmer  
**3D Nanostrukturen**  
*3D Nanostructures*



Prof. Dr. P. Lehmann  
**Photonic**  
*Photonics*



Prof. Dr. A. Müller  
**Multiscale Bioimaging**  
*Multiscale Bioimaging*



Prof. Dr. K. Singer  
**Quantentechnologie**  
*Quantum Technology*



Prof. Dr. P. Demekhin  
**Chirale Strukturen**  
*Chiral Structures*



Prof. Dr. B. Middelndorf  
**Nanomaterialien**  
*Nanomaterials*



## Ordentliche Mitglieder *Full Members*

Prof. Dr. C. Backes	Prof. Dr. F. W. Herberg
Prof. Dr. T. Baumert	Prof. Dr. H. Hillmer
Prof. Dr. S. Böhm	Prof. Dr. J. Kleinschmidt
Prof. Dr. S. Buhmann	Prof. Dr. H. Klusmann
Prof. Dr. P. Demekhin	Prof. Dr. P. Lehmann
Prof. Dr. A. Ehresmann	Prof. Dr. M. Maniak
Prof. Dr. R. Faust	Prof. Dr. R. Matzdorf
Prof. Dr. T. Fuhrmann-Lieker	Prof. Dr. G. Mayer
Prof. Dr. M. E. Garcia	Prof. Dr. B. Middendorf
Prof. Dr. T. Giesen	Prof. Dr. A. Müller
Prof. Dr. P. Heim	Prof. Dr. S. Neupert

## Assoziierte Mitglieder *Associate Members*

Prof. Dr. T. Niendorf	PD Dr. M. Benyoucef
Prof. Dr. M. Pastor	Prof. Dr. T. Kusserow
Prof. Dr. R. Pietschnig	Dr. D. Wang
apl. Prof. Dr. C. Popov	Dr. A. Wetzel
Prof. J. P. Reithmeier	
Prof. Dr. R. Schaffrath	
Dr. A. Senftleben	
Prof. Dr. U. Siemeling	
Prof. Dr. K. Singer	
Prof. Dr. M. Stengl	

## Wissenschaftlicher Beirat *Scientific Advisory Board*



Prof. Dr.  
J. H. Freund  
(Fritz-Haber-Institut  
der MPG)



Prof. Dr.  
E. Lifshitz  
(Technion)



Prof. Dr.  
A. Offenhäuser  
(FZ Jülich)



Prof. Dr.  
U. Woggon  
(TU Berlin)

## Geschäftsführung *CINsaT Management*



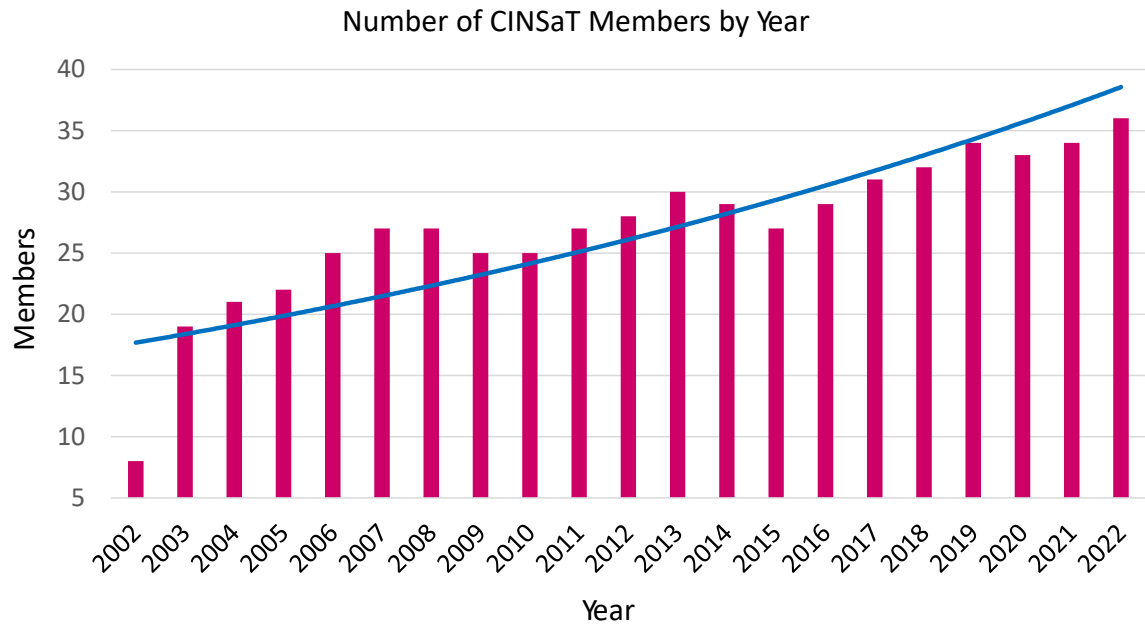
Dr. Daniel Merker  
(Executive Manager)

Olga Muss  
(Office)

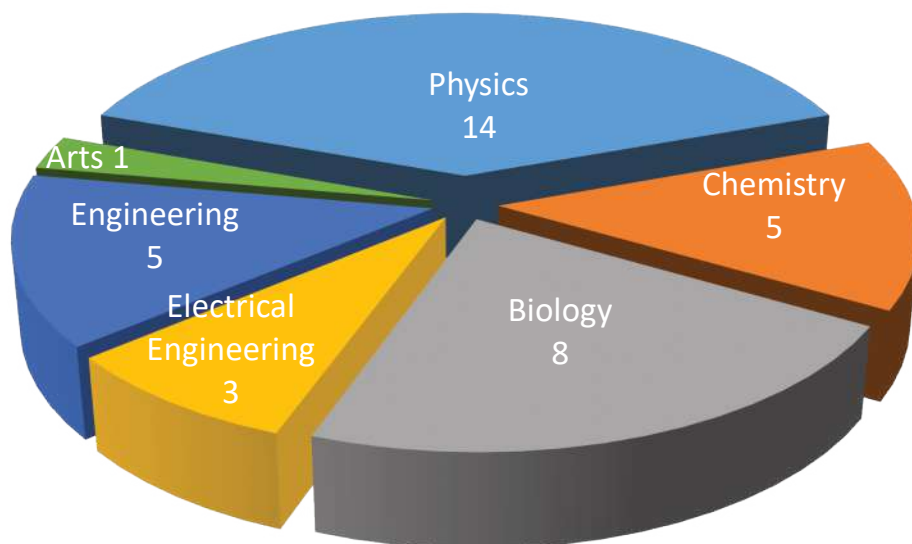
Florian Ott  
(Assistant to the Manager)

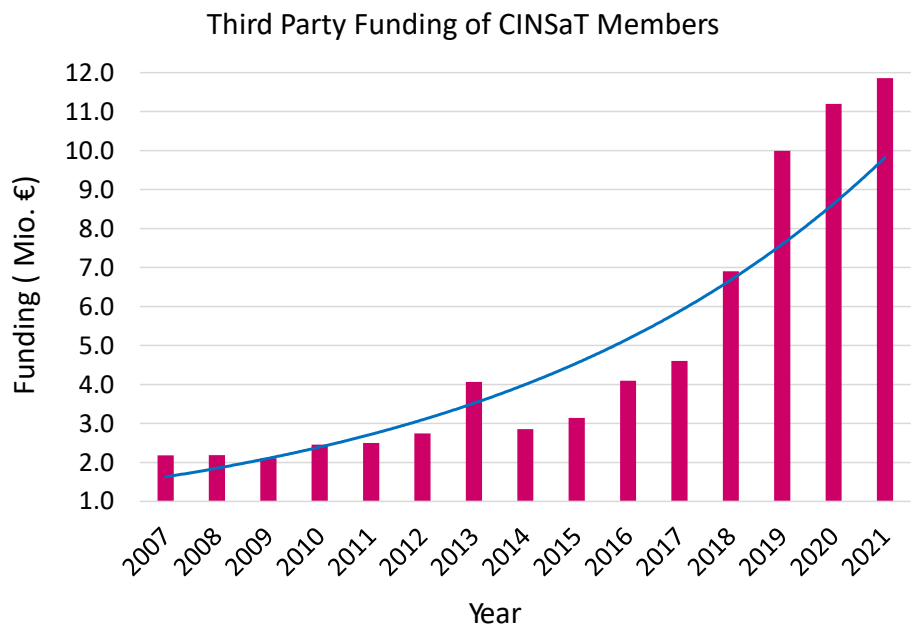
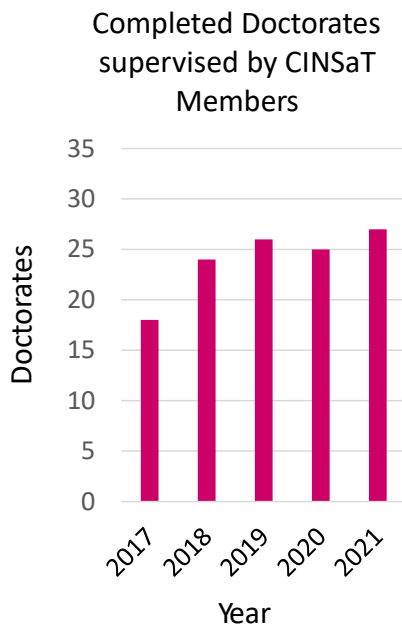
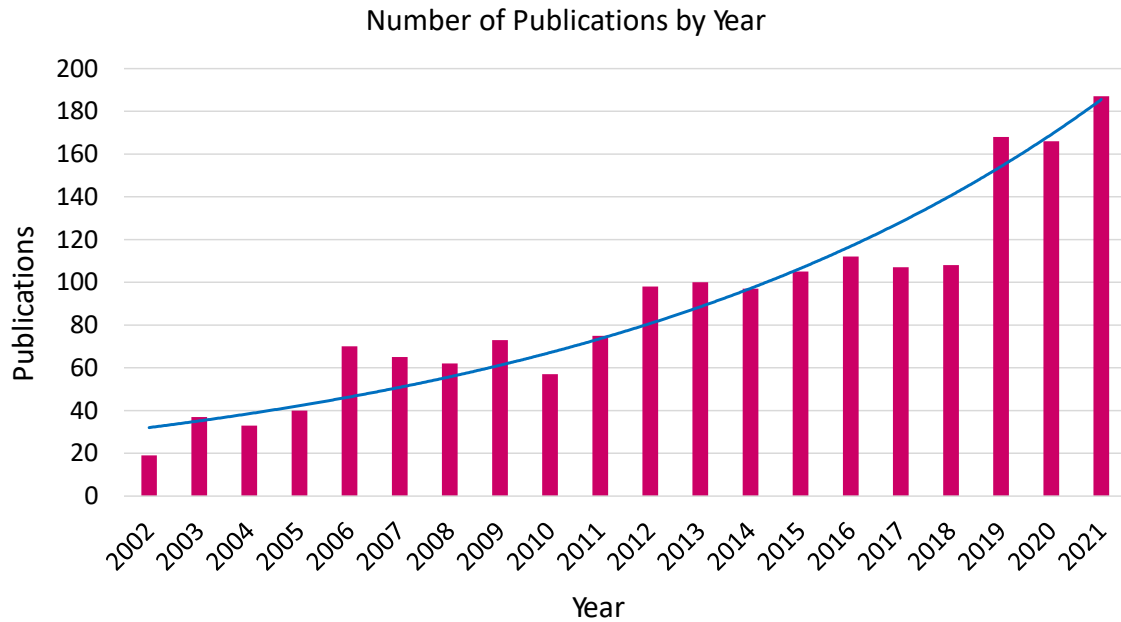
# CINSaT in Zahlen

## CINSaT Statistics



Departments of CINSaT Members (2022)





# Die Zukunft des CINSaT

## *Future of CINSaT*

Anlässlich des letzten Antrags zur Verlängerung des CINSaT-Forschungszentrums im Jahre 2020 wurde ein Zukunftsplan vorgestellt, der eine fundamentale Änderung der Zielsetzung mit beinhaltet. Bisher lag der Schwerpunkt in der Vernetzung von Forschergruppen unterschiedlicher Fachdisziplinen. Dafür gab es Instrumente, die die Diskussion und den Informationsaustausch untereinander fördern, wie die Frühjahr- und Herbstkolloquien, oder der Newsletter. Das CINSaT fungierte deshalb als virtuelles Zentrum ohne gemeinsame Verortung durch ein Gebäude oder ein Technologiezentrum. Das Institut für Nanostrukturtechnologie und Analytik (INA), das von Herrn Reithmaier aus der Physik und Herrn Hillmer aus der Elektrotechnik gemeinsam geführt wird, ist zwar durch die Mitgliedschaft des Direktoriums eng mit CINSaT verbunden, und ermöglichte einer Reihe von CINSaT-Mitgliedern den Zugang zu Nanotechnologien, aber war bisher nicht integraler Bestandteil des CINSaT.

Die Universität plant jedoch schon seit vielen Jahren die Verlegung der Naturwissenschaften von der Heinrich-Plett-Straße in den Hauptcampus der Universität im Stadtzentrum. Aktuell findet die Planung des ersten Bauabschnitts statt, bei dem

die Physik und das INA in neue Gebäude umziehen werden. Dieser Bauabschnitt beinhaltet dann auch Büro- und Laborflächen für das CINSaT, wobei insbesondere das INA übergehen wird in ein neues breiter aufgestelltes Nanotechnologiezentrum (NTC = nano technology center). Dieses ca. 1000 qm große Reinraumgebäude stellt ein zukünftiges fachbereichsübergreifendes "Key-Lab" dar, das vom CINSaT verwaltet und ein integraler Bestandteil werden soll. Damit wird der Übergang von einem virtuellen zu einem realen Forschungszentrum vollzogen werden können. Weitere Key-Labs mit den Schwerpunkten in den Materialwissenschaften, der Biologie und Chemie sind im Zuge weiterer Baumaßnahmen und der Weiterentwicklung der CINSaT-Organisationsstruktur geplant. Insofern wird den kommenden Forschergenerationen eine weltweit konkurrenzfähige Infrastruktur für die Nanotechnologien an der Universität Kassel zur Verfügung stehen.

Im Rahmen der Neuorganisation, werden, wie oben erwähnt, zusätzliche "Key-Labs" (wie das NTC) in die Organisationsstruktur integriert. Die neue Organisationsstruktur ist im dem folgenden Organisationchart illustriert.

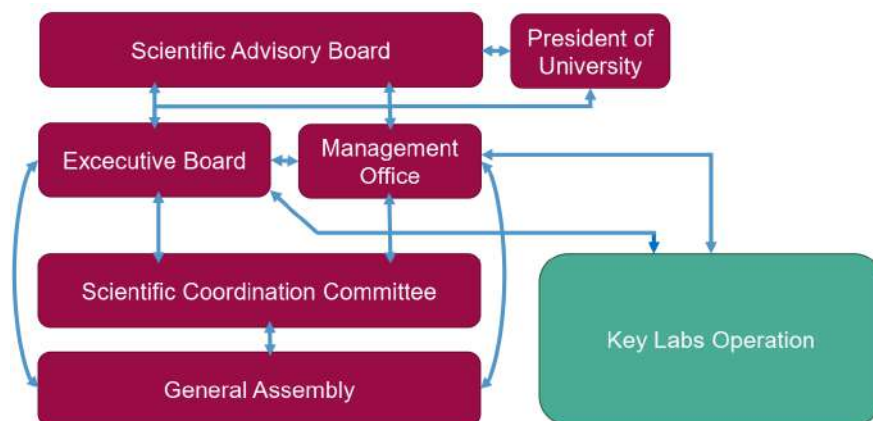


Illustration der neuen Organisationsstruktur des CINSaT erweitert durch den Betrieb von "key-labs".

*Illustration of the new organizational structure of CINSaT extended by the key lab operation.*

---

*On the last application for the extension of the CINSaT research center in 2020, a plan was presented that included a fundamental change of the objective of CINSaT. So far, the focus has been on networking research groups from different disciplines. There were instruments that promote discussion and the exchange of information among each other, such as the spring and autumn colloquia or the newsletter. The CINSaT therefore functioned as a virtual center without a common location through a building or a technology center. The Institute for Nanostructure Technology and Analytics (INA), which is managed jointly by Mr. Reithmaier from physics and Mr. Hillmer from electrical engineering, is closely linked to CINSaT through membership of the board of directors and has enabled several CINSaT members to access nanotechnology but has not been an integral part of the CINSaT so far.*

*However, the university has been planning for many years to move the science department from campus Heinrich-Plett-Strasse to the university's main campus in the city center. The first phase of construction, in which physics and INA will move to new*

*buildings, is currently being planned. This construction phase will then also include office and laboratory space for the CINSaT, with in particular the INA being converted into a new, broader nanotechnology center (NTC). This approx. 1000 square meter clean room building represents a future cross-departmental "Key Lab" which is managed by CINSaT and is to become an integral part. This will enable the transition from a virtual to a real research center to be completed. Further Key Labs with a focus on materials science, biology and chemistry are planned in the course of further construction work and further development of the CINSaT organizational structure. In this respect, future generations of researchers will have access to a globally competitive infrastructure for nanotechnology at the University of Kassel.*

*As mentioned above, as part of the reorganization, additional "Key-Labs" (such as the NTC) will be integrated into the organizational structure. The new organizational structure is illustrated in the following organization chart.*



# CINSaT in Bildern



CINSaT Stand am Campus Fest 2019  
CINSaT stall at the Campus Festival 2019



Forschung im CINSaT  
Research in CINSaT







CINSaT Frühjahrskolloquium 2020

*CINSaT spring colloquium 2020*



CINSaT Herbstkolloquium 2021

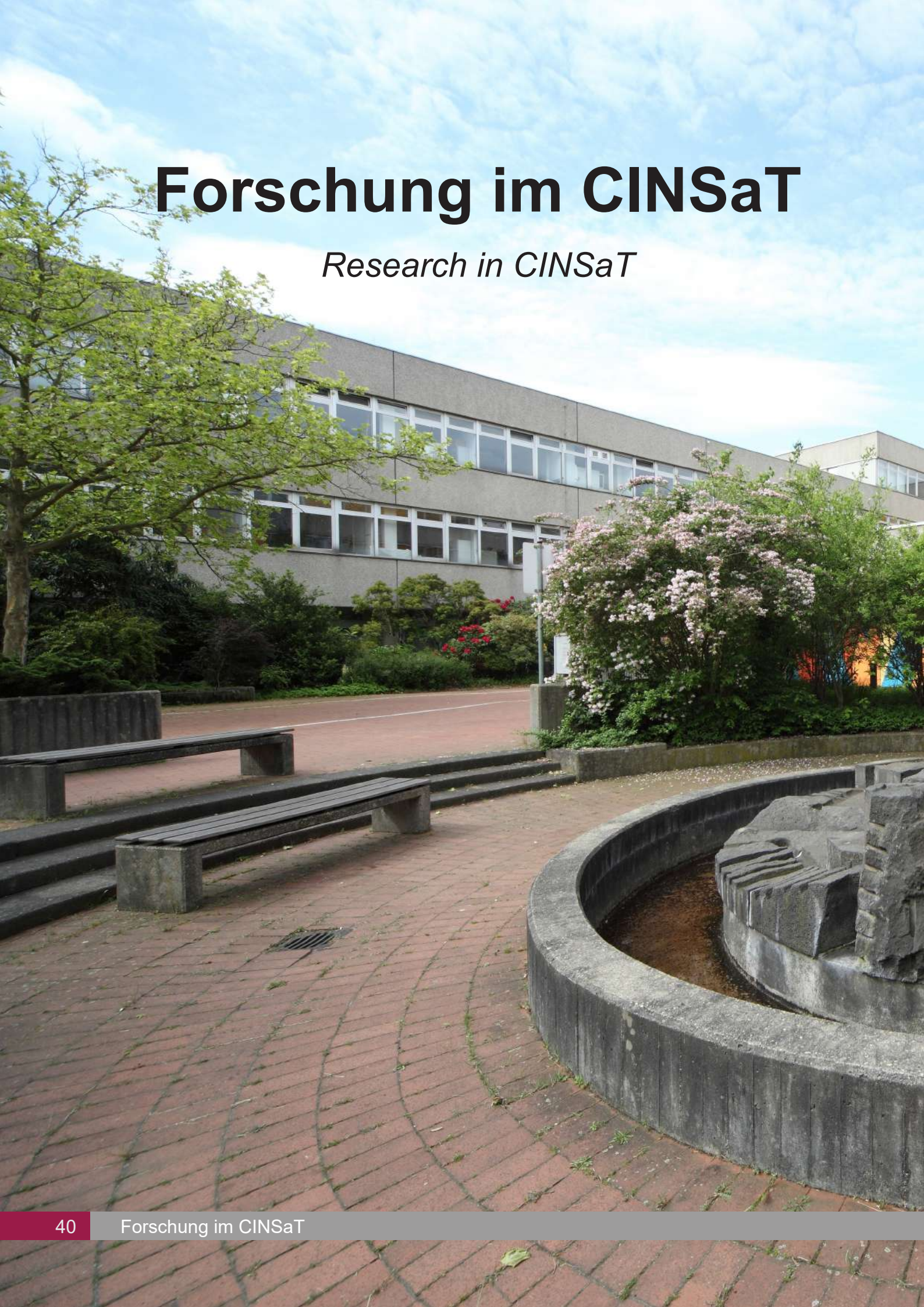
*CINSaT autumn colloquium 2021*





# Forschung im CINSaT

*Research in CINSaT*











Prof. Heike Klussmann

### Forschungsplattform BAU KUNST ERFINDEN

Die Forschungsplattform BAU KUNST ERFINDEN widmet sich dem Thema, wie Raum nachhaltig für die Zukunft unter sinnvollen ökonomischen Rahmenbedingungen entworfen, geplant und gebaut werden kann. Sie ist am Fachbereich Architektur, Stadtplanung und Landschaftsplanung der Universität Kassel angesiedelt und vereint Expertisen der gestaltungs-, entwurfs-, planungs- und baubezogenen Disziplinen.

Im Fokus steht, wie Werkstoffe (v.a. Beton, Ziegel, Holz, Textil) neu konzipiert, eingesetzt und funktionalisiert werden können, so dass sie neue Aufgaben in komplexen Systemen übernehmen. Es wird erforscht, wie Werkstoffe und Bauteile aktiviert und gezielt neue elektrische, mechanische, ästhetische, akustische oder optische Eigenschaften erhalten können, so dass sie z.B. berührungssensitiv, stromleitend, lichtlenkend oder energieerzeugend werden. Es wird skalenübergreifend von der molekularen Ebene im Nanomaßstab bis zum Gebäudekonzept gearbeitet. Hierfür werden interdisziplinären Entwurfsmethoden entwickelt, die künstlerische Strategien, Grundlagenwissenschaften und anwendungsorientierte ingenieurwissenschaftliche Strategien in der Entwurfs-, Planungs-, Prozess- und Produktionskette mitein-ander verbinden.

Mit den Materialentwicklungen BlingCrete – *Licht reflektierender Beton*, TouchCrete – *Berührungssensitiver Beton*, Magnetic Patterning of Concrete, Botanical Concrete – Betonsubstrate für Kryptogamen und Tracheophyten für die vertikale Begrünung, SolarChip und DysCrete – *Energie erzeugende Fassadensysteme/Betone* wurden neuartige Standards für Beton entwickelt, die diesen Baustoff in die Lage versetzen, zum ersten Mal lichtreflektierend, informationsübertragend, begrünt und energieerzeugend zu sein.

Im Fokus der Projekte TETHOK - *Textile Tektonik für den Holzbau*, FLIGNUM – Endlosfaden aus Massivholz, SALIX REGIONALIS 3D – Gewebtes Holz, TeraX – Geflochtenes Holz und VOTO - *Weidengewebeverstärkter Kunststoff* steht die Entwicklung der neuen Werkstoffklasse der „Holz-Textilien“. Die projektübergreifende Fragestellung ist, wie Bauteile in der Architektur und dem Bauwesen auf der Basis von endlosen Fäden aus Massivholz textil aufgebaut und gefügt werden können und wie die daraus entstehende textile Tektonik für den Holzbau in seiner Gesamtheit entworfen, konstruiert, berechnet und simuliert, funktionalisiert und hergestellt werden kann. Der neuartige Endlosfaden aus Holz wird dabei als kleinstes gemeinsames Bauelement definiert. Für das Gestalten und Bauen mit Holz, dessen Nachfrage aufgrund seiner hervorragenden Ökobilanz und natürlichen Leichtbaueigenschaften kontinuierlich steigt, ist der Holzfaden ein Disruptor, auf dessen Grundlage die Vorteile leichter, fester, ästhetischer und bei Bedarf funktionalisierter textiler Bauteile mit den Vorteilen von Holz vereint werden könnten. Es entsteht eine mit dem Makrobauteil interagierende Mikrostruktur. Die natürlich gewachsenen physikalischen und ästhetischen Eigenschaften des Endlos-



Abbildung 1: Textile Tektonik im Holzbau: Gewebe aus Massivholzmonofil  
© BAU KUNST ERFINDEN

Figure 1: Textile Tectonics for Wood Construction: Woven fabric made from solid-wood monofilament © BAU KUNST ERFINDEN



Abbildung 2: TERA X – Geflochtenes Holz: Technisches Radialflechten von Massivholzstrukturen © BAU KUNST ERFINDEN

Figure 2: TERA X - Braided wood: Technical radial braiding of solid wood structures © BAU KUNST ERFINDEN



fadens aus Holz sind durch eine gezielte Bearbeitung seines Querschnitts und seiner Oberfläche bis zu einem gewissen Grad steuerbar. Entlang der strukturbildenden Kette Faden – *textiles Gefüge – Bauteil – Tragstruktur* werden diese Eigenschaften in jede der Dimensionen und in Abhängigkeit voneinander entwickelt und finden in der jeweils dimensions-typischen Gestalt Ausdruck bis hin zum Bauwerk. Die Vorteile dieser so textil und additiv gefügten Strukturen und Verbunde für den Holzbau liegen in ihrer überragenden Eignung für leichtes Bauen durch steuerbare Materialeigenschaften, ihren Funktionalisierungs- und Formgebungsmöglichkeiten, ihren hochentwickelten und erprobten Herstellungs- und Verarbeitungstechnologien, sowie ihrer seit Jahrtausenden bekannten und immer wieder wandelbaren charakteristischen Ästhetik paralleler und sich überkreuzender Fäden.

Die Forschungsplattform BAU KUNST ERFINDEN wurde international ausgezeichnet, unter anderem mit dem iF Gold Award für besonders innovative Materialentwicklung und herausragende Designleistung, dem Design Plus Award, dem International Tunnelling and Underground Space Award und dem Hessischen Hochschulpreis für Exzellenz in der Lehre.

## **BUILDING ART INVENTION research platform**

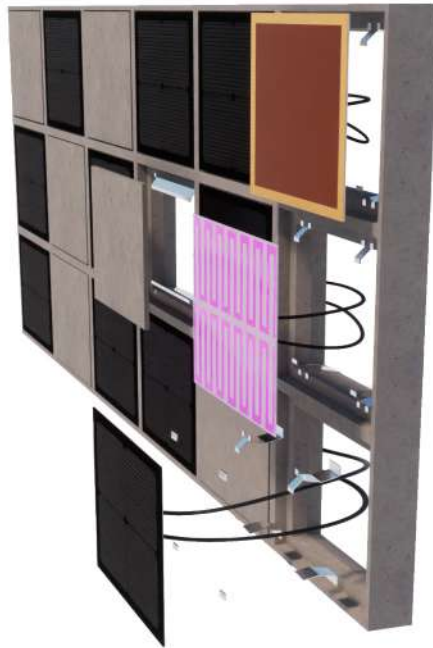
*The BUILDING ART INVENTION research platform pools expertise from the fields of art, design, planning, and construction in the service of exploring how space can be sustainably designed, planned, and built for the future within sensible economic parameters. Our focus is on finding new ways of thinking about, using, and functionalizing materials (especially concrete, brick, wood, and textiles) so that they can take on new roles in complex systems. We study how materials and components can be activated and given distinctive new electrical, mechanical, aesthetic, acoustic, and optical characteristics, so that they become, for example, touch-sensitive, electrically conductive, light-transmitting, or photoactive. To achieve these goals, we develop interdisciplinary design methods that incorporate artistic strategies, basic research, and application-oriented engineering methods into the design, planning, process, and production chain.*

*With BlingCrete – light reflective concrete, TouchCrete – touch sensitive concrete, Magnetic Patterning of Concrete, Botanical Concrete – Concrete substrates for cryptogams and tracheophytes for vertical greening, SolarChip and DysCrete – energy generating concrete, the BUILDING ART INVENTION research platform has developed novel standards of concrete, enabling this material to be lightreflecting, informationconveying, green and energy generating for the very first time.*

*The projects TETHOK - Textile Tectonics for Wood Construction, FLIGNUM – A Solid Wood Monofilament, SALIX REGIONALIS 3D – Woven Wood, TeraX – Tubular Solid Wood Braids and VOTO – Willow Reinforced Composites focus on the development of a new class of wood-textile materials. The primary questions are how textile processes can be used to build and assemble structural components from wood fibers, and how*

the resulting textile architectures can be designed, constructed, modeled, simulated, made functional, and manufactured as complete units for use in wood construction. The novel continuous wood fiber is defined as the minimal structural element. In terms of designing and building with wood, a material that is increasingly in demand as a result of its outstanding environmental performance and natural suitability for light construction, wood fiber is a disruptor that offers the possibility of combining the advantages of lightweight, sturdy, visually appealing, and functionally versatile textile structural elements with the advantages of wood. The result is a microstructure that interacts with the macrostructural element. Through directed

modification of the wood fiber's profile and surface, its naturally physical and aesthetic characteristics can be customized to a certain degree. These characteristics are explored and developed in every dimension along the entire chain of structure formation, from fiber to textile to structural element to load-bearing structure, finding expression in the specific form created at each level, all the way up to the complete structure. The advantages of such additively assembled textile structures and composites include their excellent suitability for light construction, thanks to the controllability of the material's characteristics; their great versatility of form and function; their use of refined and tested manufacturing and processing technologies; and a characteristic, ever-changing, deeply familiar aesthetic of parallel and crossing threads.



The BUILDING ART INVENTION research platform has received numerous international awards, among others the iF Material Gold Award for outstanding materials research and design achievement, the German Design Prize, the Design Plus Award, the International Tunnelling and Underground Space Award and the Higher Education Prize for Teaching Excellence.

Abbildung 3: Solarchip: Entwicklung eines betonintegrierten multifunktionalen Infrastruktursystems zur Kontaktierung und Verschaltung von PV-Zellen © BAU KUNST ERFINDEN

Figure 3: Solarchip: Development of a concrete-integrated multifunctional infrastructure system for contacting and interconnecting PV cells © BAU KUNST ERFINDEN

## Weiterführende Informationen / Further Information

### Prof. Heike Klussmann

Universität Kassel  
Henschelstr. 2  
34127 Kassel  
Raum 3112

Tel: +49 561 804-2396  
E-Mail: [klussmann@asl.uni-kassel.de](mailto:klussmann@asl.uni-kassel.de)  
Website: [www.uni-kassel.de/fb06](http://www.uni-kassel.de/fb06)  
[www.baukunstfinden.org](http://www.baukunstfinden.org)









# Biochemie

## Biochemistry



Prof. Dr. Friedrich W. Herberg

*Proteine sind molekulare Schalter innerhalb von Zellen - wie man sie künstlich herstellen, verändern und als molekulare Werkzeuge nutzen kann.*

Die Abteilung Biochemie beschäftigt sich mit der Struktur, Funktion und Regulation von Proteinkinasen. Wir treffen Funktionsvorhersagen basierend auf dreidimensionalen Strukturmodellen, um auf molekularer Ebene zu verstehen, wie diese „Nanomaschinen“ funktionieren. Dazu werden die zu untersuchenden Proteine in Bakterien oder Zellkulturen künstlich hergestellt (Abb. 1). Zusätzlich können wir diese Proteine gentechnisch verändern, um den Einfluss, auch krankheitsrelevanter Mutationen, auf die Funktionalität der Proteine (Aktivität, Bindungsverhalten, Lokalisation in Zellen etc.) zu untersuchen (Abb. 2).

### Proteinkinasen - eine Familie von Proteinen, die das Leben regulieren

Wir arbeiten seit Jahren an Enzymen der Familie der Proteinkinasen, die ATP, den Energielieferanten der Zelle nutzen, um andere Proteine ein- oder auszuschalten (Abb. 3). Proteinkinasen steuern Stoffwechselprozesse wie unseren Zuckerhaushalt (cAMP-abhängige Proteinkinase, kurz PKA) oder Blutdruck (cGMP-abhängige Proteinkinase, PKG). Mutationen eben dieser Proteine sind folglich häufig auch an der (Fehl)regulation von Zellen im Allgemeinen beteiligt, was bspw. zu Krankheiten wie Krebs und dem Cushings Syndrom führen kann (PKA) oder darüber hinaus neurodegenerative Erkrankungen wie Morbus Parkinson (Leucine-Rich Repeat Kinase 2, LRRK2) oder Probleme der Schmerzentwicklung befördern kann.

PKA dient als Modellsystem für die Proteinkinase-Familie. Wir analysieren Komponenten des PKA-Systems im Kontext der zugehörigen Signalnetzwerke und assoziierten Krankheiten (Ramms et al., Pharmacol Rev., 2021; DOI: 10.1124/pharmrev.120.000269). Dabei versuchen wir zu verstehen, wie ein

extrazelluläres Signal (Hormon oder physikalischer Reiz wie Hitze, Licht oder Druck) intrazellulär über eine Kaskade miteinander wechselwirkender Proteine verarbeitet wird, um letztendlich eine Reaktion der Zelle auf das ursprüngliche Signal auszulösen (Abb. 4). Oftmals werden solche Antworten durch kleine, chemische Verbindungen vermittelt, sog. sekundäre Botenstoffe. Bei PKA ist dieser sekundäre Botenstoff cAMP, bei PKG ist es cGMP. cGMP ist beispielsweise in den Sehprozess bzw. Erkrankungen der Netzhaut (Retinitis pigmentosa, BMBF-Verbundprojekt TargetRD) involviert. Mit unserer Arbeit an der Kinase LRRK2 sind wir in ein internationales Forschungsnetzwerk eingebunden, um die Ursachen von Morbus Parkinson besser zu verstehen und neue Therapieansätze zu entwickeln. Diese Arbeiten werden z.B. durch die Michael J. Fox Foundation for Parkinson's Research gefördert.

Innerhalb von CINSaT gibt es gemeinsame Projekte mit dem Fachgebiet Entwicklungsgenetik zu Microtubuli-assoziierten Serin/Threonin Kinasen (MAST), während im neuen DFG-geförderten Graduiertenkollegs „Clocks“ am Wechselspiel verschiedener sekundärer Botenstoffe wie cAMP, cGMP und Calcium sowie der Verankerung von Proteinen über AKAPs (A-Kinase Ankerproteine) in intrazellulären Netzwerken geforscht wird. In diesen medizinisch orientierten Projekten werden Substanzen charakterisiert, die spezifisch krankheitsrelevante Signalwege unterbrechen und somit als potenzielle Pharmazeutika dienen könnten. Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeitsgruppe liegt in der Charakterisierung/Beschreibung molekularer Werkzeuge für die diagnostische Anwendungen.

### BIA – Biomolekulare Interaktionsanalyse

Wer spricht in der Zelle mit wem und wie intensiv?

Methodisch sind unsere Arbeiten biochemisch, strukturbiochemisch, molekularbiologisch und zellbiologisch orientiert und lassen sich unter dem Oberbegriff „biomolekulare Interaktionsanalyse“ (BIA) zusammenfassen. Unser *in vitro*-Schwerpunkt (also „im Reagenzglas“) ist die BIA mittels Oberflächenplasmonresonanz (surface plasmon resonance, SPR) - Spektroskopie, bei der wir international führend sind. Wir

Abbildung 1: Herstellung und Reinigung von Proteinen, welche gentechnisch verändert und in *Escherichia coli* Bakterienzellen produziert wurden.

Figure 1: Production and purification of proteins that have been genetically modified and produced in *Escherichia coli* bacterial cells.





Abbildung 2: Arbeiten „in vitro“ (im Reagenzglas) werden durch Untersuchungen in lebenden Zellen („in cellulo“) ergänzt. Das erlaubt das Verständnis der Funktion in einem organismischen Zusammenhang. Das Bild zeigt die Pflege von Säugerzellen in einer Laborsicherheitsbank.

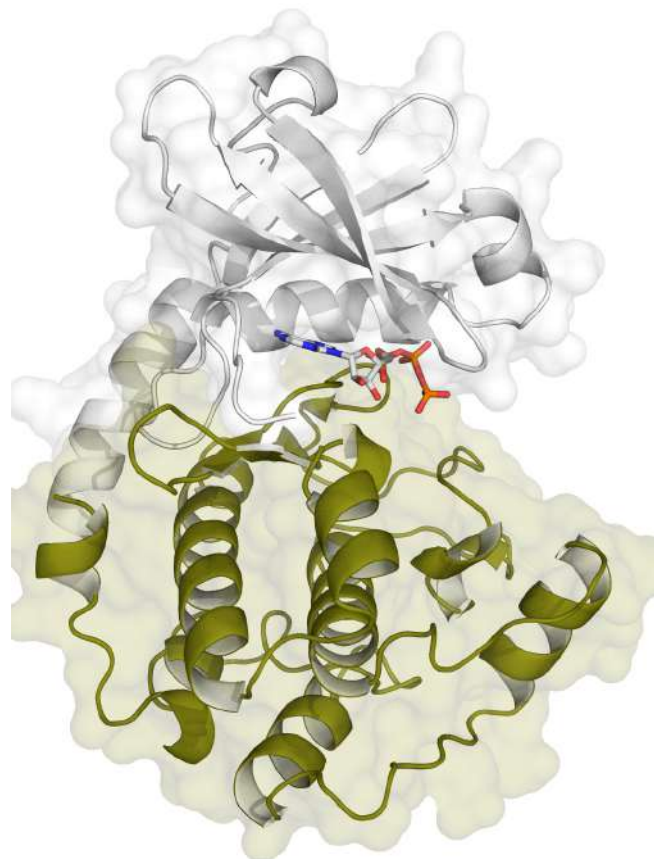
*Figure 2: Work "in vitro" (in the test tube) is complemented by studies in living cells ("in cellulo"). This allows the understanding of function in an organismic context. The picture shows the maintenance of mammalian cells in a laboratory safety bench.*

kooperieren hier eng mit der Firma Biaffin GmbH & Co. KG, die als spin-off der Biochemie seit 2002 am Standort ansässig ist und die Methodik als kommerzieller Dienstleister anbietet. Diese Technik erlaubt es, molekulare Wechselwirkungen von Biomolekülen in Echtzeit mittels mikrofluidischer Biosensoren zu untersuchen und dabei getrennt das Assoziations- und das Dissoziationsverhalten von Molekülen zu messen – ein enormer Vorteil, wenn es um die Charakterisierung von Bindemolekülen geht.

Neueste BIA-Entwicklungen nutzen die Schwingungen nanoskaliger DNA-Fragmente aus um, wie mit SPR, direkt molekulare Wechselwirkungen kinetisch messen zu können (switchSENSE-Technologie, Abb. 5). Darüber hinaus haben sich unsere Arbeiten in den letzten Jahren zunehmend auf Analysen biologischer Wechselwirkungen in lebenden Zellen fokussiert, wobei unser methodischer Schwerpunkt im Bereich

Abbildung 3: Kristallstruktur einer Proteinkinase, hier die katalytische Untereinheit der PKA. Im Zentrum ist ein Molekül ATP dargestellt, von dem die Proteinkinase eine Phosphatgruppe auf ein Zielprotein überträgt und so Schaltprozesse in Zellen durchführt.

*Figure 3: Crystal structure of a protein kinase, here the catalytic subunit of PKA. A molecule of ATP is shown in the center, from which the protein kinase transfers a phosphate group to a target protein and thus carries out switching processes in cells.*



Biolumineszenz-Resonanzenergietransfer (BRET; Prinz et al., ChemBioChem, 2006; doi: 10.1002/cbic.200600048) liegt.

SPR und BRET haben uns eine Vielzahl von Forschungs-kooperationen und Forschungsförderungen durch die DFG, das BMBF, die EU und diverse Stiftungen ermöglicht. Darüber hinaus versuchen wir Technologiekonzepte mit Firmen aus dem Biotechnologiesektor, der Analytik und Diagnostik umzusetzen. Mit Arbeitsgruppen aus der Physik (AG Ehresmann, Exp Physik;

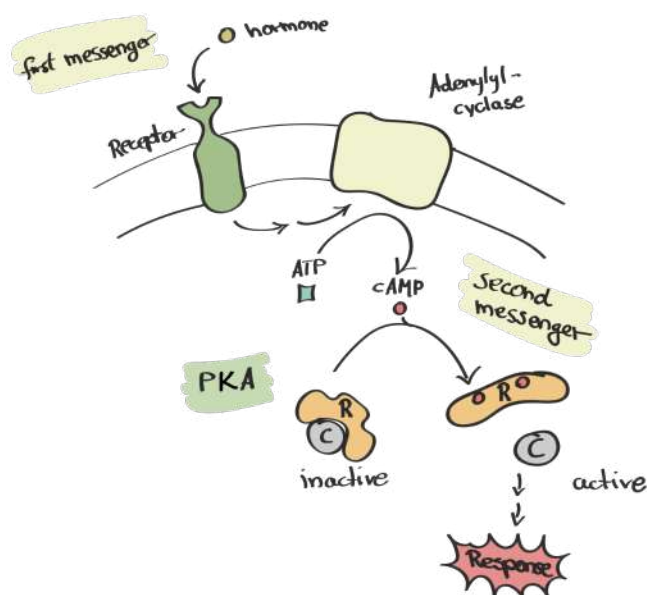


Abbildung 4: Signaltransduktion über sekundäre Botenstoffe am Beispiel der PKA: Ein erster Botenstoff wie ein Hormon dockt an einem Rezeptor an der Außenseite einer Zelle und löst eine Enzymkaskade aus, die letztendlich viele Moleküle des sekundären Botenstoffs cAMP generiert. cAMP bindet an eine regulatorische Untereinheit „R“ der PKA, die dadurch die katalytische Untereinheit „C“ freigibt, worauf letztere Schaltprozesse in der Zelle („response“) bewirkt.

Figure 4: Signal transduction via secondary messengers using the example of PKA: A first messenger such as a hormone docks at a receptor on the outside of a cell and triggers an enzyme cascade that ultimately generates many molecules of the secondary messenger cAMP. cAMP binds to a regulatory subunit "R" of the PKA, which thereby releases the catalytic subunit "C", whereupon the latter causes switching processes in the cell ("response").

Reginka et al., Langmuir, 2021; doi: 10.1021/acs.langmuir.1c00900) haben wir angefangen, *Point-of-Care*-Geräte (PoC) basierend auf magnetischen Nanopartikeln für mikrofluidische Anwendungen zu entwickeln. Andere Kooperationen in CINSaT gehen in den Bereich der biologischen Kopplung von Proteinen auf Diamantoberflächen (AG Popov, Merker et al., Diamond & Related Materials, 2018; doi: 10.1016/j.diamond.2018.09.027).

### Entwicklungen in CINSaT

Innerhalb des wissenschaftlichen Zentrums CINSaT konzentrieren wir uns auf die Entwicklung neuer Ansätze für die BIA mit verschiedenen Zielen:

1. Steigerung der Empfindlichkeit SPR-basierter Biosensoren z.B. durch die Kombination von SPR mit dem magneto-optischen Kerr-Effekt und speziellen Schichtsystemen (2D-MO-SPR, Kooperation mit AG Ehresmann, Kämpf et al., J. Applied Physics, 2012; doi: 10.1063/1.4742130)

2. Entwicklung biofunktionalisierter Magnetpartikel für den Transport und die Sortierung von Biomolekülen (Kooperation mit AG Ehresmann, Reginka et al., Langmuir, 2021; doi: 10.1021/acs.langmuir.1c00900)
3. Modellierung und Simulation von Proteinkinase-Strukturen in Kooperation mit AG Garcia, Theoretische Physik
4. Entwicklung biofunktionalisierter Diamantoberflächen für PoC-Anwendungen und zur Detektion von Neuropeptiden (Kooperation mit AG Popov, AG Stengl)

Weitere Entwicklungen gehen in das Design neuer biochemischer Werkzeuge auf Protein-/Molekülebene, indem wir maßgeschneiderte Bindemoleküle (Proteine, Nukleotide) herstellen und für unsere Biosensoren anpassen. Diese Art von Forschung kann für die Zusammenarbeit mit verschiedenen Arbeitsgruppen innerhalb oder außerhalb der Universität Kassel adaptiert werden und hat bereits zu vielen Kooperationen geführt.

Proteins are molecular switches within cells - how they can be artificially produced, modified and used as molecular tools.

The Department of Biochemistry focuses on the structure, function and regulation of protein kinases. We make functional predictions based on three-dimensional structural models to understand at the molecular level how these "nanomachines" function. To do this, we artificially produce the proteins of interest

in bacteria or cell cultures (Fig. 1). In addition, we can genetically modify these proteins to study the influence, including disease-relevant mutations, on the functionality of the proteins (activity, binding behavior, localization in cells etc.) (Fig. 2).

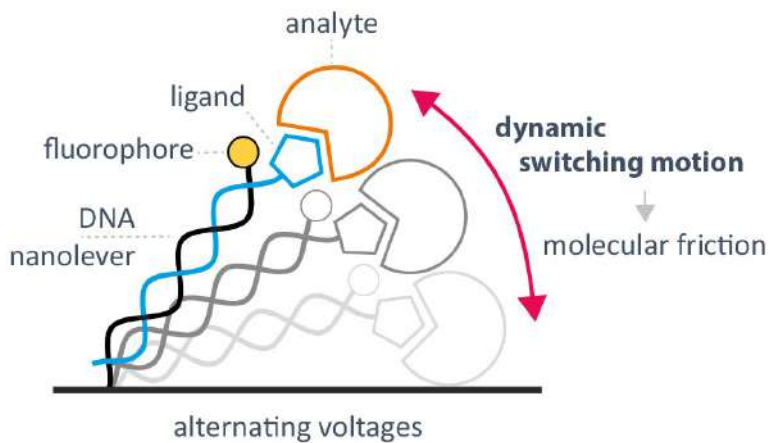


Abbildung 5: Oben: Prinzip von switchSENSE-Analysen. Um die Bindung von zwei Biomolekülen „in vitro“ beobachten zu können, wird ein Molekül, der „Ligand“ an einen DNA-Faden (Blau) gekoppelt und die Fluoreszenz eines komplementären Stranges (schwarz) während des Schaltens in einem elektrischen Feld gemessen. Bei Bindung eines Interaktionspartners (Analyt) an den Liganden verändert sich die Schaltgeschwindigkeit und damit das Fluoreszenzsignal. Dadurch können die Bildung und Auflösung des Molekülkomplexes quantitativ bestimmt werden. Unten: Interaktionsanalyse mittels eines heliX+-Bioanalyzers, in dem die switchSENSE-Technologie angewandt wird.

Figure 5: Top: Principle of switchSENSE analyses. In order to observe the binding of two biomolecules "in vitro", a molecule, the "ligand" is coupled to a DNA thread (blue) and the fluorescence of a complementary strand (black) is measured during switching in an electric field. When an interaction partner (analyte) binds to the ligand, the switching rate changes and so does the fluorescence signal. This allows the formation and resolution of the molecular complex to be quantitatively determined. Bottom: Interaction analysis using a heliX+ bioanalyzer in which the switchSENSE technology is applied.



### Protein kinases - a family of proteins that regulate life

We have been working for years on enzymes of the protein kinase family that use ATP, the cell's energy supplier, to switch other proteins on or off (Fig. 3). Protein kinases control metabolic processes such as our sugar balance (cAMP-dependent protein kinase, PKA) or blood pressure (cGMP-dependent protein kinase, PKG), and mutations of these proteins are therefore frequently involved in the (mis)regulation of cells (cancer), Cushing's syndrome, neurodegenerative diseases such as Parkinson's disease (Leucine-Rich Repeat Kinase 2, LRRK2) or pain development.

PKA serves as a model system for the protein kinase family. We analyze components of the PKA system in the context of associated signaling networks and associated diseases (Ramms et al., *Pharmacol Rev.*, 2021; DOI: 10.1124/pharmrev.

120.000269). Here, we seek to understand how an extracellular signal (hormone or physical stimulus such as heat, light, or pressure) is processed intracellularly through a cascade of interacting proteins to ultimately trigger a cellular response to the original signal (Fig. 4). Often, such responses are mediated by small, chemical compounds called secondary messengers. In PKA, this secondary messenger is cAMP; in PKG, it is cGMP. cGMP is involved, for example, in the visual process or diseases of the retina (retinitis pigmentosa, BMBF joint project TargetRD). With our work on the kinase LRRK2, we are involved in an international research network to better understand the causes of PD and to develop new therapeutic approaches. This work is funded, for example, by the Michael J. Fox Foundation for Parkinson's Research.

Within CINSaT there are joint projects with the Department of Developmental Genetics on microtubule-associated serine/threonine kinases (MAST), while in the new DFG-funded Research Training Group "Clocks" research is being conducted on the interplay of various secondary messengers such as cAMP, cGMP and calcium, as well as the anchoring of proteins via AKAPs (A-kinase anchor proteins) in intracellular networks. In these medically oriented projects, substances are characterized



Abbildung 6: Lagerung von künstlich hergestellten Proteinen bei -80 °C in Ultratiefkühlschränken.

Figure 6: Storage of man-made proteins at -80 °C in ultra-low temperature freezers.

that specifically interrupt disease-relevant signaling pathways and could thus serve as potential pharmaceuticals. Another focus of the group is the development of molecular tools for diagnostic applications.

### BIA - Biomolecular Interaction Analysis

*Who talks to whom in the cell and how intensively?*

Methodologically, our work is biochemical, structural biological, molecular biological and cell biological oriented and can be summarized under the generic term "biomolecular interaction analysis" (BIA). Our in vitro focus (i.e. "in the test tube") is BIA using surface plasmon resonance (SPR) technology, in which we are international leaders. We cooperate closely with the company Biaffin GmbH & CoKG, which has been based at the site since 2002 as a spin-off of Biochemistry and offers the methodology as a commercial service provider. This technique makes it possible to study molecular interactions of biomolecules in real time by means of microfluidic biosensors and to measure separately the association and dissociation behavior of molecules - an enormous advantage when it comes to characterizing binding molecules.

Recent BIA developments exploit the vibrations of nanoscale DNA fragments to directly measure molecular interactions kinetically, as with SPR (switchSENSE technology, Fig. 5). In addition, our work in recent years has increasingly focused on analyses of biological interactions in living cells, with our methodological focus on bioluminescence resonance energy transfer (BRET; Prinz et al., ChemBioChem 2006 doi: 10.1002/cbic.200600048).

SPR and BRET have enabled us to obtain a large number of research collaborations and research funding from the DFG, the BMBF, the EU, and various foundations. In addition, we try to implement technology concepts with companies from the biotechnology sector, analytics and diagnostics. With research groups from physics (AG Ehresmann, Exp Physik; Reginka et al., Langmuir, 2021; doi: 10.1021/acs.langmuir. 1c00900), we have



begun to develop point-of-care (PoC) devices based on magnetic nanoparticles for microfluidic applications. Other collaborations in CINSaT are in the area of biological coupling of proteins on diamond surfaces (AG Popov, Merker et al., Diamond & Related Materials, 2018; doi: 10.1016/j.diamond.2018.09.027).

### Developments in CINSaT.

Within the CINSaT scientific center, we focus on the development of new approaches for BIA with several goals:

1. increasing the sensitivity of SPR-based biosensors e.g. by combining SPR with the magneto-optical Kerr effect and special layer systems (2D-MO-SPR, Kooperation mit AG Ehresmann, Kämpf et al., J. Applied Physics, 2012; doi: 10.1063/1.4742130).
2. development of biofunctionalized magnetic particles for the transport and sorting of biomolecules (cooperation with AG Ehresmann, Reginka et al., Langmuir, 2021; doi: 10.1021/acs.langmuir.1c00900)
3. modeling and simulation of protein kinase structures in cooperation with AG Garcia, Theoretical Physics
4. development of biofunctionalized diamond surfaces for PoC applications and for detection of neuropeptides (cooperation with AG Popov, AG Stengl).

Further developments are going into the design of new biochemical tools at the protein/molecule level by making custom binding molecules (proteins, nucleotides) and adapting them for our biosensors. This kind of research can be adapted for collaboration with different research groups inside or outside the University of Kassel and has already led to many collaborations.

## Weiterführende Informationen / *Further Information*

Prof. Dr. Friedrich W. Herberg studierte Biologie an der Ruhr-Universität Bochum und promovierte in der Medizinischen Fakultät am Institut für Physiologische Chemie unter Ludwig Heilmeyer jr. Nach einem 4-jährigen Postdoc-Aufenthalt an der University of California in San Diego bei Prof. Dr. S. S. Taylor habilitierte er im Jahr 2000 im Fach Physiologische Chemie. Im Herbst 2002 erhielt Dr. Herberg einen Ruf auf die Biochemie der Universität Kassel und baute dort eine neue Arbeitsgruppe mit folgenden Schwerpunkten auf: Signaltransduktion vermittelt durch Proteinkinasen, Biomolekulare Interaktionsanalyse (BIA) und Nanotechnologie. Seit 2002 ist Prof. Herberg Mitglied des wissenschaftlichen Zentrums CINSaT und war von 2007 bis 2010 stellvertretender Sprecher des CINSaT. Von 2011 vertrat er den Schwerpunkt Biosensorik bis dieser durch den Schwerpunkt *Multiscale Imaging* ersetzt wurde. Seit 2016 ist er Teil des CINSaT-Vorstands. In interdisziplinären Projekten implementiert er neue Konzepte für Biosensoren basierend auf Fluoreszenz, Oberflächenplasmonresonanz (SPR) oder nanostrukturierten Templaten.

*Prof. Dr. Friedrich W. Herberg studied biology at the Ruhr-University Bochum and received his PhD in the Medical Faculty at the Institute of Physiological Chemistry under Ludwig Heilmeyer jr. After a 4-year postdoctoral stay at the University of California in San Diego under Prof. Dr. S. S. Taylor, he habilitated in physiological chemistry in 2000. In the fall of 2002, Dr. Herberg received an appointment to the Department of Biochemistry at the University of Kassel, where he established a new research group focusing on signal transduction mediated by protein kinases, biomolecular interaction analysis (BIA), and nanotechnology. Since 2002, Prof. Herberg has been a member of the scientific center CINSaT and was deputy spokesperson of CINSaT from 2007 to 2010. From 2011 he represented the focus area Biosensors until it was replaced by the focus area Multiscale Imaging. Since 2016 he is part of the CINSaT board of directors. In interdisciplinary projects he implements new concepts for biosensors based on fluorescence, surface plasmon resonance (SPR) or nanostructured templates.*

### **Prof. Dr. Friedrich W. Herberg**

Universität Kassel  
Heinrich Plett Str. 40  
34132 Kassel  
AVZ I - Raum 2161

Tel: +49 561 804-4511  
Fax: +49 561 804-4466  
E-Mail: [herberg@uni-kassel.de](mailto:herberg@uni-kassel.de)  
Website: <https://www.uni-kassel.de/fb10/institute/biologie/fachgebiete/biochemie/research/research-areas>









Prof. Dr. Jörg H. Kleinschmidt

### Biophysik der Membranproteinfaltung

Biologische Membranen sind als strukturgebende Komponenten von Zellen und Zellorganellen für das Leben essenziell. Sie grenzen das Innere der Zellen oder Zellorganellen gegenüber der Umgebung ab und bewahren deren Integrität. Biomembranen bestehen aus einer Lipiddoppelschicht (LD) mit fettigem Inneren und zwei polaren Oberflächen sowie aus Transmembranproteinen (TMPs) und peripheren Proteinen. Die TMPs ermöglichen den spezifischen Austausch von Stoffen und Signalen über Membranen. Der Einbau und die Faltung von TMPs ist seit vielen Jahren für Wissenschaftler von großem Interesse. TMPs können bezüglich ihrer Transmembran (TM) - Struktur in zwei Klassen unterteilt werden:  $\alpha$ -helikale TMPs und TMPs mit  $\beta$ -Barrel-Struktur.

$\beta$ -Barrel (oder auch  $\beta$ -Fass) TMPs aus Außenmembranen (outer membrane, OM) von Bakterien, oder auch von Mitochondrien oder Chloroplasten (outer membrane proteins, OMPs) bestehen aus mindestens 8 bis 26 antiparallelen  $\beta$ -Faltblatt-Strängen, welche die Membran komplett durchspannen und durch kurze  $\beta$ -Turns sowie lange extrazelluläre Schleifen verbunden sind. OMPs dienen den unterschiedlichsten Funktionen, wie passivem oder aktivem, spezifischen oder unspezifischen Transport, als Protease, Lipase, Acyltransferase, etc.  $\alpha$ -Helix TMP durchspannen Membranen mit einer oder mehreren  $\alpha$ -Helices. Sie sind deutlich hydrophober und daher schwerer zu untersuchen als  $\beta$ -barrel TMP.

Die Abteilung Biophysik befasst sich mit verschiedenen Themen zu Membranproteinen wie OmpA, VDAC, BamA, PdfR u.a. Dazu gehören unter anderem

a. Ermittlung von Prinzipien der Faltungs- und Einbaumechanismen von Membranproteinen. Verschiedene spektroskopische Verfahren wie Circular Dichroismus-Spektroskopie, Fluoreszenzspektroskopie, intra- und intermolekulare ortsgerichtete Fluoreszenzspektroskopie und Fluoreszenzlöschung werden dazu verwendet, Prinzipien der Faltung und des Einbaus von TMPs zu finden. So konnten wir mit gezielt konzipierten und biochemisch isolierten Mutanten des 8-strängigen  $\beta$ -Barrels OmpA (Abb. 1A und 1B) unter Verwendung von Fluoreszenzspektroskopie und geeigneten Fluoreszenzlöschern zeigen, dass die Assoziation der 8 transmembran-ständigen  $\beta$ -Stränge des OmpA strikt an seinen Einbau in die Membran gekoppelt ist (Abbildung 1C).

b. Funktion von periplasmatischen Chaperonen. Verschiedene periplasmatische Chaperone wie das trimere Skp oder SurA begünstigen den Transport ungefalteter  $\beta$ -Fass TMP von der Cytoplasma-Membran zur Außenmembran. Unter den periplasmatischen Chaperonen besitzt Skp die höchste Affinität für OMPs, die es innerhalb seiner Tentakel-Domäne bindet. Skp benötigt zur Freisetzung gebundener  $\beta$ -Fass-TMPs Wechselwirkungen mit negativ-geladenen Lipid oder Proteinoberflächen.

c. Funktionsmechanismen von Membranproteinen und Membranproteinkomplexen.

d. Molekulare Wechselwirkungen in Membranen

### Biophysics of Membrane Protein Folding

*Biological membranes are structuring elements of biological cells and cell organelles and absolutely essential for all life forms. They consist of a lipid bilayer (LB) with a fatty inner core region and two polar surfaces. This bilayer contains transmembrane (TMP) and peripheral proteins. TMPs allow for a specific exchange of solutes*

*and signals across the membrane. The principles and mechanisms of insertion and folding of TMPs have attracted great interest of many researchers. TMPs may be subdivided into two major classes by their transmembrane (TM) structure:  $\alpha$ -helical and  $\beta$ -Barrel-TMPs.*

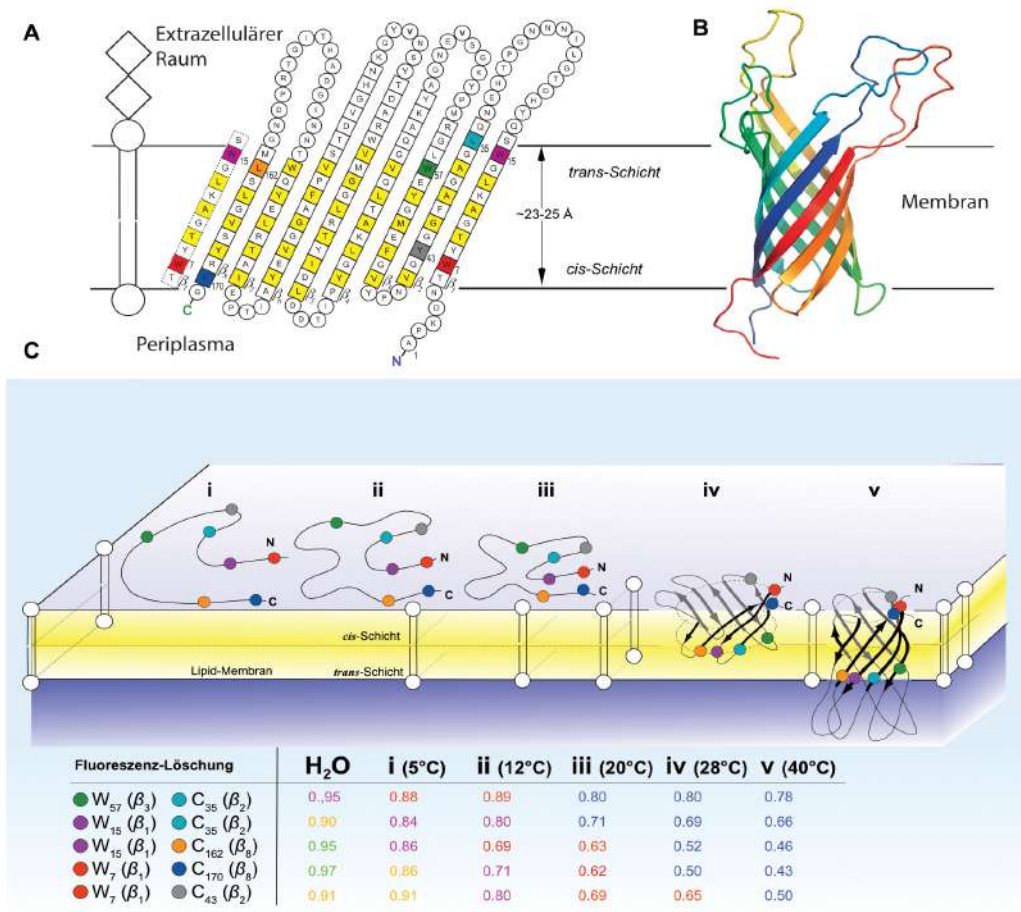


Abbildung 1: Der Einbau und die Faltung eines  $\beta$ -Fass-Membranproteins wie OmpA in Lipidmembranen erfolgen parallel und sind synchronisiert, illustriert hier für die Transmembrandomäne des OmpA (bestehend aus den N-terminalen 170 Aminosäureresten). **A**, Aminosäuresequenz und Membrantopologie (Lipid-orientierte Aminosäureseitenketten sind in gelb abgebildet) sowie **B**, NMR-Struktur (1G90) der Transmembran-Domäne (TMD) des OmpA. **C**, Einbaumechanismus nach Messungen der intramolekularen Fluoreszenzlöschung. Die Einzel-Tryptophan(W)-einzel-Cystein(C)-Mutanten W57C35, W15C35, W15C162, W7C170 und W7C43 des OmpA wurden am C mit einem Fluoreszenzlöcher markiert. Die relative Restfluoreszenz 1 h nach Faltungsbeginn, bezogen auf die Fluoreszenz ohne Markierung mit dem Löcher, ist für verschiedene Temperaturen angegeben und ist um so niedriger je kleiner der Abstand zwischen W und C. Die bei verschiedenen Temperaturen beobachteten Intermediate korrelieren mit früheren Messungen zur Insertion der  $\beta$ -Stränge in die Membran und zeigen einen konzertierten Faltungs- und Einbaumechanismus für OmpA.

Figure 1: Insertion and folding of a  $\beta$ -barrel protein like OmpA are coupled, with a synchronized formation of  $\beta$ -sheet secondary and  $\beta$ -barrel tertiary structure. **A**, amino acid sequence and membrane topology (lipid-facing amino acid side-chains are shown in yellow). **B**, NMR-structure (1G90) of the transmembrane domain (TMD) of OmpA. **C**, Insertion mechanism, based on recordings of the intramolecular fluorescence quenching of a single tryptophan (W) in OmpA. The single W, single cysteine (C) mutants W57C35, W15C35, W15C162, W7C170 and W7C43 of OmpA were labeled with a fluorescence quencher at the C. The fluorescence observed 1 h after initiation of folding, relative to the fluorescence observed in the absence of the quencher, is indicated for selected temperatures, at which folding and insertion experiments were performed. The relative fluorescence is lower when the neighboring W and C are in close proximity. The intermediates observed at the various temperatures correlate with intermediates we described previously for the insertion of the  $\beta$ -strands into the membrane, indicating a concerted folding and insertion mechanism of OmpA.

*$\beta$ -Barrel TMPs from outer membranes (OMs) of bacteria, mitochondria or chloroplasts, also called outer membrane proteins (OMPs) consist of at least 8, but up to 26 antiparallel  $\beta$ -strands of a single polypeptide chain that span the membrane. These strands are connected by short  $\beta$ -turns and long polar loops. OMPs serve many different functions, like passive or active, specific or unspecific transport, as proteases, lipases, acyltransferases, etc.  $\alpha$ -helical TMPs span a membrane with one or more  $\alpha$ -helices. They are much more hydrophobic and therefore more difficult to examine than  $\beta$ -barrel TMPs.*

*The Biophysics Department investigates various different topics of membrane proteins like OmpA, VDAC, BamA, PdfR and others. Major areas of research are*

*a. Principles of folding and insertion or mechanisms of membrane proteins. A wide range of various spectroscopic methods are used, like circular dichroism (CD) spectroscopy, fluorescence spectroscopy, intra- and intermolecular site-directed fluorescence spectroscopy and fluorescence quenching to examine principles of membrane protein folding and insertion. For the 8-stranded  $\beta$ -barrel TMP OmpA (Figure 1A and 1B), we found a concerted*

*mechanism, in which folding and membrane insertion were strictly coupled. For these studies, specifically designed and biochemically isolated mutants were examined by site-directed fluorescence spectroscopy and site-directed fluorescence quenching. The results showed that association of the 8 transmembrane  $\beta$ -strands of OmpA are strictly coupled to membrane insertion of OmpA (Figure 1C).*

*b. Functions of periplasmic chaperones. Different periplasmic chaperones like the trimeric Skp or SurA facilitate the transport of unfolded  $\beta$ -barrel TMPs from the cytoplasmic membrane to the outer membrane. Among periplasmic chaperones, Skp has the highest affinity for unfolded OMPs. Skp binds OMPs in its tentacle domain that forms a basket. We demonstrated that Skp requires interactions with a negatively charged surface of a membrane or protein to release bound OMPs.*

*c. Structure-function relationships of membrane proteins and membrane protein complexes.*

*d. Molecular Interactions in membranes.*

## Weiterführende Informationen / Further Information

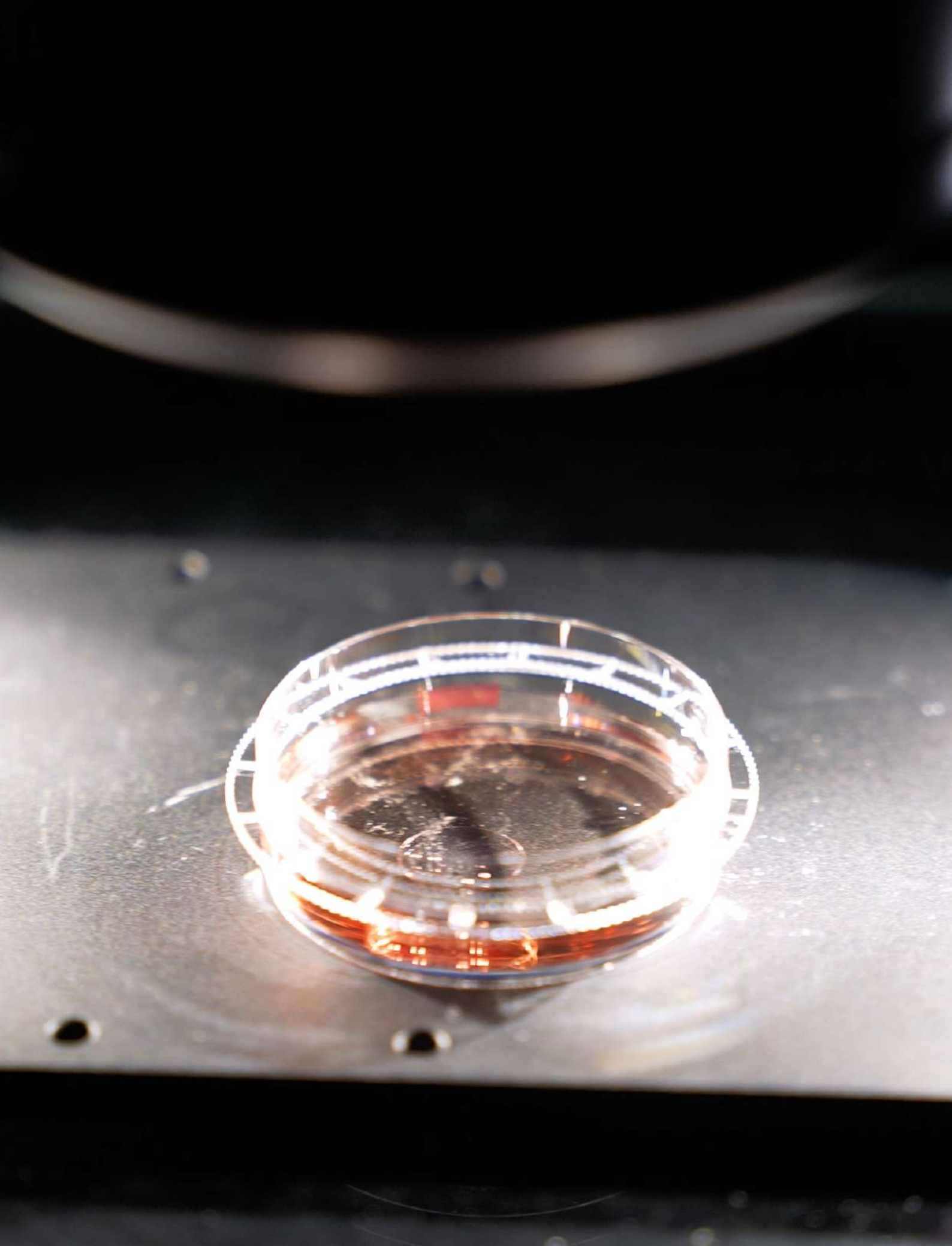
### Prof. Dr. Jörg H. Kleinschmidt

Universität Kassel  
Heinrich Plett Str. 40  
34132 Kassel  
Abt. Biophysik - Raum 2249

Tel: +49 561 804-4041 or -4043  
Fax: +49 561 804-4128 or -934041  
E-Mail: [jhk@uni-kassel.de](mailto:jhk@uni-kassel.de)  
Website: [www.membranproteine.net](http://www.membranproteine.net)









# Chemie mesoskopischer Systeme

## Chemistry of Mesoscopic Systems



Prof. Dr. Rüdiger Faust

Die Forschung im Fachgebiet „Chemie mesoskopischer Systeme“ entwickelt sich derzeit entlang zweier Themen, den **Funktionalfarbstoffe** und den **Molekularen Drähten**. Gemeinsam ist beiden Themen, dass es sich um organische Materialien handelt, deren Wechselwirkung mit Licht im Fokus stehen und die mit Methoden der modernen (organischen) Synthese und der Spektroskopie bearbeitet werden.

Im Themenbereich **Funktionalfarbstoffe** beschäftigen wir uns mit Derivaten der Phthalocyanine, einer Farbstoffklasse, deren photophysikalische Eigenschaften durch zwei Charakteristika geprägt sind. Zum einen zeigen Phthalocyanine und ihre Derivate Intensivabsorptionen im Bereich des sichtbaren Lichts bis in den nahen Infrarotbereich. Zum anderen erzeugen die Farbstoffe nach Lichtanregung reaktiven Sauerstoff (Singulett-Sauerstoff), durch den eine Reihe photooxidativer Prozesse eingeleitet werden. Die Photophysik der Phthalocyanine lässt sich durch synthetisch-chemische Modifizierung in verschiedenen Projekten zielgerichtet einsetzen. So werden die intensitätsstarken Absorptionen, die sich über einen weiten Wellenlängenbereich erstrecken, in Projekten zu farbstoffsensibilisierten Solarzellen untersucht. Die Erforschung photooxidativer Prozesse hat derzeit einen Fokus in der Entwicklung von supramolekularen Singulett-Sauerstoff Speichersystemen, die im Hinblick auf ihren Einsatz in biologischer Umgebung erforscht werden.

Im Themenbereich **Molekulare Drähte** entwickeln wir neue Architekturen, in denen Farbstoffzentren mit starren, elektronisch delokalisierten Molekülteilen wechselwirken können. Es werden dabei Modellsysteme erarbeitet, in denen nach Lichtanregung Energie und/oder Elektronen auf der Pico- oder Femtosekundenzeitskala von einem Molekülteil in einen anderen übertragen werden können. Eine solche lichtinduzierte Ladungstrennung ist ein wichtiger Schritt der Photosynthese sowie in anderen Formen der solaren Energieumwandlung. Besondere Aufmerksamkeit wird dabei einer Anbindung des molekularen Drahtes an leitfähige Metalloberflächen oder metallische Nanopartikel gewidmet. Sowohl im chemischen Design der Metallbindungsstellen als auch in der Konzeption der organischen Elektronenleiter werden dabei neue Synthesewege eingeschlagen. Langfristiges Ziel dieser Arbeiten ist die Entwicklung von photoschaltbaren molekularen Drähten und deren Anbindung als Einzelmoleküle in elektronischen Funktionseinheiten.

*Research in the field of "Chemistry of Mesoscopic Systems" is currently developing along two themes, **functional dyes** and **molecular wires**. Both topics have in common that they are organic materials whose interaction with light is in the focus of our research and which are worked on with methods of modern (organic) synthesis and spectroscopy.*



Abbildung 1: Funktionsfarbstoff, der nach Lichtanregung sowohl Energie- als auch Elektronentransferprozesse zeigt (links) zusammen mit Farbeindruck der Einzelkomponenten in Lösung (rechts).

*Figure 1: Functional dye showing both energy and electron transfer processes after light excitation (left) together with colour impression of the individual components in solution (right).*

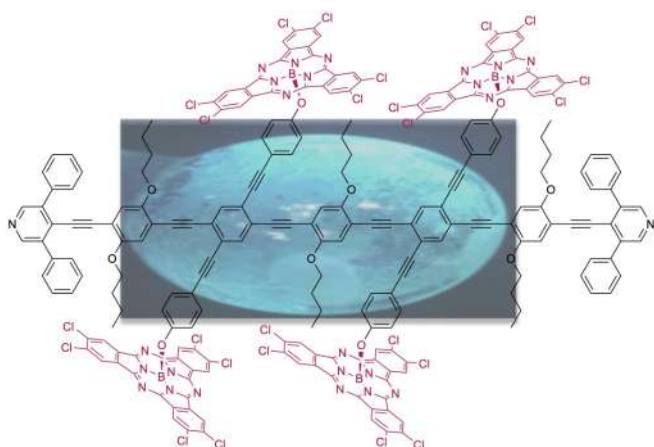


Abbildung 2: Molekularer Draht aus einem starren organischen Halbleiter mit Stickstoff-Kontaktierpunkt. Anhängende Farbstoffmoleküle beeinflussen die Leitfähigkeit. Der Hintergrund zeigt die Fluoreszenz eines Films dieser Substanzklasse.

Figure 2: Molecular wire made of a rigid organic semiconductor with nitrogen contact point. Attached dye molecules influence the conductivity. The background shows the fluorescence of a film of this substance class.

In the field of **functional dyes**, we address derivatives of phthalocyanines, a class of dyes whose photophysical properties are characterised by two features. Firstly, phthalocyanines and their derivatives show intensive absorptions across the range of visible light up to the near infrared range. Secondly, after light excitation, the dyes generate reactive oxygen (singlet oxygen), which initiates a series of photooxidative processes. The photophysics of phthalocyanines can be used in a targeted manner in various projects through synthetic-chemical modification. For example, the high-intensity absorptions, which extend over a wide wavelength range, are being investigated in projects on dye-sensitised solar cells. Research into photooxidative processes is currently focussing on the development of supramolecular singlet oxygen storage systems, which are being investigated with regard to their use in biological environments.

In the topic of **Molecular Wires**, we are developing new architectures in which dye centres can interact with rigid, electronically delocalised molecular parts. Model systems are being developed in which energy and/or electrons can be transferred from one molecular part to another on the pico- or femtosecond time scale after light excitation. Such light-induced charge separation is an important step in photosynthesis as well as in other forms of solar energy conversion. Special attention is paid to binding the molecular wire to conductive metal surfaces or metallic nanoparticles. New synthetic approaches are being taken both in the chemical design of the metal binding sites and in the conception of the organic electron conductors. The long-term goal of this work is the development of photoswitchable molecular wires and their connection as single molecules in electronic functional units.

## Weiterführende Informationen / Further Information

### Prof. Dr. Rüdiger Faust

Universität Kassel  
Heinrich Plett Str. 40  
34132 Kassel

Tel: +49 561 804-4750  
Fax: +49 561 804-4752  
E-Mail: [r.faust@uni-kassel.de](mailto:r.faust@uni-kassel.de)  
Website: <https://www.uni-kassel.de/fb10/institute/chemie/fachgebiete/chemie-mesoskopischer-systeme>

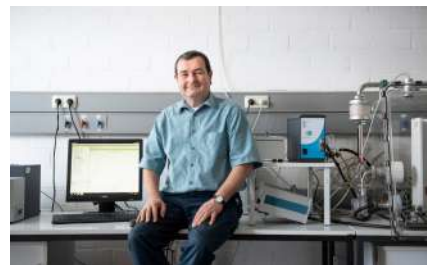






# Chemische Hybridmaterialien

## Chemical Hybrid Materials



Prof. Dr. Rudolf Pietschnig

Prof. Dr. Rudolf Pietschnig studierte Chemie an der Universität Bonn, wo er im Jahre 1996 seine Dissertation zur Synthese neuartiger funktionaler Organophosphorverbindungen abschloss. Daran schloss sich ein mehrjähriger Post-Doc Aufenthalt am Eugene Rochow Chair an der University of Madison, USA an, zunächst als DFG-Stipendiat, später als Mitarbeiter am dortigen Organosilicon Research Center. Nach seiner Rückkehr begann er 1999 an der Universität Bochum mit eigenständigen Forschungsarbeiten als Liebig-Stipendiat des Fonds der Chemischen Industrie zum Thema elementorganische  $\pi$ -konjugierte Materialien. Im Jahr 2002 wechselte er an die Universität Graz wo er sich 2005 mit einem Thema aus der Organosiliciumchemie habilitierte. Dort wirkte er als Universitätsdozent bis er im Jahre 2011 einem Ruf als Leiter des Fachgebiets Chemische Hybridmaterialien an die Universität Kassel folgte. Seit Februar 2012 ist er Mitglied des wissenschaftlichen Zentrums CINSaT an der Universität Kassel. Seine Forschungsschwerpunkte liegen im Bereich der Organoelementchemie, Metallopolymere, Oberflächenchemie und lumineszente molekulare Materialien, finanziell unterstützt durch DFG, BMBF, LOEWE, EU und DAAD.

In Zusammenhang mit dem Sonderforschungsbereich ELCH (SFB 1319) arbeitet das Fachgebiet mit Arbeitsgruppen aus der Physik und weiteren Standorten in Deutschland zusammen, um fundamentale Aspekte der Chiralität zu erforschen. Basierend auf ihrer syntheseschemischen Kompetenz stellt die Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Pietschnig dabei maßgeschneiderte Moleküle unter Beteiligung schwerer Elemente zur Verfügung, die als molekulare Modellschubstanzen fungieren, um daraus Struktur-Eigenschaftsbeziehungen ableiten zu können. Diese Forschungsaktivitäten sind auch Teil des CINSaT Schwerpunkts Chirale Strukturen.

Bezüglich des CINSaT Schwerpunkts Quantentechnologie ist das Fachgebiet am LOEWE-Projekt SMolBits beteiligt, in dem optisch schaltbare Qubits realisiert werden sollen. Zu diesem Zweck werden vibronisch deaktivierte Lanthanoidkomplexe synthetisch zugänglich gemacht und in resonanten Kavitäten oberflächen-immobilisiert. In Zusammenarbeit mit anderen Arbeitsgruppen an der Universität Kassel bzw. der FU Berlin werden derartige Strukturen gemeinschaftlich hinsichtlich ihrer Eignung für quantentechnologische Zwecke untersucht.

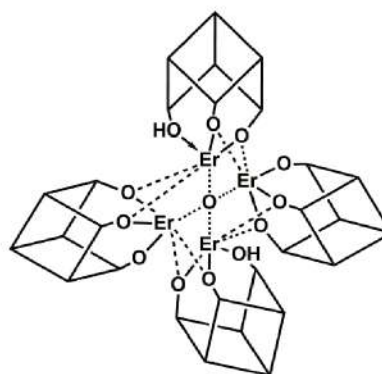
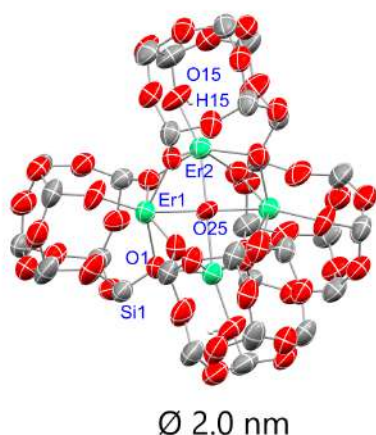


Abbildung 1: Stöchiometrisches molekulares Nanopartikel mit definiert angeordneten lumineszierenden Lanthanoidzentren

Figure 1: Stoichiometric molecular nanoparticle containing an array of luminescent lanthanoid centers

Prof. Dr. Pietschnig ist zudem an einer Zusammenarbeit mit den Arbeitsgruppen Hillmer vom Fachgebiet Technische Elektronik sowie Ehresmann aus der Physik beteiligt, im Rahmen derer anisotrop geformte Nano- und Mikropartikel und -strukturen von der Arbeitsgruppe Pietschnig mit zusätzlichen Funktionseigenschaften ausgerüstet werden, beispielsweise Lumineszenz, Redoxaktivität oder Magnetismus.

Organische Moleküle können durch den gezielten Einbau von Heteroatomen, also Nicht-Kohlenstoffatomen, modifiziert werden, wodurch erhöhte Ladungsträgerbeweglichkeit oder Lumineszenzeigenschaften resultieren können. In der Arbeitsgruppe Pietschnig wurde ein effizienter Zugang zu derartigen Verbindungen entwickelt, bei der Heteroatom und Ringgröße variiert werden können und auf anderen Syntheserouten erforderliche Substituenten vermieden werden können, woraus besonders hohe Fluoreszenzquantenausbeuten (ca. 70%) resultieren. Durch diesen synthetischen Zugang sind zudem

silylsubstituierte Phosphorheterocyclen zugänglich, die über die Silylgruppe an Oberflächen beispielsweise von Partikeln chemisch angebunden werden können. Hierdurch können die am ungebundenen Molekül optimierten Eigenschaften in anorganisch-organische Hybridmaterialien transferiert werden.

Die Speicherung von Energie ist eine globale Herausforderung von wachsender Bedeutung. Unter Nachhaltigkeitsaspekten ist in unserer Klimazone besonders Wärmespeicherung von großer Bedeutung, da im Jahresmittel der größte Teil des Energiebedarfs in Form von Wärme zum Heizen und für die Warmwasserbereitung benötigt wird. In Zusammenarbeit mit Ingenieuren der Universität Kassel haben die Forscher des Fachgebiets Chemische Hybridmaterialien neue Materialien zur Speicherung von thermischer Energie, entwickelt, um Wärme zu speichern und damit gleichsam lagerfähig zu machen. Diese Arbeiten wurden mit dem IHK Wissenschaftspreis 2019 ausgezeichnet.

---

*Prof. Dr. Rudolf Pietschnig studied chemistry at the University of Bonn, where he completed his dissertation in 1996 exploring the synthesis of novel functional organophosphorus compound. After his dissertation he joined the Eugene Rochow Chair at the University of Madison, USA as a postdoctoral researcher initially funded by the DFG and later employed by the Organosilicon Research Center. From there he returned to Germany starting his independent research on organoelement  $\pi$ -conjugated materials in 1999 at the University of Bochum as Liebig-Fellow funded by the Fonds der Chemischen Industrie. In 2002 he moved on to the University of Graz, Austria, where he completed his habilitation in 2005 with a topic hypo- and hypercoordinate silicon compounds. As University docent he stayed in Graz until he moved to the University of Kassel heading the research area of Chemical Hybrid Materials in 2011. Since February 2012 he is member of the Scientific Center CINSaT at the University of Kassel. His research interests cover organoelement chemistry, metallo-polymers, surface chemistry and luminescent molecular materials supported by DFG, BMBF, LOEWE, EU and DAAD.*

*In the context of the cooperative research center ELCH (CRC 1319) the chemical hybrid materials group collaborates with physicists in Kassel and other research institutions in Germany to investigate and understand fundamental aspects of chirality. Based on their competences in synthetic chemistry the Pietschnig group designs bespoke molecules containing heavy atoms functioning as molecular model systems to derive structure-property relationships. These research activities are embedded into the CINSaT focal point chiral structures.*

*Regarding the CINSaT focal point quantum technology, the Pietschnig group is involved in the LOEWE-project SMolBits, where optically switchable qubits are investigated. To this end, vibronically deactivated lanthanoid complexes are synthetically prepared and surface immobilized in resonant cavities. In collaboration with other groups at the University of Kassel and the FU Berlin such structures are jointly studied with respect to their suitability for quantum technological purposes.*



Moreover, Prof. Dr. Pietschnig has an active collaboration with the Hillmer group at the INA and the Ehresmann group from Physics, where anisotropically shaped micro- and nanoparticles are endowed with additional functionalities and properties, such as luminescence, redox-activity or magnetism.

Organic molecules can be modified by targeted incorporation of hetero atoms (i.e. non-carbon atoms) resulting in higher charge carrier mobility or luminescence properties. The Pietschnig group has developed an efficient access route such compounds where ring size and the nature of the atom may be varied and controlled. Furthermore, this route does not require additional substituents as in alternative approaches, allowing higher fluorescence quantum yields of (ca. 70%) compared with substituted congeners. In addition, silyl functionalized phosphorus heterocycles are accessible on pathway offering possibilities for

surface immobilization at particles and interfaces. Thereby, properties optimized for the unbound molecules may be transferred into composites and organic-inorganic hybrid materials.

Energy storage is a global challenge of increasing importance. From the perspective of sustainability heat storage is highly important in our climate zone, since the largest share of the average annual energy consumption is allocated to heating and warm water supply. In collaboration with engineers at the University of Kassel, researchers from the chemical hybrid materials group have developed new materials for thermal energy storage in order to store heat for on demand use. For the research results from this study the IHK Wissenschaftspreis 2019 has been awarded.

---

## Weiterführende Informationen / Further Information

### Prof. Dr. Rudolf Pietschnig

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Straße 40  
34132 Kassel  
AVZ II - Raum 2201

Tel: +49 561 804-4615  
Fax: +49 561 804-4649  
E-mail: [pietschnig@uni-kassel.de](mailto:pietschnig@uni-kassel.de)  
Website: <https://www.uni-kassel.de/go/hybrid>







Prof. Dr. Arno Müller

### Genetische Kontrolle der Biomechanik

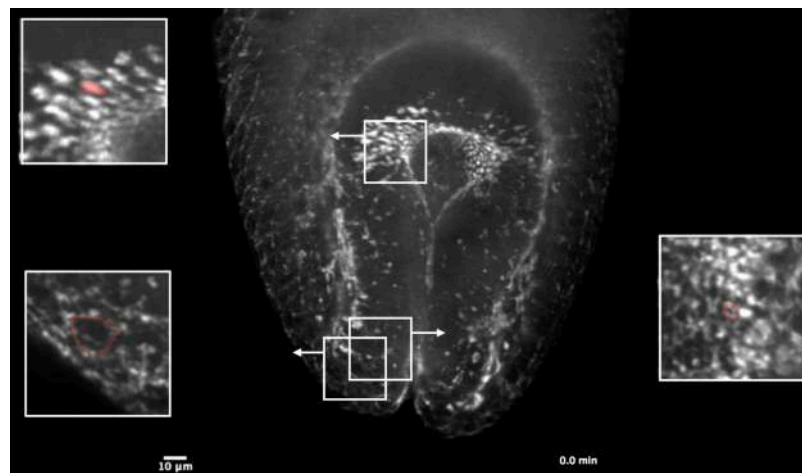
Die Gruppe Entwicklungsgenetik (DGen) ist seit 2017 Mitglied von CINSaT. 2019 wurde der Leiter der DGen Gruppe, Arno Müller, Sprecher eines neuen Schwerpunkts in CINSaT namens „Multiscale Bioimaging“. Die DGen-Gruppe untersucht als Modellsystem die subzelluläre und zelluläre Kontrolldynamik in Embryonen der Fruchtfliege *Drosophila melanogaster*. Warum wollen Sie die Zellbewegungen des Fliegenembryos untersuchen? *Drosophila* ist seit über 100 Jahren ein genetisches Modellsystem. Die Forschung an diesem winzigen Organismus hat wichtige biologische Prinzipien aufgedeckt, darunter die Natur der Chromosomen, Mutationen und genetische Rekombination, die Gene, die die Embryonalentwicklung kontrollieren, die Prinzipien des angeborenen Immunsystems und die Grundlagen biologischer Uhren. Die Erforschung der bescheidenen Fruchtfliege wurde mit 6 Nobelpreisen ausgezeichnet. In den letzten 20 Jahren hat sich die Forschung an der Fruchtfliege stark auf die Zellbiologie ausgeweitet, insbesondere die Erforschung der Mechanismen, die dynamische Zell- und Gewebewebungen steuern. Innerhalb dieses Forschungsfeldes konzentriert sich die DGen-Gruppe auf dynamische Ereignisse in der frühen Entwicklung des *Drosophila*-Embryos: (1) Kopplung von mitotischen Spaltungszyklen mit oszillierendem Membranverkehr und Zytoskelett-Dynamik und (2) Mechanische Kopplung von Mesodermzellen bei der Gastrulation.

Das erste Projekt befasst sich mit der Frage, wie der Zellzyklus oszillierendes subzelluläres Verhalten beeinflusst und wie frühe Embryonen von einem Syncytial- in ein zelluläres Stadium transformiert werden können. Nach der Befruchtung der Eizelle teilen sich die Embryonen schnell und bei diesen Spaltungsteilungen erfolgt die Teilung der Zellkerne ohne Zytokinese. Das Zytoskelett und die Plasmamembran unterliegen oszillatorischen Veränderungen, die an die mitotischen Zyklen gekoppelt sind. Unsere Forschung identifizierte Gene, die an der Kopplung der mitotischen Zyklen an die subzellulären Zyklen beteiligt sind. Innerhalb der DFG-geförderten Graduiertenschule „Multiskalenuhren“ werden wir Molekulargenetik und hochauflösende dynamische Bildgebung anwenden, um die Natur der Genprodukte und ihre Rolle in den Mechanismen zu bestimmen, die die beiden zyklischen Verhaltensweisen koppeln. Die Daten werden auch als Grundlage für die Computer-modellierung mit unseren CINSaT-Mitarbeitern in der Gruppe Theoretische Physik (Prof. Garcia) verwendet.

Zwei weitere Projekte befassen sich mit der Funktion und Regulation zweier human-krankheitsassoziierter Proteinkinasen: der Tyrosin-Kinase Src und der MAST-Familien-Kinasen Drop out. Wir fanden heraus, dass Src für Gastrulationsbewegungen benötigt wird, insbesondere für die Achsenverlängerung des Embryos. Quantitative dynamische Bildgebung zeigte, dass Src

Abbildung 1: 3D-Rendering eines aufgezeichneten lebenden *Drosophila*-Embryos, der während der Bildung des hinteren Mitteldarms vom Multiview-Tiling-SPIM aufgenommen wurde. Myosin II-GFP wird in einem Embryo im Gastrulationsstadium am hinteren Pol abgebildet. Drei charakteristische subzelluläre Myo-II-Strukturen werden im Laufe der Zeit visualisiert.

Figure 1: 3D rendering of a recorded live *Drosophila* embryo captured by the Multiview-tiling SPIM during posterior midgut formation. Myosin II-GFP is imaged in a gastrulation stage embryo at the posterior pole. Three characteristic subcellular Myo II structures are visualized overtime.





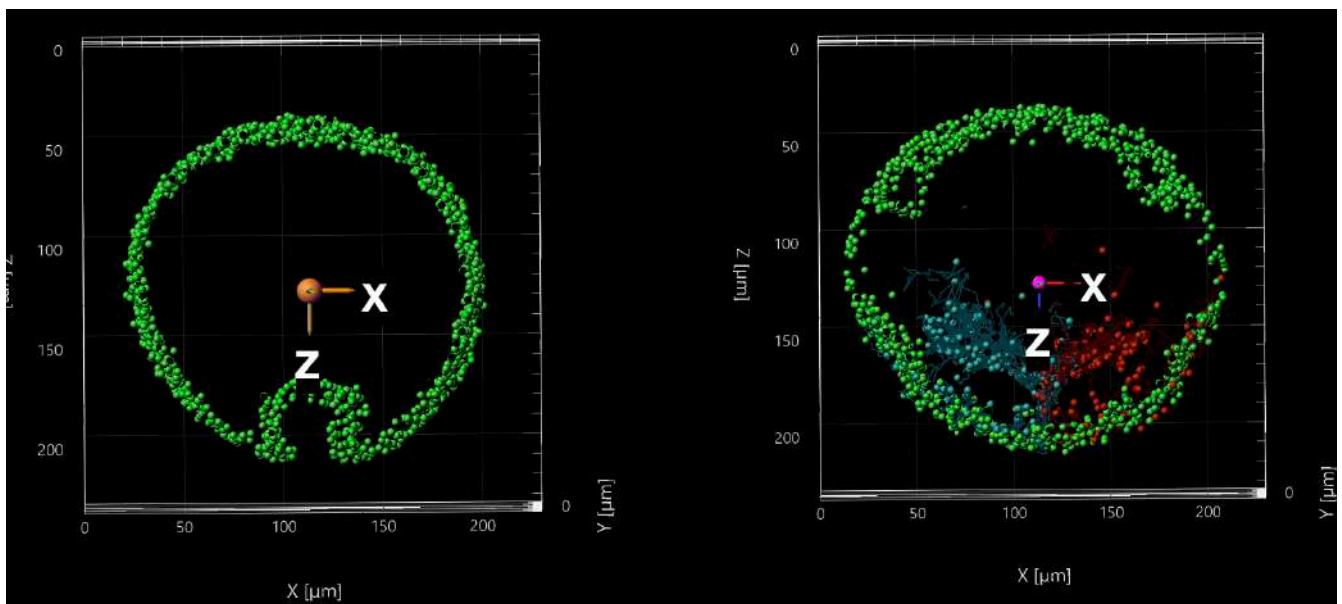


Abbildung 2: Querschnitt eines rekonstruierten Embryos, bei dem Zellkerne durch MT-SPIM abgebildet wurden. Die Bilder zeigen zwei Zeitpunkte in einer einzigen Ebene entlang der AP-Achse des Embryos, um anzuzeigen, wie die Segmentierung und Verfolgung von Mesodermzellen während der Mesodermausbreitung erfolgt. Die Koordinaten werden verwendet, um die Verschiebung der Zellen in 3 Dimensionen über die Zeit zu quantifizieren.

*Figure 2: Cross section of reconstructed embryo where cell nuclei were imaged by MT-SPIM. The images show two time points at a single plane along the AP axis of the embryo to indicated how segmentation and tracking of mesoderm cells during mesoderm spreading in performed. The coordinates are used to quantify the displacement of the cells in 3 dimensions over time.*

den Umsatz von Zelladhäsionsmolekülen moduliert, sodass in seiner Abwesenheit Zellinterkalationen, die die Achsenverlängerung antreiben, verlangsamt werden. Im MAST-Kinase-Projekt haben wir Targets und Interaktionspartner dieser Kinase in der Fliege identifiziert und analysieren derzeit ihre Regulation und ihre Interaktion mit der Zellzyklusmaschinerie. Dieses Projekt profitiert auch von einer intensiven CINSaT-Kooperation mit der Biochemie-Gruppe (Prof. Herberg).

In einem weiteren Teilprojekt haben wir eine weitere CINSaT-Kollaboration mit der Gruppe Experimentalphysik (Prof. Baumert) aufgebaut, um mit Femtosekunden-Laserpuls die biophysikalische Kooperativität von Myo II-Strukturen im frühen Embryo zu bestimmen. Dieser Ansatz ermöglicht es uns, biophysikalische Eigenschaften des lebenden Embryos in Echtzeit und während verschiedener Entwicklungsstadien zu definieren. Die Daten weisen auf unterschiedliche physikalische Eigenschaften des Myo II-Netzwerks während des Prozesses der Zellbildung im frühen Embryo hin.

Der andere Schwerpunkt des Labors baut auf unserer langjährigen Expertise in frühen morphogenetischen Bewegungen des *Drosophila*-Embryos auf. Das erste große morphogenetische Ereignis im Embryo ist die Unterteilung der embryonalen Zellen in die drei Keimblätter (Ektoderm, Mesoderm und Endoderm); Dieser Vorgang wird Gastrulation genannt. Wir haben vor kurzem neuartige dynamische Bildgebungstechnologien auf einer Lichtblatt-Mikroskopie-Plattform entwickelt, die eine vollständige Bildgebung mit hoher zeitlicher und räumlicher Auflösung ermöglicht. Wir fanden heraus, dass unsere neue Bildgebungsplattform es uns ermöglicht, die mechanische Kopplung während der Gastrulationsbewegungen zu analysieren, indem wir ein wichtiges krafterzeugendes Molekül in der Zelle namens Myosin II (Myo II) abbilden. Wir identifizierten bereits bekannte und neue subzelluläre und suprazelluläre Myo-II-Strukturen im Kontext des gesamten Embryos (Abbildung 1). Wir werden genetische, bildgebende und biophysikalische Methoden verwenden, um zu bestimmen, welche dieser

kontraktilen Strukturen chemisch oder mechanisch induziert werden. Ein weiteres Hauptthema dieses Projektes ist die Analyse der Mesodermbildung durch dynamisches Tracking der gesamten Zellpopulation über die Gastrulation. Wir wenden Computermethoden an, einschließlich maschinenlernbasierter Ansätze, um Bildgebungsdaten zu segmentieren und die Kerne

der Mesodermzellen im Zeitverlauf zu verfolgen (Abbildung 2). Diese Methode wird zum ersten Mal eine 4-D-Karte der Mesodermzellbewegungen liefern und als Werkzeug verwendet werden, um die genaue Funktion von Genen zu bestimmen, die für den Mesoderm-Ausbreitungsprozess erforderlich sind.

## Genetic Control of Biomechanics

*The Developmental Genetics (DGen) group is a member of CINSaT since 2017. In 2019, the head of the DGen group, Arno Müller became the speaker of a new focal point in CINSaT called 'multiscale bioimaging'. The DGen group investigates the control subcellular and cellular dynamics in embryos of the fruit fly, Drosophila melanogaster, as a model system. Why would you want to study cell movements in the fly embryo? Drosophila has been a genetic model system for over 100 years. Research on this tiny organism has revealed major biological principles, including the nature of chromosomes, mutations and genetic recombination, the genes that control embryo development, the principles of the innate immune system and the basics of biological clocks. The research on the humble fruit fly was subject to the award of 6 Nobel prizes. In the past 20 years, research on the fruit fly expanded much into cell biology, in particular exploring the mechanisms that control dynamic cell and tissue movements. Within this field of research, the DGen group focuses on dynamic events in the early development of the Drosophila embryo: (1) Coupling of mitotic cleavage cycles with oscillating membrane traffic and cytoskeletal dynamics and (2) Mechanical coupling of mesoderm cells in gastrulation.*

*The first project addresses the question of how the cell cycle informs oscillating subcellular behaviors and how to transform early embryos from a syncytial into a cellular stage. After fertilization of the egg, embryos divide rapidly and in these cleavage divisions the division of the cell nuclei occur without cytokinesis. The cytoskeleton and the plasma membrane undergo oscillatory changes that are coupled to the mitotic cycles. Our research identified genes that are involved in the coupling of the mitotic cycles to the subcellular cycles. Within the DFG-funded graduate school 'multiscale clocks' we will apply molecular genetics and high-resolution dynamic imaging to*

*determine the nature of the gene products, their role in the mechanisms that couple the two cyclic behaviors. The data will also be used to provide the basis for computer modeling with our CINSaT collaborators in the theoretical physics group (Prof. Garcia).*

*Two other projects concern the function and the regulation of two human-disease associated protein kinases: the Tyrosine-kinase Src and the MAST-family kinases Drop out. We found that Src is required for gastrulation movements, in particular the axis elongation of the embryo. Quantitative dynamic imaging revealed that Src modulates the turnover of cell adhesion molecules, such that in its absence, cell intercalations that drive the axis elongation get slowed down. In the MAST kinase project, we identified targets and interaction partners of this kinase in the fly and are currently dissecting its regulation and its interaction with the cell cycle machinery. This project also benefits from an intense CINSaT collaboration with the biochemistry group (Prof. Herberg).*

*Within another subproject we established another CINSaT collaboration with the experimental physics group (Prof. Baumert) in order to apply femto-second laser pulses to determine the biophysical cooperativity of Myo II structures in the early embryo. This approach let us to define biophysical properties of the living embryo in real time and during different stages of development. The data indicate distinct physical properties of the Myo II network during the process of cell formation in the early embryo.*

*The other main focus of the lab builds on our long-standing expertise in early morphogenetic movements in the Drosophila embryo. The first major morphogenetic event in the embryo is the*



subdivision of embryonic cells into the three germ layers (ectoderm, mesoderm and endoderm); this process is called gastrulation. We recently developed novel dynamic imaging technologies on a light sheet microscopy platform, which provides whole content imaging at high temporal and spatial resolution. We found that our new imaging platform allows us to dissect the mechanical coupling during gastrulation movements by imaging an important force-producing molecule in the cell called Myosin II (Myo II). We identified previously known and novel subcellular and supracellular Myo II structures within the context of the entire embryo (Figure 1). We will be using genetics, imaging and

biophysical methods to determine which of these contractile structures are chemically induced or mechanically induced. Another main subject of this project is the analysis of mesoderm formation by tracking the entire cell population dynamically over gastrulation. We apply computational methods including machine-learning based approaches to segment imaging data and track the nuclei of the mesoderm cells over time (Figure 2). This method will, for the first time, provide a 4-D map of mesoderm cell movements and will be applied as a tool to determine the precise function of genes that are required for the mesoderm spreading process.



Abbildung 3: Mitarbeiter/Doktoranden in der Gruppe Entwicklungsgenetik. Lenin Chandran (src-Projekt); Elham Gheisari (Mesoderm-Projekt); Mostafa Aakhte (MT-SPIM-Projekt); Marie Rumpf (MAST-Kinase-Projekt); Arno Müller (Gruppenleiter) (von rechts nach links).

Figure 3: Coworkers/PhD students in the Developmental Genetics group. Lenin Chandran (src project); Elham Gheisari (Mesoderm project); Mostafa Aakhte (MT-SPIM project); Marie Rumpf (MAST kinase project); Arno Müller (head of group) (from right to left).

## Weiterführende Information / Further Information

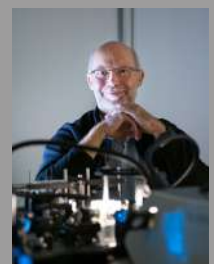
### Prof. Dr. Arno Müller

Universität Kassel  
Heinrich-Plett Str. 40  
34132 Kassel  
IBC - Raum 2403

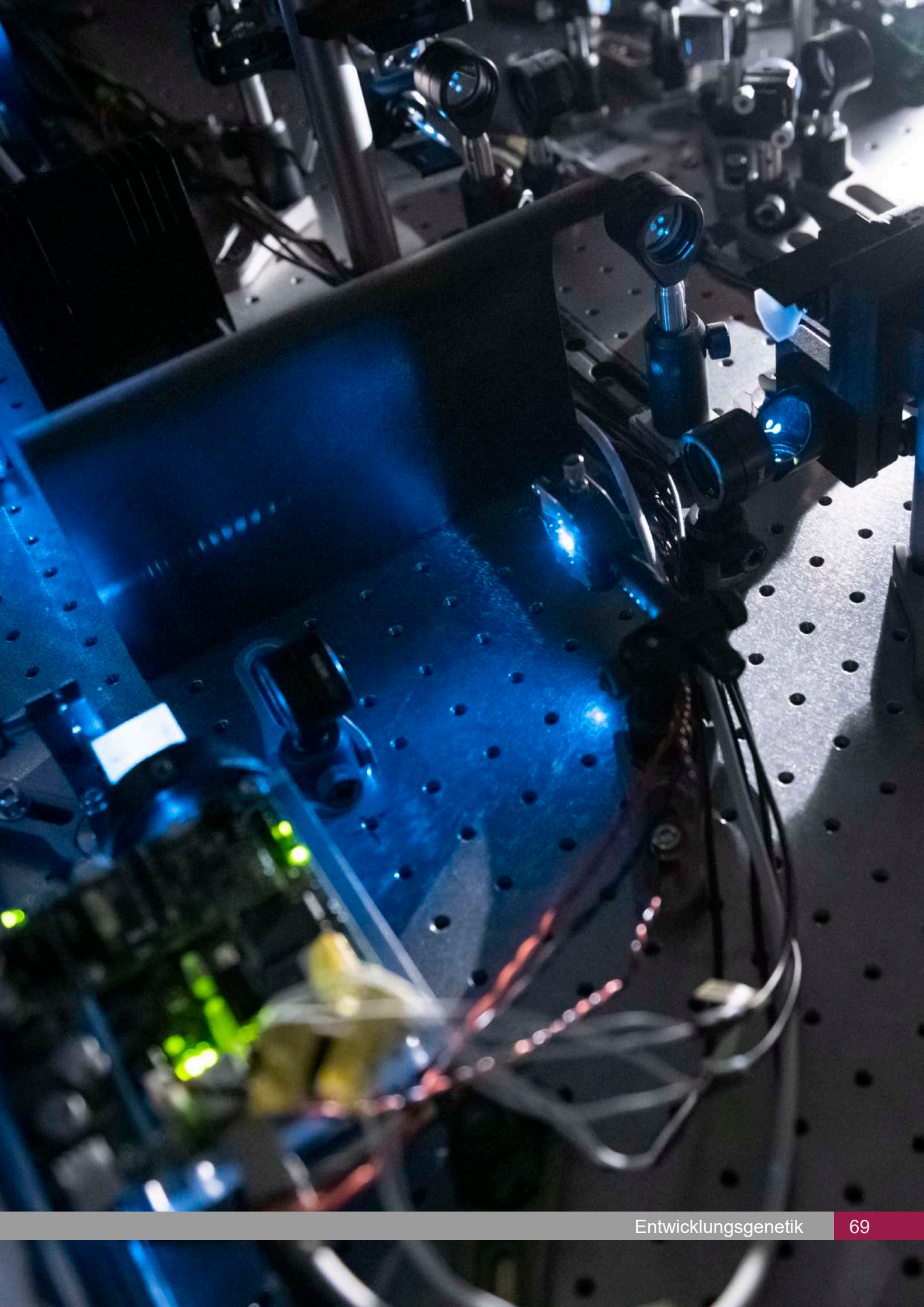
Tel: +49 561 804-4725 or -4723

E-mail: [h.a.muller@uni-kassel.de](mailto:h.a.muller@uni-kassel.de)

Website: <https://www.uni-kassel.de/fb10/institute/biologie/fachgebiete/entwicklungsgenetik/startseite>









# Femtosekundenspektroskopie & Ultraschnelle Laserkontrolle

## *Femtosecond Spectroscopy & Ultrafast Laser control*



Prof. Dr. Thomas Baumert

**Wie bewegen sich die Bausteine der Materie nach der Beleuchtung mit sehr kurzen und intensiven Laserpulsen und kann diese Bewegung gesteuert und ausgenutzt werden?**

Um diese Fragen zu beantworten, beleuchten wir Materie mit extrem kurzen Laserpulsen im Bereich von Billiardstelsekunden und beobachten die dadurch erzeugte schnelle Dynamik mittels stroboskopischer Methoden in Zeitlupe (**Femtosekunden-spektroskopie**). Mit Hilfe von optischen Synthesizern steuern wir die zeitliche Struktur des Laserlichts und können dadurch die schnelle Dynamik kontrollieren (**Ultraschnelle Laserkontrolle**)

In unseren Forschungsvorhaben nutzen wir die einzigartigen Eigenschaften von ultrakurzen Laserpulsen aus:

### **1. Sehr kurze Lichtblitze.**

Die Kürze der Laserpulse ermöglicht es uns, im Mikrokosmos „die Zeit zu stoppen“ und – wie unter einem Stroboskop – die lichtinduzierte Dynamik in Zeitlupe zu beobachten. Unsere Stroboskope verwenden optische Anregungs- und Abfrage-techniken und auch ultraschnelle Elektronenbeugung.

### **2. Breites Farbspektrum**

Ein kurzer Laserpuls enthält viele Farben. In einem optischen Synthesizer – auch Pulsformer genannt, da sie die zeitliche Struktur des Laserpulses ändern – können diese Farben nahezu beliebig kombiniert und arrangiert werden. Die resultierenden Pulse können verwendet werden, um Elektronendynamik zu kontrollieren, chirale Moleküle zu identifizieren, Laser-Materie-Wechselwirkung zu optimieren oder hochauflösende Mikroskopie zu entwickeln.

### **3. Extrem hohe Intensitäten**

Durch ihre Kürze können fokussierte ultrakurze Laserpulse sehr hohe Intensitäten sogar bei niedrigen Energien pro Puls erreichen. Mit Hilfe von nichtlinearen optischen Effekten ermöglichen diese Intensitäten dreidimensionale Materialbearbeitung und Plasmaspektroskopie, die nicht thermisch-diffusiv ablaufen und daher mit wenig ungewollten Schäden einhergehen.

Auf diesen Eigenschaften aufbauend verwenden wir ultrakurze Laserpulse und optische Synthesizer in den folgenden Forschungsgebieten, die auch in Abbildung 1 illustriert sind:

### **Ultraschnelle Elektronenbeugung**

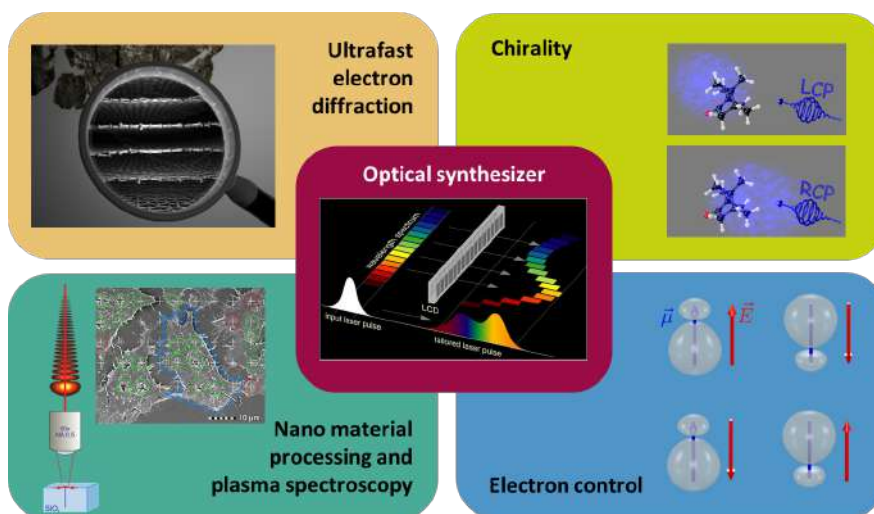
Gleich einer Lupe erlaubt Beugung einen Einblick in die atomare Struktur eines Kristalls. Basierend auf unseren ultrakurzen Laserpulsen haben wir ein stroboskopisches System aufgebaut, das Veränderungen dieser atomaren Struktur nach der Beleuchtung mit einem kurzen Lichtblitz untersucht. Die Methode verwendet ähnlich kurze Elektronenpulsen, die durch Beugung einen Schnappschuss des sich bewegenden Kristalls erzeugen. Wir erreichen eine Zeitauflösung von 120 Femtosekunden, die zu den besten gehört, die mit Elektronenbeugung erreicht werden können. Wie in Abbildung 1 dargestellt, untersuchen wir Schichtkristalle wie Graphit, hexagonale Bornitrid und Übergangsmetalldichalcogenide wie  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{ReS}_2$  und  $\text{TaS}_2$ .

### **Chiralität**

Chirale Moleküle kommen in zwei spiegelbildlichen Versionen vor, die unterschiedliche biologische oder pharmazeutische Wirkungen haben können. Physikalisch lassen sich die beiden Spiegelbilder hingegen schwer unterscheiden. In unserer Gruppe untersuchen wir die Wechselwirkung von zirkular polarisierten ultrakurzen Laserpulsen mit chiralen Molekülen in der Gasphase. Wenn dabei Elektronen aus dem Molekül herausgelöst werden, hängt deren Emissionsrichtung von der Chiralität des Moleküls und des Lichts ab. Die dabei entstehende Vorwärts-Rückwärts-Asymmetrie (siehe Abbildung 1) ist ein sehr starker chiraler Effekt, mit dem sich der Enantiomerenüberschuss einer chiralen Mischung besser als 1 % genau aus nur wenigen Molekülen bestimmen lässt. Zu unseren Zielen gehören die Maximierung des chiralen Signals mit dem optischen Synthesizer und die Umwandlung der Chiralität eines Moleküls. Unsere Forschungen an chiralen Molekülen sind Teil des DFG-Sonderforschungsbereichs 1319 ELCH an der Universität Kassel.

Abbildung 1: Forschungsgebiete der Gruppe Femtosekundenspektroskopie & Ultraschnelle Laserkontrolle.

Figure 1: Research areas of the group Femtosecond Spectroscopy & Ultrafast Laser control.



### Nanomaterialbearbeitung und Plasmaspektroskopie

Mit ihrer hohen Lichtstärke können ultrakurze Laserpulse Material von Oberflächen verdampfen und so Löcher erzeugen. Wir haben mit einem optischen Synthesizer gezeigt, dass eine spezielle zeitliche Struktur von Laserpulsen die Licht-Materie-Wechselwirkung so modifiziert, dass Nanokanäle von unerreichter Dünne (250 nm) und Tiefe (7  $\mu\text{m}$ ) erzeugt werden. Dieselbe Pulsstruktur wurde auch erfolgreich eingesetzt, um Zellmembranen kontrolliert und überlebar zu durchlöchern (siehe Abbildung 1). Ein Nebeneffekt von Materialbearbeitung mit ultrakurzen Laserpulsen ist die Erzeugung eines Plasmas aus kleinsten Volumina, das Licht ausstrahlt, dessen Farben charakteristisch für das verdampfte Material sind. Aus der Analyse dieses Lichts können wir die Zusammensetzung der Probe bestimmen. In einem aktuellen Projekt verwenden wir diese Plasmaspektroskopie um Tumore in menschlichem Gewebe zu identifizieren.

### Elektronenkontrolle

Wenn Licht mit Materie wechselwirkt, treibt es vor allem die Elektronen. Mit unseren optischen Synthesizern können wir die Wechselwirkung so beeinflussen, dass die Elektronen kontrolliert getrieben werden können. Mit diesem Ansatz können zeitlich geformte Laserpulse verwendet werden, um langlebige Kohärenzen zu erzeugen, zu untersuchen und zu kontrollieren. Diese Kohärenzen könnten die Grundlage für die Entwicklung molekularer Quantenbits darstellen, die wir zusammen mit anderen CinSaT-Gruppen im LOEWE Schwerpunktprojekt SMolBits vorantreiben. Wir haben Elektronenkontrolle auch bereits eingesetzt, um Populationen in Atomen und Molekülen in gewünschte Quantenzustände zu steuern, wobei eine zeitliche Genauigkeit von Attosekunden und besser erreicht werden kann. In der Zukunft wollen wir das auch auf chirale Moleküle anwenden.

**How do the building blocks of matter move after irradiation with very short and intense laser pulses and can this motion be controlled and used?**

To this end, we illuminate matter with extremely short laser pulses in the quadrillionth of a second range and observe the ultrafast dynamics with stroboscopic methods in slow motion (**femtosecond spectroscopy**). Using optical synthesizers, we shape the laser light in the time domain and can thus control the

ultrafast dynamics (**ultrafast laser control**) by adjusting the energy transfer.

In our research projects, we exploit the unique properties of ultrashort laser pulses:



### 1. Very short flashes of light.

The shortness of the pulses allows us to "stop time" in the microcosm and, used as a stroboscope, to view light-induced dynamics in slow motion. In our stroboscopes we use optical excitation and interrogation techniques as well as ultrafast electron diffraction.

### 2. Broad color spectrum

A short pulse contains many colors. These can be arranged almost arbitrarily with optical synthesizers, which are also called pulse shapers because they allow to modify the temporal shape of laser pulses. These can be used to control electron dynamics, to detect chirality, but also to optimize laser materials processing and to develop high-resolution microscopy techniques.

### 3. Extremely high intensities

Due to the shortness of femtosecond laser pulses, focusing achieves very high intensities even at low energies per pulse. Using nonlinear optical effects, these can be used for three-dimensional, largely nonthermal and therefore low-damage laser material processing and plasma spectroscopy on the nanometer scale, as well as for three-dimensional microscopy.

Building on these properties we employ ultrashort laser pulses and optical synthesizers in the following research areas (see Figure 1):

### Ultrafast electron diffraction

Diffraction acts as a magnifying glass into the atomic structure of a crystalline solid. Using our ultrashort laser pulses we have developed a stroboscopic system to investigate changes of this atomic structure after interaction with a short burst of light. The system uses similarly short pulses of electrons to create snapshots of the crystal in motion. We can achieve a temporal resolution as good as 120 femtoseconds which is among the best achievable in electron diffraction. As depicted in Figure 1, we are studying the layered materials graphite, hexagonal boron nitride and transition metal dichalcogenides such as  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{ReS}_2$  and  $\text{TaS}_2$ .

### Chirality

Chiral molecules come in two mirror symmetric forms that can have different functions in biology and medicine. Physically, the two forms appear barely distinct. In our group, we are investigating the interaction of circularly polarized ultrashort laser pulses with isolated chiral molecules in the gas phase. When electrons are removed from the molecule in such an interaction, their emission direction is influenced by the chirality of the molecule and the light, creating forward-backward asymmetries as illustrated in Figure 1. This asymmetry is a very strong chiral effect that allows to determine chirality with an accuracy on the enantiomeric excess of better than 1 % from a small number of molecules. Among our goals are the maximizing of chiral signature by means of the optical synthesizer as well as the inversion of chirality inside a molecule. Our investigations on chiral molecules are part of the DFG Sonderforschungsbereich 1319 ELCH located in Kassel.

### Nano material processing plasma spectroscopy

With their high light intensity, ultrashort laser pulses can evaporate material from surfaces and create holes. Using an optical synthesizer, we have demonstrated that a special

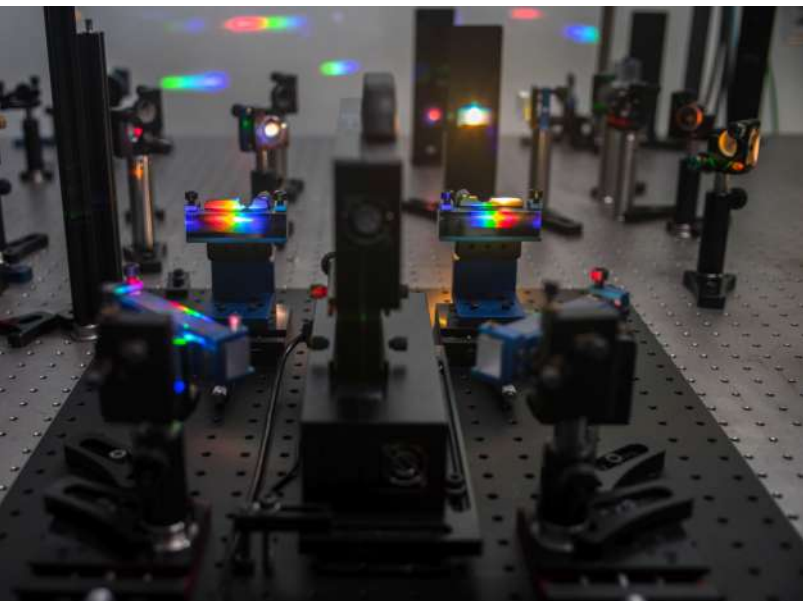


Abbildung 2: Eindruck aus unserem Labor: Ein optischer Synthesizer im Einsatz, wobei die vielen Farben, die ein ultrakurzer Laserpuls enthält, sichtbar werden.

Figure 2: Impression from our lab: Optical synthesizer at work visualizing the many colors present in an ultrashort laser pulse.

temporal shape of laser pulses modifies the interaction of light and matter such that nano channels of unprecedented thinness (250 nm) and depth (7  $\mu\text{m}$ ) are created. These pulses have also been used successfully to perforate cell membranes in a controlled and survivable way (see Figure 1). A by-product of material processing with ultrashort laser pulses is the creation of a plasma from a very small volume that emits light in the colors characteristic for the materials present in the removed substance. We can analyze this light to learn about the composition. In a current project, this plasma spectroscopy is employed to identify tumors in human tissue.

#### **Electron control**

When light interacts with matter, it mainly drives electrons. Using our optical synthesizers we can modify the interaction such that electrons are driven in specific ways. Along this line, the shaped pulses can be used to induce, interrogate and control long-lived electronic coherences as a basis for the development of molecular qubits that we pursue in collaboration with other Cinsat groups in the LOEWE priority project SMolBits. We have also been using electron control to steer population in molecules to desired quantum states with a precision of attoseconds and below. In the future, we want to apply this approach to chiral molecules.

## **Weitere Informationen / Further Information**

### **Prof. Dr. Thomas Baumert**

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Str. 40  
34132 Kassel  
AVZ I - Raum 1128

Tel: +49 561 804-4452  
Fax: +49 561 804-4453  
E-Mail: [baumert@physik.uni-kassel.de](mailto:baumert@physik.uni-kassel.de)  
Website: <http://www.physik.uni-kassel.de/exp3>



### **Dr. Arne Senftleben**

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Str. 40  
34132 Kassel  
AVZ I - Raum 1126

Tel: +49 561 804-4294  
E-Mail: [arne.senftleben@uni-kassel.de](mailto:arne.senftleben@uni-kassel.de)

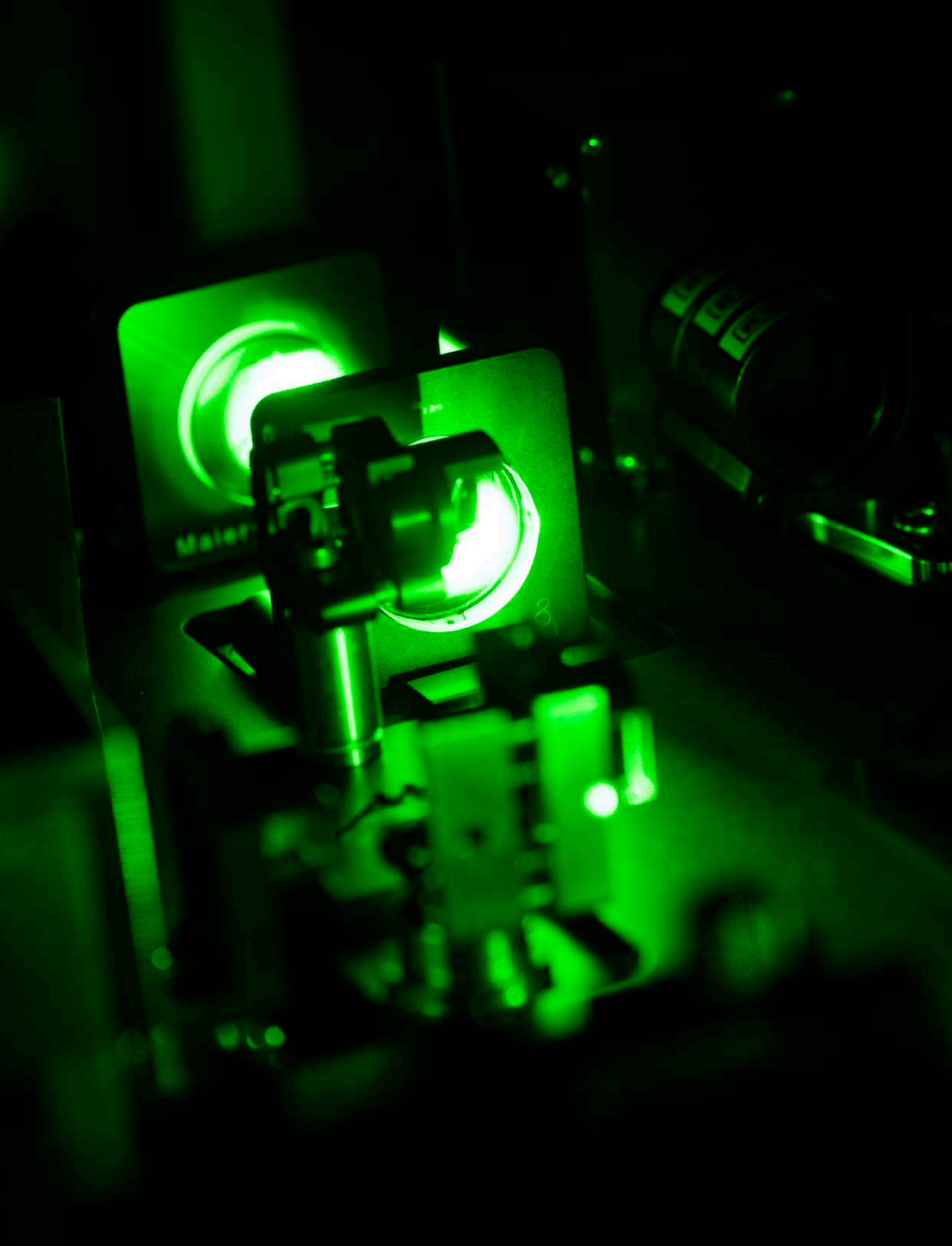


### **Dr. Hendrike Braun**

Universität Kassel  
Institut für Physik  
Heinrich-Plett-Str. 40  
34132 Kassel  
AVZ I - Raum 1126a

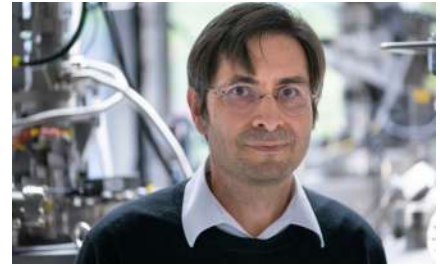
Tel: +49 561 804-4188  
Fax: +49 561 804-4453  
E-Mail: [braun@physik.uni-kassel.de](mailto:braun@physik.uni-kassel.de)





# Funktionale dünne Schichten & Physik mit Synchrotronstrahlung

*Functional thin films & physics with synchrotron radiation*



Prof. Dr. Arno Ehresmann

## Energie- und Ladungstransferprozesse in Nanoclustern

Cluster in der Größenordnung von einigen Nanometern, zusammengesetzt aus einigen wenigen bis zu mehreren 10000 Atomen oder Molekülen, stellen den Übergang zwischen einzelnen Atomen und Festkörpern dar. Experimente an solchen Systemen wurden in der Vergangenheit dadurch motiviert, die Eigenschaften von Materie bei diesem Übergang auf kontrollierte Art und Weise zu studieren. In jüngerer Vergangenheit wurden dieser Motivation mindestens zwei weitere Aspekte hinzugefügt: mit der Vorhersage und experimentellen Beobachtung von neuartigen Zerfallsprozessen, folgend auf eine Photoionisation oder -anregung, öffnete sich ein völlig neues Forschungsfeld. Solche Prozesse sind nur möglich, wenn die Clusterbestandteile quantenmechanisch verschränkt sind. Der erste Zerfallsmechanismus wurde interatomarer oder intermolekularer Coulombzerfall (ICD) genannt. Dabei wird ein Loch in einer inneren Elektronenschale von einem äußeren Elektron aufgefüllt und die freiwerdende Energie zu einem benachbarten Atom oder Molekül transferiert, welches dadurch ionisiert wird. Nach der Entdeckung dieses Prozesses wurde eine Vielzahl weiterer Ladungs- und Energietransferprozesse vorhergesagt und nachgewiesen. Ein kürzlich erschienener Review-Artikel [1] fasst die bisherigen Arbeiten zu diesem Thema zusammen.

Der zweite, mehr anwendungsbezogene Aspekt dieses Themenfelds ist eine umfangreiche Diskussion, ob solche Prozesse für die Strahlungsbiologie relevant sind und eine Rolle für die schädigende Wirkung von ionisierender Strahlung spielen. Im Detail stellt sich die Frage, ob die typischerweise emittierten langsamen Elektronen DNA-Doppelstrangbrüche verursachen können. Weitere Bedeutung in der Astrochemie von Staub- und Eispartikeln ist denkbar.

Durch unsere eigene Arbeit konnten wir ein bestimmtes Mitglied der Familie interatomarer Prozesse erstmals nachweisen, nämlich den strahlenden Ladungstransfer (RCT) zu einfach geladenen Ionen im Grundzustand [2]. Der Nachweis dieses Mechanismus ist besonders herausfordernd, da hierzu Elektronen und Photonen koinzident gemessen werden müssen.

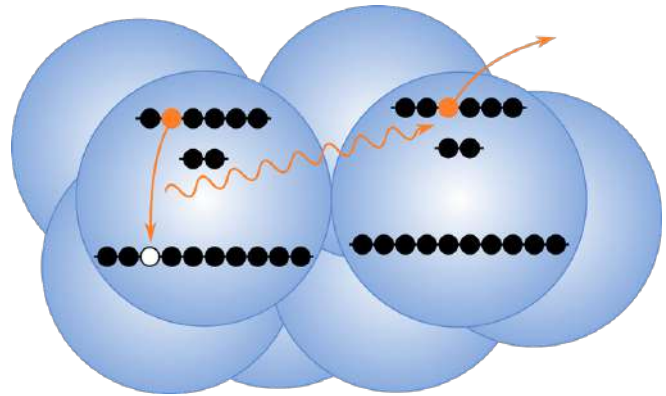


Abbildung 1: Illustration des interatomaren Coulombzerfalls von Innerschalenlöchern, welcher als allgegenwärtiger Zerfallskanal in photoionisierten Clustern identifiziert wurde.

*Figure 1: Illustration of core-level interatomic Coulombic decay, which is a novel decay channel found to be omnipresent in photoionized nanoparticles.*

Elektron-Photon-Koinzidenzspektroskopie wurde zwar mehrfach mit verschiedenen Herangehensweisen versucht, konnte sich bisher aber nicht etablieren. Durch die Entwicklung einer neuen Reflexionsoptik [3] konnten wir den Raumwinkel für Photondetektion signifikant erhöhen. Kombiniert mit einer magnetischen Flasche zur Elektronendetektion konnte Elektron-Photon und Elektron-Elektron-Photon-Koinzidenzspektroskopie an Synchrotronstrahlungseinrichtungen etabliert werden, sogar für komplexe Füllmuster des Speicherrings [4]. Mit dieser Methode wurde auch der Zerfall von Innerschalenlöchern durch ICD (core-level ICD) erstmals in van der Waals gebundenen Systemen beobachtet [5]. Dieser Mechanismus ist in Abb. 1 illustriert. Derzeit wird dieses Forschungsfeld auf heterogene Cluster erweitert, insbesondere auf Wasser-Cluster dotiert mit organischen Molekülen und Flüssigkeitsstrahlen. Damit kann die Lücke zwischen einzelnen isolierten Atomen und fester und flüssiger Materie geschlossen werden.



---

## Energy- and Charge Transfer Processes in Nanoclusters

Nanosized clusters consisting of a few to several 10000s of atoms or molecules constitute a state of matter intermediate between individual atoms or molecules and solids. Experiments on these systems have in the past been motivated by trying to study the transition from properties of individual atoms or molecules to properties of solids by controllably varying the cluster size. Although this is already a valuable research direction in recent years at least two more aspects have been added to the cluster research portfolio: with the prediction and experimental verification of decay processes subsequent to ionization or excitation which only occur in clusters a completely new research branch has opened. These processes only happen when the constituents of the clusters are quantum mechanically entangled. The first of these processes has been termed Interatomic or Intermolecular Coulombic Decay (ICD), where an electron hole in an inner shell is filled by an electron of an outer shell, transferring energy to a neighbouring atom or molecule of the cluster and in this way emitting an electron of this neighbouring entity. After the discovery of this process a whole family of other energy or charge transfer processes in clusters have been predicted and experimentally verified. Results of investigations discussing the fundamentals of these processes and an overview on the whole family of processes have been described in a recent review [1].

The second, somewhat more applied research aspect is the discussion whether these processes are a missing link in understanding the consequences of ionizing radiation on living species and why it is so harmful. In particular, the question arises

whether these processes are responsible for double strand breaks in the DNA due to their typical emission of slow electrons. These family of processes may also be relevant in the understanding of astrochemical processes on dust and icy grains.

In own work we were able to prove experimentally for the first time one of these processes, namely the radiative charge transfer (RCT) to singly charged ground-state ions [2]. This process has been particularly difficult to experimentally prove, as it necessitated the coincident detection of an electron and a photon, a technology which has been tried a few times in the past, but which never made it towards routine applications in experiments. By developing a new reflection optics [3] to considerably enhance the solid angle for photon detection together with a magnetic bottle spectrometer for a full  $4\pi$  acceptance of the emitted electrons an experimental station has been developed enabling routine electron-photon coincidence experiments at synchrotron radiation facilities, even at non-trivial filling patterns [4]. This method enabled in addition the experimental proof of core-level ICD in van der Waals bound systems, applying electron-electron-photon triple coincidence measurements [5]. Core-level ICD is in general found to be one of the fundamental decay channels of photoionized matter and is illustrated in Figure 1. This line of research is currently extended to heterogeneous clusters, in particular to water clusters with embedded other molecules, and to investigations on liquid jets, therefore bridging the gap between individual atoms and molecules and liquid matter.

---

## Literatur / Literature

[1] Till Jahnke et al., Chem. Rev. 120, 11295 (2020)

[2] Andreas Hans et al., Phys. Rev. Lett. 123, 213001 (2019)

[3] Andreas Hans et al., Rev. Sci. Instrum. 90, 093104 (2019)

[4] Christian Ozga et al., Rev. Sci. Instrum. 92, 045110 (2021)

[5] Andreas Hans et al., Phys. Rev. Res. 2, 012022(R) (2020)

## Magnetische Mikro- und Nanopartikel für Lab-on-Chip-Anwendungen

Präzise Bewegungskontrolle von Mikrometer- und Submikrometer-Partikeln ist eine Kerntechnologie für neue Möglichkeiten im Bereich des biomolekularen Analytnachweises. Hierfür gelten magnetische Mikrometer- und Submikrometer-Partikel (MPs), die durch Magnetfelder bewegt werden, als besonders vielversprechend, da es bisher keine Hinweise darauf gibt, dass homogene Magnetfelder biologische Materie verändern würden. Seit den frühen 2000er Jahren kommen statische Magnetfeldlandschaften (MFLs), erzeugt durch magnetisch strukturierte Dünnschichtsysteme, überlagert mit externen Magnetfeldpulsen für den Transport von MPs in Flüssigkeiten zum Einsatz. Der Transport der MPs findet hierbei in unmittelbarer Nähe der Substratoberfläche statt. Die Überlagerung rotierender oder gepulster externer Magnetfelder mit der statischen Streufeldlandschaft aus künstlich hergestellten magnetischen Domänen lässt sich hierbei für die Translation ausnutzen. Ein zentrales Merkmal der mikroskaligen MFLs sind hohe Feldgradienten, die stationäre Partikelgeschwindigkeiten von mehr als 100  $\mu\text{m/s}$  bei moderaten externen Magnetfeldern von nur wenigen mT ermöglichen. Der Transport, das Mischen, die Trennung, das Sortieren und sogar das Erfassen von biologisch funktionalisierten MPs lässt sich mit diesem Ansatz verwirklichen.

In unserer Arbeit konzentrieren wir uns derzeit auf drei Richtungen, (1) die vollständige Kontrolle der translatorischen und rotatorischen Bewegung von MPs, (2) das Design von anisotropen MPs und (3) die Entwicklung automatisierter Tracking-Routinen mit Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) in Zusammenarbeit mit der AG Bernhard Sick der Universität Kassel. Die vollständige translatorische und rotatorische Bewegungssteuerung durch ein sich dynamisch änderndes externes Feld, das von statischen lokalen Magnetfeldlandschaften überlagert wird, ist nur mit anisotropen Partikeln möglich. Zu diesem Zweck haben wir kugelförmige nicht-magnetische Partikel untersucht, die einseitig mit einem magnetischen Schichtsystem bedeckt sind, um ein maximales magnetisches Nettomoment zu induzieren [1]. Mit diesen MPs haben wir die gewünschte vollständige Bewegungskontrolle [2] erreicht, bei der eine rein translatorische, eine rein rotatorische sowie eine gemischt translatorisch-rotatorische Bewegung

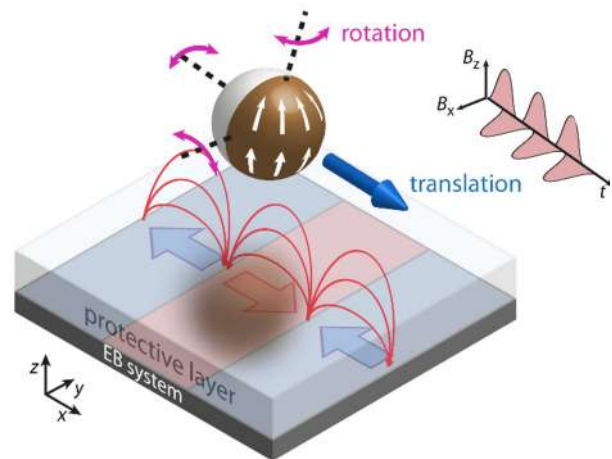


Abbildung 1: Skizze eines magnetischen Janus-Partikels (MJP), mit einer Kappe (braun), bestehend aus einem in-plane Schichtsystem mit Exchange Bias, das mit einer künstlichen magnetischen Streufeldlandschaft auf einem topographisch ebenen Substrat wechselwirkt. Eine kontrollierte Translation und Rotation des MJP wird durch Anlegen externer Magnetfeldpulse in z- und x-Richtung erreicht [2].

Figure 1: Sketch of a magnetic Janus particle (MJP), with a cap (brown) consisting of an in-plane exchange-biased layer system, interacting with an artificial magnetic stray field landscape on top of a topographically flat substrate. Controlled translation and rotation of the MJP is achieved by applying external magnetic field pulses in z- and x-direction [2].

ermöglicht wird. Durch den zusätzlichen Freiheitsgrad der Rotation lassen sich neue Ansätze der Analytdetektion verwirklichen. Beispielsweise dürfte sich durch die Rotation der Partikel über einem bestimmten funktionalisierten Oberflächenbereich des Chips der Nachweis von Analyten durch Partikelimmobilisierung auf der Chipoberfläche über Analytbrücken beträchtlich erhöhen.

Vor kurzem gelang in Kooperation mit dem CINSaT-Partner Herberg auch die translatorische Bewegung magnetischer Partikel die mit green fluorescing protein (GFP) funktionalisiert waren in physiologischer Umgebung [3]. Dies kann als ein

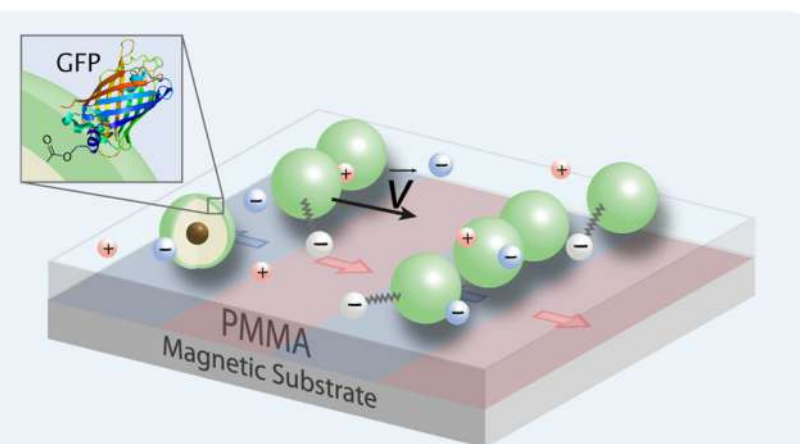


Abbildung 2: Skizze eines Prototypsystems zur Untersuchung der kolloidalen Stabilität und Oberflächenadhäsion superparamagnetischer Core-Shell Partikel mit biochemisch immobilisiertem grün fluoreszierendem Protein (GFP) [3]

Figure 2: Sketch of the prototype system for the investigation of the colloidal stability and surface adhesion of superparamagnetic core-shell particles with biochemically immobilized green fluorescent protein (GFP) [3].

wichtiger Schritt für die Realisierung dieser Transportmethode über Umgebungen rein wässriger Lösung hinaus angesehen werden. Ein automatisiertes Tracking der Bewegungsbahnen der MPs und des Rotationsverhaltens ist der Schlüssel zur statistisch signifikanten Datenauswertung in den aufgezeichneten Videos der entsprechenden Experimente. Erste Routinen wurden von Mitgliedern der Sick-Gruppe an der Universität Kassel [4] in enger

Zusammenarbeit mit unseren Nanowissenschaftlern entwickelt und führen bereits zu signifikanten Ergebnissen. Diese Bemühungen werden derzeit ausgeweitet, um die Erkennung von MPs mit unterschiedlicher optischer Signatur durch die Nutzung von Methoden der KI zu verbessern [5]. Unter Verwendung ähnlicher Bewegungsschemata präsentierten wir des Weiteren eine Methode zur gezielten Positionierung magnetischer Partikel in Polymermatrizen vor der Polymervernetzung zur Fixierung der Partikelpositionen [6].

## Magnetic Micro- and Nanoparticles for lab-on-chip applications

*Precisely controlled actuation of micron and submicron-sized particles is an enabling technology to open new avenues for biomolecular analyte detection. For this goal, magnetic micron and submicron particles (MPs) actuated by magnetic fields were found to be particularly promising, as there is as yet no indication that homogeneous magnetic fields would modify biological matter. Since the early 2000s, static magnetic field landscapes (MFLs) emerging from micromagnetic arrays superposed with external dynamically changing magnetic fields have been used for translatory motion control of MPs in liquids. Transport of MPs across a substrate surface could be achieved by a periodic shift of the MP's magnetic potential energy landscape between neighbouring stray field sources via superposed rotating or pulsed magnetic fields. A central characteristic of the MFLs formed above a micromagnetic pattern are strong field gradients within a small volume (over small distances), enabling high local steady-state velocities of more than 100  $\mu\text{m/s}$  while using moderate fields of only a few mT. Transport, mixing, separation, sorting, and even sensing of biologically functionalized MPs has been achieved with this approach.*

*In our work, we currently focus on three directions, (1) the full control of translatory and rotatory motion of MPs, (2) the design of anisotropic MPs, and (3) the development of automated tracking routines using artificial intelligence methods in cooperation with the Sick group at U Kassel. The full translatory and rotatory motion control by a dynamically changing external field superposed on static and designed magnetic field landscapes emerging from magnetically patterned surfaces is only possible with anisotropic particles. For this, we have tested spherical non-magnetic particles capped with a particular magnetic layer system to induce a maximized net magnetic moment [1]. With these MPs we have achieved the desired full motion control [2], where pure translatory, pure rotatory, and a mixed translatory-rotatory motion is possible. If analyte detection by particle immobilization on the chip surface is desired a rotatory motion over a certain surface area of the chip will enhance considerably the binding probability of the analyte to an adjacent capture molecule. Also, recently it was possible to prove a translatory motion of MPs functionalized with green fluorescent*

protein in physiological environment in cooperation with the CINSaT partner Herberg [3], proving the feasibility of the method not only in pure aqueous environment. An automated tracking of MP tracks and of MP rotation is key to statistically significant data evaluation in the recorded videos of the corresponding experiments. First routines have been developed by members of the Sick group at U Kassel [4] in close collaboration with our

nanoscientists and lead already to significant output. This endeavour will be continued currently to improve recognition of MPs with different optical response by harnessing artificial intelligence enhanced methods [5]. By using similar motion schemes, we presented a method for a defined positioning of magnetic particles in polymer matrices prior to polymer crosslinking to fix the particle positions [6].

---

## Literatur / Literature

[1] Andrea Tomita et al., J. Appl. Phys. 129, 015305 (2021)

[2] Rico Huhnstock et al., Sci. Rep. 11, 21794 (2021)

[3] Meike Reginka et al., Langmuir 37, 8498 (2021)

[4] Kristina Dingel et al., Computer Physics Communications 262, 107859 (2021)

[5] Kristina Dingel et al., 2021 IEEE (ACSOS-C) , S. 150-153 (2021)

[6] Iris Koch et. al., Partikel- und Partikelsystemcharakterisierung, 2100072 (2021)

## Weiterführende Informationen / Further Information

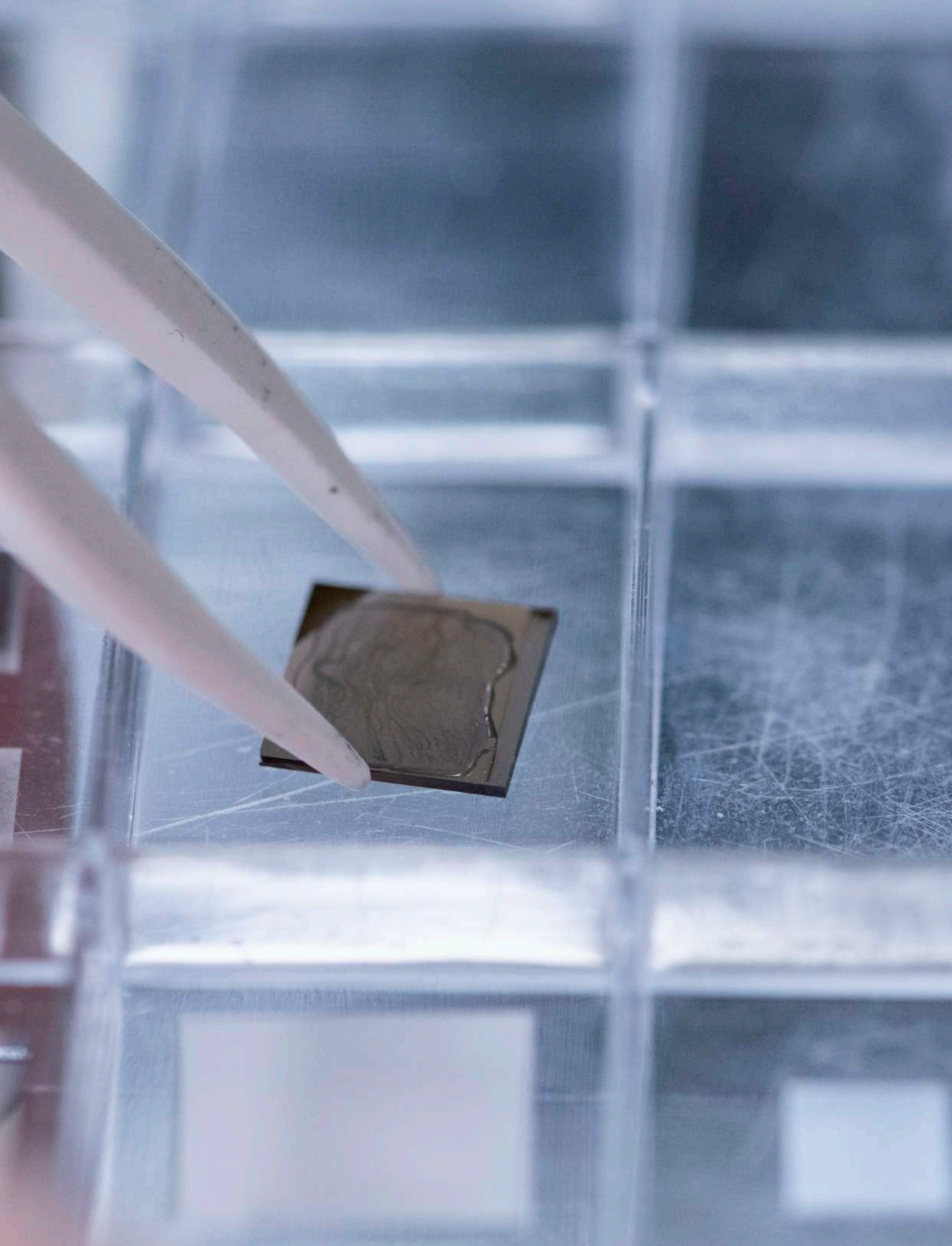
### Prof. Dr. Arno Ehresmann

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Str. 40  
34132 Kassel  
AVZ II - Raum 1266

Tel: +49 561 804-4060 or -4061  
Fax: +49 561 804-4150  
E-mail: [ehresmann@physik.uni-kassel.de](mailto:ehresmann@physik.uni-kassel.de)  
Website: [www.ag-ehresmann.de](http://www.ag-ehresmann.de)







# Institut für Werkstofftechnik, Fachgebiet Kunststofftechnik

*Institute for Materials Engineering,  
Plastic Materials*



Prof. Dr. Hans Peter Heim

Prof. Dr.-Ing. Hans-Peter Heim leitet seit 2008 das Fachgebiet Kunststofftechnik am Institut für Werkstofftechnik an der Universität Kassel. Forschungsschwerpunkte des Fachgebiets sind u.a. die Verarbeitung und Analyse von Kunststoffen und Silikonen, die Digitalisierung, die Funktionenintegration sowie Biokunststoffe.

Das Anwendungszentrum UNIpace wurde gemeinsam mit der B.Braun Melsungen AG im Jahr 2013 gegründet. Übergeordnete Thematik ist die Silikonverarbeitung, mit dem Ziel die wissenschaftliche Forschung mit einer praxisnahen Produktion zu verknüpfen. Dabei werden Verarbeitungsverfahren optimiert und neue Prozesstechnologien, u.a. mit zahlreichen Kooperationspartnern, entwickelt. Ein Schwerpunkt ist hier das Mehrkomponentenspritzgießen, mit dem Thermoplaste und Flüssigsilikonkautschuke in einem Produktionsschritt miteinander verbunden werden und nachfolgende Montageschritte entfallen. Weitere Themen sind die Extrusion von Festsilikonkautschuken sowie das Schäumen von Flüssigsilikonkautschuken.

Im Rahmen der Digitalisierung stehen Methoden des maschinellen Lernens in der Kunststoffverarbeitung im Vordergrund. Aktuelle Forschungsprojekte sind die ressourcenschonende Ermittlung eines optimierten Einstelldatensatzes sowie die zyklusbezogene Echtzeitdatenerfassung aller Prozessgrößen im Spritzgießprozess. Dafür wird ein digitales Abbild eines realen Spritzgießprozesses entwickelt, das mit verschiedenen Methoden des maschinellen Lernens die Bauteilqualität vorhersagen kann.

Ein weiteres Forschungsprojekt ist die Simulation und Verifikation von hochgeschäumten spritzgegossenen Integralschaumstrukturen. Dabei werden in einer Simulationsprozesskette verschiedene Simulationssoftwaretools miteinander verbunden, um eine genaue Übereinstimmung der simulationsbasierten Daten mit den real ermittelten Materialparameter zu erhalten. Füllsimulation, Materialmodellierung und FE-Simulation stellen die jeweiligen Schritte der Simulationskette dar. Durchgeführt werden die Untersuchungen exemplarisch an geschäumten Bauteilen (Pull and Foam), die durch lokal begrenztes Aufschäumen der Thermoplaste in der Werkzeugkavität hergestellt werden.



Abbildung 1: Granulat und Probekörper eines biobasierten Kunststoffs mit Zellulosefaserverstärkung

*Figure 1: Granules and test specimens of a bio-based plastic with cellulose fiber reinforcement*

Die Nachfrage nach biobasierten Kunststoffen ist in den letzten Jahren stetig gestiegen. Thermoplastische Kunststoffe aus nachwachsenden Rohstoffen bieten Alternativen zu herkömmlichen erdölbasierten Kunststoffen. Am Fachgebiet Kunststofftechnik werden Verbundwerkstoffe aus nachwachsenden Rohstoffen entwickelt und auf ihre mechanischen Eigenschaften charakterisiert. Eine entscheidende Rolle spielt dabei die Verarbeitung biobasierter Kunststoffe. In einem Kooperationsnetzwerk mit zahlreichen weiteren Partnern steht die Optimierung der Langzeitbeständigkeit von biobasierten Kunststoffen im Fokus. In mehreren Teilprojekten werden verschiedene biobasierte Kunststoffe (z.B. naturfaserverstärktes Bio-PA, PLA-Stärkeblends) entwickelt und optimiert. Die Ergebnisse werden in einer Datenbank gesammelt und den Unternehmen der Kunststoffindustrie zur Verfügung gestellt.

Im Bereich der Funktionalisierung wurde im Jahr 2020 das Anwendungszentrum UNIfipp (function-integration polymer processing) gegründet. Übergeordnete Themenfelder sind die Funktionenintegration (z.B. Aktorik, Sensorik, Elektrolumineszenz, Photovoltaik, Lab on Chip) sowie die Prozessintegration (z.B. Reduzierung von Verfahrensschritten einer Wertschöpfungskette, Integration unterschiedlicher Verfahren, integrierte Fertigungsprozesse), die sich als aktuelle Trends in

der Kunststoffbranche ausmachen lassen. Den Anwendungen liegen häufig innovative Materialien mit in situ-Modifikation oder Schichtsysteme zugrunde. Im Fokus stehen neben der Entwicklung und Herstellung dieser neuen Materialien auch deren Weiterverarbeitung zu fertigen Produkten. Besondere Herausforderungen zur Etablierung der funktionenintegrierenden Kunststofftechnik ergeben sich insbesondere aus der hohen Anlagenkomplexität für die Automatisierung sowie den hohen Anforderungen an die Qualitätssicherung entlang der gesamten Prozesskette. Mit dem neuen Anwendungszentrum wurde eine Plattform für die Initiierung und kooperative Bearbeitung von Aufgaben und Projekten mit Partnern aus Industrie und Wissenschaft geschaffen, die zentrale Themen, wie die additive Fertigung, die Herstellung von Schichtsystemen sowie das Compoundieren und Blenden von Polymeren bearbeitet.

Ein weiteres Thema ist die Integration effizienter Solarzellen in Gebäude. In Zusammenarbeit mit verschiedenen Partnern soll ein Fenster entwickelt werden, das Sonnenenergie in nutzbare Energie für die Haustechnik (z. B. elektrische Rollläden oder andere Verbraucher) umwandelt. Die Energie soll von einem dünnen, mit Quantendots gefüllten Polymerfilm erzeugt werden, der Wellenlängen im ultravioletten Bereich des Sonnenlichts absorbiert und Wellen im nahen Infrarot- und Infrarotbereich emittiert. Diese Rotverschiebung wird für ein möglichst transparentes Fenster benötigt. Liegen die Absorptions- und Emissionsspektren zu nahe beieinander, absorbieren die Quantendots die emittierten Wellen wieder, und der dünne Film färbt sich. Die emittierten Wellen werden an den Rand des Fensters geleitet, wo spezielle Galliumarsenid-Solarzellen die Sonnenenergie in nutzbare Energie umwandeln. Das Projekt steht vor verschiedenen Herausforderungen wie dem sogenannten Fogging aller Innenraummaterialien und der Befestigung der dünnen Schicht auf Glas.



Abbildung 2: Validierung der Ergebnisse der Modellierung auf der Grundlage von Methoden des maschinellen Lernens (Abgebildet: Christin Gerstner)

Figure 2: Validation of results from modeling based on machine learning methods (Figure: Christin Gerstner)

*Prof. Dr.-Ing. Hans-Peter Heim has been a Professor of Plastics Engineering at the University of Kassel since 2008. His research topics include processing and analyzing plastics and silicones, digitalization, function-integration, and bioplastics.*

*The polymer application center UNIpace was founded together with the B. Braun Melsungen AG in 2013 with a focus on silicone processing. The aim is to link scientific research in the field of silicones (solid and liquid silicone rubbers) with production applied in practice. In addition to optimizing processing methods*

*and introducing new process technologies, UNIpace has cooperations with several regional and national companies in the field of silicone rubber processing. In addition, numerous research projects are underway in this area. One focus is on multi-component injection molding. In this process, different materials (liquid silicone rubber with thermoplastic) are processed into a component in a single production step, which means that subsequent assembly steps can be eliminated. Other topics include the extrusion of solid silicone rubbers in addition to the foaming of liquid silicone rubbers.*



*In digitalization topics methods of machine learning regarding plastics processing are in focus. Current research projects include the resource-saving determination of an optimized setting data set, as well as the cycle-related real-time data acquisition of all process variables in the injection molding process. The department is developing a digital image of a real injection molding process that can predict component quality using various machine learning methods. Digitalization and the application of machine learning methods can enable more efficient process optimization and monitoring in plastics processing, which is being driven forward by the investigations at the department of plastic engineering.*

*Another research project is the simulation and verification of highly expanded injection-molded integral foam structures. The aim is to verify and validate simulation results in the context of highly expanded injection-molded integral foam structures. Utilizing a simulation process chain, which corresponds to a coupling of three different simulation software tools, it will be investigated, among other things, to what extent real determined material parameters can be adjusted. Filling simulation, material modeling, and FE simulation represent the respective steps of the simulation chain. The "pull and foam" process variant is used to generate locally foamed areas in the injection-molded integral part. Using precision-opening molds and the associated volume expansion, it is possible to initiate locally limited foaming of the polymer melt in the mold cavity.*

*The demand for bio-based plastics has risen steadily in recent years. Thermoplastics made from renewable raw materials offer alternatives to conventional, crude oil-based plastics. At the department of plastic engineering, composites made from renewable raw materials are being developed and characterized in terms of their mechanical properties. Processing plays a decisive role in biobased plastics. In a cooperation network with numerous other partners, the optimizing of the long-term durability of biobased plastics is in focus. In several subprojects, different bio-based plastics (e.g., natural fiber-reinforced bio-PA, PLA starch blends) are developed and optimized. The results are collected in a database and made available to companies in the plastics industry.*

*In the field of functionalization, the application center UNIfipp (function-integration polymer processing) was founded in 2020. Topics are function integration (e.g., actuators, sensors, electroluminescence, photovoltaics, lab on a chip) and process integration (e.g., reduction of process steps in a value chain, integration of different processes, integrated manufacturing processes), which can be identified as current trends in the plastics industry. The applications are often based on innovative materials within situ modification or layer systems. In addition to the development and production of these new materials, their further processing into finished products is the focus of the project. Challenges for the establishment of function-integrating plastics technology include high plant complexity for automation as well as high demands on quality assurance along the entire process chain. The new application center is intended to create a platform for the initiation and cooperative processing of tasks and projects with partners from industry and science. Central topics are additive manufacturing, the production of layer systems as well as compounding and blending.*

*One specific topic is to integrate efficient solar cells into buildings. In collaboration with different partners, the development of a window that converts solar energy into energy for building services (e.g., electric shutters or other consumers) is running. The energy is to be provided by a thin polymer film filled with quantum dots that absorbs wavelengths in the ultraviolet range from sunlight and emits waves in the near-infrared and infrared ranges. The redshift is needed for a window that is as transparent as possible. If the absorption and emission spectra are too close to each other, the quantum dots reabsorb the emitted waves, and the thin film is colored. The re-emitted waves are directed to the edge of the window, where special gallium arsenide solar cells convert the solar energy into usable energy. The project faces various challenges such as the fogging behavior of all interior materials and the attachment of the thin film to the glass.*



---

## Weitere Informationen / *Further Information*

### **Prof. Dr. Hans Peter Heim**

Universität Kassel

Mönchebergstr. 3

34125 Kassel

Raum 2201

Tel: +49 561 804-3670

Fax: +49 561 804-3672

E-Mail: [heim@uni-kassel.de](mailto:heim@uni-kassel.de)

Website: [www.ifw-kassel.de](http://www.ifw-kassel.de)





# Laborastrophysik

## Laboratory Astrophysics



Prof. Dr. Thomas Giesen

### Infrarot- und Terahertz-Präzisionsspektroskopie zur Untersuchung chiraler Moleküle

Thomas Giesen studierte Physik an der Universität zu Köln, wo er 1992 promovierte. Als Stipendiat der Max-Kade-Stiftung begann er Untersuchungen an kleinen Kohlenstoff-Clustern an der University of California, Berkeley/USA. 1994 kehrte er an die Universität zu Köln zurück, wo er Experimente zur Gasphasen-Infrarot-Laserspektroskopie von kohlenstoffhaltigen Molekülen mit astrophysikalischer Relevanz durchführte.

Von 2009 bis 2012 war er außerplanmäßiger Professor an der Universität zu Köln, bis er 2012 an die Universität Kassel auf eine Professur für Laborastrophysik berufen wurde. Seit 2015 ist er Mitglied des CINSaT und seit 2018 Projektleiter im SFB 1319 ELCH.

Prof. Giesen und sein Team am Institut für Physik sind auf hochpräzise Terahertz- und Infrarot-Laser-Spektroskopie spezialisiert. Zu den Forschungsthemen gehören die Untersuchung chiraler Moleküle in der Gasphase sowie die Charakterisierung interstellarer Moleküle unter Laborbedingungen. Die erforderliche hohe spektrale Genauigkeit der Spektrometer wird durch die Stabilisierung der Laserfrequenzen auf einen optischen Frequenzkamm erreicht.

Die kombinierte Anwendung von Infrarot- und Mikrowellen-Strahlung ermöglicht eine Vielzahl neuer Experimente zur kontrollierten Anregung und gezielten Manipulation chiraler

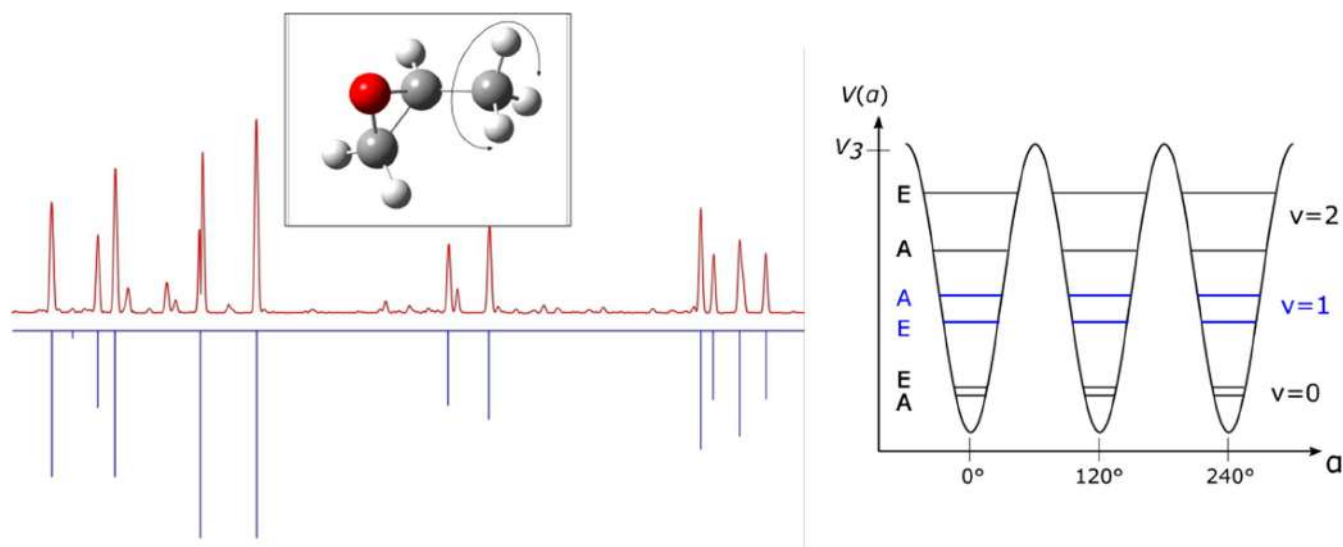


Abbildung 1: links: Rotationsspektrum von Propylenoxid im ersten vibrationsangeregten Zustand der molekülinternen Torsionsbewegung. Die interne Rotation der Methylgruppe führt zu einer Linienaufspaltung, die im Spektrum deutlich erkennbar ist. Das gemessene Spektrum (rot) lässt sich aufgrund einer quantenmechanischen Analyse exakt beschreiben (blau). Links: Die große Linienaufspaltung im schwingungsangeregten Zustand ( $v=1$ ) wird durch die erhöhte Tunnelbewegung der Methylgruppe erzeugt [1].

Figure 1: left: Rotational spectrum of propylene oxide in the first vibrationally excited state of the internal molecular torsional motion. The internal rotation of the methyl group leads to a line splitting, which is clearly visible in the spectrum. The measured spectrum (red) can be accurately described (blue) based on a quantum mechanical analysis. Left: The large line splitting in the vibrationally excited state ( $v=1$ ) is generated by the increased tunneling motion of the methyl group [1].



Abbildung 2: Multireflexionsoptik vom Typ Herriott. Die aus Aluminium bestehenden Spiegel führen zu einer deutlichen Erhöhung der Signale schwach absorbierender Moleküle. Die speziell dazu entwickelten Spiegel wurden mithilfe einer Diamantfräse in der Feinmechanik-Werkstatt am Standort AVZ gefertigt. Das Spiegel-Design beruht auf computergestützten Berechnungen Gauß'scher Strahlen [2].

*Figure 2: Herriott-type multireflection optics. The two aluminum mirrors lead to a significant increase in the signals of weakly absorbing molecules. The specially designed mirrors were manufactured using a diamond milling machine in the mechanics workshop at the AVZ site. The mirror design is based on computer-aided calculations of Gaussian beams [2].*



Moleküle. So ist ein kontrollierter Transfer eines Enantiomers in sein Spiegelbild denkbar, der über das quantenmechanische Tunneln in einem Infrarot-angeregten Zustand erfolgt. Die Gruppe transienter chiraler Moleküle, die bei Raumtemperatur schnell zwischen den beiden spiegelbildlichen Formen wechselt, lässt sich mithilfe intensiver Laserfelder kontrollieren und steuern. Die Präzisionsspektroskopie mittels stabiler Laser und Mikrowellenquellen wird zudem verwendet, um kleinste Energieunterschiede im Energieterm-Schema von Molekülen zu untersuchen. Die instrumentelle Entwicklung zielt auf eine weitere Verbesserung der spektralen Genauigkeit, um einen theoretisch vorhergesagten minimalen Energieunterschied zwischen links- und rechtshändigen Molekülen erstmals nachzuweisen.

Auch für die Astrophysik ist die Untersuchung chiraler Moleküle von großer Bedeutung. Im Jahre 2018 wurde Propylenoxid als erstes chirales Molekül im Weltall entdeckt. Die interstellare Chemie bringt eine Vielzahl organischer Moleküle hervor, deren Entdeckung Gegenstand aktueller Forschung ist. Welche Rolle chirale Moleküle in der chemischen Evolution des Kosmos spielen ist eine bisher unbeantwortete Frage. Mit Präzisionsspektrometern, die spezifisch zur Untersuchung astrophysikalisch relevanter Moleküle entwickelt wurden und mit Beoberkungskampagnen an weltweiten Großteleskopen wird die Laborastrophysik Gruppe auch weiterhin zur Untersuchung der interstellaren Materie beitragen. Welche Rolle dabei den chiralen Molekülen zukommt ist eine spannende und offene Frage [3].

## ***Infrared and Terahertz Precision Spectroscopy for the Study of Chiral Molecules***

*Thomas Giesen studied physics at the University of Cologne, where he received his PhD in 1992. As a scholarship holder of the Max Kade Foundation he started investigations on small carbon clusters at the University of California, Berkeley/USA. In 1994 he returned to the University of Cologne, where he performed experiments on gas-phase infrared laser spectroscopy of carbonaceous molecules with astrophysical relevance. From 2009 to 2012, he was an associate professor at the University of*

*Cologne until he was appointed to a professorship in laboratory astrophysics at the University of Kassel in 2012. He has been a member of CINSaT since 2015 and project leader in SFB 1319 ELCH since 2018.*

*Prof. Giesen and his team at the Institute of Physics are specialized in high-precision terahertz and infrared laser spectroscopy. Research topics include the study of chiral*



molecules in the gas phase and the characterization of interstellar molecules under laboratory conditions. The required high spectral accuracy of the spectrometers is achieved by stabilizing the laser frequencies on an optical frequency comb.

The combined application of infrared and microwave radiation enables a variety of new experiments for the controlled excitation and targeted manipulation of chiral molecules. For example, a controlled transfer of an enantiomer to its mirror image is conceivable via quantum mechanical tunneling in an infrared excited state. The group of transient chiral molecules that rapidly switches between the two mirror-image forms at room temperature can be controlled and steered using intense laser fields. Precision spectroscopy using stabilized lasers and microwave sources is also used to study smallest energy differences in the energy level scheme of molecules. Instrumental

development is aimed at further improving spectral accuracy to detect for the first time a theoretically predicted minimum energy difference between left- and right-handed molecules.

The study of chiral molecules is also of great importance to astrophysics. In 2018, propylene oxide became the first chiral molecule discovered in space. Interstellar chemistry produces a wide variety of organic molecules, the discovery of which is the subject of current research. What role chiral molecules play in the chemical evolution of the cosmos is still an unanswered question. With precision spectrometers specifically designed to study astrophysically relevant molecules and with observational campaigns at large telescopes worldwide, the Laboratory Astrophysics Group will continue to contribute to the study of interstellar matter. What role chiral molecules will play in this is an exciting and open question [3].

---

## Literatur / Literature

[1] *Deciphering the rotational spectrum of the first excited torsional state of propylene oxide.* P. Stahl, B. E. Arenas, O. Zingsheim, M. Schnell, L. Margulès, R. A. Motiyenko, G. W. Fuchs, T. F. Giesen, J. Mol. Spectrosc. 378, 111445 (2021).

[2] *Concept and application of a linearized ring multipass optics configuration.* B. Waßmuth, G. W. Fuchs, H. Zimmermann, and T. F. Giesen, Applied Optics 60, 10273-10281 (2021).

[3] *Laboratory blueprints for interstellar searches of aromatic chiral molecules: rotational signatures of styrene oxide,* P. Stahl, B. E. Arenas, S. R. Domingos, G. Fuchs, M. Schnell and T. F. Giesen, Phys. Chem. Chem. Phys. 22, 21474-21487 (2020).

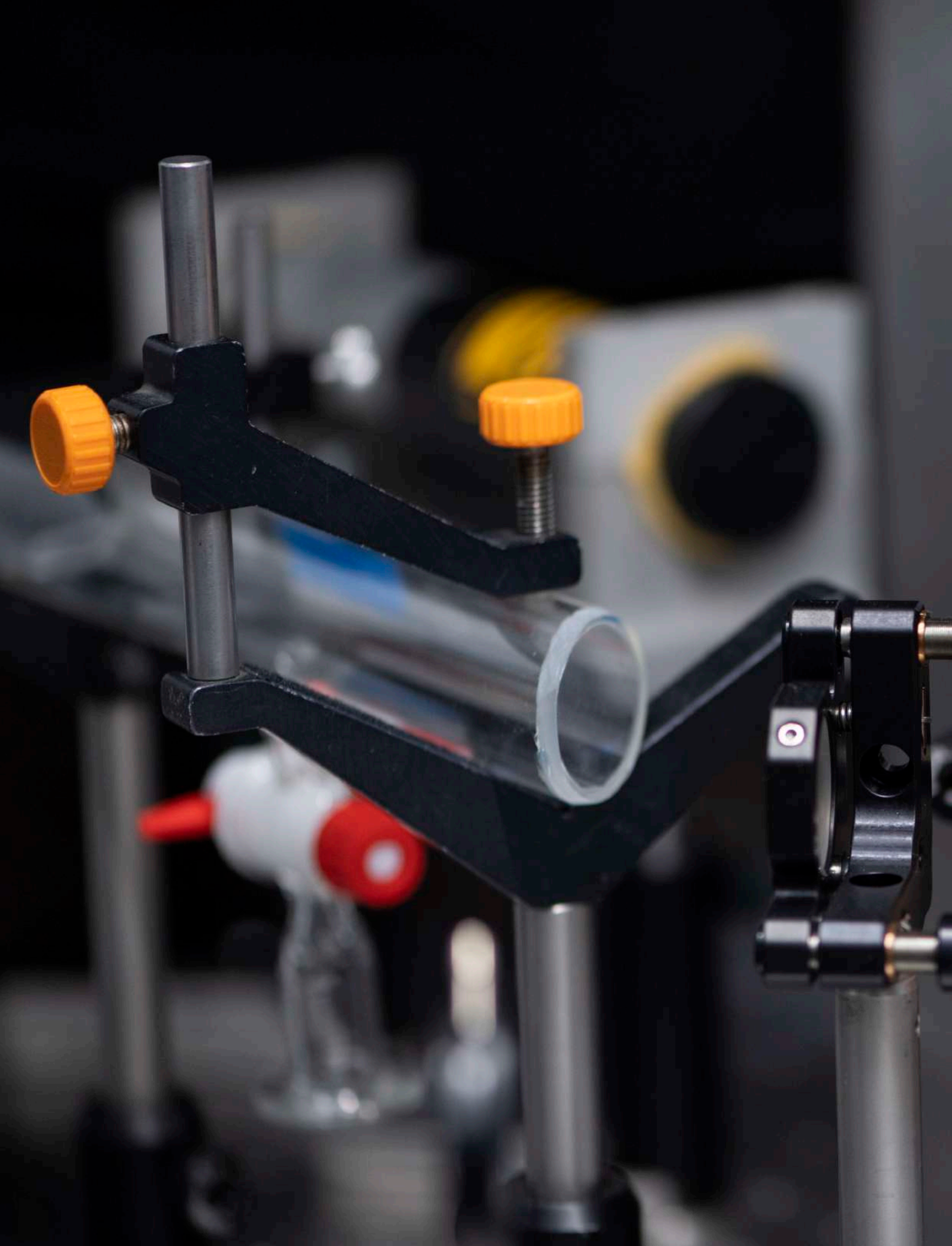
## Weitere Informationen / Further Information

### Prof. Dr. Thomas Giesen

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Str. 40  
34132 Kassel  
AVZ I - Raum 1144

Tel: +49 561 804-4775  
Fax: +49 561 804-934792  
E-Mail: [t.giesen@uni-kassel.de](mailto:t.giesen@uni-kassel.de)  
Website: [www.uni-kassel.de/go/labastro](http://www.uni-kassel.de/go/labastro)





# Licht-Materie-Wechselwirkung

## *Light-matter Interactions*



Prof. Dr. Kilian Singer

Das Fachgebiet ist auf Grundlagenforschung bezüglich Quantenoptik und Quantentechnologien ausgerichtet mit dem Fokus auf Quantensensorik. Die Expertise erstreckt sich über Rydberg-Atome, gefangene ultrakalte Atome, Farbzentren bis hin zu gefangenen lasergekühlten Ionen. Die Nachwuchswissenschaftler Gruppe um Daqing Wang beschäftigt sich darüber hinaus mit Interferenzexperimenten zur Identifikation von chiralen Molekülen.

Kilian Singer studierte Physik an der Universität Heidelberg und promovierte 2004 an der Universität Freiburg. Er arbeitete als Postdoktorand an der Universität Ulm und wurde 2010 wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Universität Mainz. Seit 2015 ist er ordentlicher Professor an der Universität Kassel (W3). Er ist ordentliches Mitglied von CINSaT und Sprecher des Forschungsschwerpunkts "Quantum Technologies". Als Erfinder und „Principal Investigator“ der kleinsten Wärmekraftmaschine aus nur einem Atom (siehe Abb.1) konnte Prof. Singer die Gesetze der Thermodynamik von Wärmekraftmaschinen für einzelne Atome überprüfen. Physics World hat daraufhin unsere Publikation unter die Top-Ten-Liste der "Durchbrüche des Jahres". Die Ergebnisse haben ein neues Forschungsfeld im Rahmen einer DFG-Forschergruppe der Quantenthermodynamik für Wärmekraftmaschinen begründet. Des Weiteren ist er Netzwerkkoordinator (VW-Stiftung, BMBF) bei einem Projekt zur

Realisierung von Quantenspeichern mit Farbzentren. Im Rahmen des Sonderforschungsbereich ELCH werden Rydbergatome als ultrasensitive Quantensensoren für Chiralität untersucht. Im LOEWE Projekt werden skalierbare Molekulare Quantenbits in Ionenfallen untersucht.

Daqing Wang studierte Physik an der Huazhong University of Science and Technology in China und an der Universität Jena. 2013 begann er seine Doktorarbeit am Max-Planck-Institut für die Physik des Lichts über Cavity-Quantenelektrodynamik mit einzelnen Molekülen. Seine Arbeit wurde mit dem Dissertationspreis der Deutschen Physikalischen Gesellschaft 2020 ausgezeichnet. 2018 wechselte er in die Gruppe von Prof. Kilian Singer in Kassel, um Thermodynamik im Quantenbereich zu untersuchen und seine unabhängige Forschungsrichtung mit Licht-Molekül-Wechselwirkung zu verfolgen. Er und seine Mitarbeiter haben theoretisch gezeigt, dass ein chirales optisches Gitter, das mit einem gepulsten Laser erzeugt wurde, dazu verwendet werden kann, eine enantiospezifische Materiewellenbeugung zu realisieren. Dieses System eröffnet die Möglichkeit, grundlegende Experimente mit chiralen Molekülen im Quantenbereich durchzuführen (siehe Abb. 2). Ein experimenteller Aufbau zur Umsetzung dieses Vorschlags wird derzeit in seinem Team vorbereitet.

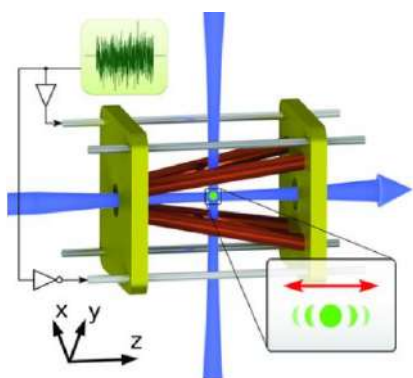


Abbildung 1: In der Einzelionen-Wärmekraftmaschine (aus Science, 352, 325-329 (2016)) untersucht die Gruppe bahnbrechende Experimente mit thermischen Maschinen im Quantenbereich (New Journal of Physics, 22, 093020 (2020)).

Figure 1: In the single ion heat engine (taken from Science, 352, 325-329 (2016)) the group is investigating pioneering experiments with thermal machines in the quantum regime (New Journal of Physics, 22, 093020 (2020)).

The department is focused on fundamental research concerning quantum optics and quantum technologies with a focus on quantum sensing. Expertise ranges from Rydberg atoms, trapped ultracold atoms, color centers to trapped laser-cooled ions. The junior principal investigator group led by Daqing Wang has been leading a team to study chiral light-molecule interaction in the gas phase.

Kilian Singer studied physics at the University of Heidelberg and obtained a PhD degree at the University of Freiburg 2004. He worked as a postdoctoral researcher at the University of Ulm and became 2010 academic research staff at the University of Mainz. Since 2015 he is Full Professor at the University of Kassel (W3). He is a full member of CINSaT and a spokesperson of the research focal point "Quantum Technologies". As inventor and "Principal Investigator" of the smallest heat engine made of only one atom (see Fig. 1), Prof. Singer was able to verify the laws of thermodynamics of heat engines for single atoms. Physics World subsequently placed our publication among the top ten list of "Breakthroughs of the Year". The results have established a new field of research within a DFG research group of quantum thermodynamics for heat engines. Furthermore, Prof. Singer is

network coordinator (VW Foundation and BMBF) in a project for the realization of quantum memories with color centers. Within the Collaborative Research Center ELCH, Rydberg atoms are investigated as ultrasensitive quantum sensors for chirality. In the LOEWE project scalable molecular quantum bits are investigated with ion traps.

Daqing Wang studied physics at the Huazhong University of Science and Technology in China and the University of Jena. 2013 he started his PhD work at the Max-Planck Institute for the Science of Light on cavity quantum electrodynamics with single molecules. His thesis was awarded the Dissertation Prize of the German Physical Society in 2020. 2018 he joined the group of Prof. Kilian Singer in Kassel to study thermodynamics in the quantum regime and pursue his independent research direction with light-molecules interaction. He and co-workers demonstrated theoretically that a chiral optical grating created using a pulsed laser can be used to achieve enantio-specific matter-wave diffraction. This scheme opens a door for performing fundamental experiments with chiral molecules in the quantum regime (see Fig. 2). An experimental setup aiming at realizing this proposal is now being prepared in his team.

Abbildung 2: Vorgeschlagener Aufbau zur Erzeugung von Quantenüberlagerungen von Enantiomeren und zur Ausnutzung ihrer Tunnel-dynamik für interferometrische Messungen. Ein racemischer Strahl chiraler Moleküle wird an optischen Gittern gebeugt und am Detektionsschirm gefiltert (entnommen aus Phys. Rev. X 11, 031056 (2021)).

Figure 1: Proposed setup to generate quantum superpositions of enantiomers and exploit their tunneling dynamics for interferometric sensing. A racemic beam of chiral molecules is diffracted from optical gratings and filtered at the detection screen (taken from Phys. Rev. X 11, 031056 (2021)).

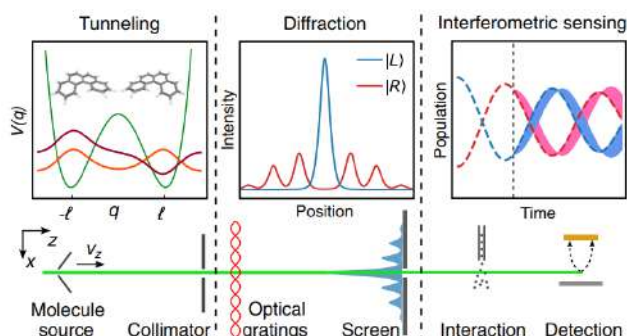






Abbildung 3: Fotos der Mitglieder der Gruppe Experimentalphysik I (ab Postdoc-Ebene). Von links nach rechts: Daqing Wang, Peter Zahariev und Markus Debatin.

Figure 3: Photos of the experimental Physics I group members (starting from postdoc level). From left to right: Daqing Wang, Peter Zahariev and Markus Debatin.

## Weitere Informationen / *Further Information*

### **Prof. Dr. Kilian Singer**

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Str. 40  
34132 Kassel  
AVZ I - Raum 1166

Tel: +49 561 804-4358  
Fax: +49 561 804-4518  
E-Mail: [ks@uni-kassel.de](mailto:ks@uni-kassel.de)  
Website: <https://www.uni-kassel.de/go/exp1>





# Makromolekulare Chemie & Molekulare Materialien

## Macromolecular Chemistry & Molecular Materials



Thomas Fuhrmann-Lieker

In unserer Arbeitsgruppe, die nun Teil des Fachgebietes Physikalische Chemie der Nanomaterialien ist, interessieren wir uns für die physikochemischen Prinzipien der Musterbildung auf einer mit den Wellenlängen von ultraviolett und sichtbarem Licht vergleichbaren Längenskala. Ziel ist die Herstellung selbstorganisierter photonischer Nanostrukturen. Wir untersuchen dafür sowohl *hybride biologische Materialien* als auch *organische optoelektronische Materialien*.

Auf dem Gebiet der *hybriden biologischen Materialien* (Abb. 1) untersuchen wir die komplexe Silikat-Nanostruktur von Diatomeen – einzellige Algen, die im Zuge ihrer Zellteilung ornamentale Zellwände produzieren. Im Konsortium PhosMOrg haben wir Modellsysteme entwickelt, die die Wechselwirkung zwischen Polymeren und Silikat nachstellen und eine komplexe mesoskopische Phasenseparation aufweisen können. Mit Laserfarbstoffen zum Anfärben der Zellwände entwickeln wir hybride photonische Strukturen, die uns helfen, die optische Funktion der Silikatzellwände beim Lichteinsammeln für die Photosynthese zu verstehen.

Beim Vermehrungsmechanismus der Diatomeen treten nicht nur räumliche, sondern auch zeitliche Strukturen auf. Diese Oszillationen auf verschiedenen Zeitskalen untersuchen wir experimentell und theoretisch in der Kasseler Graduiertenschule

über biologische Uhren und im darauf aufbauenden Graduiertenkolleg der Deutschen Forschungsgemeinschaft. Hier untersuchen wir, wie Prozesse auf der kurzen Zeitskala zwischen zwei Zellteilungen die Populationsdynamik einer ganzen Kolonie mit Zeitskalen über mehrere Jahre beeinflussen können.

Wir haben unser Biomaterial-Portfolio inzwischen auch auf Polysaccharide aus Arthropoden und Pflanzen sowie auf Polyphenole aus Braunalgen ausgedehnt, wobei letztere eine Schwestergruppe der Diatomeen darstellen. So konnten wir zeigen, dass vernetzte Cellulosefasern, die mit Laserfarbstoffen gefärbt sind, ein Zufallsresonator-Netzwerk darstellen, mit interessanten Emissionseigenschaften aufgrund stimulierter Emission in einer ungeordneten Topologie. Die Wechselwirkung solcher Materialien mit natürlichen Farbstoffen öffnet neue Perspektiven für eine neue Generation erneuerbarer Kompositmaterialien, die wir zusammen mit Kolleginnen und Kollegen aus den Ingenieurfachbereichen entwickeln.

Zufallslaser stehen auch im Interesse bei unseren *organischen optoelektronischen Materialien* (Abb. 2). Hier wenden wir die Fähigkeit zur Musterbildung an, die in verspannten Multischichtstrukturen oder ternären Mischungen verborgen liegt. Beide relaxieren zu sogenannten spinodalen Strukturen, die sich durch periodische Muster einer definierten räumlichen

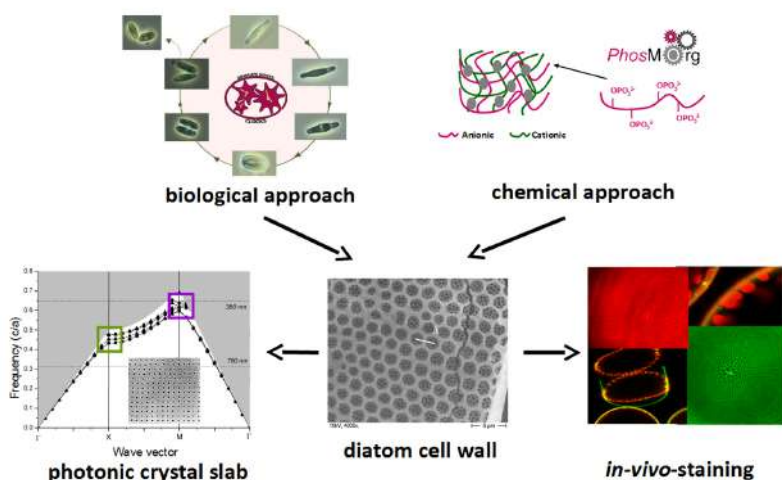


Abbildung 1: Periodische Strukturen in der Diatomeen-Zellwand werden durch Reduplikation in Algenkulturen (oben links) oder in biomimetischen System (oben rechts) erzeugt. Sie beeinflussen photonische Moden (unten links) und können durch emittierende Moleküle funktionalisiert werden, sogar in lebenden Zellen (unten rechts).

Figure 1: The periodic patterns in the diatom cell wall are generated by reduplication in algae cultures (upper left) or in biomimetic systems (upper right). They influence photonic modes (lower left) and can be functionalized with emissive molecules, even in living cells (lower right).



Wellenlänge, aber ungeordneter Orientierung auszeichnen. Zusammen mit Kolleginnen und Kollegen aus Physik und Ingenieurwissenschaften wenden wir den Musterbildungsprozess in Hybridschichten aus unseren eigenen Materialien mit anderen optischen, elektrischen oder magnetischen Materialien an.

Mit Azomaterialien erzielen wir eine noch bessere Kontrolle der Musterbildung. Die Besonderheit dieser Materialklasse ist die Fähigkeit, auf polarisiertes Licht mit lichtinduzierter Doppelbrechung zu reagieren, was interessante optische Bauelemente ermöglicht. Wir untersuchen Oberflächengitter, helikale Strukturen und Mikroorigamimuster, indem wir dieses Prinzip in Photostrukturierungsmethoden anwenden.

*In our research group that is now part of the Physical Chemistry of Nanomaterials unit, we are interested in the physicochemical principles of pattern formation on a length scale comparable with the wavelengths of ultraviolet and visible light, thus building the basis for self-organized photonic nanostructures. For this purpose, we investigate hybrid biological materials as well as organic optoelectronic materials.*

*In the hybrid biological materials field (Figure 1) we investigate the intricate silica nanostructures of diatoms, single-celled algae that deposit highly ornamented cell walls during their cell division. In the consortium PhosMOrg we have been developing model systems that mimic the interaction between polymers and silica, leading to a complex mesoscopic phase separation. Using laser dyes for staining the cell wall, we develop hybrid photonic structures that help us to understand the optical function of the silica cell wall in collecting light for photosynthesis.*

*Not only generate spatial patterns, but also temporal patterns are generated in the proliferation mechanism of diatoms. Oscillations that occur on different timescales are investigated theoretically and experimentally within the graduate school on biological clocks that evolved into a Research Training Group funded by the DFG. Here, we investigate how processes on the short time scale between two cell divisions control the population dynamics of a whole colony in timescales over several years.*

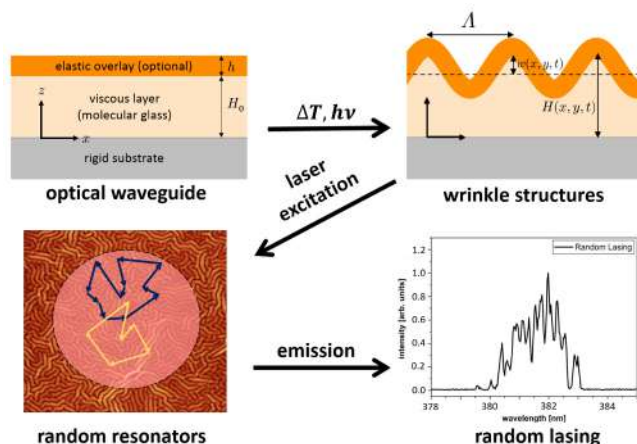


Abbildung 2: Prinzip der periodischen Musterbildung durch *Wrinkling* in einem Multischichtsystem, bestehend aus einem weichen Material mit elastischer Deckschicht (oben links). Durch Stressrelaxation bilden sich ungeordnete periodische Muster (oben rechts), die Resonatoren für *Random Lasing* darstellen (unten links). Ein typisches Emissionsspektrum eines Farbstoffes in einer solchen Struktur ist unten rechts dargestellt. In einigen Fällen, z.B. bei der Photostrukturierung von Azomaterialien, ist die Deckschicht nicht notwendig, hier erfolgt die Musterbildung durch Entnetzungsprozesse.

Figure 2: Principle of periodic pattern formation by wrinkling in a multilayer system consisting of a soft material with an elastic cover (upper left). Upon stress relaxation, disordered periodic patterns are formed (upper right) that constitute resonators for random lasing (lower left). A typical emission spectrum of a laser dye embedded into a wrinkle structure is shown on the lower right. In some cases, e.g. in photopatterning of azo materials, the elastic cover is not necessary, and pattern formation occurs via dewetting processes.

We also extended our biomaterials portfolio to polysaccharide materials from arthropods and plants, and polyphenols occurring in brown algae, a sister group of the diatoms. We demonstrated that interconnected cellulose fibers stained with laser dyes form a random resonator network with interesting emission properties due to stimulated emission in a disordered topology. The interaction of such materials and natural dyes open perspectives for a new generation of renewable composite materials which we develop together with colleagues from the engineering departments.



*Random lasers are also of interest in the field of organic optoelectronic materials (Figure 2). Here we apply the pattern formation capability of stressed multilayer films as well as ternary mixtures which both relax to equilibrium in so-called spinodal structures. They are characterized by the formation of periodic patterns with well-defined spatial wavelengths but irregular in orientation. Together with colleagues from physics and electrical engineering we apply the pattern formation process to hybrid layers of molecular glasses developed in our group with other optical, electric or magnetic functional materials.*

*Patterns that are better controllable we achieve with azo materials. This material class exhibits the special feature of reacting to polarized light with light-induced birefringence, opening the way to interesting optical elements. We investigate surface corrugation gratings, optical helices and microorigami folding by applying this principle within photopatterning techniques.*

---

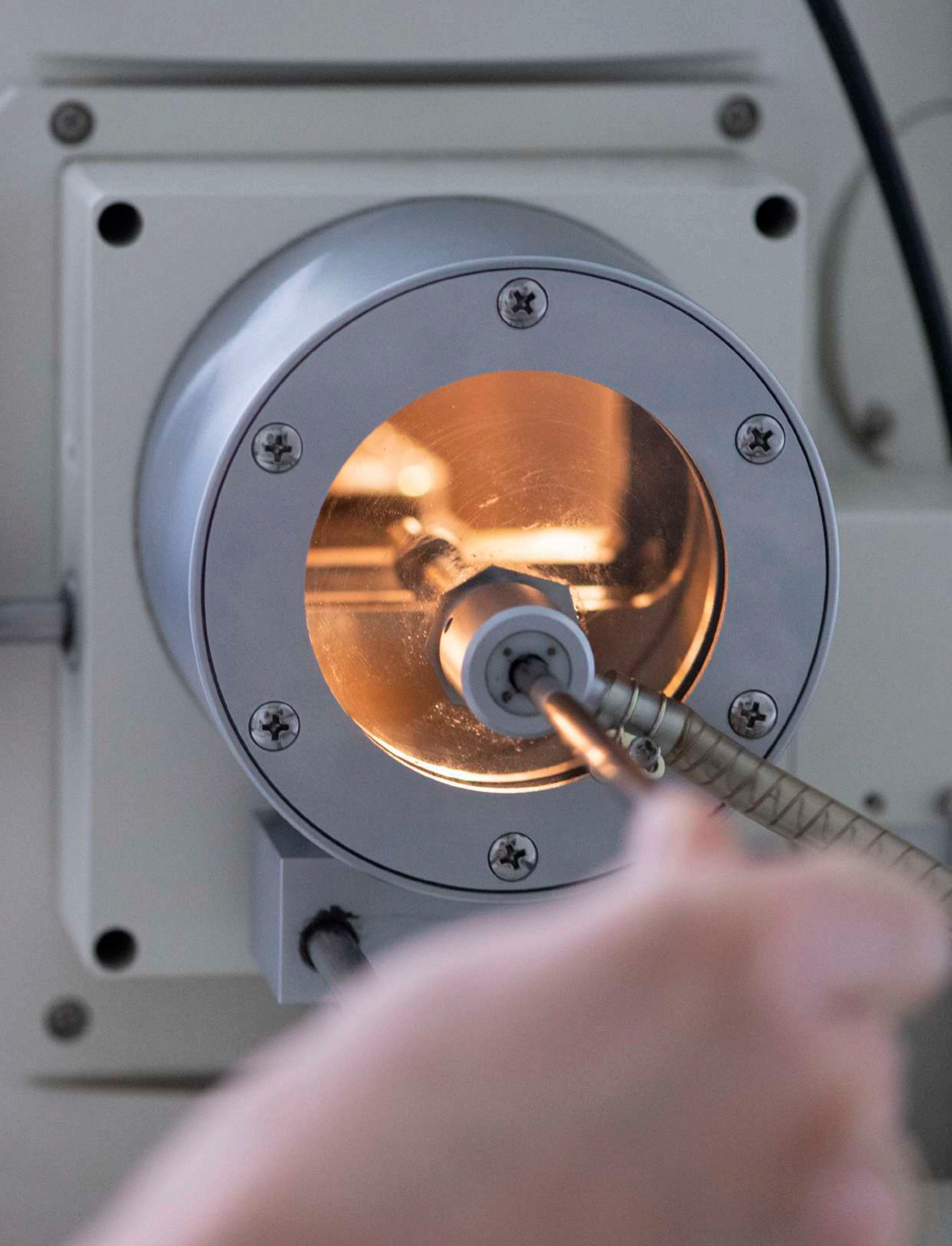
## Weitere Informationen / Further Information

### **Prof. Dr. Thomas Fuhrmann-Lieker**

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Str. 40  
34132 Kassel  
IBC - Raum 3111

Tel: +49 561 804-4720  
Fax: +49 561 804-4555  
Email: [th.fuhrmann@uni-kassel.de](mailto:th.fuhrmann@uni-kassel.de)  
Website: [www.uni-kassel.de/go/mmcm](http://www.uni-kassel.de/go/mmcm)







Prof. Dr.-Ing. Thomas Niendorf

### Prozess-Mikrostruktur-Eigenschaftsbeziehungen in multifunktionalen Werkstoffen – Das Beispiel einer Co-Ni-Ga Formgedächtnislegierung

Neue Werkstoffe sind der Schlüssel zur Lösung aktueller Herausforderungen unserer Gesellschaft. Zentrale Herausforderung im Sinne nachhaltiger Werkstofflösungen ist dabei die Betrachtung ganzheitlicher Prozesse entlang des gesamten Lebenszyklus, einem Aspekt dem unter dem Begriff der Biologisierung Rechnung getragen wird. Das Fachgebiet Metallische Werkstoffe im Institut für Werkstofftechnik ist eine der zentralen Arbeitsgruppen im Forschungsfeld „Molekulare, Nano- und Mikrokomponenten für multifunktionale Werkstoffe, Bauelemente und Systeme“ und ist u.a. in den interdisziplinären Verbundvorhaben BiTWerk (Biologisierung in der Werkstofftechnik), DigiWerk (Digitalisierung in der Werkstofftechnik) sowie SMARTCON (Shape Memory Alloy Research for Technology of CONstructions) an zentralen Stellen eingebunden.

Die im Fachgebiet Metallische Werkstoffe durchgeführten Forschungs- und Entwicklungsarbeiten orientieren sich an dem Rahmenthema Prozess-Mikrostruktur-Eigenschaftsbeziehungen/Bauteilverhalten. In allen Fällen werden in ausgewogener Weise sowohl grundlagen- als auch anwendungsorientierte Fragestellungen adressiert, wobei die Bearbeitung werkstofftechnischer Fragestellungen bzw. die Bewertung von Schadensfällen häufig in enger Kooperation mit Industriepartnern erfolgt. Innerhalb des Fachgebiets bestehen vier eng miteinander vernetzte Arbeitsgruppen zu den Forschungsschwerpunkten:

- Eigenspannungsanalytik
- Additive Fertigung
- Formgedächtnistechnik
- Bauteilfestigkeit und Randschichtoptimierung

Die Erforschung von additiven Fertigungsverfahren in Form des pulverbettbasierten selektiven Laser- und Elektronenstrahlschmelzens (L-PBF und E-PBF) sowie des Draht- und Pulverauftragsschweißens stellt einen zentralen Aspekt hinsichtlich der biologischen sowie der nachhaltigen Transformation der Werkstofftechnik dar. Neben der Charakterisierung und Entwicklung neuer Legierungen für die Additive Fertigung liegt der Fokus der Forschungstätigkeiten insbesondere auf der Prozessierung und dem gezielten mikrostrukturellen Design von Formgedächtnis-

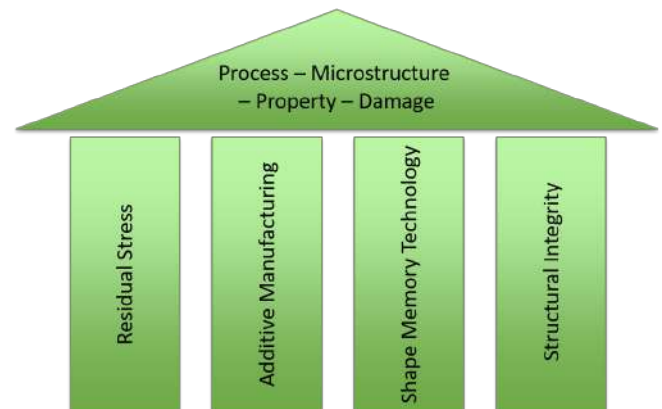


Abbildung 1: Organisationsstruktur am Fachgebiet Metallische Werkstoffe

Fig. 1: Organizational structure in the Metallic Materials group

werkstoffen. Hierüber lassen sich multifunktionale Werkstoffe, Bauelemente und Systeme in bisher nicht möglicher Art und Weise realisieren.

Grundsätzliche Fragen im Zusammenhang mit den Ursachen und der Ermittlung von Eigenspannungen in Randschichten, Schweißverbindungen und additiv gefertigten Strukturen bilden einen hieran anknüpfenden zentralen Untersuchungsgegenstand. Entsprechende Erkenntnisse ermöglichen die Bewertung des Einflusses von Mikro- und Makroeigenspannungen auf das Deformations- und Bruchverhalten metallischer Werkstoffe und somit die strukturelle Integrität eines durchaus beliebig komplexen multifunktionalen Systems.

Zur Bearbeitung der unterschiedlichen Fragestellungen steht eine breite Palette moderner Prüfeinrichtungen zur Verfügung, die eine skalenübergreifende Charakterisierung von Materialeigenschaften erlaubt. Tiefgehende Einblicke in grundlegende mikrostrukturelle Mechanismen können unter Verwendung hochauflösender licht- und elektronenmikroskopischer Verfahren gewonnen werden. Dabei decken die elektronenmikroskopischen Verfahren sowohl die Raster- (REM) als auch die Transmissions-



elektronenmikroskopie (TEM) ab. Ferner sind zahlreiche Röntgendiffraktometer zur Eigenspannungs-, Phasen- und Texturanalyse vorhanden. Zur Erforschung des makroskopischen Materialverhaltens, u.a. anhand komplexer Ermüdungs- und Rissausbreitungsversuche, verfügt das Fachgebiet über eine moderne Hard- und Softwareausstattung mit mechanischen und servohydraulischen Prüfmaschinen unterschiedlicher Kapazitäten. Als Bindeglied zur Erarbeitung und Aufstellung der teils

komplexen Wechselbeziehungen zwischen der Mikrostruktur und dem makroskopischen Materialeigenschaften werden oftmals hochauflösende in situ Techniken bei der Auswahl der zum Einsatz kommenden Untersuchungsmethoden berücksichtigt. So werden auf dem Gebiet der in situ Charakterisierung mittels Lichtmikroskopie sowie Röntgen- und Neutronendiffraktometrie umfangreiche Studien durchgeführt.

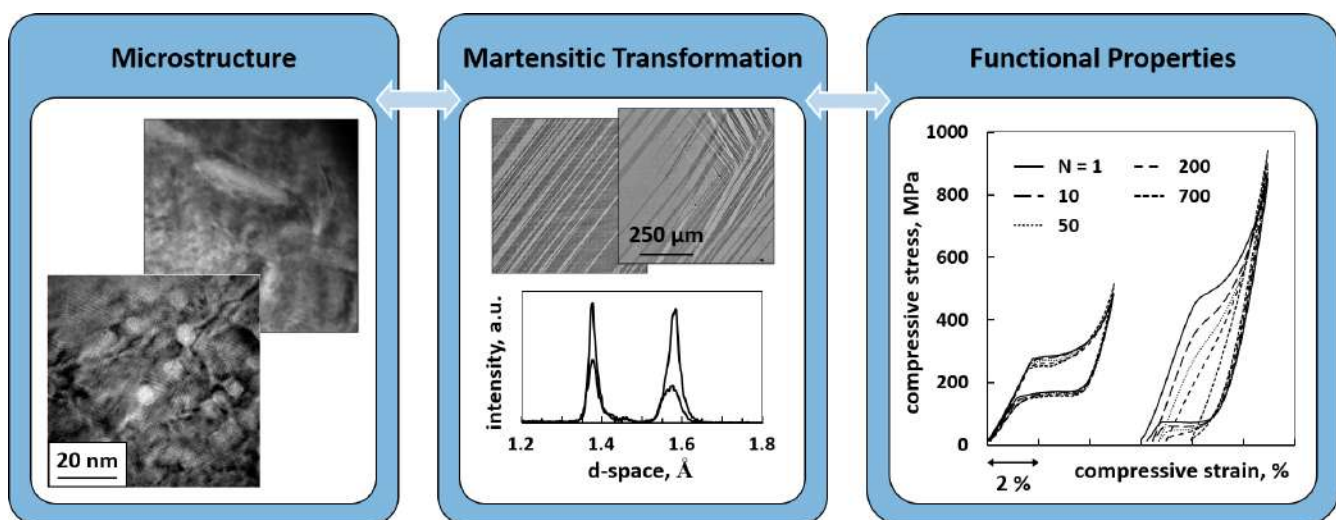


Abbildung 2: Die Mikrostruktur-Phasenumwandlung-Eigenschaftsbeziehungen am Beispiel einer Co-Ni-Ga Formgedächtnislegierung im einkristallinen Zustand: Grundlage der einzigartigen Eigenschaften von Formgedächtnislegierungen ist die diffusionslose martensitische Festphasenumwandlung zwischen einer austenitischen Hochtemperatur- und einer martensitischen Tieftemperaturphase, die im Idealfall eine vollständig reversible Formänderung mit Dehnungen von mehreren Prozent erlaubt. Im Co-Ni-Ga Legierungssystem können mithilfe einer Auslagerungswärmebehandlung die funktionalen Eigenschaften maßgeschneidert werden, wobei die Morphologie nanoskaliger Ausscheidungsteilchen (Form und Größe) einen essentiellen Einfluss auf die martensitische Umwandlung (Variantenauswahl und Morphologie der martensitischen Phase) und die zyklische Stabilität des Formgedächtniseffekts hat.

Fig. 2: The interrelationships between microstructure, phase transformation and functional behavior shown for a Co-Ni-Ga shape memory alloy (SMA) in single-crystalline state: Based on a thermoelastic phase transformation between a high-temperature austenitic phase and a low-temperature martensitic phase SMAs feature unique functional properties with large reversible strains up to several percent. In the Co-Ni-Ga system, the functional performance can be adequately tailored using an aging treatment carried out in the austenitic phase. However, morphology of nanometric secondary phase particles (size and shape) has a significant impact on the martensitic transformation (martensite variant selection and its morphology) and the cyclic stability of the shape memory effect.



## **Process-microstructure-properties relationships in multifunctional materials – The example of a Co-Ni-Ga shape memory alloy**

Novel materials are the key to overcome current challenges our society. The main step toward realization of sustainable materials is the consideration of holistic process chains along the entire life cycle, an aspect that is taken into account when using the term "biologization". The Metallic Materials group at the Institute of Materials Engineering is one of the leading research groups in the research field "Molecular, Nano- and Microcomponents for Multifunctional Materials, Structures and Systems". Currently, the group is involved in several interdisciplinary projects at the University of Kassel, e.g. BiTWerk (Biologization in Materials Engineering), DigiWerk (Digitalization in Materials Engineering) and SMARTCON (Shape Memory Alloy Research for Technology of CONstructions).

The research activities in the Metallic Materials group are focusing on processing-microstructure-properties relationships in materials science and engineering. In all fields, fundamental and application-oriented aspects are addressed in a balanced manner. In particular, technical issues as well as the evaluation of damage and failure are considered in close cooperation with industrial and academic partners. In the Metallic Materials group four working groups have been established focusing on the following fields of research:

- residual stress analysis
- additive manufacturing
- shape memory technology
- structural integrity.

Additive manufacturing (AM) processes, such as laser and electron powder bed fusion (L-PBF and E-PBF) as well as directed energy deposition (DED), are an elementary aspect toward the biological and sustainable transformation in the field of

materials engineering. In addition to realization and the characterization of novel alloys for additive manufacturing, the research activities in the Metallic Materials group primarily focus on processing and direct microstructure design of shape memory alloys (SMAs). This allows for production of multifunctional materials, components and systems to be realized in a way that was previously not possible.

Another research topic closely related are fundamental studies with respect to the origins as well as the determination and evaluation of residual stresses in surface layers, welds and additively manufactured structures. A comprehensive understanding of the relevant relationships allows for assessing the impact of residual stresses on the deformation and fracture behavior of metallic materials and, thus, on the structural integrity of arbitrary complex multifunctional systems.

For addressing the different research questions a wide range of modern testing equipment, allowing a multi-scale characterization of material properties, is available in the Metallic Materials group. By use of high resolution optical and electron microscopy, i.e. scanning electron microscopy (SEM) as well as transmission electron microscopy (TEM), profound insights into elementary microstructural mechanisms can be obtained. Furthermore, several X-ray diffractometers are available for stress, phase and texture analysis. The macroscopic material behavior, in turn, can be investigated employing state-of-the-art hardware and software equipment including mechanical and servo-hydraulic testing machines. In order to elaborate and establish the complex relationships between the microstructure and the mechanical behavior, high-resolution in situ techniques, such as optical microscopy as well as X-ray and neutron diffraction, are often considered for tackling prevailing research gaps.

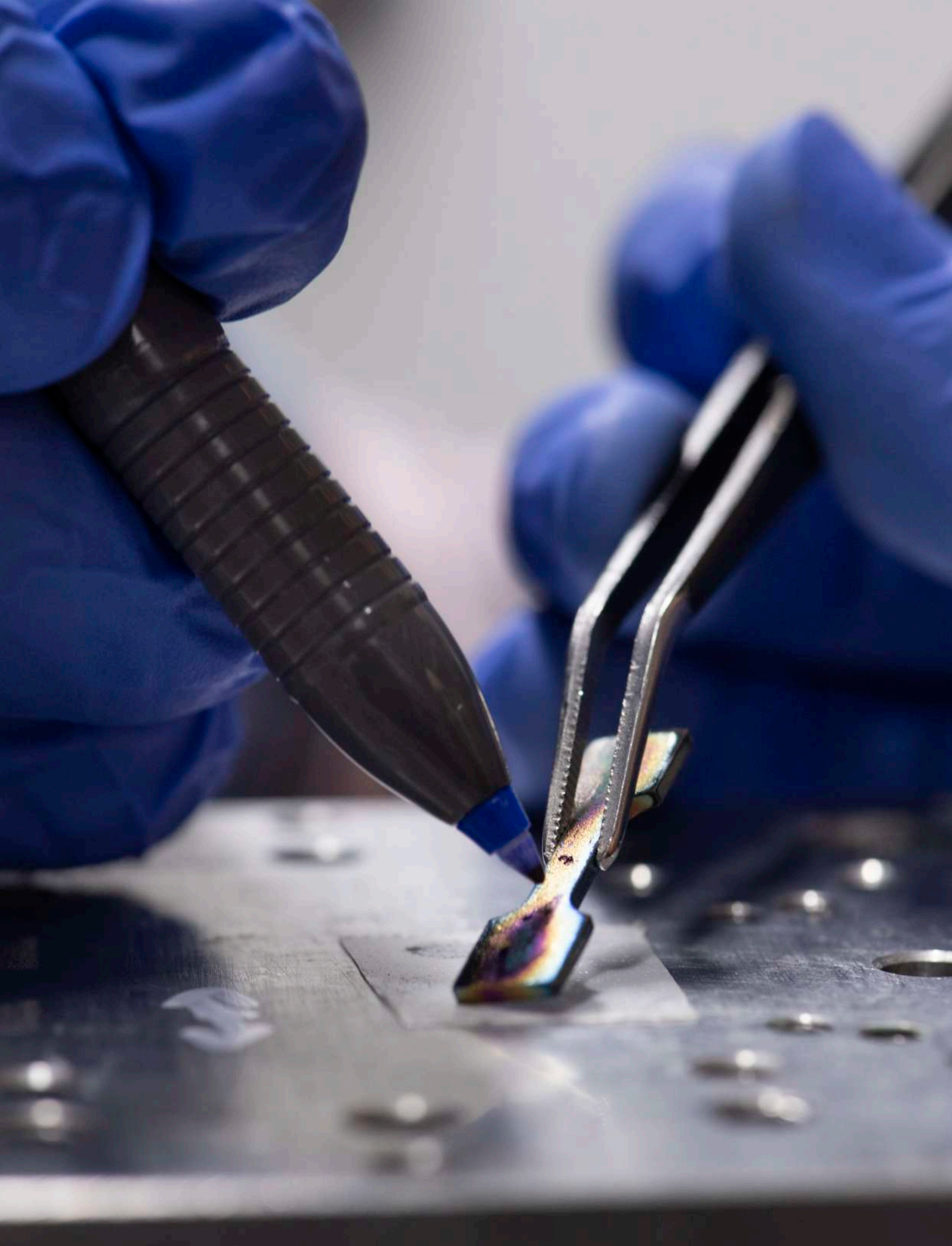
## Weiterführende Informationen / *Further Information*

**Prof. Dr.-Ing. Thomas Niendorf**

Universität Kassel  
Mönchebergstr. 3  
34125 Kassel  
Raum 2218

Tel: +49 561 804-7018  
Fax: +49 561 804-3662  
Email: [niendorf@uni-kassel.de](mailto:niendorf@uni-kassel.de)  
Website: [https://www.uni-kassel.de/maschinenbau/institute/  
werkstofftechnik/fachgebiete/metallische-werkstoffe](https://www.uni-kassel.de/maschinenbau/institute/werkstofftechnik/fachgebiete/metallische-werkstoffe)





# Metallorganische Chemie

## Organometallic Chemistry



Prof. Dr. Ulrich Siemeling

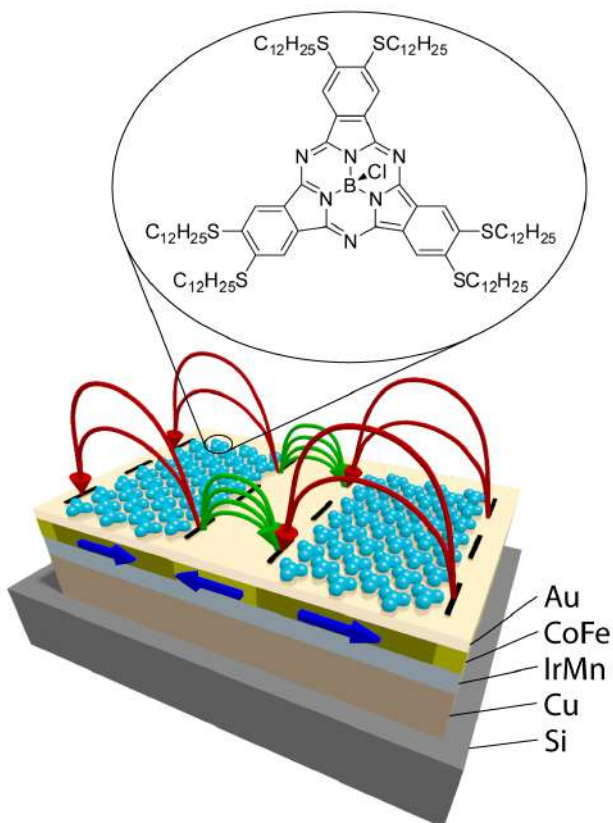
Prof. Dr. Ulrich Siemeling gehört zu den CINSaT-Gründungsmitgliedern. Seine Arbeitsgruppe befasst sich mit der Chemie metallhaltiger Moleküle, speziell mit sogenannten metallorganischen Verbindungen, in denen Metall-Kohlenstoff-Bindungen vorliegen. Seine Arbeitsgruppe hat ein lange zurückreichendes Interesse an interdisziplinären Zusammenarbeiten mit Kolleg\*innen aus der Physik. Zunächst standen dabei die Photophysik metallhaltiger Moleküle sowie Vorläuferverbindungen für die Erzeugung dünner Filme maßgeschneiderter Festkörpermateriale durch chemische Dampfphasenabscheidung im Brennpunkt. Im wissenschaftlichen Umfeld von CINSaT konnte sich die Arbeitsgruppe einem weiteren, besonders kompetitiven Forschungsgebiet zuwenden, das sich mit der molekularen Selbstassemblierung auf Metall- oder Halbleiteroberflächen befasst. Dabei wurden auch Kooperationsprojekte mit Relevanz zu wegweisenden technologischen Anwendungen durchgeführt, z. B. die Selbstassemblierung Lanthanoid-basierter Einzelmolekülmagnete auf Oberflächen. Diese Forschung führte zu ca. 30 Publikationen unter Beteiligung etlicher interner (Prof. Ehresmann, Prof. Popov, Prof. Reithmaier, Prof. Träger) und externer Kooperationspartner (Prof. Glaser/Bielefeld, Prof. Heinzmann/Bielefeld, Prof. Motschmann/Regensburg, Prof. Plass/Jena, Prof. Weidner/Aarhus, Prof. Wöll/KIT, Prof. Zharnikov/Heidelberg). Besonderes Augenmerk lag dabei auf grundlegenden Aspekten wie z. B. neuen Werkzeugen zur

Beeinflussung des Assemblierungsprozesses auf Oberflächen (magnetische Streufelder, mit Prof. Ehresmann; Abb. 1) und der Etablierung neuer Adsorbatsysteme (N-heterocyclische Carbene auf Metallsubstraten, mit Prof. Weidner). Durch die Zusammenarbeit mit Prof. Weidner zum letztgenannten Aspekt wurde ein gänzlich neues Feld im Bereich der selbstassemblierenden Monolagen (SAMs) geschaffen, was sich in einer weithin sichtbaren Schlüsselpublikation niederschlug. Im aussichtslosen Wettbewerb mit äußerst schlagkräftigen interdisziplinären Forschungskonsortien aus Chemie und Physik, die rasch von diesem aufkeimenden Feld angezogen wurden, musste dieses jedoch bald verlassen werden.

Parallel dazu liegt ein zusätzlicher Forschungsschwerpunkt der Arbeitsgruppe Siemeling im Bereich niedervalenter Hauptgruppenelement-Verbindungen, und zwar insbesondere im Zusammenhang mit der Aktivierung fundamental bedeutsamer kleiner Moleküle, die durch starke Bindungen geringer Polarität

Abbildung 1: Schematische Ansicht eines austauschverschobenen Schichtsystems, seines magnetischen Musters (angedeutet durch blaue Pfeile) und der resultierenden Streufeldlinien oberhalb der Substratoberfläche. CoFe: ferromagnetische Schicht, IrMn: antiferromagnetische Schicht. Zusätzlich sind Verteilung und chemische Struktur der zur Chemisorption verwendeten maßgeschneiderten Adsorbatspezies gezeigt.

Figure 1: Schematic view of an exchange biased layer stack, its magnetic pattern (indicated by blue arrows) and resulting stray fields above the sample surface (green and red arrows). CoFe: ferromagnetic layer, IrMn: antiferromagnetic layer. Additionally, the distribution and the chemical structure of the tailor-made adsorbate species used for chemisorption are shown.





A diagram showing a molecular structure on a surface. The molecule consists of a central Si atom bonded to two N atoms, each of which is bonded to a phenyl ring. The Si atom is also bonded to a Dipp group. The molecule is positioned above a surface represented by several horizontal brown bars. The surface atoms are labeled O, P, N, B, N, C, and H-H. The O and P atoms are bonded to H atoms. The N and B atoms are bonded to H atoms. The C atom is double-bonded to an O atom. The H-H atom is bonded to the C atom.

Abbildung 2: Ein stabiles Ferrocen-basiertes N-heterocyclisches Silylen mit ausgeprägter Ambiphilie ist in der Lage, starke Bindungen (C=O, N=O, BH, NH, PH, OH) unter Umgebungsbedingungen zu brechen.

Prof. Dr. Ulrich Siemeling belongs to the founding members of CINSaT. His group specialises in the chemistry of metal-containing molecules, in particular so-called organometallic compounds, which exhibit metal-carbon bonds. His group has a long-standing interest in interdisciplinary collaborations with colleagues from physics. Early activities were focussed on the photophysics of metal-containing molecules and on precursor compounds for the fabrication of thin films of tailor-made solid-state materials by chemical vapour deposition (CVD). The scientific environment provided by CINSaT allowed his group to enter an additional, and highly competitive, field, which deals with the self-assembly of molecules on metal or semiconductor surfaces. Collaborative projects relevant to cutting-edge technological applications such as, for example, the surface self-assembly of lanthanide-based single-molecule magnets have also been executed. This research has resulted in ca. 30 publications with numerous internal (Prof. Ehresmann, Prof. Popov, Prof. Reithmaier, Prof. Träger) and external collaborators (Prof. Glaser/Bielefeld, Prof. Heinzmann/Bielefeld, Prof. Motschmann/Regensburg, Prof. Plass/Jena, Prof. Weidner/Aarhus, Prof. Wöll/KIT, Prof. Zharnikov/Heidelberg). Special

*In parallel, an additional focus of Prof. Siemeling's laboratory has been on low-valent main-group element compounds, in particular in the context of the activation of fundamentally important small molecules which are held together by strong bonds of low polarity. Typical examples are ammonia (NH<sub>3</sub>) or carbon monoxide (CO), which are used by the chemical industry as essential building blocks. It is a great challenge to achieve their activation sustainably, viz. under mild conditions without using very expensive, and frequently highly toxic, metals of low abundance.*

Prof. Siemeling's group has demonstrated that carbon monoxide is readily transformed under ambient conditions to antibiotically active chiral compounds akin to Penicillin G by using divalent carbon compounds for its activation. The heavier elements from

the carbon group (Si, Ge, Sn, Pb; Figure 2) have been addressed in the same vein. This research has resulted in almost 40 publications, including more than a dozen papers in cutting edge journals.

---

## Weiterführende Informationen / *Further Information*

### Prof. Dr. Ulrich Siemeling

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Str. 40  
34132 Kassel  
AVZ II - Raum 2251

Tel: +49 561 804 4576  
Email: [siemeling@uni-kassel.de](mailto:siemeling@uni-kassel.de)  
Website: <https://www.uni-kassel.de/fb10/institute/chemie/fachgebiete/metallorganische-chemie/willkommen-im-fg-metallorg-chemie>







Prof. Dr.-Ing. Peter Lehmann

### Interferometrie und Nanostrukturen

Die Arbeitsgruppe Messtechnik gehört zum Fachbereich Elektrotechnik/Informatik und wird von Prof. Peter Lehmann geleitet, der seit 2017 CINSaT Mitglied ist.

Das Hauptforschungsgebiet der Arbeitsgruppe bezieht sich auf interferometrische Messsysteme. Interferometrie ist ein faszinierendes optisches Prinzip, mit dem sich Höhen- oder Abstandsänderungen eines Messobjektes problemlos mit Unsicherheiten im einstelligen Nanometerbereich erfassen lassen. Aus diesem Grund bietet die Längen- und die Formmessende Interferometrie vielfältige Einsatzmöglichkeiten sowohl in der Forschung als auch in der industriellen Anwendung.

Fasergekoppelte Common-Path-Interferometer zeigen ein großes Potential, um interferometrische Messprinzipien in die Praxis zu überführen. Solche Interferometer weisen zusätzlich konfokale Abbildungseigenschaften auf, denn sowohl das einfallende Licht als auch das am Messobjekt bzw. an einer internen Referenzebene reflektierte Licht breiten sich in einer Monomodefaser aus, deren Kerndurchmesser nur wenige Mikrometer beträgt. Dadurch wird störendes Streulicht effizient unterdrückt und robuste Messungen von Abstandsänderungen mit Nanometer-Genauigkeit und beugungsbegrenzter Spotgröße werden ermöglicht. Durch laterales Scannen lassen sich 3D-Oberflächentopographien erfassen (Fig. 1).

Werden interferometrische Messprinzipien mit optischen Abbildungssystemen kombiniert, sind die optische Auflösung und die messtechnischen Eigenschaften grundsätzlich der Beugungsbegrenzung unterworfen, unabhängig davon, ob punktförmige Abstandsmessungen oder Topographiemessungen über einem mikroskopischen Messfeld (Fig. 2) durchgeführt werden. Da aus

dem tiefenscannenden Messprozess in der Interferenzmikroskopie typischerweise ein 3D-Bilderstapel resultiert, kann jedem Kamerapixel ein Interferenzsignal zugeordnet werden. Diese Signale bestehen aus einer Vielzahl von Frequenzkomponenten. Die korrekte Interpretation stellt dabei eine Herausforderung dar, ermöglicht es aber, Messsysteme hinsichtlich ihrer lateralen Auflösung und der maximal zulässigen Oberflächenneigung zu optimieren. Fortschritte können hier über erweiterte Mess- und Signalverarbeitungsstrategien erzielt werden, oder durch verbesserte gerätetechnische Aufbauten, zum Beispiel durch die Kombination von interferometrischen mit konfokalen Anordnungen oder mit strukturierter Beleuchtung.

Da interferometrische Sensoren sehr anfällig gegenüber Umgebungsschwingungen, nichtlinearen Tiefenscanprozessen und optischen Aberrationen sind, ist eine sorgfältige Schwingungsisolierung und die Verwendung hochwertiger Komponenten erforderlich. Dies steht häufig im Widerspruch zu Forderungen nach einer maschinennahen industriellen Einsetzbarkeit. Deshalb bezieht sich ein Teil unserer Forschungsarbeiten darauf, interferometrische Messsysteme so zu modifizieren, dass sie auch unter schwierigen Umgebungsbedingungen noch zuverlässig funktionieren. Dies lässt sich zum Beispiel durch die Integration von interferometrischen High-Speed-Abstandssensoren erreichen, die den Tiefenscanprozess in der Weißlichtinterferometrie präzise dokumentieren (Fig. 3).

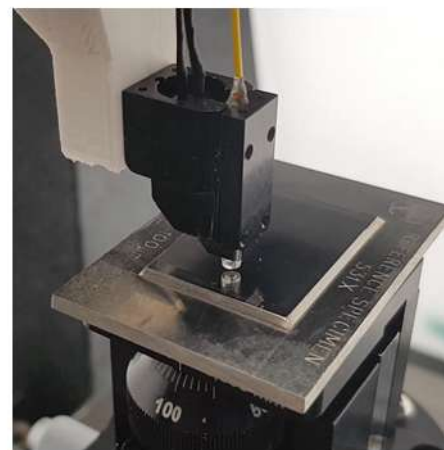
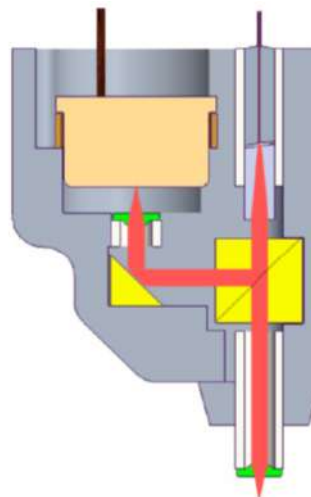


Abbildung 1: Fasergekoppelter interferometrischer Sensor (Eigenbau)

Figure 1: home-build fiber-coupled interferometric sensor





Abbildung 2: hochauflösendes Linnik-Interferenzmikroskop (Eigenbau)

Figure 2: home-build high-resolution Linnik interference microscope

Ein weiterer Punkt, der sowohl in industriellen als auch in biologischen Anwendungen zunehmend relevant wird, ist die dynamische Messung an bewegten Objekten oder Oberflächen. Für diesen Zweck entwickeln wir z.B. Methoden, die es erlauben, auf Basis von zwei Kamerabildern oder durch sehr schnelle Scanprozesse in Kombination mit entsprechenden Aktoren, dreidimensionale Oberflächentopographien zu rekonstruieren (Fig. 4).

## Interferometry and Nanostructures

*The measurement technology group headed by Prof. Peter Lehmann, who joined CINSaT in 2017, belongs to the faculty of electrical engineering and computer science.*

*One of the main research areas of the group is dedicated to interferometric measurement systems. Interferometry is one of the most fascinating optical principles as it easily achieves a resolution well below one nanometer with respect to height or distance changes of an object. Therefore, shape and length measuring interferometry shows a wide range of applications in both, research and industries.*

*A beneficial way to put an interferometric principle into practice is to build a fiber-coupled common-path interferometer. As both, the incident light as well as the interfering light reflected from the sample and an internal reference plane propagate through a single mode fiber with a core diameter of several micrometers, such interferometers work inherently confocal. Consequently, disturbing stray light is effectively suppressed such that robust measurements of distance changes with nanometer accuracy and a diffraction limited spot size can be achieved. Scanning a surface topography laterally, finally results in 3D measurement data (see figure 1).*

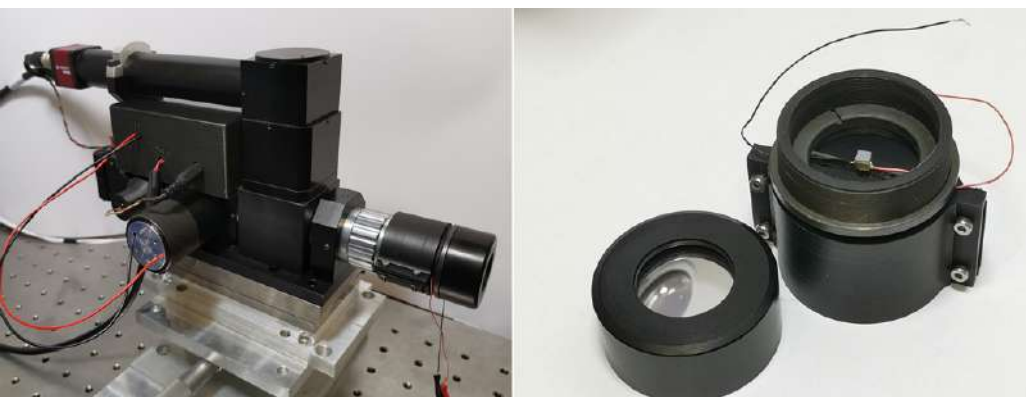


Abbildung 3: Schwingungskompensierendes Mirau Interferometer (Eigenbau)

Figure 3: home-build vibration compensating Linnik interferometer

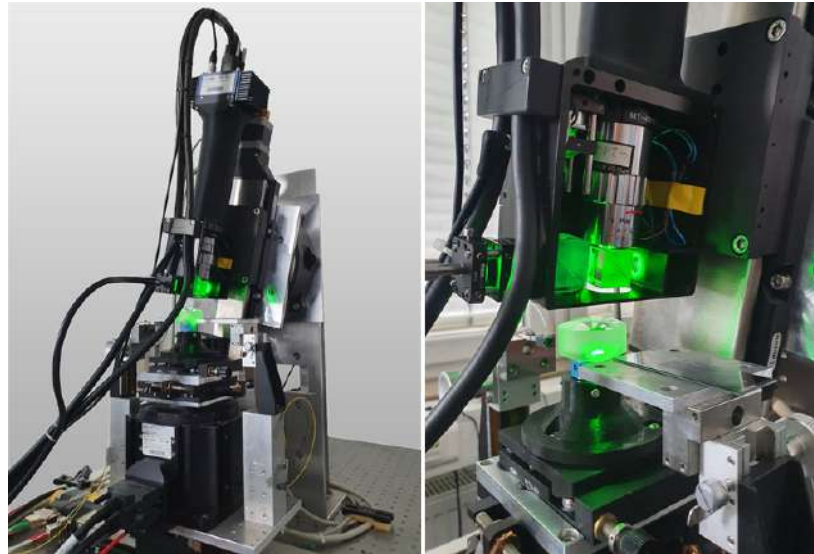
Abbildung 4: Michelson-Interferometer mit Zeilenkamera zur Messung an bewegten optischen Funktionsflächen (Eigenbau)

Figure 4: home-build line-scanning Michelson interferometer for dynamic measurement of optical functional surfaces

However, if interferometry is combined with optical imaging, the lateral resolution and measurement capabilities suffer from the diffraction limit, independently on whether a distance change in a single spot or the 3D surface topography of an object is determined in a microscopic field of view (figure 2).

Since the depth scanning process in interference microscopy results in a 3D image stack, each camera pixel records an interference signal of various frequency contributions. Thus, it is a challenge to understand the limiting phenomena in detail in order improve instruments with respect to their lateral resolution capabilities and tilt angle tolerances. Progress can be reached in this context by advanced measuring and signal analysis strategies or by extended instrumental setups such as combinations of interferometric and confocal or structured illumination techniques.

Since interferometric sensors are very sensitive to vibration, scanner nonlinearity and optical aberrations, careful vibration isolation and high-quality components are usually required. This sometimes contradicts industrial demands of close-to-machine application. Therefore, a part of our research aims at modifying



interferometric systems in order to enable these to work even under harsh environmental conditions. This is achieved by integrating high-speed interferometric distance sensors, which monitor the depth scan disturbed by vibrations in a low-coherence interference microscope (figure 3).

Another point that becomes relevant in industrial but also in biological applications concerns what we call dynamic measurement, i.e. the measurement of moving objects or surfaces. For this purpose, so-called dual-shot methods or fast depth scanning processes combined with sufficiently fast actuation and data recording techniques are being developed in our research work (figure 4).

## Weiterführende Informationen / Further Information

### Prof. Dr.-Ing. Peter Lehmann

Universität Kassel  
Wilhelmshöher Allee 71  
34121 Kassel  
Raum 3121

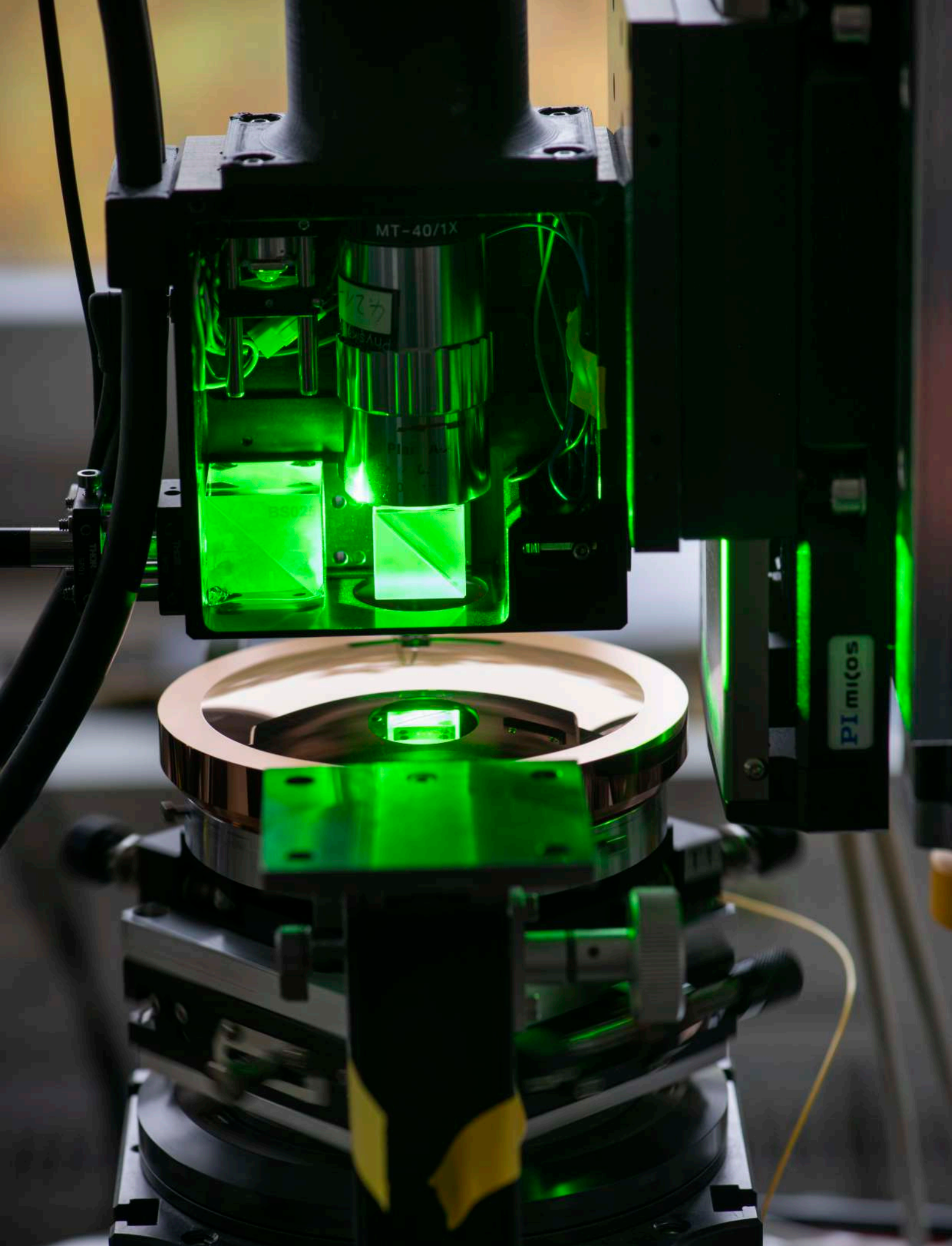
Tel: +49 561 804-6313  
Fax: +49 561 804-6411  
E-mail: [p.lehmann@uni-kassel.de](mailto:p.lehmann@uni-kassel.de)  
Website: [www.mt.uni-kassel.de](http://www.mt.uni-kassel.de)















Prof. Dr. Raffael Schaffrath

## Zellwachstumskontrolle durch Modifikationen an Biomakromolekülen

Prof. Schaffrath, Leiter des FG Mikrobiologie, ist seit 2014 CINSaT-Mitglied. Die AG untersucht am Hefe-Modell Competition und Wachstumskontrolle unter mikrobiellen Zellen. Im Ergebnis finden sich antifungale Agenzien (Rapamycin, Sordarin) und Toxine (tRNase Ribotoxin, Diphtheriatoxin), die Modifikationen an biologischen Makromolekülen (RNAs, Protein) angreifen, um in den Zielzellen essenzielle Prozesse (mRNA-Translation, TOR-Signalweg) auszuschalten [1]. Zudem wurde gezeigt, dass diese patho/biologischen Modifikationen dynamischer Natur sind. Als Konsequenz der Studien zur Regulation und Interaktion dieser Modifikationen wird die AG Schaffrath durch DFG Schwerpunktprogramme (s.u.) unterstützt. Im Vordergrund steht, wie diverse Modifikationswege und ihre Schlüsselenzyme durch exo-/endogene Signale kontrollierbar sind und ob es cross-talk zwischen ihnen gibt [2].

Von Interesse sind zwei Radikal-SAM (S-Adenosylmethionin) Enzyme mit Eisen-Schwefel Zentren (FeS) (Abb. 1). Ein nicht-kanonisches (Dph1•Dph2) dekoriert Elongationsfaktor 2 (EF2) mit Diphthamid (i.e., 2-[3-carboxyamido-3-(trimethylamino)-propyl]-Histidin) (Abb. 1). Das andere, ein konventioneller Radikal-SAM Komplex namens Elongator, führt 5-carboxy-methyl (cm5) Gruppen in Wobble-Uridinbasen (U34) von tRNA-Antikodonen ein (Abb. 1). Mittlerweile gibt es viel Evidenz dafür, dass die cm5-Synthese an U34 durch Elongator reguliert ist. Hierzu zählt (i) eine Proteinphosphatase (Sit4•Sap185/190), die für Elongatoraktivität nötig ist, (ii) aktivierende Elongator-Phosphorylierung durch eine konservierte Proteinkinase (Kti14/Hrr25), (iii) ein tRNA-Träger (Kti12) mit positivem Einfluss auf Elongatorfunktion und (iv) ein Metallbinder (Kti11•Kti13), der Elektronen an den FeS-Kofaktor von Elp3 liefert, dem Katalysekern des Komplexes. Daten von Hening Lin (Ithaca, USA) zeigen zudem, dass Kti11 alias Dph3 auch das FeS-Zentrum in Dph1•Dph2 versorgt. Wahrscheinlich interagieren beide Radikal-SAM Enzyme und die Modifikationen an EF2/tRNA tragen kooperativ zur Genauigkeit der mRNA-Translation bei (Abb. 1).

In Kollaboration mit der AG von Sebastian Glatt (Krakau, Polen) wurde gezeigt, wie ein Ubiquitin-ähnlicher Modifikator (Urm1)

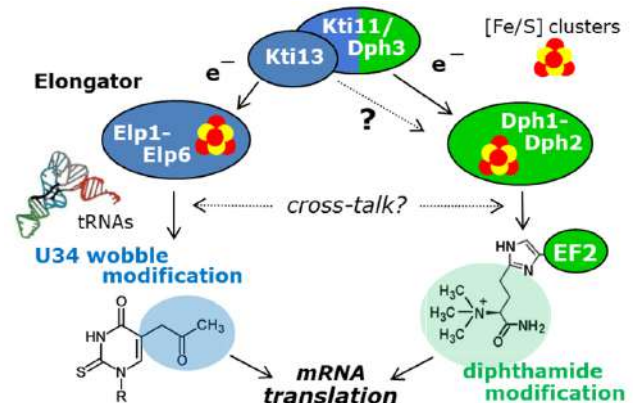


Abbildung 1: Ein Elektronendonator für zwei Radikal-SAM Enzyme [1,2]. Kti11 alias Dph3 (oben) ermöglicht Synthese von Diphthamid an EF2 via Dph1•Dph2 (rechts) bzw tRNA-Modifikation durch Elongator (links). Kti11/Dph3 liefert Elektronen (e-) zum FeS-Zentrum in Dph1•Dph2 (rechts) und mit Partnerprotein Kti13 an den FeS-Kofaktor im Elongator (links). Möglicher cross-talk zwischen beiden Enzymen in der mRNA-Translation ist angedeutet (?).

Figure 1: One and the same electron donor for two distinct radical SAM modifiers [1,2]. Kti11 aka Dph3 (top) enables diphthamide synthesis on EF2 by Dph1•Dph2 (right) and modification of tRNAs by Elongator (left). Kti11/Dph3 feeds electrons (e-) to the FeS cluster in Dph1•Dph2 (right) and in concert with Kti13, to the one in Elongator (left). Potential cross-talk in mRNA translation between both modification pathways is indicated (?).

Thio-Modifikationen an Proteinen und tRNAs bewirkt. Urm1 liefert Schwefel für den Einbau in Elongator-Substrate (tRNA-Thiolierung) und Proteine (Urmyleierung). Gibt es auch hier zwischen beiden Modifikationen cross-talk? Was die Urmyleierung betrifft, konnte an Ahp1, einem anti-oxidativen Enzym, gezeigt werden, dass die Reaktion durch Oxidation redox-aktiver Thiole (Cys-SH) zur Sulfensäure (Cys-SOH) initiiert wird [3] (Abb. 2). Daraus lässt sich vermuten, dass im Zuge der Urmyleierung und S-Transfer das Enzyme persulfidiert (Cys-S-SH) und vor Überoxidation geschützt wird [3] (Abb. 2). Die Studien der AG Schaffrath sind auch von biomedizinischem Interesse, da Defekte

bzw Dysfunktion von Urm1, Diphthamid und Elongator im Hefemodell fehleranfällige Translation und Proteinaggregation

auslösen, Szenarien, die beim Menschen zur Entstehung von Neuropathien und Krebs führen [4].

## Cell Growth Control by Modifications of Biological Macromolecules

Prof. Schaffrath heads the Microbiology Division and is a CINSaT member since 2014. Using yeast models, the group studies competition and cell growth control among microorganisms. They revealed that microbial antifungals (rapamycin, sordarin) and toxins (tRNase ribotoxin, diphtheria toxin) attack chemical modifications on biologically important macromolecules (RNAs, proteins) to inhibit processes (mRNA translation, TOR signaling) that are vital for the life of the microbial cell [1]. In addition, further research has shown that these patho/biological modifications are dynamically formed. As a logical spin-off from their research into the regulation and interaction of complex RNA and protein modifications, the lab is supported by DFG priority programs (see below). Here, they investigate how different modification pathways and their key enzymes are controlled by cellular demand or growth stage and whether they cross-talk with one another [2].

Of particular interest are two iron-sulfur (FeS) radical SAM (S-adenosylmethionine) enzymes that are conserved throughout evolution (Fig. 1). One is a non-canonical enzyme (Dph1•Dph2) involved in decoration of translation elongation factor 2 (EF2) with diphthamide (aka 2-[3-carboxyamido-3-(trimethylamino)-propyl]-histidine) (Fig. 1). The other is Elongator, a conventional radical SAM complex that forms 5-carboxy-methyl (cm5) groups on wobble uridines (U34) in tRNA anticodons (Fig. 1). Meanwhile there is robust evidence for Elongator regulation and conditional cm5 formation at U34. Among others, this includes (i) a protein phosphatase (Sit4•Sap185/190) required for Elongator's tRNA modification activity, (ii) activatory Elongator phosphorylation by a conserved protein kinase (Kti14/Hrr25), (iii) a tRNA carrier (Kti12) that acts positively on Elongator and (iv) a metal binder (Kti11•Kti13), which provides electrons to Elongator's catalytic core, the FeS subunit Elp3. Data from Hening Lin's lab (Ithaca,

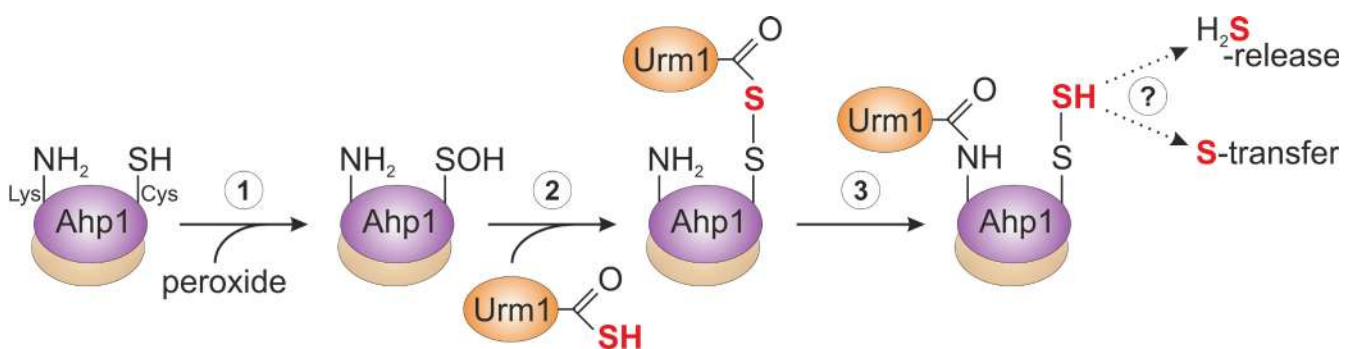


Abbildung 2: Schrittweises Modell der Urmylierung von Ahp1 [3]. 1: Ein Cystein-Thiol (Ahp1-SH) wird mittels Peroxid zur Sulfensäure (Ahp1-SOH) oxidiert. 2: S-Transfer auf Urm1 führt zum Thiocarboxylat (Urm1-COSH), das mit Ahp1-SOH zum Acyl-Disulfid (Ahp1-S-S-Urm1) kondensiert. 3: Nukleophiler Angriff eines Lysins (Ahp1-NH<sub>2</sub>) auf die Carbonylgruppe löst das Disulfid und generiert eine Peptidbindung (Ahp1-NH-CO-Urm1) und ein Persulfid (Ahp1-S-SH). Letzteres mag als H<sub>2</sub>S freigesetzt (?) oder weiter transferiert werden [3].

Figure 2: Stepwise Urmylation model for anti-oxidant enzyme Ahp1 [3]. 1: Peroxide oxidizes a Cys-based thiol (Ahp1-SH) to sulfenic acid (Ahp1-SOH). 2: S-transfer to Urm1 yields a thiocarboxylate (Urm1-COSH), which condenses with Ahp1-SOH to form an acyl-disulfide (Ahp1-S-S-Urm1). 3: nucleophilic attack by a Lys residue (Ahp1-NH<sub>2</sub>) on Urm1's carbonyl group cleaves the disulfide to form an iso-peptide (Ahp1-NH-CO-Urm1) bond and a persulfide (Ahp1-S-SH). The latter may be released as H<sub>2</sub>S (?) or transferred elsewhere [3].

US) show that Kti11 (alias Dph3) also takes care of the FeS cluster in Dph1•Dph2 implying the two radical SAM pathways and their modifications on EF2/tRNA interact and possibly, cooperate in the process of mRNA translation (Fig. 1).

Collaboration with Sebastian Glatt's lab (Kraków, Poland) shows how a ubiquitin-related modifier (Urm1) impacts on protein and tRNA thio-modifications. Urm1 feeds sulfur into pathways for S-transfer to Elongator substrates (tRNA thiolation) and proteins (urmylation). Perhaps these thio-modifications also do cross-talk?

As for analyzing the urmylation branch, which used anti-oxidant enzyme (Ahp1), their data [3] show the Urm1 conjugation reaction requires oxidation of redox-active thiols (Cys-SH) in Ahp1 to sulfenic acids (Cys-SOH) (Fig. 2). This raises the options that S-transfer from Urm1 results in persulfidation (Cys-S-SH) of Ahp1 and protects the enzyme from further overoxidation [3]. Collectively, studies in the Schaffrath lab also attract biomedical interest since defects in Urm1, diphthamide or Elongator cause error-prone translation and protein aggregation, scenarios that associate with neuropathies and cancer in humans [4].

## Literatur / Literature

[1] Schaffrath & Leidel (2017) *Wobble uridine modifications – a reason to live, a reason to die?! RNA Biol* 14: 1209-1222.

[2] Sokołowski et al. (2018) *Cooperativity between different tRNA modifications and their modification pathways. Biochim Biophys Acta* 1861: 409-418.

[3] Kaduhr et al. (2021) *Urm1, not quite a ubiquitin-like modifier? Microb Cell* 8: 256-261.

[4] Hawer et al. (2019) *Roles of Elongator dependent tRNA modification pathways in neurodegeneration and cancer. Genes* 10: 19.

## Danksagung / Acknowledgements

Unterstützung durch den Zentralen Forschungsfonds der Universität Kassel (ZFF PhosMOrg, Pilot), die EU (Cost Action EPITRAN), das Land Hessen (LOEWE Exploration) und die DFG (Schwerpunktprogramme 1784: Chemical Biology of Native Nucleic Acid Modifications & 1927: Iron-Sulfur [Fe/S] for Life) sei herzlichst gedankt.

## Weiterführende Informationen / Further Information

### Prof. Raffael Schaffrath, Ph.D.

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Str. 40  
34132 Kassel  
IBC - Raum 2104

Tel: +49 561 804-4175  
Fax: +49 561 804-4337  
Email: [schaffrath@uni-kassel.de](mailto:schaffrath@uni-kassel.de)  
Website: <https://www.uni-kassel.de/fb10/institute/biologie/fachgebiete/mikrobiologie>  
[https://www.researchgate.net/profile/Raffael\\_Schaffrath](https://www.researchgate.net/profile/Raffael_Schaffrath)









# Nanophotonik

## Nanophotonics



Prof. Dr. T. Kusserow

Die Arbeitsgruppe Nanophotonik wurde 2014 als Juniorprofessur im FB16 Elektrotechnik/Informatik am INA eingerichtet. Thematisch werden in der Forschung und den Lehrveranstaltungen die gezielte Herstellung und Manipulation der Eigenschaften von optischen Materialien sowie deren Anwendung in nanooptischen Anwendungen und Strukturen bearbeitet.

Periodische Strukturen, bei denen der Brechungsindex im Längenbereich der halben Wellenlänge des Lichts variiert, können die Ausbreitung der Wellen sehr effizient ändern. Typische Beispiele sind Dünnschichtspiegel, Photonische Kristalle oder auch Beugungsgitter. Werden lokal Störungen der periodischen Abfolge eingefügt, können zudem resonante Effekte ausgenutzt werden. In der AG Nanophotonik wurden in den letzten Jahren Strukturen untersucht, deren Periode kontinuierlich leicht variiert wird (chirp), so dass es auch ohne diskrete Störung zu resonantem Verhalten kommt. Diese Verschmierung der resonanten Störung führt ebenfalls zu einer räumlichen Verbreiterung des Modes, wie von Sabrina Reuter gezeigt werden konnte. Die experimentelle Realisierung wurde von Muhammad Taimoor durchgeführt, der hierfür auch die Verwendung von kolloidalen Quantenpunkten (Kooperation mit C.Dang, NTU Singapur) und deren optische Eigenschaften untersucht hat.

Ein weiteres Thema ist die Anregung von Bloch-Oberflächenmoden. Ähnlich zu den besser bekannten Oberflächen Plasmon-Polaritonen, können sich diese optischen Zustände nur auf einer Oberfläche ausbreiten. Allerdings basieren die Bloch-Oberflächenmoden auf den Bedingungen für Totalreflexion und

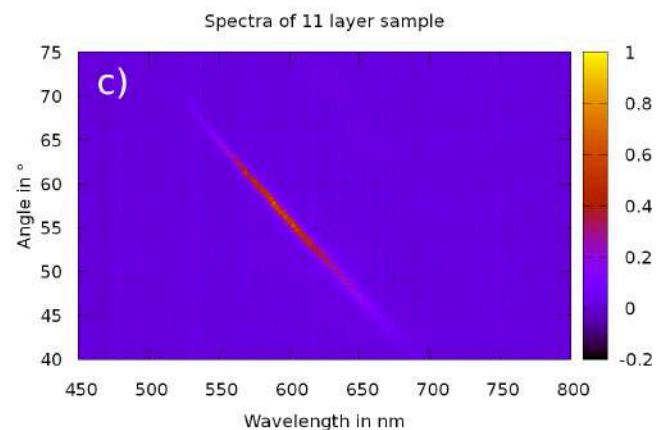
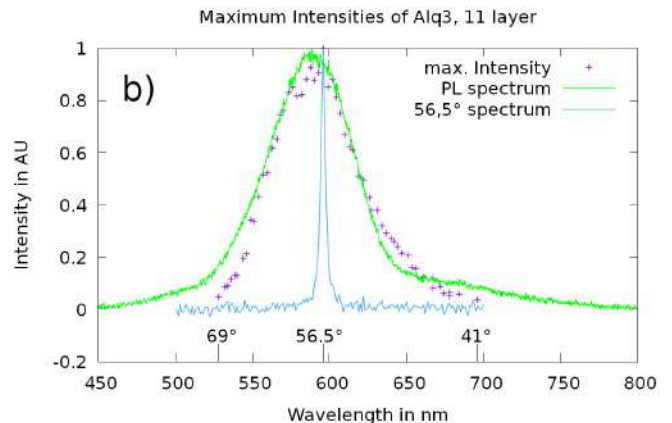
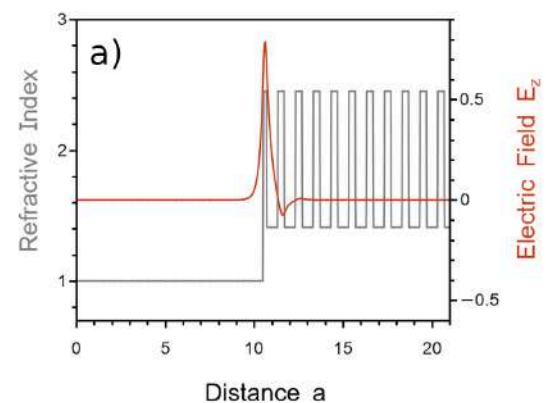


Abbildung 1: Eigenschaften von Bloch-Oberflächenmoden: a) numerische Berechnung des Modenprofils an der Oberfläche einer periodischen, dielektrischen Struktur, b) Charakterisierung des Emissionsspektrums einer Alq3 Schicht (grün: PL Spektrum Schicht, blau: resonante Emission eines angeregten Bloch-Oberflächenmodes, violett: Maxima der Resonanzen für unterschiedliche Winkel), c) Winkelabhängigkeit der Emission einer Alq3 Schicht auf einer periodischen Struktur mit 11 Schichten bei Anregung von Bloch-Oberflächenmoden (Bilder: K. Neumann).

Figure 1: Properties of Bloch surface modes: a) numerical calculation of the mode profile at the surface of a periodic dielectric structure, b) characterization of the emission spectrum of an Alq3 layer (green: PL spectrum layer, blue: resonant emission of an excited Bloch surface mode, violet: maxima of the resonances for different angles), c) angular dependence of the emission of an Alq3 layer on top of a periodic structure with 11 layers, excited as Bloch surface mode (images: K. Neumann).

destruktive Interferenz in einer periodischen, dielektrischen Struktur, und nicht auf den verlustbehafteten Eigenschaften von Metallen. Insbesondere die Anregung von Emittermaterialien im Nahfeld der Oberflächenmoden ist interessant, da hier eine spektral schmale, resonante Überhöhung beobachtet werden kann und sogar starke Kopplung möglich ist. Vorteile der Bloch-Oberflächenmoden sind die einfache Herstellung der Strukturen, die geringen Verluste in den Materialien und der offene Zugang zu dem Emittermaterial, das sich nicht in einer Kavität, sondern auf der periodischen Struktur befindet. Das grundsätzliche Verhalten und die experimentelle Umsetzung wurden von Lukas Becker und Klara Neumann (Kooperation mit Prof. Walther, TU Darmstadt) untersucht. Hierfür wurden wieder kolloidale Quantenpunkte sowie organische Emitter (Alq3, mmCmm) verwendet.

Für nanooptische Anwendungen werden häufig Materialien mit einer gewissen Leitfähigkeit benötigt (Plasmonik, Metamaterialien und -oberflächen, epsilon near zero, ...). Das Standardmaterial ist hierbei Gold, das viele Vorteile bietet, aber auch hohe optische Verluste aufweist und zudem kaum in Hinsicht auf die Permittivität bzw. Leitfähigkeit variiert werden kann. In der AG Nanophotonik wurden von Lukas Wetterau und Marco Künne daher in den letzten Jahren alternative Materialien für die Nanooptik untersucht, deren Verluste geringer sind und zudem eine lokale Manipulation der komplexen Permittivitätsfunktion erlauben. Eine mögliche Strategie ist hierbei die

Dotierung von Halbleitern mit großer Bandlücke, wie z.B. GaN (mit NTU Singapur) oder ITO. Insbesondere bei gesputtertem ITO kann die Permittivität leicht durch thermische Prozesse verändert werden. Beim klassischen Tempern oder auch mittels Excimerlaser (mit Inst. f. Nanophotonik, Göttingen, früher LLG) kommt es zu einer Umformung, der zuerst amorphen, zu einer polykristallinen Struktur und damit auch zu einer Erhöhung der Leitfähigkeit. Weitere Kandidaten für alternative nanooptische Materialien sind Nitride von Übergangsmetallen, wie ZrN oder TiN. Diese können ebenfalls gut in ihren Eigenschaften manipuliert werden. Zum einen ist dies bereits bei der Herstellung möglich, z.B. wenn durch reaktives Sputtern entweder ZrN oder  $Zr_3N_4$  erzeugt wird, oder auch durch nachfolgende Prozesse. Prinzipiell ist hierbei auch eine Transformation der Stöchiometrie möglich, noch einfacher ist aber eine lokale Oxidation zu  $ZrO_2$  oder  $TiO_2$ , welche beide sehr gute dielektrische Eigenschaften aufweisen. In Zukunft wäre auch die Untersuchung von Perovskiten (z.B. SMO) oder hochdotiertem Diamant von Interesse.

Zusätzlich zu den Untersuchungen der Eigenschaften von Materialien und Nanostrukturen, werden auch die benötigten Herstellungsprozesse und Charakterisierungsmethoden entwickelt und untersucht. So ist im Moment gerade die Bestimmung der komplexen Permittivitätsfunktion mit mikroskopischer Auflösung ein gesetztes Ziel.

*The nanophotonics group was established in 2014 as a junior professorship in the faculty 16 Electrical Engineering/Computer Science at INA. The main topics in research and lectures deal with the design, fabrication and manipulation of the properties of optical materials as well as their application in nano-optics and related nanoscale structures.*

*Periodic structures, with variation of the refractive index in the length range of half the wavelength of light, can influence the propagation of waves very efficiently. Typical examples are thin-film reflectors, photonic crystals or diffraction gratings. If local perturbations of the periodic sequence are inserted, resonant effects can also be exploited. In the nanophotonics group, structures with small continuous variation of their period (chirp)*

*have been investigated in recent years, so that resonant behavior occurs even without discrete perturbation. This smearing of the resonant perturbation also leads to a spatial broadening of the modes itself, as shown by Sabrina Reuter. The experimental realization was performed by Muhammad Taimoor, who also investigated the implementation of colloidal quantum dots (cooperation with C.Dang, NTU Singapore) as emitter and their optical properties.*

*Another topic is the excitation of Bloch surface modes. Similar to the better known surface plasmon polaritons, these optical states can only propagate on surfaces. However, Bloch surface modes are based on total internal reflection and destructive interference conditions in a periodic dielectric structure, rather than the lossy*

properties of metals. In particular, excitation of emitter materials in the near-field of the surface modes is of interest, since spectrally narrow resonant enhancement can be observed and even strong coupling is possible. Advantages of Bloch surface modes are the ease of fabrication of the structures, the low losses in the materials, and the open access to the emitter material, which is not placed in a cavity but on top of the periodic structure. The fundamentals and the experimental implementation were investigated by Lukas Becker and Klara Neumann (cooperation with Prof. Walther, TU Darmstadt). Again colloidal quantum dots as well as organic emitters (Alq3, from mmCmm) were used for this purpose.

For nano-optical applications, materials with a certain conductivity are often needed (plasmonics, metamaterials and metasurfaces, epsilon near zero, ...). The most common material is gold, which offers many advantages, but also shows high optical losses and, in addition, can hardly be varied regarding its permittivity or conductivity. In the nanophotonics group, Lukas Wetterau and Marco Künne have therefore investigated alternative materials for nano-optics in recent years, which

provide lower losses and also allow local manipulation of the complex permittivity function. One possible strategy is the doping of large bandgap semiconductors, such as GaN (with NTU Singapore) or ITO. Especially for sputtered ITO, the permittivity can be easily manipulated by thermal processes. Classical annealing or excimer lasers (with Inst. f. Nanophotonik, Göttingen, formerly LLG) lead to the transformation of the initially amorphous structure into a polycrystalline one and thus to an increase in conductivity. Other candidates for alternative nano-optical materials are the nitrides of transition metals, such as ZrN or TiN. These also offer options to manipulate their optical properties. On the one hand, this is already possible during deposition, e.g. when either ZrN or  $Zr_3N_4$  is generated by reactive sputtering, or also by subsequent processes. In principle, transformation of the stoichiometry is possible as well, but even simpler is local oxidation to  $ZrO_2$  or  $TiO_2$ , which both have very good dielectric properties. In the future, the investigation of perovskites (e.g. SMO) or highly doped diamond would be further interesting options.

In addition to the investigations of the properties of materials and nanostructures, the required fabrication processes and characterization methods are also being developed and investigated. At the moment the characterization of the complex permittivity function with microscopic resolution is such a goal.

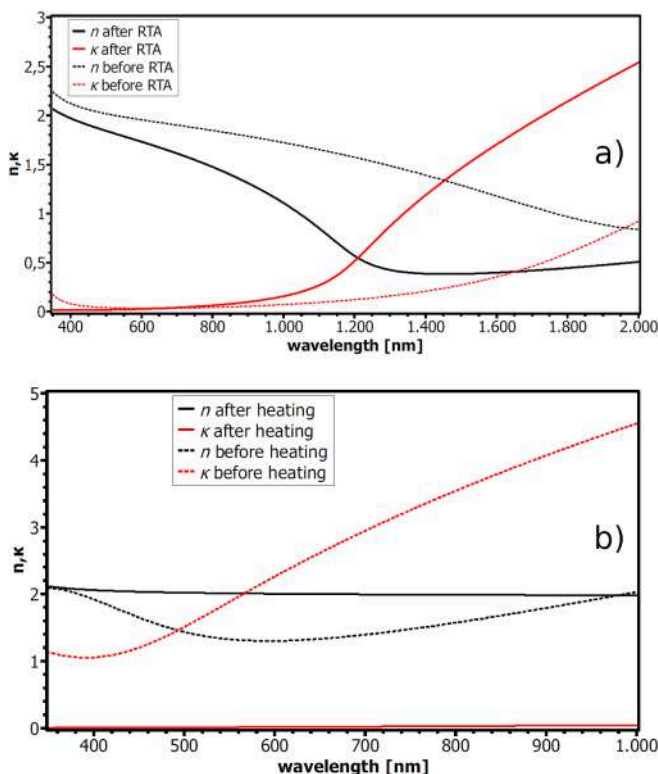


Abbildung 2: Thermische Beeinflussung der Permittivitätsfunktion: a) ITO vor und nach Temperprozess und dadurch initiiierter Strukturumformung von amorph zu polykristallin, b) Umwandlung von ZrN zu  $ZrO_2$  durch thermische Oxidation (Bilder: M. Künne).

Figure 2: Thermal influence on the permittivity function: a) ITO before and after annealing process and thereby initiated transformation from amorphous to polycrystalline structure, b) transformation of ZrN to  $ZrO_2$  by thermal oxidation (images: M. Künne).

## Weiterführende Informationen / *Further Information*

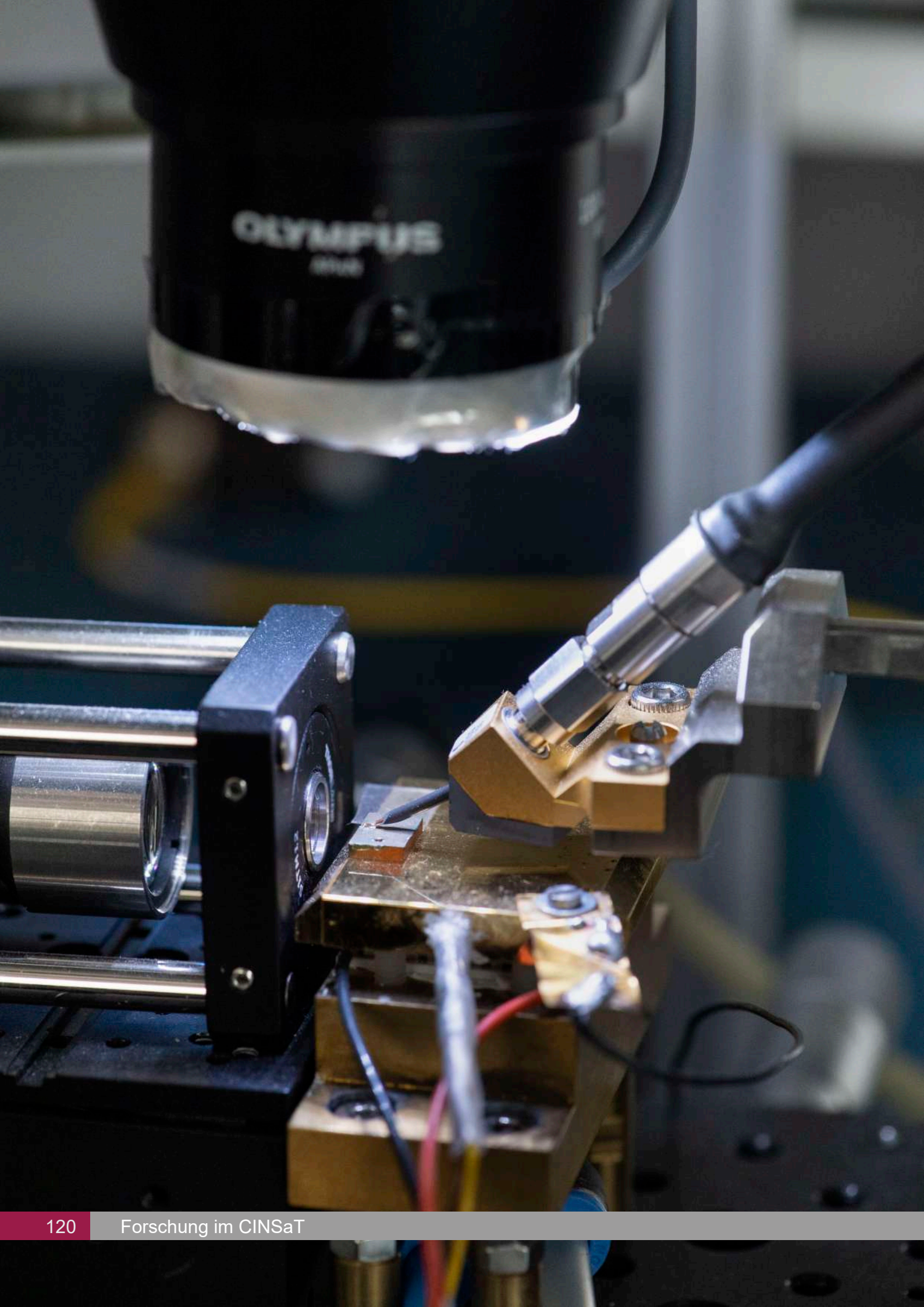
### **Prof. Dr. T. Kusserow**

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Str. 40  
34132 Kassel  
INA - Raum 2116

Tel: +49 561 804-4315  
Email: [kusserow@ina.uni-kassel.de](mailto:kusserow@ina.uni-kassel.de)  
Website: [https://www.uni-kassel.de/  
forschung/ina/nanophotonik/ueber-uns](https://www.uni-kassel.de/forschung/ina/nanophotonik/ueber-uns)







# Oberflächenphysik

## Surface Science



Prof. Dr. René Matzdorf

Im Fachgebiet Oberflächenphysik wird an der Elektronenstruktur in niedrig-dimensionalen Systemen geforscht. In elektrisch leitenden Nanostrukturen auf Festkörperoberflächen ist die Bewegungsfreiheit der Elektronen im Vergleich zu dreidimensional ausgedehnten Leitern eingeschränkt. Durch die Coulomb-Wechselwirkung und das Pauli-Prinzip können sich Elektronen – je nach Spin – überhaupt nicht oder nur durch Aufwendung von Energie nahe kommen. Für die relevante Längenskala ist dabei die Wellenlänge der Elektronen maßgeblich. Sie hängt mit den Eigenschaften des Kristallgitters zusammen und liegt im Bereich von wenigen Nanometern und darunter.

Da die Elektronen Abstand voneinander halten müssen und sich bei gleichem Spin nicht am selben Ort aufhalten können – analog zu Molekülen in einer Flüssigkeit – spricht man auch hier von einer „Flüssigkeit“ im übertragenen Sinn. Im dreidimensionalen Fall beschreibt man die schwachen Korrelationen der Elektronen mit der s.g. Fermi-Flüssigkeit, bei der man die einzelnen Elektronen mit ihren Wechselwirkungen s.g. Quasiteilchen zuordnet, die aber weiterhin individuell eine Anregung erfahren können und Energie tragen.

Bei eindimensionalen Strukturen ist eine Bewegung der Elektronen nur entlang einer Dimension möglich, während senkrecht dazu die Wellenfunktion wie in einem Quantentrog auf eine Halbwelle eingeschränkt wird. Dies führt dazu, dass Elektronen sich nicht mehr bzw. nur unter Aufwendung erheblicher Energie aneinander vorbei bewegen können. In solchen eindimensionalen Elektronensystemen sind daher nur kollektive Anregungen des Elektronensystems insgesamt möglich. Elektronen können nicht mehr als Quasiteilchen beschrieben werden, können nicht individuell angeregt werden und können nicht mehr individuell Energie tragen. Als anschauliches Analogon kann man sich eine Flüssigkeit vorstellen, bei der man nicht Energie auf einzelne Moleküle sondern auf Wellen oder Solitonen in der Flüssigkeit insgesamt überträgt.

In eindimensionalen Elektronensystemen kann sich eine s.g. Tomonaga-Luttinger-Flüssigkeit (TLL) ausbilden. Darin hängt die Wechselwirkung der Elektronen von ihrem Spin ab. Ist der Spin

zweier Elektronen unterschiedlich, wirkt nur die Coulomb-Abstoßung zwischen ihnen, ist der Spin gleich, wirkt zusätzlich eine Abstoßung aufgrund des Pauli-Prinzips, die einen Aufenthalt am selben Ort verhindert. Durch diese Abhängigkeit vom Spin ergeben sich zwei unterschiedliche Möglichkeiten für kollektive Anregungen: Ladungsdichtewellen und Spindichtewellen. Sie bewegen sich mit unterschiedlicher Geschwindigkeit, da die zugrundeliegende Wechselwirkungsstärke der beteiligten Elektronen unterschiedlich ist. Man spricht von Spin-Ladungstrennung, da eine lokale Anregung von Spin und Ladung wegen der unterschiedlichen Ausbreitungsgeschwindigkeiten mit der Zeit auseinanderläuft. Weiterhin wird eine s.g. Zero-Bias-Anomalie in der Zustandsdichte von der Theorie vorhergesagt. Die Zustandsdichte in der Umgebung der Fermi-Energie zeigt unter idealen Bedingungen von linearen Banddispersionen ein Potenzgesetz mit universellem Skalenverhalten aber bestimmten Exponenten. Es kann als Nachweis einer TLL im Experiment genutzt werden.

Im Fachgebiet Oberflächenphysik wurde ein eindimensionales Elektronensystem mit TLL in Gold-induzierten Nanodrähten auf Ge(100) mittels Rastertunnelmikroskopie (STM) und Rastertunnelspektroskopie (STS) nachgewiesen [1]. Bisher gibt es nur wenige Beispiele von Systemen, in denen eine TLL experimentell nachgewiesen wurde und das Besondere an diesem System ist, dass es sich um Nanodrähte von sehr geringer Breite handelt, die an der Oberfläche eines Halbleiters mit Methoden der Oberflächenphysik zugänglich sind und auf atomarem Maßstab manipuliert werden können.

In jüngster Zeit werden im Fachgebiet Oberflächenphysik unterschiedliche Manipulationen an den Gold-Nanodrähten auf Germanium vorgenommen, um damit das Verhalten der TLL zu studieren. Dazu gehört der Versuch, Moleküle als leitende Brücken zwischen benachbarten Drähten aufzubringen, genauso wie die Untersuchung des modifizierten Exponenten der TLL am Ende der Drähte. Die genaue Struktur der Drähte aus Goldatomen eingebettet in eine Germaniummatrix ist bis heute unbekannt. Daher werden auch Untersuchungen durchgeführt, die zur Strukturaufklärung beitragen können und einen Vergleich mit Rechnungen erlauben.

Die im Fachgebiet eingesetzte Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie bietet die einzigartige Möglichkeit, einzelne Nanostrukturen auf atomarem Maßstab direkt zu untersuchen und Spektren daran zu messen. Misst man den Tunnelstrom  $I$  als Funktion von der angelegten Spannung  $V$  bei festem Abstand, so erhält man ein Signal, dass proportional zum Integral über die

Zustandsdichte der Probe ist. In einem besonders stabilen STM ist es möglich, bei tiefen Temperaturen ( $<5\text{K}$ ) mit Lock-In Technik ein  $dI/dV$  Signal zu messen, das direkt proportional zur lokalen Zustandsdichte ist. Man erreicht Energieauflösungen  $<5\text{meV}$ , die es erlauben, die lokale Zustandsdichte in der Umgebung der Fermi-Energie im Detail zu studieren.

---

*In the surface science research group, the electronic structure in low-dimensional systems is studied. In conductive nanostructures on solid surfaces, the freedom of movement of electrons is restricted compared to three-dimensional conductors. Due to the Coulomb interaction and the Pauli principle, electrons – depending on the spin – cannot come close at all or only under considerable use of energy. The relevant length scale is determined by the wavelength of the electrons. It is related to the properties of the crystal lattice and is in the range of a few nanometers and below.*

*Since the electrons have to keep a distance from each other and cannot be at the same place with the same spin – analogous to molecules in a liquid – one speaks of a "liquid" in the figurative sense. In the three-dimensional case, the weak correlations of the electrons are described with the so-called Fermi-liquid, in which the individual electrons and their interactions are becoming so-called quasiparticles, which can still be excited and carry energy individually.*

*In the case of one-dimensional structures, the electrons can only move along one dimension, while perpendicular to this the wave function is confined to a half-wave like in a quantum well. This means that electrons can no longer pass or overhaul each other or need at least considerable energy for that. In such one-dimensional electron systems, therefore, only collective excitations of the electron system as a whole are possible. Electrons can no longer be described as quasiparticles, cannot be excited individually and can no longer carry energy individually. As an analogue one can imagine a liquid in which one does not transfer energy to individual molecules but to waves or solitons in the liquid as a whole.*

*In one-dimensional electron systems a so-called Tomonaga-Luttinger-liquid (TLL) can be observed. The interaction of the electrons depends on their spin. If the spin of two electrons is*

*different, only the Coulomb repulsion acts between them; if the spin is the same, a repulsion based on the Pauli principle acts additionally, which prevents being simultaneously at the same place. This dependence on spin results in two different possibilities for collective excitations: charge density waves and spin density waves. They move at different velocities because the underlying interaction strength of the electrons involved is different. One speaks of spin-charge separation, since a local excitation of spin and charge separates over time due to the different propagation velocities. Furthermore, a so-called zero bias anomaly (ZBA) in the density of states is predicted by theory. The density of states in the vicinity of the Fermi energy shows under ideal conditions of linear band dispersions a power law with universal scale behavior but certain exponent. It can be used as evidence of a TLL in the experiment.*

*In the surface physics research group, a one-dimensional electron system with TLL in gold-induced nanowires on Ge(100) was demonstrated using scanning tunneling microscopy (STM) and scanning tunneling spectroscopy (STS) [1]. So far there are only a few examples of systems in which a TLL has been experimentally proven and the special thing about this system is that it has nanowires of very small width that are accessible on the surface of a semiconductor using methods of surface science and can be manipulated on the atomic scale.*

*Recently, various manipulations have been carried out on the gold induced nanowires on germanium in the surface physics research group in order to study the behavior of the TLL. This includes the attempt to apply molecules as conductive bridges between neighboring wires as well as the investigation of the modified exponent of the TLL at the end of the wires. The exact structure of the wires made of gold atoms embedded in a germanium matrix is still unknown today. Therefore, investigations that can contribute to the structure determination and allow a comparison with calculations.*

The scanning tunneling microscopy and spectroscopy used in the research group offers the unique opportunity to examine individual nanostructures directly on an atomic scale and to measure spectra on them. If the tunnelling current  $I$  is measured as a function of the applied voltage  $V$  at a fixed distance, a signal is obtained that is proportional to the integral over the density of

states of the sample. In a particularly stable STM, it is possible at low temperatures ( $<5K$ ) to use lock-in technology to measure a  $dI/dV$  signal that is directly proportional to the local density of states. Energy resolution of  $<5meV$  is achieved, which allow to study the local density of states in the vicinity of the Fermi energy in detail.

---

## Literatur / Literature

[1] Atomically controlled quantum chains hosting a Tomonaga-Luttinger liquid, C. Blumenstein, J. Schäfer, S. Mietke, et al. NATURE PHYSICS 7, 776, 2011

## Weiterführende Informationen / Further Information

### Prof. Dr. René Matzdorf

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Str- 40  
34132 Kassel  
AVZ I - Raum 1164

Tel: +49 561 804-4772  
Fax: +49 561 804-4518  
E-Mail: [matzdorf@physik.uni-kassel.de](mailto:matzdorf@physik.uni-kassel.de)  
Website: <https://www.uni-kassel.de/fb10/institute/physik/forschungsgruppen/oberflaechenphysik/startseite>











Prof. Dr. rer. nat. habil. Hartmut Hillmer

### 3-dimensionale Nanostrukturen

#### Funktionalisierte Mikro- und Nanostrukturen

Seit vielen Jahren ist die Strukturierung und Funktionalisierung von 3D Mikro- und Nanostrukturen einer der Schwerpunkte der Technischen Elektronik am Institut für Nanostrukturtechnologie und Analytik. Hierfür verwenden wir die Methode der Nanoimprint-Lithografie (NIL), mit welcher uns Strukturen mit einer Auflösung im einstelligen Nanometerbereich gelingen. Durch die Implementierung von Gastpartikeln mit charakteristischen Eigenschaften können dabei funktionalisierte Strukturen und/oder Gast-Wirt-Partikelsysteme hergestellt werden (Abb. 1, links) [1-2]. Alternativ gelingt die Funktionalisierung auch durch den Einsatz von maßgeschneiderten Prägelacken [3] oder einer Oberflächenmodifikation, wie beispielsweise durch Beschichtung oder Substrukturierung der mittels NIL hergestellten Strukturen. Beide Methoden zur Funktionalisierung können kombiniert werden und schließlich so zu einer Multifunktionalität der anisotropen Partikelsysteme führen. Solche multifunktionalen Partikel sind unter anderem in der Sensorik, Medizin- und Werkstofftechnik gefordert. Hier finden sie Anwendung als Marker

oder Transportvehikel auf Lab-on-the-Chip-Systemen, als Medikamententräger oder als Füllstoffe in Verbundwerkstoffen. Wir entwickeln stets die NIL-Methode weiter und testen ihre Grenzen aus. So untersuchen wir aktuell in einer Kooperation mit der AG Messtechnik (Prof. Lehmann) im Rahmen eines DFG Projektes das Prägeverhalten eines hybriden NIL-Stempels auf gekrümmten Oberflächen (Abb. 1, Mitte). Ziel ist hierbei die kontrollierte Nanostrukturierung halbkugelförmiger Mikrostrukturen zur Entwicklung einer neuen Interferometrie-Technik [4]. Bei der Herstellung von dreidimensionalen Strukturen greifen wir vor allem auf das Verfahren der Zwei-Photonen-Polymerisation (2PP) zurück. Hierbei handelt es sich um ein additives Fertigungsverfahren, mit dem in einem einzelnen Arbeitsschritt geometrisch anspruchsvolle Polymerstrukturen hergestellt werden können. Analog zu den mittels NIL hergestellten Strukturen können diese ebenfalls funktionalisiert werden. Die 2PP-Methode ermöglicht die Fabrikation hochkomplexer Strukturen, die mittels NIL nicht zugänglich sind, wie z.B. eine Kugel im Käfig (Abb. 1, rechts).

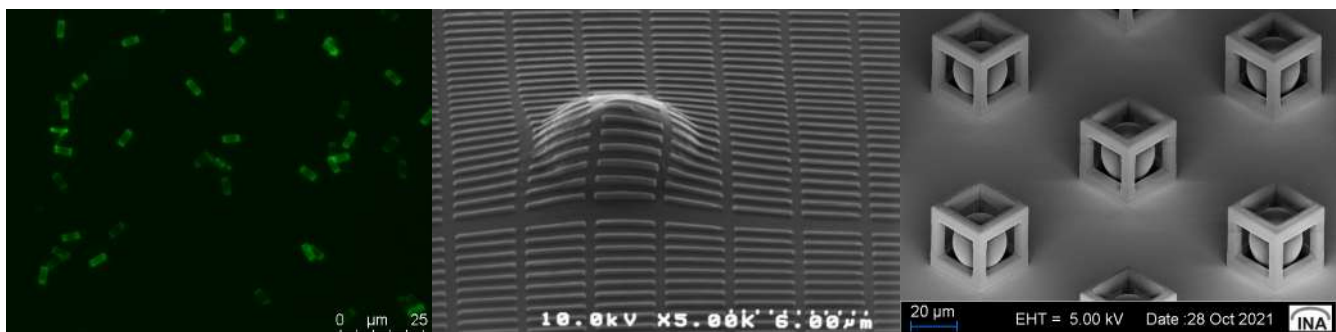


Abbildung 1: (Links) Fluoreszenzmikroskop-Aufnahmen von geprägten und freigesetzten Phospholpartikeln (Anregungswellenlänge: 360-380 nm, Emissionsmaximum: 506 nm). (Mitte) Gekrümmte Oberfläche, welche mit NIL substrukturiert wurde. (Rechts) Mittels Zwei-Photonen-Polymerisation lassen sich geometrisch anspruchsvolle Strukturen additiv fertigen. Dargestellt ist eine Kugel im Käfig, welche in einem einzigen Prozessschritt hergestellt wurde.

Figure 1: (Left) Fluorescence microscope images of imprinted and released phosphol particles (excitation wavelength: 360-380 nm, emission maximum: 506 nm). (Center) Curved surface, which was substructured via NIL. (Right) Geometrically demanding structures can be additively manufactured using two-photon polymerization. Shown here is a ball in a cage, which was fabricated in a single step process.

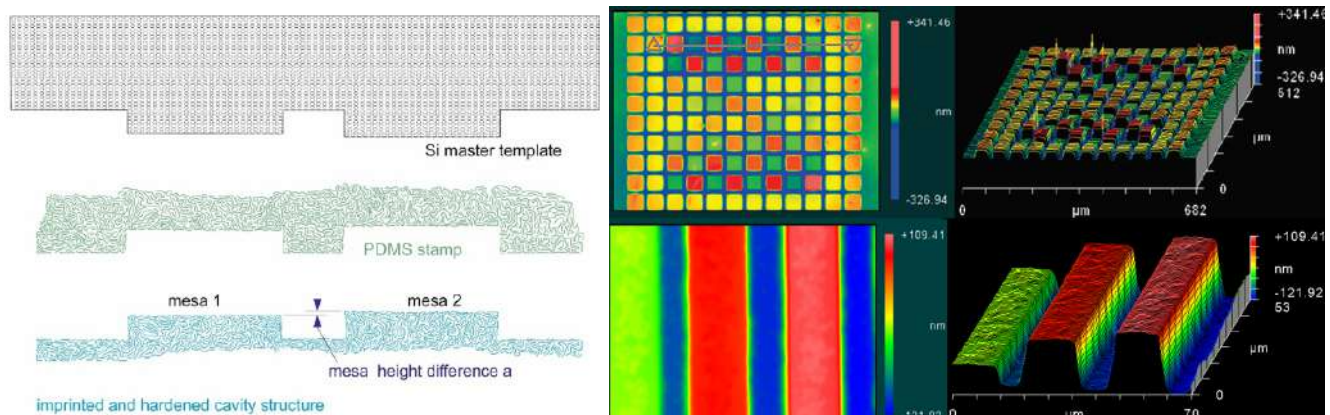


Abbildung 2: (links) Grundlagen des Abformens eines Arbeits-Stempels von einem Master-Template und das Prägen von zwei verschiedenen Kavitäten. (Rechts) Weißlicht Interferometer Aufnahmen der mit SCIL abgeformten Kavitäten für Anwendungen in Nanospektrometern im sichtbaren und nahen Infrarot-Bereich.

Figure 2 (Left) Fundamentals of molding a stamp from a master templet and imprinting two different cavities. (Right) white light interferometry images of the imprinted cavities using SCIL for applications in nanospectrometers in the visible and infrared spectral range.

### Nanoimprint von Fabry-Pérot-Filter-Arrays für die optische Sensorik

Ferner verwenden wir NIL zur Herstellung eines hochauflösenden Nanospektrometers, das ein Fabry-Pérot-Filter-Array mit einem korrespondierenden Sensor-Array kombiniert. Die Wellenlänge jedes Filters wird durch die Höhe der jeweiligen Kavitäten definiert, die zwischen zwei Bragg-Reflektoren (DBRs) liegen. Bislang haben wir bis zu 192 einzelne Filterwellenlängen auf einem Chip realisiert [5]. Alle individuellen 3D-Kavitäten bestehen aus organischem, photosensitiven NIL-Lack und werden in einem einzigen NIL-Schritt geprägt. Um das Prägen über vertikale Stufen zwischen verschiedenen DBRs zu ermöglichen, verwenden wir die Substrate Conformal Imprint Lithography (SCIL), die auf flexiblen Stempeln basiert und reproduzierbare Prägeergebnisse über große Flächen gewährleistet. Dies ermöglicht das Prägen von verschiedenen DBRs mit unterschiedlichen Höhen und unterschiedlichen Stoppbändern. Viele flexible PDMS-Stempel können so aus einem einzigen Master-Template abgeformt werden (Abb. 2, links). Die 3D-Nanokavitäten innerhalb des Stempels werden bei Kontakt des flexiblen Stempels mit dem Lackmaterial durch Kapillarkräfte gefüllt. Nach der Aushärtung durch UV-Licht wird der Stempel entfernt. Der kleinste Höhenunterschied, den wir mit einem Interferenzmikroskop gemessen haben betrug  $a=0,2$  nm. Da in

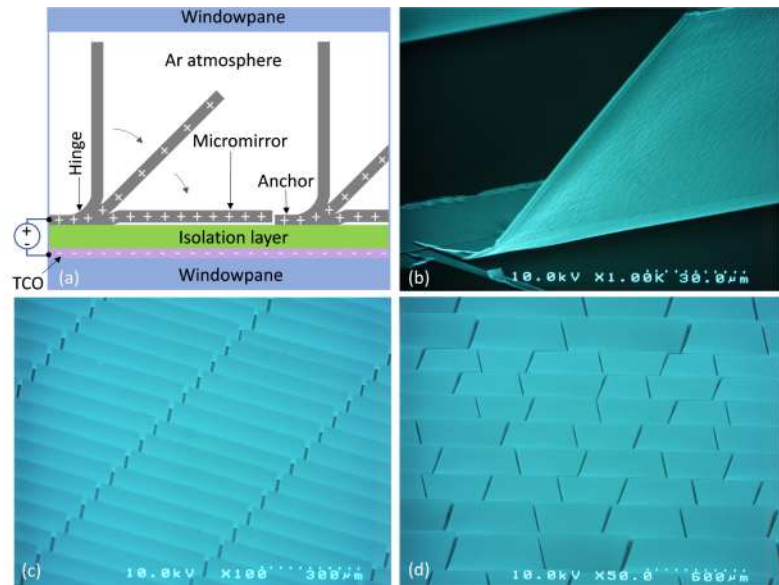
unserem Proof-of-Principle die lateralen Abmessungen unserer Mesa-Strukturen im Bereich von  $> 6$   $\mu\text{m}$  oder sogar bei 40  $\mu\text{m}$  liegen (Abb. 2, rechts) [5], werden sich die Ketten der NIL-Lackmoleküle in laterale Richtungen ausbreiten. Dies bedeutet, dass eine sehr hohe vertikale Genauigkeit erreicht werden kann, wenn relativ große laterale Abmessungen toleriert werden können oder sogar erforderlich sind, wie in unserem Fall. Eine sehr hohe vertikale Auflösung kann auch erreicht werden, wenn größere Restschichten zulässig sind oder Reservoirs für überschüssigen Lack in das Stempel-Design einbezogen werden.

### Intelligente 3D-MEMS für Lichtlenkung und Wärme-management

Heutzutage sind Gebäude für den größten Teil des Primärenergieverbrauchs für Heizung, Kühlung und Beleuchtung verantwortlich, was zu einer raschen globalen Erwärmung, einem Anstieg des Meeresspiegels und einer tiefgreifenden Veränderung des Ökosystems der Ozeane führt, da sie große Mengen an  $\text{CO}_2$  ausstoßen. Seit 2003 untersuchen und entwickeln wir intelligente MEMS-Fenster, die aus Millionen von mikro- und nanostrukturierten 3D-MEMS-Spiegelarrays bestehen und das Tageslicht dynamisch lenken und steuern können [6-9]. Die Mikrospiegel befinden sich in Isolationsverglasungen im mit

Abbildung 3: (a) Schematische Darstellung der elektrostatischen Aktuation. Mit ansteigenden angelegten Spannungen wächst die elektrostatische Anziehungskraft. Ein Kräftegleichgewicht wird aufgebaut zwischen elektrostatischer Anziehungskraft und elastischer Gegenkraft im deformierten Scharnier. Verschiedene Kräftegleichgewichte führen dabei zu diversen Aktuations-Winkeln. Ein vollständig geschlossen aktuierter Zustand wird erreicht, indem eine größere als die Pull-in Spannung angelegt wird. (b) REM Aufnahme eines planarisierten freistehenden MEMS Spiegels. (c,d) REM Aufnahmen von MEMS Spiegel-Arrays.

Figure 3: (a) Schematic of electrostatic actuation. By increasing the bias voltage, the electrostatic attraction force is growing. A force equilibrium is created between the electrostatic attraction force and the elastic counterforce of the deformed hinge. Different force equilibria lead to different actuation angles. The entirely closed state of the MEMS mirror is obtained by applying electrostatic actuation and a voltage exceeding the pull-in voltage, (b) SEM image of a planarized free-standing MEMS mirror, (c, d) SEM micrographs of MEMS mirror arrays.



Inertgas gefüllten Scheibenzwischenraum, um Windunempfindlichkeit, Fensterreinigung und Schutz vor ungünstigen Wetterbedingungen zu gewährleisten. Die MEMS-Arrays werden auf einem Glassubstrat mit einer dünnen transparenten leitfähigen Oxidschicht (TCO) und einer Isolationschicht hergestellt. Die Fotolackschicht wird durch Photolithographie strukturiert, gefolgt von der Abscheidung von Metallschichten (Dicke der Teilschichten liegt im nm-Bereich). Ein zusätzlicher Lithographie- und Depositionsschritt wird durchgeführt, um die induzierten intrinsischen Spannungen im Bereich der Spiegelebene lokal zu kompensieren und so ebene Spiegel zu gewährleisten. Der Scharnierbereich wird jedoch nicht kompensiert, um die Auslenkung von freistehenden Spiegeln senkrecht zum Substrat zu ermöglichen. Ein nasschemisches Lift-off-Verfahren wird durchgeführt, um die Opferschicht zu entfernen, gefolgt von einem Trocknungsprozess. Die einzelnen Mikrospiegel können durch Anlegen der vollen Spannung zwischen der Spiegelebene und der durch die Isolierschicht getrennten unteren Gegenelektrode in die horizontale Position gebracht werden. Verschiedene Kippwinkel können durch kleinere Spannungen erreicht werden, wobei sich jeweils auch die elektrostatische Anziehungskraft und die elastische Gegenkraft ausgleicht (Abb. 3).

Wir entwickeln ferner ein intelligentes vernetztes Sensorsystem, um die Position von Personen, die hellste Stelle des Himmels, Temperaturverteilung und die Lichtumgebung im Raum zu überwachen, um eine automatisierte Steuerung zu ermöglichen, die je nach Bedarf verschiedene Funktionalitäten ermöglicht. Mit effizienter Tageslichtlenkung und Wärmemanagement innerhalb des Gebäudes kann das intelligente MEMS-Fenster enorme Energiemengen einsparen, indem es die Beleuchtungslast während des ganzen Jahres und die Heiz-/Kühllast im Winter/Sommer reduziert. Im Vergleich zu anderen intelligenten Gläsern zeichnen sich MEMS-Fenster vor allem durch folgende Eigenschaften aus: proaktive Lichtlenkung, Farbneutralität, sehr lange Lebensdauer, Sicherheit im Falle eines Stromausfalls, extreme Betriebstemperaturen (-80 °C bis 120 °C), schnelles Schalten (wenige  $\mu$ s), hoher Kontrast  $T_{\max}/T_{\min} = 7300$ , Unempfindlichkeit gegenüber UV-Strahlung und geringer Stromverbrauch bis zu 0,2 mW/m<sup>2</sup>. Darüber hinaus werden niedrige Ansteuerspannungen (typisch 40 V), klare Durchsicht und unabhängige Steuerung verschiedener Fensterbereiche erreicht. Die Miniaturisierung der MEMS-Elemente in den Mikro- und Nanokosmos ist entscheidend, um diese Kenndaten zu erreichen.



---

## 3-dimensional nanostructures

### **Functionalized micro and nano structures**

For many years, structuring and functionalization of 3D micro- and nanostructures has been the main focus of the Technical Electronics department at the Institute for Nanostructure Technology and Analytics. We use the method of nanoimprint lithography (NIL) to create structures with a resolution in the single-digit nanometer range. By implementing guest particles with characteristic properties, functionalized structures or guest-host particle systems can be fabricated (Fig. 1, left) [1-2]. Alternatively, functionalization can also be achieved by using customized imprint resists [3] or by surface modification, for example by coating or substructuring the structures which are previously produced via NIL. Both methods of functionalization can be combined and ultimately lead to a multifunctionality of the anisotropic particle systems. Such multifunctional particles are required, among others, in sensorics, medical and materials technology. At the moment they are used as markers or transport vehicles in lab-on-the-chip systems, as drug carriers or as fillers in composite materials. We focus on further developing the NIL method and testing its limits. For example, we are currently investigating the imprinting behavior of a hybrid NIL stamp on curved surfaces in a cooperation with the Metrology Group (Prof. Lehmann) as part of a DFG project (Fig. 1, center). The aim is the controlled nanostructuring of hemispherical microstructures for the development of a novel interference microscopy [4]. In manufacturing of 3D structures, we especially use the process of two-photon polymerization (2PP). It is a nanoscale additive manufacturing process to produce geometrically demanding polymer structures in a single process step. Analogous to the structures produced by NIL, these structures can also be functionalized. The 2PP method enables the fabrication of highly complex structures that are not accessible using NIL, such as a ball in a cage (Fig. 1, right).

### **Nanoimprinted Fabry Pérot filter arrays for optical sensing**

In addition, we also use NIL to fabricate a high-resolution nano-spectrometer combining a Fabry Pérot filter array with a corresponding sensor array. The wavelength of each filter is defined by the individual cavity height sandwiched between two distributed Bragg reflectors (DBRs). As of now we have

implemented up to 192 individual filter wavelengths on a chip [5]. All the individual 3D cavities consist of organic photo-curable NIL resist and are imprinted within a single NIL step. To enable printing over vertical steps between different DBRs, we apply Substrate Conformal Imprint Lithography (SCIL) based on flexible soft stamps ensuring reproducible imprinting results over large areas. This enables imprinting on different DBRs with different heights and different stopbands. Many flexible soft PDMS stamps can be molded from a single master template (Fig. 2, left). The 3D nanocavities within the soft stamp are filled by capillary forces when in contact with the imprint resist. After curing by UV light, the stamp is removed. Our smallest height difference, which has been measured with an interference microscope, is 0.2 nm. Since the lateral dimensions of our mesa are still in the range of  $> 6 \mu\text{m}$  or even  $40 \mu\text{m}$  (Fig. 2, right) in our proof-of-principle [1], the chains of the nanoimprint resist molecules will spread in lateral directions. This means that a very high vertical accuracy can be obtained if rather large lateral dimensions can be tolerated—or are even required, as in our case. Very high vertical resolution can be also obtained if larger residual layers are acceptable or reservoirs for excess resist are included in the template design.

### **Smart 3D MEMS for light steering and heat management**

Today, buildings are responsible for the highest amount of primary energy consumption for heating, cooling, and lighting that triggers rapid global warming, rising sea-level, and profound changes in ocean ecosystems by emitting a massive amount of  $\text{CO}_2$ . Since 2003, we have studied and developed MEMS smart windows comprising millions of 3D micro- and nano-structured MEMS mirror arrays that can guide and control daylight dynamically [6-9]. The micromirrors are placed inside insulated window glazings filled with an inert gas to guarantee invulnerability to wind, window cleaning, and protection against unfavorable weather conditions. MEMS arrays are fabricated on glass substrates covered by a thin transparent conductive oxide layer (TCO) and an isolation layer. The photoresist layer is structured using photolithography followed by metal layer depositions (all sublayers thicknesses are in the nm range). An additional lithography and deposition steps are performed to locally compensate the induced residual stress on the mirror

plane area to obtain flat mirrors. However, the hinge area is left uncompensated to allow deflection of free-standing mirrors vertical to the substrate. A wet chemical lift-off process is executed to remove sacrificial photoresist, followed by the drying process. The individual micromirrors can be actuated to the horizontal position by applying the full voltage between mirror plane and counter bottom electrode separated by the isolation layer. Several bending angles can be achieved by smaller voltages to balance electrostatic attraction force and elastic counterforce (Fig. 3).

We also develop an intelligent networked sensing system to monitor the position of persons, brightest spot of the sky, temperature distributions, ambient lighting inside the room, and to operate an automated driving circuit enabling various

functionalities according to the requirements. With efficient daylight steering and heat management inside the building, MEMS smart window can save enormous amounts of energy by reducing lighting load throughout the year and heating/cooling load during summer/winter. Compared to other smart glass, the main features of MEMS smart windows are: the ability to steer light proactively, color neutrality, very long lifetime, safety in case of a power failure, extreme operation temperatures ( $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$  to  $120\text{ }^{\circ}\text{C}$ ), fast switching (few  $\mu\text{s}$ ), high contrast  $T_{\text{max}}/T_{\text{min}} = 7300$ , insensitivity against UV radiation and low power consumption down to  $0.2\text{ mW/m}^2$ . In addition, low actuation voltages (typically  $40\text{ V}$ ), clear view through, and independent control of different window areas have also been achieved. Miniaturization into the micro-and nano cosmos is crucial to obtain this performance.

## Literatur / Literature

- [1] U.-M. Ha, B. Kaban, A. Tomita, K. Krekić, D. Klintuch, R. Pietschnig, A. Ehresmann, D. Holzinger, H. Hillmer: *Multifunctional guest–host particles engineered by reversal nanoimprint lithography*. In: Applied Nanoscience, Vol. 8: Issue 5, pp. 1161–1169 (2018)
- [2] F. Roesler, B. Kaban, D. Klintuch, U. Ha, C. Bruhn, H. Hillmer, R. Pietschnig: *Tailoring Phospholes for Imprint of Fluorescent 3D Structures*. In: European Journal of Inorganic Chemistry, (2019). DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.201900742>
- [3] D. Löber, S. Dey, B. Kaban, F. Roesler, M. Maurer, H. Hillmer, R. Pietschnig: *3D Micro/Nanopatterning of a Vinylferrocene Copolymer*. In: Molecules, 25(10), 2438, (2020). DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules25102438>
- [4] B. Allendorf, E. Käkel, U. Ha, S. Hagemeyer, H. Hillmer, P. Lehmann: *Adaptive high-resolution Linnik interferometry for 3D measurement of microparticles*. In: Optics Letters Vol. 44, Issue 14, pp. 3550–3553, (2019). DOI: <https://doi.org/10.1364/OL.44.003550>
- [5] H. Hillmer, C. Woidt, A. Kobylinskiy, M. Kraus, A. Istock, M.S. Q. Iskandar, R. Brunner and T. Kusserow: *Miniaturized interferometric sensors with spectral tunability for optical fiber technology – a comparison of size requirements, performance, and new concepts*. PHOTONICS 8, 332 (2021). DOI:10.3390/photonics8080332
- [6] H. Hillmer, J. Schmid, I. Stadler, *Micro Mirror Arrays*, Patents EU 1700152B1, US 7677742B2, DE 10358967B4
- [7] M. S. Iskandar, B. Al-Qargholi, M. M. Khan, A. Tatzel, H. Luo, S. Nazemroaya, Q. Li, and H. Hillmer, *Development of optical MEMS-based micromirror arrays for smart window applications: Implementation of subfield addressing and reliability measurements*, Yearbook surface technology, Leuze publishing house, Vol. 52, pp. 93–107, 2019, ISBN number 978-3-87480-357-1.
- [8] S. Nazemroaya, M. Iskandar, Md K. Hasan, Q. Li, H. Hillmer: *Concepts for clear view through 3D structured surfaces of MEMS smart glass: design, implementation, characterization and validation*, Yearbook surface technology, Leuze publishing house, Vol. 76, pp. 101–115, 2020, ISBN: 978-3-87480-364-9

[9] H. Hillmer, M.S.Q. Iskhandar, M. K. Hasan, S. Akhundzada, B. Al-Qargholi, & A. Tatzel, *MOEMS micromirror arrays in smart windows for daylight steering, invited opening article*, Journal of Optical Microsystems, 1(1), 014502, 2021

## Weitere Informationen / *Further Information*

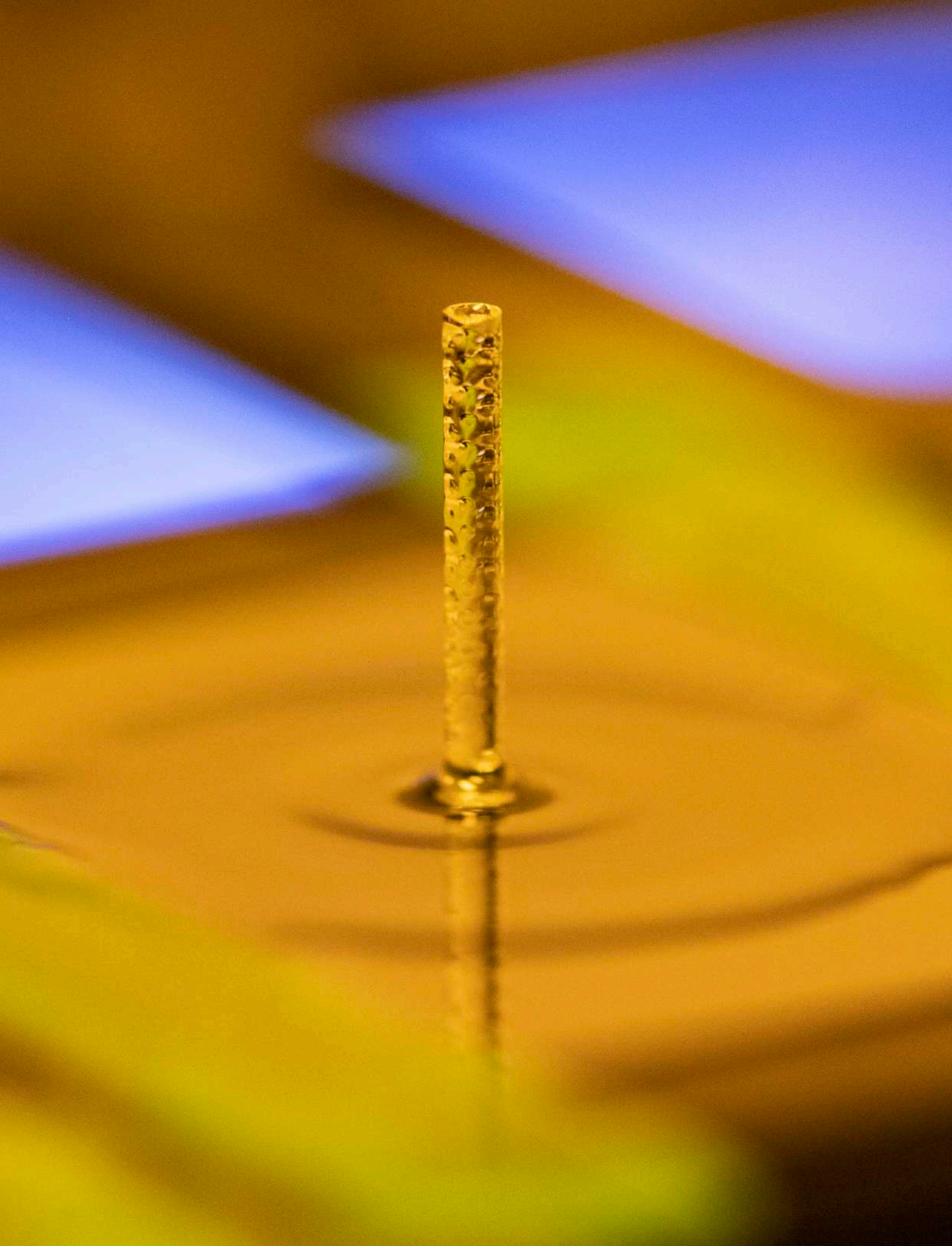
### **Prof. Dr. rer. nat. habil. Hartmut Hillmer**

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Str. 40  
34132 Kassel  
INA - Raum 2113

Tel: +49 561 804-4485  
Email: [hillmer@ina.uni-kassel.de](mailto:hillmer@ina.uni-kassel.de)  
Website: [www.ina.uni-kassel.de/te/](http://www.ina.uni-kassel.de/te/)











Prof. Dr. Johann Peter Reithmaier

## Nanostrukturtechnologie und optoelektronische Anwendungen

Die Technische Physik (TP) am Institut für Nanostrukturtechnologie und Analytik (INA) besteht aus vier Untergruppen mit den folgenden Unterthemen: Nano-Optik, Nano-Materialien, Nano-Fertigung & Bauelemente und Nano-Diamant.

Zwei davon werden von weiteren CINSaT-Mitgliedern geleitet, nämlich von Mohamed Benyoucef (Nano-Optik) und Cyril Popov (Nano-Diamant). In diesem Überblick werden die Aktivitäten der beiden verbleibenden Gruppen hervorgehoben.

Der allgemeine Schwerpunkt von TP liegt auf der Realisierung und Untersuchung von Halbleiter-Nanostrukturen und verwandten nanoskopischen Materialien sowie deren Anwendung für neue photonische oder optoelektronische Strukturen und Bauelemente. Dies umfasst sowohl die Grundlagenforschung, z. B. zu neuen Materialien, quantenphysikalischen Phänomenen und Quantenoptik, als auch die angewandte Forschung, z. B. zu optoelektronischen Komponenten und integrierten Schaltkreisen

für Glasfaserkommunikationsnetze mit hoher Kapazität und Sensoranwendungen. Die Gruppe Technische Physik koordiniert auch das LOEWE-Projekt SMolBits, das sich mit einem neuen Ansatz für künftige potenzielle Quantencomputer befasst, die auf molekularen Quantenbits und einer nanophotonischen Festkörperplattform basieren.

In Abbildung 1 sind einige Bilder eines Rasterkraftmikroskops (AFM), eines Transmissionselektronenmikroskops (TEM) und eines Sekundärelektronenmikroskops (SEM) von Halbleiter-Quantenpunkt-Materialien und einem Laser mit verteilter Rückkopplung (DFB-Gitter) zu sehen. Der Querschnitt des Bauelements wurde durch fokussiertes Ionenstrahlätzen auf einer fertiggestellten Laserdiode hergestellt. Diese Bauelemente weisen eine ultraschmale Linienbreite und eine hohe Temperaturstabilität auf, was auf Quantenphänomene des nanoskaligen Materials zurückzuführen ist.

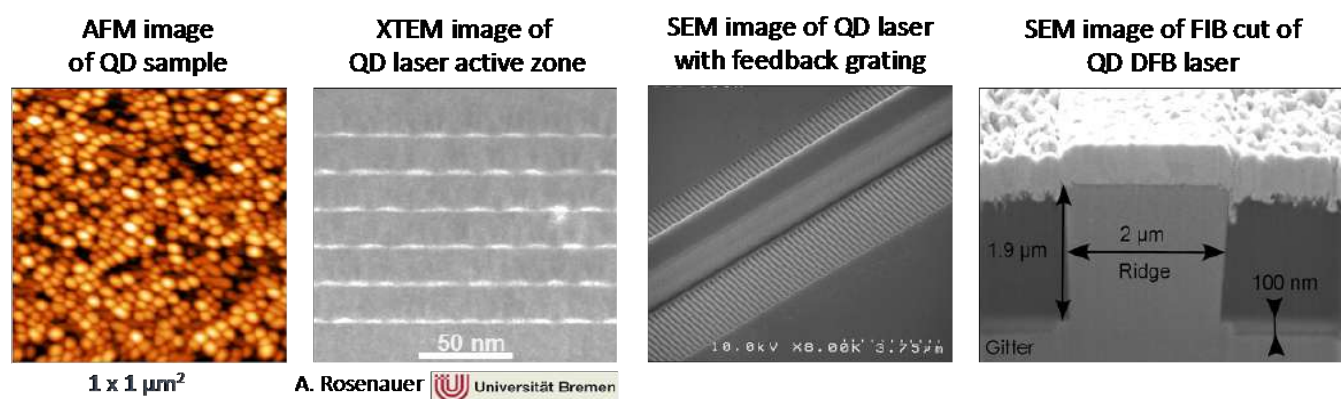


Abbildung 1: Bilder von Quantenpunkt(QP)-Material und QP-Lasern. Von links nach rechts: (a) AFM-Bild von InAs-QPs, die auf einer Halbleiteroberfläche gewachsen sind; (b) TEM-Querschnitt der aktiven Zone eines Lasers mit 6 QP-Schichten, die durch 20 nm dicke Barrieren getrennt sind; (c) REM-Bild eines Gitters erster Ordnung eines QP-DFB-Lasers; (d) Querschnitt senkrecht zum Wellenleiter eines vollständig bearbeiteten QP-Lasers mittels FIB. Die Tiefe der Gittergräben von 100 nm ist angegeben [1].

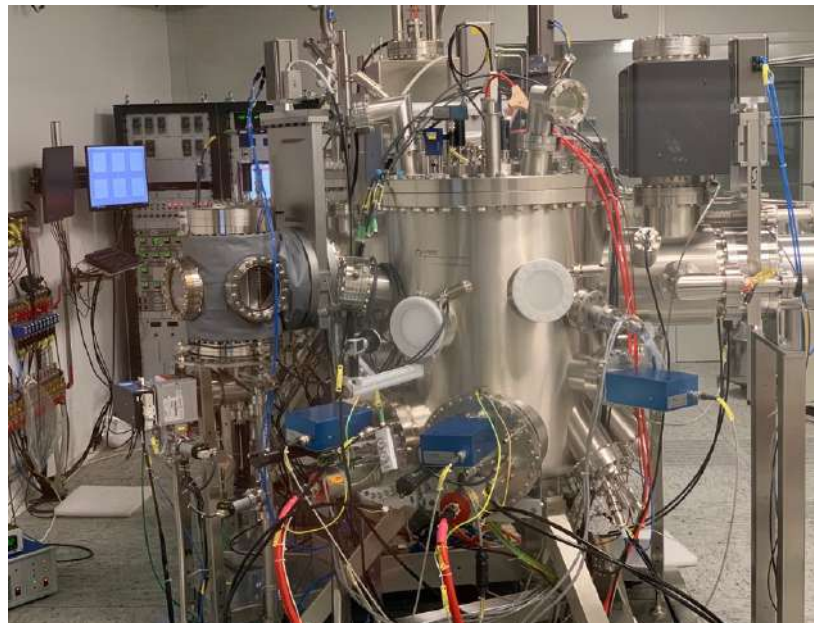
Figure 1: Images of quantum dot (QD) material and QD lasers. From left to right: (a) AFM image of InAs QDs grown on a semiconductor surface; (b) cross section TEM of the active zone of a laser with 6 QD layers separated by 20 nm thick barriers; (c) SEM image of a first order grating of a QD DFB laser; (d) crosscut perpendicular to the waveguide of a fully processed QD laser performed by FIB. The depth of the grating trenches of 100 nm is indicated [1].

Um die Fähigkeit zur Interaktion mit externen Partnern insbesondere auf dem Gebiet der auf Si integrierten Materialien der Gruppe III/V zu verbessern, konnte vor kurzem eine neue, von der DFG und der Universität finanzierte Epitaxieanlage (Investition von ca. 1,8 Mio. €) installiert werden (siehe Abbildung 2), die nun direkte Kooperationen mit Siliziumelektronik-Firmen und Forschungsinstituten durch die Bearbeitung von 8-Zoll-Si-Wafern ermöglicht. Diese Art von Ausrüstung ist für jedes Halbleiterforschungslabor, das mit Verbindungen der Gruppe III/V arbeitet, einzigartig, da typische GaAs- und InP-Wafer nur einen Durchmesser von 2 bis 4 Zoll haben. Diese neuen Möglichkeiten können die Einführung aktiver Materialien im Nanomaßstab in hochintegrierten optoelektronischen Schaltungen (OEICs) vorantreiben. Mehrere Projekte laufen bereits, und weitere Forschungsanwendungen sind in Vorbereitung.

Die neuen Fähigkeiten dieses neuen Systems werden auch die Untersuchung und Nutzung eines neuen nanostrukturierten Hybridmaterials ermöglichen, das auf potenziell optisch aktiven Verbindungshalbleitermaterialien basiert, die vollständig in eine Siliziummatrix eingebettet sind. Diese neue Materialkategorie kann für die künftige Integration optoelektronischer Funktionen in die Silizium-Photonik und -Elektronik von entscheidender Bedeutung sein. In Abbildung 3 ist die Vision einer neuen Integrationsplattform dargestellt, die die Kombination aktiver und passiver optischer Komponenten auf demselben Wafer ermöglicht. Abbildung 4 zeigt Transmissionselektronenmikroskop-Aufnahmen der vorläufigen Ergebnisse des Wachstums von InAs-Nanoclustern in einer defektfreien einkristallinen Siliziummatrix. Die InAs-Cluster sind vollständig entspannt. In einigen Fällen sind Kristalldefekte zu sehen (Abb. 4b), in anderen (Abb. 4c) ist der Cluster einkristallin und alle Defekte sind an der Grenzfläche lokalisiert.

Abbildung 2: Zweikammer-Epitaxieanlage mit einer Si/Ge- und einer Gruppe III/V-Kammer, die im Reinraum des INA installiert ist. Die Anlage kann mehrere 2- und 3-Zoll-Wafer sowie einzelne Wafer mit einem Durchmesser von bis zu 8 Zoll bearbeiten.

*Figure 2. Dual-chamber epitaxial system with a Si/Ge and a group III/V chamber installed in the clean room of INA. The system can handle multiple 2 and 3 inch as well as single wafers up to 8 inch in diameter.*



## Nanostructure Technology and Optoelectronic Applications

The Technical Physics (TP) at the Institute of Nanostructure Technology and Analytics (INA) consists of four sub-groups with the following sub-topics: Nano Optics, Nano Materials, Nano Fabrication & Devices and Nano Diamond.

Two of them are headed by further CINSaT members, i.e., Mohamed Benyoucef (Nano Optics) and Cyril Popov (Nano Diamond). In this overview, the activities of the two remaining groups are highlighted.

The general focus of TP is to realize and investigate semiconductor nanostructures and related nanoscopic materials as well as to apply them for new photonic or optoelectronic structures and components. This includes fundamental research on, e.g., new materials, quantum physical phenomena and quantum optics and rather applied research, such as

optoelectronic components and integrated circuits for high capacitance optical fiber communication networks and sensing applications. The Technical physics group is also coordinating the LOEWE project SMolBits dealing with a new approach for future potential quantum computing based on molecular quantum bits and a nanophotonic solid state platform.

In figure 1, some images are shown made by an atomic force microscope (AFM), a transmission electron microscope (TEM) and secondary electron microscope (SEM) of semiconductor quantum dot materials and a laser with a distributed feedback (DFB) grating. The cross section of the device was prepared by ion beam etching on a finalized laser diode. These devices show ultra-narrow linewidth and high temperature stability related to quantum phenomena of the nanoscale material.

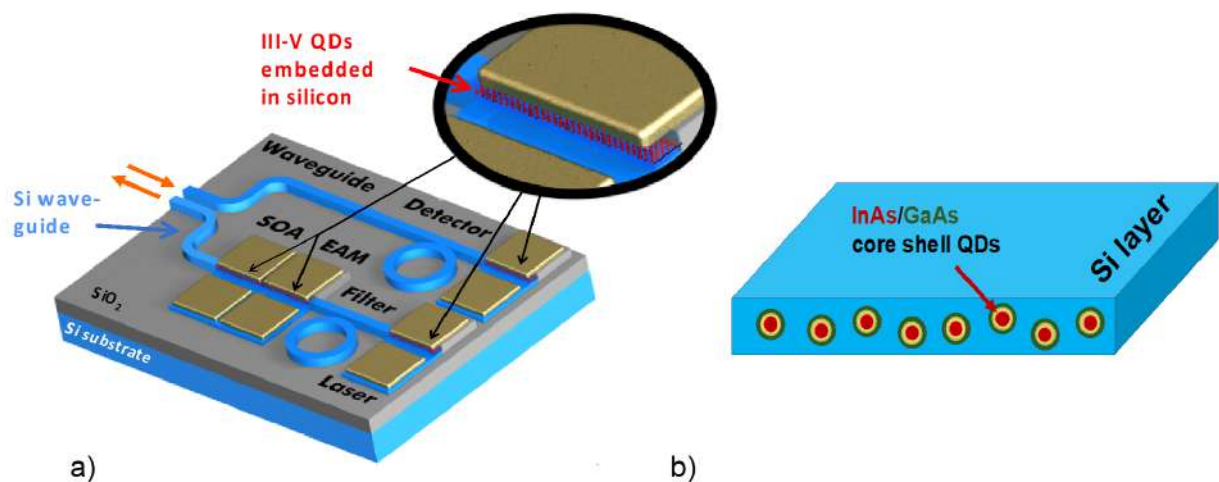


Abbildung 3. (a) Skizze der monolithischen Integration aktiver und passiver photonischer Bauelemente auf der neu vorgeschlagenen III-V/Si-Materialplattform mit eingebetteten III-V-QPs [2] (b) Illustration des aktiven Nanokompositmaterials mit eingebetteten Kern-Schale-QPs in planarem kristallinem Silizium.

Figure 3. (a) Sketch of monolithic integration of active and passive photonic devices on the newly proposed III-V / Si material platform with embedded III-V QDs [2] (b) Illustration of active nano compo-site material with embedded core-shell QDs in planar crystalline silicon.

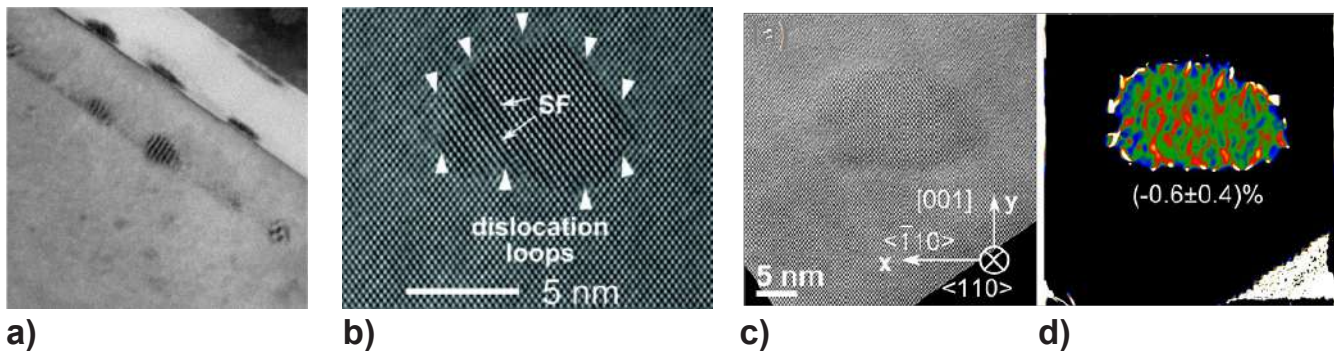


Abbildung 4: TEM-Bilder von in Silizium eingebetteten InAs-Nanokristallen. (a) Moiré-Muster, das defektfreie InAs-Cluster (markiert durch einen roten Kreis) zeigt, die vollständig in eine defektfreie Siliziummatrix eingebettet sind. Aufgrund der unterschiedlichen Gitterkonstanten zwischen InAs-Clustern und Silizium ist ein Interferenzeffekt der durchgelassenen Elektronen zu beobachten. Auf der Oberseite sind auch oberflächliche InAs-QPs sichtbar. (b) Sphärischer InAs-Cluster, umgeben von einer defektfreien Si-Matrix. Die Pfeile markieren die lokalisierten Versetzungsschleifen und einen Stapelfehler (SF) innerhalb des QPs. (c) Beispiel eines defektfreien InAs-Clusters, der vollständig in defektfreies Si eingebettet ist. (d) Dehnungsanalyse in x-Richtung desselben in c) gezeigten Clusters, die eine nahezu unverformte InAs-Bulk-Gitterkonstante zeigt (d. h. etwa 10 % Fehlanpassung an Si). Die TEM-Untersuchungen wurden vom Paul-Drude-Institut, Berlin, durchgeführt [3, 4].

Figure 4: TEM images of InAs nano crystals embedded in silicon. (a) Moiré pattern showing defect-free InAs cluster (marked by red circle) fully embedded in defect-free silicon matrix. Due to the different lattice constants between InAs cluster and silicon an interference effect of transmitted electrons can be observed. On top there are also surface InAs QDs visible. (b) Spherical InAs cluster surrounded by defect-free Si matrix. The arrows mark the localized dislocation loops and a stacking fault (SF) inside the QD. (c) Example of defect-free InAs cluster fully embedded in defect-free Si. (d) Strain analysis in x-direction of same cluster shown in c) showing nearly unstrained InAs bulk-like lattice constant (i.e., about 10 % mismatch to Si). TEM investigations were performed by Paul Drude Institute, Berlin [3, 4].

To improve the capability of the interaction with external partners in particular in the field of group III/V materials integrated on Si, a new epitaxial system, financed by DFG and the University (ca. 1.8 Mio € investment) could be recently installed (see figure 2), which allow now direct cooperations with silicon electronics foundries and research institutes by handling 8-inch Si wafers. This type of equipment is unique for any semiconductor research lab working on group III/V compounds, while typical GaAs and InP wafers have only diameters between 2 - 4 inch. These new capabilities may push the introduction of nanoscaled active materials in highly integrated optoelectronic circuits (OEICs). Several projects are already running, and further research applications are in preparation.

These new capabilities of this new system will also allow the investigation and exploitation of a new nanostructured hybrid material, which is based on potentially optically active compound semiconductor materials fully embedded in a silicon matrix. This new category of material can be for future integration of optoelectronic functionalities with silicon photonics & electronics a game changer. In figure 3, the vision of a new integration platform is illustrated, which allow the combination of active and passive optical components on the same wafer. In figure 4, transmission electron microscope images are shown of preliminary growth results of InAs nanoclusters in a defect-free single crystal silicon matrix. The InAs clusters are fully relaxed. In some cases, crystal failures are seen (Fig. 4b), in others (Fig. 4c) the cluster is single crystal and all defects are localized at the interface.





Abbildung 5: Gruppenbild beim internen Gruppenseminar in der Staatsdomäne Frankenhausen, September 2020. Aufgrund der COVID-19-Sicherheitsvorschriften waren große Abstände erforderlich.

Figure 5. Group picture at internal group seminar in the State Domain Frankenhausen, September 2020. Large spacing was needed due to the COVID-19 safety rules.

## Literatur / Literature

- [1] S. Bauer, V. Sichkovskyi, O. Eyal, T. Septon, A. Becker, I. Khanonkin, G. Eisenstein, J.P. Reithmaier, "1.5- $\mu\text{m}$  Indium Phosphide-Based Quantum Dot Lasers and Optical Amplifiers", IEEE Nanotechnology Magazine, 23 (April 2021).
- [2] J.P. Reithmaier and M. Benyoucef, "III-V on Si nanocomposites" in Silicon Photonics, edited by Sebastian Lourdudoss, Ray Chen, Chennupati Jagadish, Elsevier book series "Semiconductors and Semimetals", vol. 99 (2018), pp. 27-42, ISBN-13: 978-0128150993
- [3] M. Benyoucef, T. Alzoubi, J. P. Reithmaier, M. Wu, A. Trampert, "Nanostructured hybrid material based on highly mismatched III-V nanocrystals fully embedded in silicon", pss a 211, 817 (2014).
- [4] M. Wu, A. Trampert, T. Alzoubi, M. Benyoucef, J.P. Reithmaier, "Interface structure and strain state of InAs nano-clusters embedded in silicon", Acta Materialia 90, 133 (2015).

## Weiterführende Informationen / Further information

### Prof. Dr. Johann Peter Reithmaier

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Str. 40  
34132 Kassel  
INA - Raum 2110

Tel: +49 561 804-4430  
Fax: +49 561 804-4136  
Email: [jpreith@ina.uni-kassel.de](mailto:jpreith@ina.uni-kassel.de)  
Website: <https://www.uni-kassel.de/forschung/ina/technische-physik/forschung/nano-materials>



## Nanostrukturen und dünne Schichten aus Diamant für fortgeschrittene technologische Anwendungen

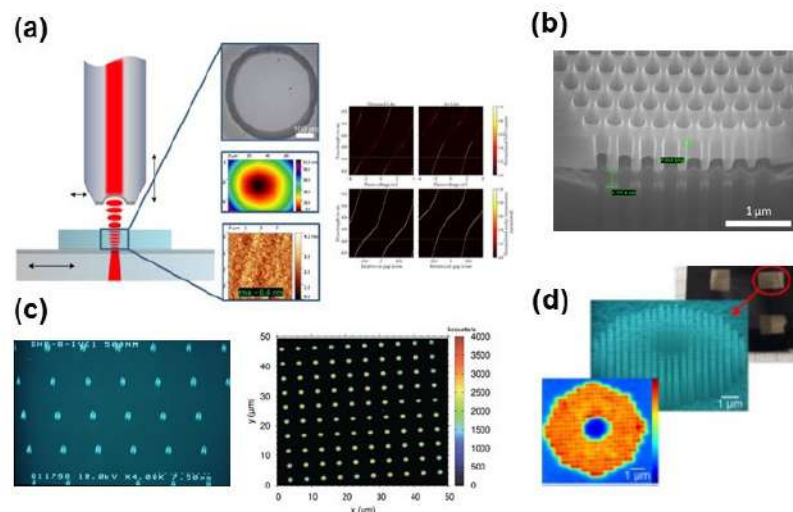
Diamant ist ein Material mit einer Reihe von hervorragenden mechanischen, optischen, elektrischen und chemischen Eigenschaften. Diese einzigartigen Eigenschaften werden in hohem Maße von Diamantfilmen mit verschiedenen Kristallinitäten übernommen, die auf Substrate unterschiedlicher Geometrie aufgetragen werden können. In den letzten zehn Jahren erregte Diamant zunehmend die Aufmerksamkeit der Wissenschaft aufgrund vielversprechender Eigenschaften von Farbzentren in dessen Kristallgitter wie z. B. das Stickstoff-Fehlstellen (NV) Zentrum und das Silizium-Fehlstellen (SiV) Zentrum, die Anwendung in der Quanteninformationstechnologie (QIT) oder der Quantensensorik im Nanometerbereich finden können. Eine entscheidende Komponente für viele QIT-Anwendungen ist eine effiziente, kohärente Spin-Photon-Schnittstelle. Um eine effiziente Auskopplung aus der Null-Phononen-Linie (ZPL) der Farbzentren zu erreichen und die Effizienz der Photonenerfassung zu verbessern, können verschiedene lichtbegrenzende Architekturen wie Fabry-Pérot-Mikrokavitäten, Nanosäulen oder photonische Kristallkavitäten verwendet werden. Diese sollten auf dünnen einkristallinen Diamantmembranen (SCD) hergestellt werden, die nicht nur hinsichtlich der Ähnlichkeit zum Bulkmaterial, sondern auch bezüglich der Oberfläche eine gute Qualität aufweisen. Um solche mikrometerdünnen SCD-Membranen zu strukturieren, ist es wichtig, die durch Polier- oder Ätzverfahren verursachten



Defekte zu minimieren und das Ausgangsmaterial richtig vorzubereiten. Wir haben SCD-Membranen mit verschiedenen Durchmessern hergestellt, die eine geringe Oberflächenrauigkeit von bis zu 0,4 nm auf einer kleinen Fläche ( $4 \times 4$  bzw.  $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ ) aufweisen, indem wir durch eine Diamantmaske mit abgewinkelten Löchern geätzt haben. Eine signifikante Verringerung der durch Mikromaskierung- und Polierschäden verursachten Ätzlöcher wurde durch die Anwendung von abwechselnden  $\text{Ar}/\text{Cl}_2 + \text{O}_2$ -Trockenätzschritten erreicht. Das erfolgreiche Bonden einer SCD-Membran über van-der-Waals-Kräfte auf einem Dielektrischen Spiegel und Finessemessungen, die je nach Position und damit Membrandicke Werte zwischen 500 und 5000 ergaben, wurden demonstriert (Abb. 1 (a)). Weiterhin wurden 2D photonische Kristalle in den SCD-Membranen durch Elektronenstrahlolithographie (EBL) und induktiv gekoppeltes Plasma reaktives Ionenätzen (ICP-RIE) mittels einer  $\text{SiO}_2$ -Hartmaske strukturiert (Abb. 1 (b)). Die Eigenschaften der photonischen Kristalle wurden vor dem Herstellungsprozess für verschiedene Designs und Farbzentren simuliert.

Abbildung 1: (a) Messungen von Diamantmembranen mit geringer Oberflächenrauheit in faserbasierten Fabry-Pérot-Mikrokavitäten; (2) 2D-Photonische Kristalle in Diamantmembranen; (c) Anordnung von NCD-Nanosäulen und Fluoreszenzkartierung; (d) Dichte Anordnung von Nanosäulen in NCD-Membranen und Fluoreszenz von eingebauten SiV-Zentren.

Figure 1: (a) Measurements of diamond membranes with low surface roughness in fiber-based Fabry-Pérot microcavity; (2) 2D photonic crystals in diamond membrane; (c) Array of NCD nanopillars and fluorescence map; (d) Dense array of nanopillars in NCD membrane and fluorescence from incorporated SiV centers.



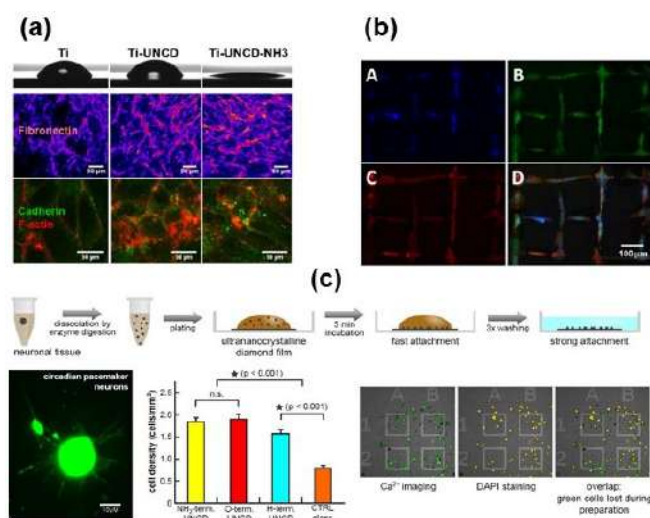


Abbildung 2: (a) Erhöhte Anzahl von Proteinen in Osteoblastenzellen, die an den Zell-ECM-Oberflächen-Interaktionen auf UNCD-beschichtetem Ti beteiligt sind; (b) Gezielte Anheftung und Ausbreitung von Neuroblastomzellen auf UNCD mit strukturierter, modifizierter Oberfläche; (c) Modifiziertes Protokoll für die Präparation primärer zirkadianer Schrittmachenneuronen von Insekten, ihre Dichte auf UNCD mit verschiedenen Terminierungen und Beobachtung eines geringeren Neuronenverlusts und einer starken Zellanheftung auf UNCD mit O-Terminierung.

Figure 2: (a) Increased abundance of proteins in osteoblast cells involved in the cell-ECM-surface interactions on UNCD coated Ti; (b) Directed attachment and proliferation of neuroblastoma cells on UNCD with patterned surface termination, (c) Modified protocol for preparation of primary insect circadian pacemaker neurons, their density on UNCD with different terminations and observation of reduced neuron loss and strong cell attachment on O-terminated UNCD surface.

Wir demonstrierten auch die Herstellung von Nanosäulen mit Durchmessern von bis zu 50 nm in nanokristallinen Diamantfilmen (NCD) und einkristallinem Diamant mittels EBL und ICP-RIE mit Sauerstoff (Abb. 1 (c)). NV-Farbzentren wurden in die Diamant-Nanosäulen durch Einführung von Stickstoff in der Gasphase während des Wachstums des NCD-Films vor der Strukturierung oder durch Ionenimplantation in monokristallinen Diamant nach der Strukturierung eingebaut. Für die Entstehung von SiV-Zentren wird ein kurzer Überwachungsprozess von bereits strukturierten Nanosäulen, welche aus dem Substrat

geätzte Si-Atome enthalten, angewandt. Um die Photonenstreuung an der rauen NCD-Oberfläche zu reduzieren, haben wir eine Planarisierungstechnik entwickelt, welche die Oberflächenrauigkeit deutlich verringert. Darüber hinaus demonstrieren wir die Herstellung von dichten Anordnungen von Nanosäulen in NCD-Membranen (Abb. 1 (d)). Sie wurden während des Diamantwachstums mit SiV-Zentren versehen. Die oben genannten Arbeiten, welche durch mehrere Projekte des BMBF und der Volkswagenstiftung finanziell unterstützt wurden, tragen zu zwei der CINSaT-Schwerpunkte bei, nämlich Photonik und Quantentechnologie.

Aufgrund seiner Biokompatibilität, seines großen elektrochemischen Potenzialfensters und seiner hohen chemischen Stabilität ist Diamant ein idealer Kandidat für biomedizinische und biotechnologische Anwendungen wie Beschichtungen von Prothesen und medizinischen Instrumenten, Plattformen für Biosensoren und DNA-Chips und viele andere. In einer Reihe von Projekten, die von dem DFG, dem DAAD, der Universität Kassel und CINSaT finanziert wurden, haben wir ultrananokristalline Diamantschichten (UNCD) für verschiedene Bioanwendungen eingesetzt. Bei diesen müssen die Oberflächeneigenschaften des Diamanten maßgeschneidert werden aufgrund der direkten Interaktion der Oberfläche mit Zellen, Proteinen, RNA oder DNA. In einem ersten Schritt werden die Oberflächen modifiziert, um die Benetzbarkeit, Oberflächenchemie, Energie und die Leitfähigkeit zu verändern. Dazu gehören Plasmaprozesse mit O<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub> und CHF<sub>3</sub> sowie eine UV/Ozon-Behandlung. Die gewachsenen und modifizierten UNCD Schichten weisen relativ glatte Oberflächen auf, deren Topografie von abgerundeten Merkmalen geprägt ist. Die Oberflächen mit Sauerstoff- oder Amino-Endgruppen sind stark hydrophil, während die mit Fluor-Endgruppen stark hydrophob sind. Anhand von gewachsenen und modifizierten UNCD-Proben wurden die Reaktionen menschlicher Osteoblastenzellen auf Oberflächen mit verschiedenen Terminierungen mittels Proteomanalyse untersucht. Die Ergebnisse zeigten, dass sowohl die Beschichtung von Ti mit UNCD als auch die Plasmamodifikationen, die zu O- oder NH<sub>2</sub>-terminierten UNCD führen, eine Hochregulierung von Proteinen induzieren, die für das Zytoskelett, die Zellmembran und die extrazelluläre Matrix (ECM) spezifisch sind und an den Zell-ECM-Oberflächen-Interaktionen beteiligt sind. Proteine aus jeder dieser Gruppen, nämlich Vimentin, Cadherin und Fibronectin, wurden weiter immunzytochemisch untersucht, und die

Ergebnisse bestätigten, dass ihre erhöhte Abundanz zu einer verbesserten Zell-Oberflächen-Adhäsion und Zell-Zell-Interaktionen führt (Abb. 2 (a)). Diese Ergebnisse belegen das Potenzial der Implantatbeschichtung mit UNCD und ihrer Oberflächenmodifikationen für eine bessere Osseointegration und Knochenbildung.

Die Oberflächenstrukturierung eines Biomaterials, d. h. die Anordnung von Bereichen mit unterschiedlicher Oberflächenchemie nebeneinander, ist ein wichtiger Schritt für verschiedene biomedizinische und biotechnologische Anwendungen, z. B. in der Biosensorik, beim Wirkstoffscreening oder bei der Gewebeentwicklung. Um einen hohen Benetzungskontrast in den benachbarten Bereichen zu erreichen, wurden O- und F-Terminierungen auf der UNCD-Oberfläche mit einer Gold-Hartmaske hergestellt, die photolithographisch strukturiert und in Form eines Gitters nassgeätzt wurde. Die Ergebnisse der Strukturierung wurden mit Hilfe der Rasterelektronenmikroskopie analysiert, wobei unterschiedliche Kontraste in den Bereichen mit verschiedenen Modifikationen erkennbar waren. Menschliche Neuroblastomzellen wurden auf die strukturierten UNCD-Oberflächen aufgebracht und wuchsen bevorzugt auf dem hydrophilen Gitter (Abb. 2 (b)).

Die Wechselwirkungen von zirkadianen Schrittmachern von Insekten mit UNCD-Oberflächen mit H-, O- und NH<sub>2</sub>-Terminierungen wurden auch im Hinblick auf Zelldichte und Lebensfähigkeit untersucht. Die schnelle und starke Anhaftung, die ohne Anwendung von Adhäsionsproteinen erreicht wurde, ermöglichte eine vorteilhafte Modifizierung von Dispersionsprotokollen für die Vorbereitung von Primärzellkulturen. Die verbesserte Anhaftung der Neuronen, insbesondere auf den modifizierten UNCD-Oberflächen, war besonders vorteilhaft für die immunzytochemischen Verfahren mit den Zellkulturen. Die Zellverluste während der Waschschrte wurden im Vergleich zu den Kontrollen deutlich um eine Größenordnung reduziert. Die Integration einer Titangitterstruktur unter den UNCD-Filmen ermöglichte zudem die individuelle Zuordnung von physiologisch charakterisierten Neuronen zu immunzytochemisch gefärbten Zellen (Abb. 2 (c)). Die schnelle und starke Anheftung der Neuronen wurde auf eine günstige Kombination von Topographie, Oberflächenchemie und Benetzbarkeit zurückgeführt.

---

## ***Diamond nanostructures and thin films for advanced technological applications***

*Diamond is material with a number of outstanding mechanical, optical, electrical and chemical properties. These excellent properties are inherited to a great extent by diamond films with various crystallinities which can be coated on substrates with different sizes and shapes. In the last decade diamond has additionally attracted the attention of scientists due to the promising properties of the color centers in its crystal lattice, such as the nitrogen-vacancy (NV) and the silicon-vacancy (SiV) centers, which can find applications in quantum information technology (QIT) or quantum sensing on nanometer scale. A crucial component for many QIT applications is an efficient, coherent spin-photon interface. In order to yield an efficient outcoupling from the zero-phonon line (ZPL) of the color centers and improve the photon collection efficiency, various light-confining architectures can be used like Fabry-Pérot microcavities, nanopillars or photonic crystal cavities. They*

*should be fabricated on thin single-crystal diamond (SCD) membranes with a good quality regarding not only the bulk material, but also the surface. To structure such micrometer thin SCD membranes, it is important to minimize the defects originating from polishing or etching procedures and properly prepare the starting material. We fabricated SCD membranes with various diameters, exhibiting a low surface roughness down to 0.4 nm on a small area scale, by etching through a diamond bulk mask with angled holes. A significant reduction of pits induced by micro-masking and polishing damages was accomplished by the application of alternating Ar/Cl<sub>2</sub>+O<sub>2</sub> dry etching steps. Successful bonding of a SCD membrane via van der Waals forces on a cavity mirror and finesse measurements which yielded values between 500 and 5000, depending on the position and hence on the membrane thickness were demonstrated (Fig. 1 (a)). Furthermore, 2D photonic crystals were*



structured in the SCD membranes by electron beam lithography (EBL) and inductively coupled plasma reactive ion etching (ICP-RIE) with SiO<sub>2</sub> hard mask (Fig. 1 (b)). The properties of the photonic crystals were simulated for different cavity designs and color centers prior to the fabrication process.

We demonstrated also the fabrication of nanopillars with diameters down to 50 nm in nanocrystalline diamond (NCD) films and monocrystalline diamond by EBL and ICP-RIE with oxygen (Fig. 1 (c)). NV color centers were incorporated in the diamond nanopillars by introduction of nitrogen in the gas phase during the growth of the NCD film before or by ion implantation in monocrystalline diamond prior the structuring, the SiV centers by short overgrowth of already structured nanopillars incorporating Si atoms etched from the substrate. In order to reduce the photon scattering from the rough NCD surface we developed a planarization technique which significantly reduced the surface roughness. Furthermore, we demonstrate the fabrication of dense arrays of nanopillars in NCD membranes (Fig. 1 (d)). They were incorporated with SiV centers during the diamond growth. The above mentioned work financially supported by several BMBF and Volkswagen Foundation projects contributes to two of CINSaT focal points, namely Photonics and Quantum Technology.

Due to its biocompatibility, large electro-chemical potential window and high chemical stability diamond is an ideal candidate for biomedical and biotechnological applications like coatings of prosthesis and medical tools, platforms for biosensors and DNA-chips, and many others. In a number of projects financed by DFG, DAAD, University of Kassel and CINSaT we applied ultrananocrystalline diamond (UNCD) films for diverse bio-applications in which the diamond surface properties should be tailored since the surface interacts directly with cells, proteins, RNA or DNA. The initial step includes surface modification to change the wettability, surface chemistry, energy and conductivity including plasma processes with O<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub> and CHF<sub>3</sub> and UV/ozone treatment. The as-grown and modified UNCD exhibit relatively smooth surfaces with topography dominated by rounded features. The oxygen- or amino-terminated surfaces are strongly hydrophilic, the fluorine terminated ones strong hydrophobic. As-grown and modified UNCD samples were applied to study the responses of human osteoblast cells triggered by surfaces with various terminations assessed by

proteomic analysis. The results revealed that the coating of Ti with UNCD as well as the plasma modifications resulting in O- or NH<sub>2</sub>-terminated UNCD induced upregulation of proteins specific for cytoskeleton, cell membrane, and extracellular matrix (ECM) involved in the cell-ECM-surface interactions. Proteins from each of these groups, namely, vimentin, cadherin and fibronectin were further studied immunocytochemically and the results confirmed their increased abundance leading to improved cell-to-surface adhesion and cell-to-cell interactions (Fig. 2 (a)). These findings demonstrate the potential of implant coating with UNCD and its surface modifications for better osseointegration and bone formation.

The surface patterning of a biomaterial, i.e. placing areas with different surface chemistries next to each other is an important step for various biomedical and biotechnological applications, e.g. in biosensor technology, drug screening or tissue engineering. In order to achieve a high wettability contrast in the neighboring areas O- and F-terminations were achieved on UNCD surface applying a gold hard mask photolithographically structured and wet etched in form of a grid. The results of the patterning of the surface termination were visualized by scanning electron microscopy revealing different contrasts of the areas with different terminations. Human neuroblastoma cells were plated on the patterned UNCD surfaces and they exhibited preferential attachment and growth on the hydrophilic grid (Fig. 2 (b)).

The interactions of insect circadian pacemaker neurons with UNCD surfaces with H-, O- and NH<sub>2</sub>-terminations were also investigated with respect to cell density and viability. The fast and strong attachment achieved without application of adhesion proteins allowed for advantageous modification of dispersion protocols for the preparation of primary cell cultures. The enhanced attachment of the neurons, especially on the modified UNCD surfaces, was especially advantageous for the immunocytochemical procedures with the cell cultures. The cell losses during washing steps were significantly reduced by one order of magnitude in comparison to controls. In addition, the integration of a titanium grid structure under the UNCD films allowed for individual assignment of physiologically characterized neurons to immunocytochemically stained cells (Fig. 2 (c)). The fast and strong attachment of neurons was attributed to a favorable combination of topography, surface chemistry and wettability.

## Weiterführende Informationen / *Further information*

### apl. Prof. Dr. Cyril Popov

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Strasse 40  
34132 Kassel  
INA - Raum 2115

Tel: +49 561 804-4205  
Fax: +49 561 804-4136  
Email: [popov@ina.uni-kassel.de](mailto:popov@ina.uni-kassel.de)  
Website: <https://www.uni-kassel.de/forschung/ina/technische-physik/forschung/nano-diamond>



### Priv.-Doz. Dr. M. Benyoucef

## Quanten-Nano-Photonik

Wir verfügen über langjährige Erfahrung in Experimentalphysik, optischer Spektroskopie, Quantenoptik, Nanophotonik, epitaktischem Wachstum niederdimensionaler Quantenstrukturen und Herstellung neuartiger Quantenarchitekturen für Quanteninformationsanwendungen. Darüber hinaus verfügen wir über mehrjährige Erfahrung im Bereich der optischen Untersuchung von niederdimensional photonischen Nanostrukturen mit verschiedenen spektroskopischen Techniken wie  $\mu$ -Photolumineszenz ( $\mu$ PL), zeitaufgelöster PL und Photonenkorrelationsspektroskopie. Meine Forschungsgruppe beschäftigt sich mit zwei Forschungsschwerpunkten: (a) Festkörper-Quantensysteme für die Quantenkommunikation und (b) Molekulare Quantensysteme für Quantencomputing-Anwendungen.

Das Forschungsthema (a) konzentriert sich auf die Entwicklung neuartiger und fortschrittlicher Quantenarchitekturen, die auf Silizium-, GaAs- und InP-Substraten unter Verwendung eines Bottom-up-Ansatzes hergestellt werden, der auf dem Wachstum von selbstorganisierten Quantenpunkten (QPkten) durch Molekularstrahlepitaxie basiert. Die hergestellten Nanostrukturen emittieren bei verschiedenen Wellenlängen, einschließlich der Telekommunikationswellenlängen. Wir untersuchen ihre spezifischen Aspekte der Quantenoptik. Die erste gilt als eine der Schlüsseltechnologien, die das Beste aus beiden Materialien (III-

V und Si) kombiniert, was zu einer äußerst vielseitigen hybriden Photonik-Plattform führt, die den Weg für eine groß angelegte photonische Integration ebnet. Dies könnte eine direkte Kombination von Photonik und Elektronik auf demselben Chip ermöglichen. Letzteres könnte die Implementierung effizienter Einzelphotonenquellen mit Telekommunikationswellenlänge und verschränkter Photonen für Quanteninformationen über große Entfernungen ermöglichen. (siehe Abb.1)

Das Forschungsthema (b) beschäftigt sich mit molekularen Quantensystemen, die im Rahmen des aktuell geförderten Verbundschwerpunktprojektes LOEWE-SMolBits entwickelt werden. Unsere Arbeit erfolgt in enger Zusammenarbeit mit mehreren Gruppen aus drei Disziplinen (Physik, Chemie und Elektrotechnik). Das Hauptziel besteht darin, Quantensysteme zu realisieren, die als Schlüsselbausteine für skalierbare Quantensysteme verwendet werden können. Das SMolBits-Projekt besteht aus 7 Projektbereichen und die Gruppe Nano Optics leitet zwei davon. Die erste ist „B1-Spektroskopie



immobilisierter Moleküle“, die sich auf die optische Untersuchung immobilisierter Moleküle konzentriert und die Photonenstatistik des von einzelnen Molekülen emittierten Lichts untersucht. Die zweite ist „C-Integration in Photonic Chip“. Das Ziel dieses Projektbereichs ist die Erforschung des Potenzials von molekularbasierten Quantensystemen, deren Quantenübergänge im Wesentlichen nicht unterscheidbar sind, und die Untersuchung von optisch gekoppelten, räumlich getrennten Einzelmolekülen auf dem Chip (siehe Abb. 2).

Parallel dazu hat die Gruppe Geräte mit kontrollierten Dotierungsniveaus für Spinmanipulation und Quantenspeicher entwickelt. Meine Gruppe verwendet auch den Top-Down-Ansatz, um photonische Halbleiterstrukturen mit hochauflösender Elektronenstrahlolithographie herzustellen und die grundlegenden, strukturellen und quantenoptischen Eigenschaften der neuen Quantennanostrukturen zu untersuchen. Wir arbeiten auch an der Integration von III-V-Halbleiterlichtquellen mit Silizium und der Herstellung von Mikrokavitäten (z.B. photonischen Kristallen) mit eingebettetem Quantenemitter, die neue Perspektiven in der Photonik und Quanteninformationstechnologie eröffnen (siehe Abb. 3).

Meine Gruppe ist aktiv an mehreren Projekten im Bereich Quantentechnologien beteiligt und derzeit bin ich Principal Investigator (PI) mehrerer Projekte (BMBF, LOEWE, DFG). So gehört die Gruppe beispielsweise zu den 38 Partnern, die sich kürzlich an einem nationalen großen BMBF-Quantenrepeater.Link (QR.X)-Netzwerk beteiligt haben, um die Schlüsseltechnologie der Quantenrepeater für die Quantenkommunikation über große Entfernungen zu erforschen. Unsere Forschung ist auf dem Gebiet der Quantenkommunikation international anerkannt und meine Gruppe ist führend in der Herstellung von Einphotonenquellen mit Telekommunikationswellenlänge. Darüber hinaus kooperiere ich mit vielen weltweit führenden Gruppen in der Quantenphotonik und Quantenkommunikation.

Die hergestellten photonischen Strukturen werden durch verschiedene Methoden charakterisiert, einige davon in Zusammenarbeit mit unseren Projektpartnern: Rasterkraftmikroskopie (AFM), Photolumineszenz- (PL), Korrelationsmessungen, Faserkopplung und Quantenoptik-Experimente (TU Berlin, Uni. Stuttgart), Spinmanipulation (TU Dortmund, TU München), Photostromspektroskopie (Uni. Paderborn), Transmissionselektronen-mikroskopie (TEM) Messungen und Atomistic Tight-Binding (TB) Berechnung (Uni. Bremen).

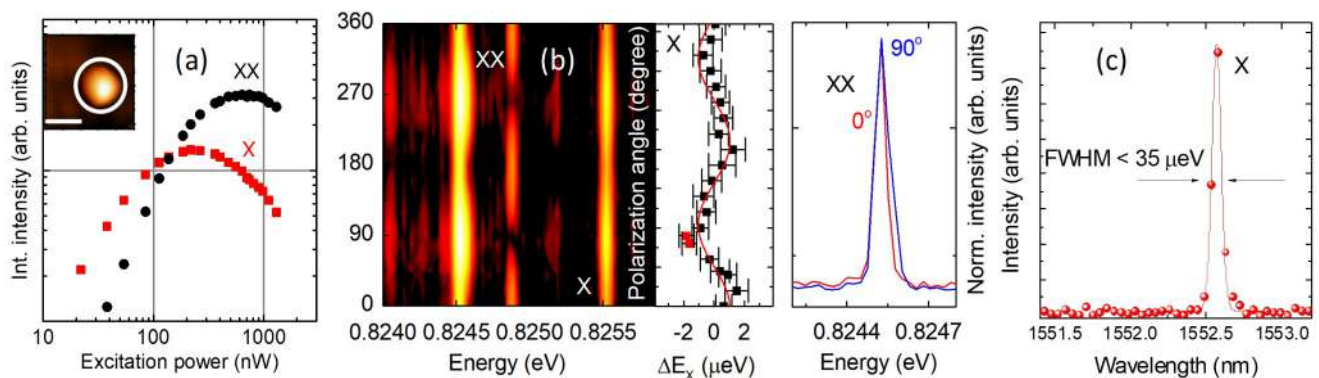


Abbildung 1: (a) Integrierte PL-Intensität in Abhängigkeit von der Anregungsleistung für die Exziton- und Biexzitonlinien. (b) Polarisationsabhängige Messungen, die auf eine verschwindende Feinstrukturaufspaltung hinweisen. (c) Auflösungsbegrenzte exzitonische Emissionslinie im C-Band der Telekommunikation.

Figure 1: (a) Integrated PL intensity vs. excitation power for the exciton and biexciton lines. (b) Polarization dependent measurements, indicating a vanishing fine-structure splitting. (c) Resolution-limited excitonic emission line in the telecom C-band.

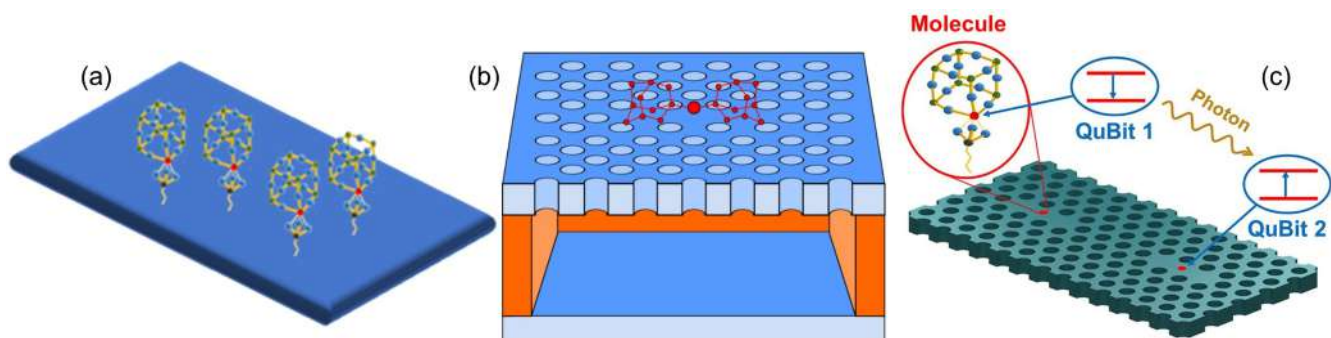


Abbildung 2: (a) Immobilisierte Moleküle auf Oberflächen. (b) Lokalisierung von Einzelmolekülen in PhC-Hohlräumen. (d) Optisch gekoppelte Einzelmoleküle auf dem Chip (aus dem SMolBits-Projekt).

Figure 2: (a) Immobilized molecules on surfaces. (b) Localization of single molecules in PhC cavities. (d) On-Chip optically coupled single molecules (from SMolBits project).

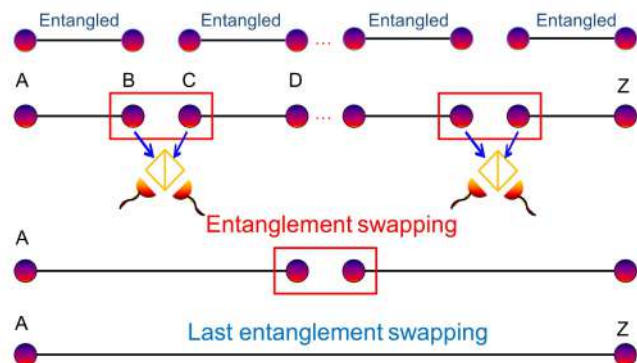
Wir haben zum ersten Mal erfolgreich hochwertige photonische C-Band-Telekommunikationsstrukturen mit hohen Qualitätsfaktoren für On-Chip-Einzelphotonenquellenanwendungen entwickelt. PhC auf InP-Basis mit eingebetteten QPkten wurden unter Verwendung von Elektronenstrahlolithographie, reaktiven Ionenätzen mit induktiv gekoppeltem Plasma und Nassätztechniken hergestellt. Darüber hinaus konnte die Lichtemission von QPkten durch Integration der QPkten auf verteilten Bragg-Reflektoren (DBR) und mit 40-facher Verstärkung durch Einbetten der QPkten in PhC-Mikrokavitäten um mehr als eine Größenordnung gesteigert werden (siehe Abb.4).

Es wurde ein hochqualitativer C-Band-Einzelphotonenemitter für die Telekommunikation realisiert, der ein Schlüsselement für die Quantenkommunikation über große Entfernungen auf der

Grundlage von Quantenrepeatern ist (Abb. 5(a)). Wir haben auch Pin-Dioden-Strukturen mit integrierten QPkten realisiert. Hochauflösende resonante Photostrom-spektroskopie durchgeführt in Zusammenarbeit mit Uni. Paderborn zeigt Rabi-Oszillationen wie in Abb. 5(b) dargestellt. Wir ermöglichten die Realisierung von Schottky-Dioden-Strukturen mit Delta-Dotierung und eingebetteten QPkten. In Zusammenarbeit mit der TU Dortmund wurden Tieftemperatur-Pump-Probe-Messungen im Magnetfeld durchgeführt. Die gemessenen Elektronen- und Loch-g-Faktoren sind in Fig. 5(c) gezeigt. Mit einem Core-in-a-Ansatz haben wir erstmals helle Lichtemission mit schmalen, spektralen Linienbreiten von einzelnen QPkten realisiert, die direkt auf Siliziumsubstraten gewachsen sind, und präsentieren einen experimentellen Ansatz für das erfolgreiche Wachstum direkter Bandlücken Verbindungshalbleiter auf Siliziumsubstraten.

Abbildung 3: Faserbasierte Quantenverstärker für die Quantenkommunikation über große Entfernungen

Figure 3: Fiber-based quantum repeaters for long-distance quantum communication





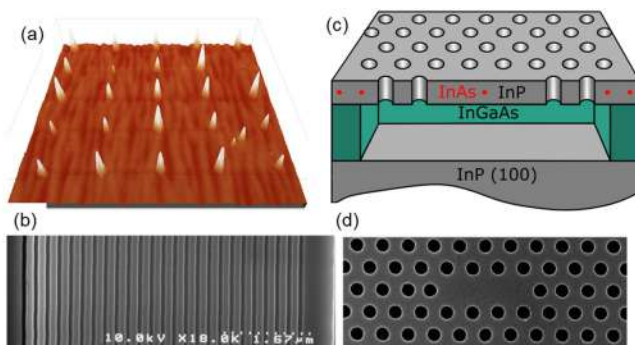


Abbildung 4: Ortskontrollierte Quantenpunkte. (b) QDs, die auf einem verteilten Bragg-Reflektor gewachsen sind. (c) Schema der L3 photonischen Kristallmikrokavität (PhC) mit eingebetteten QDs und (d) REM-Bild der L3 PhC.

Figure 4: Site-controlled quantum dots. (b) QDs grown on top of a distributed Bragg reflector. (c) Schematic of L3 photonic crystal microcavity (PhC) with embedded QDs and (d) SEM image of L3 PhC.

## Quantum Nano Photonics

We have many years' experience in experimental physics, optical spectroscopy, quantum optics, nanophotonics, epitaxial growth of low dimensional quantum structures, and fabrication of novel quantum architectures for quantum information applications. We have also several years' experience in optical investigations of low-dimensional photonic nanostructures using various spectroscopic techniques such as  $\mu$ -photoluminescence ( $\mu$ PL), time-resolved PL, and photon correlation spectroscopy. My research group is dealing with two main research topics: (a) Solid-state quantum systems for quantum communication and (b) Molecular quantum systems for quantum computing applications.

The research topic (a) focuses on the development of novel and advanced quantum architectures fabricated on silicon, GaAs, and InP substrates using a bottom-up approach based on the self-assembled growth of quantum dots (QDs) by molecular beam epitaxy. The fabricated nanostructures emit at different wavelengths, including telecommunications wavelengths. We also study their specific aspects of quantum optics. The first is considered as one of the key technologies combining the best of both materials (III-V and Si) leading to a highly versatile hybrid photonics platform, which opens the way to large-scale photonic integration; this could allow a direct combination of photonics and electronics on the same chip. The latter could allow the implementation of efficient telecom wavelength single-photon sources and entangled photons for long-distance quantum information. (see Fig. 1)

The research topic (b) deals with molecular quantum systems, which will be developed in the framework of currently funded collaborative priority project LOEWE-SMolBits. Our work is performed in close collaboration with several groups from three disciplines (physics, chemistry, and electrical engineering). The main objective is to realize quantum systems that can be used as key building blocks for scalable quantum systems. The SMolBits project consists of 7 project areas and the Nano Optics group is leading two of them. The first one is "B1- Spectroscopy of immobilized molecules", which focuses on the optical investigation of immobilized molecules and study the photon statistics of the light emitted from single molecules. The second is "C-Integration in Photonic Chip". The goal of this project area is to explore the potential of molecular-based quantum systems whose quantum transitions are essentially indistinguishable, and investigation of on-chip optically coupled spatially separated single molecules (See Fig. 2).

In parallel, the group has developed devices with controlled doping levels for spin manipulation and quantum memory. My group also uses the top-down approach to fabricate semiconductor photonic structures using high-resolution electron beam lithography and study the fundamental structural and quantum optical properties of the new quantum nanostructures. We are also working on the integration of III-V semiconductor light sources with silicon and the production of microcavities (e.g., photonic crystals) with embedded quantum emitters, which open up new perspectives in photonics and quantum information technology.

My group is actively involved in several projects in quantum technologies, and I am currently a principal investigator (PI) of several projects (BMBF, LOEWE, DFG). As an example, the group is among the 38 partners who have been recently involved in a national large BMBF-Quantenrepeater.Link (QR.X) network to explore the key technology of quantum repeaters for long-distance quantum communication. Our research has been internationally recognized in the field of quantum communication and my group is leading in the fabrication of telecom wavelength single-photon sources. Furthermore, we have collaborations with many world-leading groups in quantum photonics and quantum communication (see Fig. 3).

The fabricated photonic structures are characterized by different methods some of which are in collaboration with our project partners such as atomic force microscopy (AFM), photoluminescence (PL), correlation measurements, fibre coupling and quantum optics experiments (TU Berlin, Uni. Stuttgart), spin manipulation (TU Dortmund, TU Munich), photocurrent spectroscopy (Uni. Paderborn), transmission electron microscopy (TEM) measurements and atomistic tight-binding (TB) calculation (Uni. Bremen).

We have successfully developed high-quality telecom C-band photonic structures with high-quality factors for the first time for

on-chip single-photon source applications. The InP-based PhC microcavities embedded with QDs have been fabricated using electron beam lithography, inductively coupled plasma reactive ion etching and wet etching techniques. Furthermore, light emission from QDs could be increased by more than an order of magnitude by integrating the QDs on distributed Bragg reflector (DBR) and with 40 times enhancement by embedding the QDs in PhC microcavities (see Fig.4).

High quality telecom C-band single-photon emitter has been realized, which is a key element for long-distance quantum communication based on quantum repeaters (Fig. 5(a)). We have also realized pin-diode structures with integrated QDs. High-resolution resonant photocurrent spectroscopy performed in collaboration with Uni. Paderborn reveals Rabi oscillations as displayed in Fig. 5(b). We have also realized Schottky-diode structures with delta-doping and embedded QDs. Low temperature pump-probe measurements in magnetic field have been performed in collaboration with TU Dortmund. The measured electron and hole g-factors are shown in Fig. 5(c). Using a core-in-a-shell III-V QD approach, we have realized for the first-time bright light emission with narrow spectral linewidths from single QDs grown directly on silicon substrates and present an experimental approach for the successful growth of direct bandgap compound semiconductors on silicon substrates.

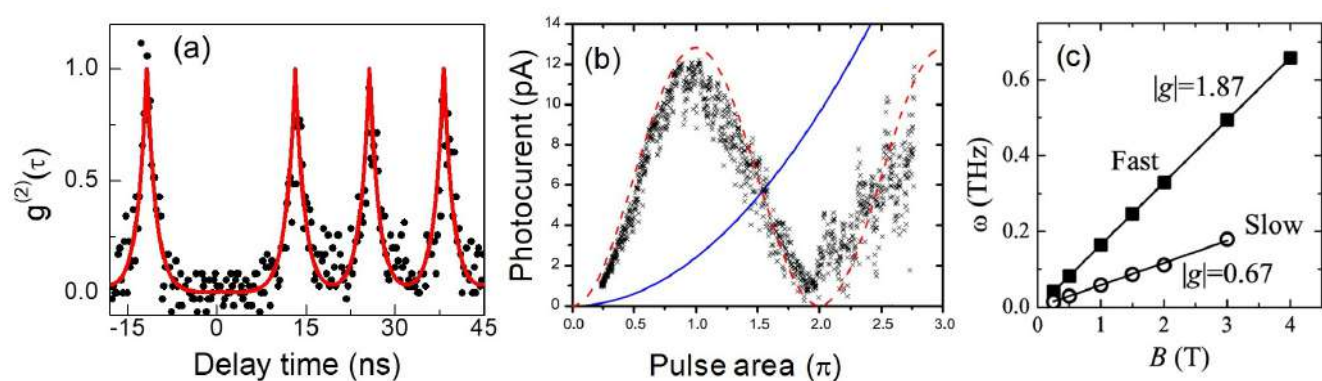


Abbildung 5: Einzelphotonenemission von einem einzelnen QD, der bei Telekom-Wellenlänge im C-Band emittiert. (b) Gemessene Rabi-Rotationen als Funktion der Pulsfläche. (c) Die gemessenen g-Faktoren für Elektronen (volle Quadrate) und Löcher (offene Kreise).

Figure 5: Single-photon emission from single QD emitting at telecom c-band wavelength. (b) Measured Rabi rotations as a function of pulse area. (c) The measured electron (full squares) and hole (open circles) g-factors.

## Weitere Informationen / *Further Information*

**Priv.-Doz. Dr. M. Benyoucef**

Universität Kassel

Heinrich-Plett-Strasse 40

34132 Kassel

INA - Raum 2112

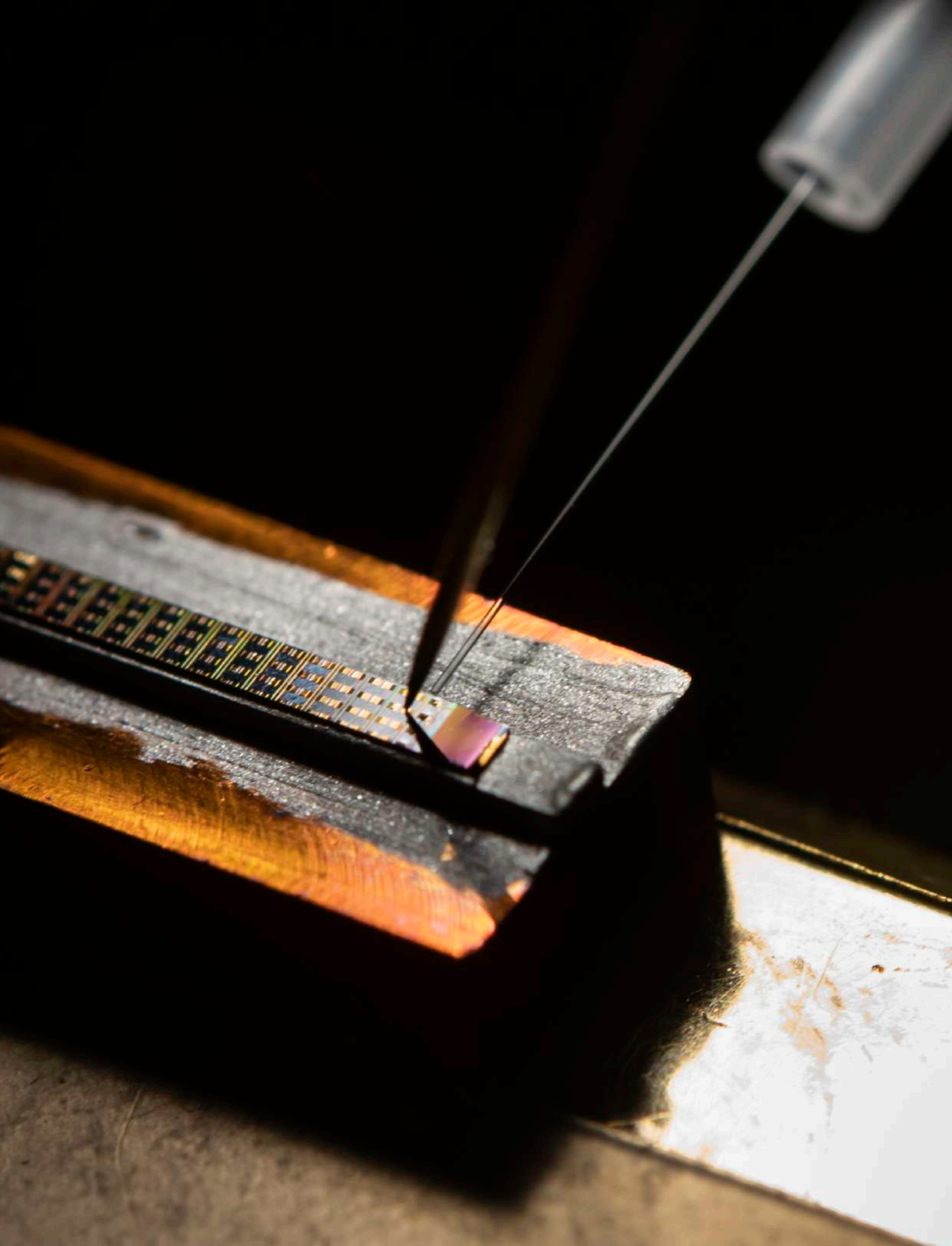
Tel: +49 561 804-4553

Fax: +49 561 804-4136

Email: [m.benyoucef@physik.uni-kassel.de](mailto:m.benyoucef@physik.uni-kassel.de)

Website: <https://www.uni-kassel.de/forschung/en/ina/technological-physics/research/nano-optics>







# Theoretische Atom- & Molekülphysik

## Theoretical Atomic & Molecular Physics



apl. Prof. Dr. Philipp Demekhin

Philipp Demekhin studierte Physik an der Staatlichen Universität Rostow-am-Don (Russland) und promovierte dort im Jahr 2000. Danach forschte er als Postdoktorand an der Staatlichen Verkehrsuniversität Rostow-am-Don (Russland), der Technischen Universität Kaiserslautern (mit einem Alexander-von-Humboldt-Stipendium), der Universität Kassel (mit einem EU-Marie-Curie-Stipendium) und der Universität Heidelberg. Im Jahr 2013 erhielt er eine Juniorprofessur an der Universität Kassel, wo er die Gruppe Theoretische Atom- und Molekularphysik aufbaute. Seit 2014 ist er assoziiertes Mitglied von CINSaT. Momentan ist er außerplanmäßiger Professor an der Universität Kassel und hat eine permanente Stelle. Er ist ordentliches Mitglied des CINSaT und Sprecher des Schwerpunkts "Chirale Systeme".

Die Entwicklung von theoretischen und rechnerischen Ansätzen zur grundlegenden Beschreibung des elektronischen Kontinuumspektrums in Molekülen mit Anwendungen zur winkel- und zeitaufgelösten Elektronen- und Fluoreszenzspektroskopie gehören zu den wichtigsten wissenschaftlichen Forschungsschwerpunkten der Gruppe. Dabei ist die Gruppe Theoretische Atom- und Molekularphysik vollständig in das Konsortium von Wissenschaftlern integriert, dass sich mit der Untersuchung der Elektronendynamik chiraler Systeme befasst. In den Jahren 2013-2016 hat dieses Konsortium finanzielle Unterstützung durch die Hessische Landesinitiative zur Entwicklung wissenschaftlicher und wirtschaftlicher Exzellenz (LOEWE) erhalten.

Im Jahr 2018 richtete dieses Konsortium von Wissenschaftlern in Kassel einen neuen DFG-Sonderforschungsbereich SFB-1319 "Extremes Licht für die Analyse und Kontrolle von molekularer Chiralität" ein. In diesem SFB-Projekt spielt die Gruppe Theoretische Atom- und Molekülphysik eine der zentralen Rollen bei der theoretischen Beschreibung des Photoelektronen-Zirkulardichroismus (PECD), der von experimentellen Kooperationspartnern in den winkelaufgelösten Photoionisations- und Fragmentierungsspektren chiraler Moleküle untersucht wird. Im Jahr 2021 bewarb sich das Konsortium erfolgreich bei der DFG für eine Verlängerung des SFB für die zweite Förderungsperiode, welche im Januar 2022 begann. Diese Aktivität der Gruppe Theoretische Atom- und Molekularphysik ist Teil des CINSaT Schwerpunkts "Chirale Systeme".

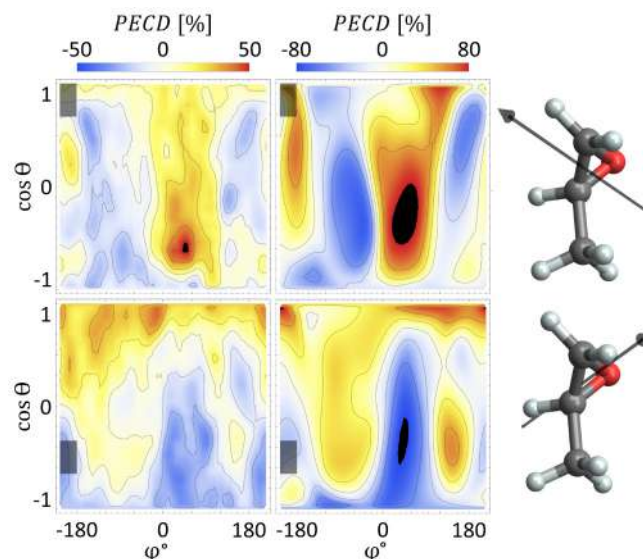


Abbildung 1: Entnommen von K. Fehre et al., Phys. Rev. Lett. 127, 103201 (2021). DOI:10.1103/PhysRevLett.127.103201. Experimentelle (links) und theoretische (rechts) vierfach differentielle PECDs von S-Methyloxirane als Funktion der zwei Photoelektronenemissionswinkel für zwei unterschiedliche molekulare Orientierungen bezüglich der Lichtpropagationsrichtungen, welche als graue Pfeile rechts neben den Daten angedeutet sind. Die schwarzen Stellen heben Photoemissionsrichtungen hervor, bei denen die gemessenen und berechneten PECDs die gewählten oberen oder unteren Grenzen der jeweiligen Asymmetrieskala übersteigen.

Figure 1: Taken from K. Fehre et al., Phys. Rev. Lett. 127, 103201 (2021). DOI:10.1103/PhysRevLett.127.103201. Measured (left panels) and computed (right panels) fourfold differential PECDs for S-methyloxirane as functions of the two photoelectron emission angles for two different molecular orientations with respect to the light propagation directions, which are indicated by grey arrows in the respective insets. Black spots highlight photoemission directions at which the measured and computed PECDs exceed the presently chosen upper or lower limits of the respective asymmetry scales.

Ein aktuelles Ergebnis des SFB-1319 ELCH ist in Abb. 1 gezeigt. Der PECD für zufällig orientierte Moleküle beträgt typischerweise einige wenige Prozent. Der Effekt kann jedoch bis zu ca 10-20% verstärkt werden, indem nur eine molekulare Achse im Raum fixiert wird. Gemeinsam mit den SFB Mitgliedern Reinhard Dörner

und Markus Schöffler (Goethe-Universität Frankfurt), Arno Ehresmann (Universität Kassel) und Robert Berger (Philipps-Universität Marburg) zeigten wir, dass der PECD eines vollständig raumfixierten chiralen Moleküls einen viel höheren

Kontrast von bis zu 50% erreichen kann. Diese Ergebnisse ebnen den Weg für die Weiterentwicklung des PECD zu einem bisher unübertroffen empfindlichen Werkzeug für die chirale Erkennung in der Gasphase.

*Philipp Demekhin studied physics at the Rostov State University (Russia) and obtained there a PhD degree in 2000. After that, he made postdoctoral research in the Rostov State Transport University (Russia), Technical University of Kaiserslautern (with an Alexander-von-Humboldt fellowship), University of Kassel (with an EU Marie Curie fellowship), and University of Heidelberg. In 2013, he obtained a Junior Professor position at the University of Kassel, where he established the Theoretical Atomic and Molecular Physics group. In 2014, he was associated to CINSaT. Currently, he is an außerplanmäßiger Professor at the University of Kassel and holds a permanent position. He is a full member of CINSaT and a spokesperson of the research focal point "Chiral Systems".*

*The development of theoretical and computational approaches for ab-initio description of the electronic continuum spectrum in molecules with applications to angle- and time-resolved electron and fluorescence spectroscopy are among the main scientific research expertizes of the group. Thereby, the Theoretical Atomic*

*and Molecular Physics group is entirely integrated in the consortium of scientists aiming at the investigation of electron dynamics of chiral systems. In 2013-2016, this consortium acquired financial support from the State's Hessen Initiative for the Development of Scientific and Economic Excellence (LOEWE).*

*In 2018, this consortium of scientists established in Kassel a new DFG collaborative research center SFB-1319 'Extreme light for sensing and driving molecular chirality'. In this CRC-project, the Theoretical Atomic and Molecular Physics group plays one of the central roles in the theoretical description of the photoelectron circular dichroism (PECD), observed by experimental cooperation partners in the angle-resolved photoionization and fragmentation spectra of chiral molecules. In 2021, this consortium successfully applied to DFG for a prolongation of the CRC for a second funding period which started in January 2022. This activity of the Theoretical Atomic and Molecular Physics group is a part of the CINSaT focal point "Chiral Systems".*



Abbildung 2: Bilder der Gruppenmitglieder der Theoretischen Atom- und Molekülphysik. Von links nach rechts: Anton Artemyev, Nikolay Novikovskiy, Eric Kutscher, Dmitrii Rezvan.

Figure 2: Photos of the Theoretical Atomic and Molecular Physics group members. From left to right: Anton Artemyev, Nikolay Novikovskiy, Eric Kutscher, Dmitrii Rezvan.

*One of the recent results of the SFB-1319 ELCH is illustrated in Fig. 1. For randomly oriented molecules, PECD emerges on the level of a few percent. It can however be enhanced up to about 10-20% by fixing already one molecular orientation axis in space. Together with the CRC members Reinhard Dörner and Markus Schöffler (Goethe-Universität Frankfurt), Arno Ehresmann (Universität Kassel) and Robert Berger (Philipps-Universität Marburg), we illustrated that PECD of a fully fixed-in-space chiral molecule can reach a much higher contrast of more than 50%. Those findings pave the way for promoting PECD to an unprecedentedly-sensitive tool for chiral recognition in the gas phase.*

## Weiterführende Informationen / *Further Information*

**apl. Prof. Dr. Philipp Demekhin**

Universität Kassel

Heinrich-Plett-Straße 40

34132 Kassel

AVZ II - Raum 0187

Tel: +49 561 804-4013

Fax: +49 561 804-4150

E-mail: [demekhin@physik.uni-kassel.de](mailto:demekhin@physik.uni-kassel.de)

Website: <https://www.uni-kassel.de/fb10/institute/physik/forschungsgruppen/theoretische-atom-und-molekuelphysik/startpage>



$q=+1 \rightarrow \text{mV}$   
 $q=-1 \rightarrow \text{cell}$  *aller CPL*

$\Rightarrow P$

$$b_{2n}^{(+1)} = b_{2n}^{(-1)}$$

$$b_{2n+1}^{(+1)} = -b_{2n+1}^{(-1)}$$

P



# Theoretische Festkörper- & Ultrakurzzeitphysik

*Theoretical Condensed Matter Physics & Ultrafast Phenomena*



Prof. Dr. Martin E. Garcia

## Dynamische Prozesse in Festkörpern, Nanostrukturen und biologischen Systemen

Die Gruppe von Professor Dr. Martin E. Garcia (Theoretische Physik II) forscht seit 2004 innerhalb von CINSaT. Die wichtigsten wissenschaftlichen Aktivitäten der Gruppe konzentrierten sich zunächst auf die Bereiche ultraschnelle Phänomene in Festkörpern, mit europäischer und deutscher Förderung durch ein Research Training Network und verschiedene DFG-Schwerpunktprogramme, und Transporteigenschaften von Nanostrukturen, ebenfalls auf der Grundlage von DFG-Förderungen. Später erwarb die Gruppe Erfahrungen in der theoretischen Beschreibung der Laserbearbeitung von Materialien und verschiedenen Themen der Biophysik. Die Gruppe arbeitet aktiv mit vielen Universitäten und Instituten in Deutschland sowie in den Vereinigten Staaten, Japan, China, Frankreich, Spanien, Italien, Portugal, Schweden, der Schweiz, Russland, Argentinien, Kolumbien und Mexiko zusammen.

Es wurden in der Gruppe verschiedene theoretische Ansätze entwickelt, um die Wechselwirkung intensiver Femtosekunden-Laserpulse mit Festkörpern und insbesondere die laserinduzierten thermischen und nichtthermischen ultraschnellen Strukturübergänge zu beschreiben. Der durch die ultrakurzen Laserpulse erzeugte transiente Nichtgleichgewichtszustand treibt ultraschnelle Phasenübergänge in verschiedenen Materialien entlang von Wegen an, die unter thermodynamischen Bedingungen unzugänglich sind. Die Gruppe hat ein Computerprogramm namens CHIVES (Code for Highly excited Valence Electron Systems) für die Durchführung von ab-initio-Molekulardynamiksimulationen von laserangeregten Festkörpern entwickelt. CHIVES ist der schnellste existierende Code für diesen Zweck und hat es der Gruppe von Prof. Garcia ermöglicht, verschiedene laserinduzierte nichtthermische Phänomene wie thermisches Phonon Squeezing, transiente fraktionale Diffusion, anisotrope Energieübertragung und anomales Schmelzen zu erklären und vorherzusagen. Andererseits führt die Gruppe ultra-großskalige atomistische Kontinuumssimulationen (mit bis zu Hunderten von Millionen Atomen) auf der Grundlage empirischer Potenziale durch, um auf denselben Zeit- und Raumskalen wie im Experiment die Laserablation von Filmen und die Laser-Nanostrukturierung von

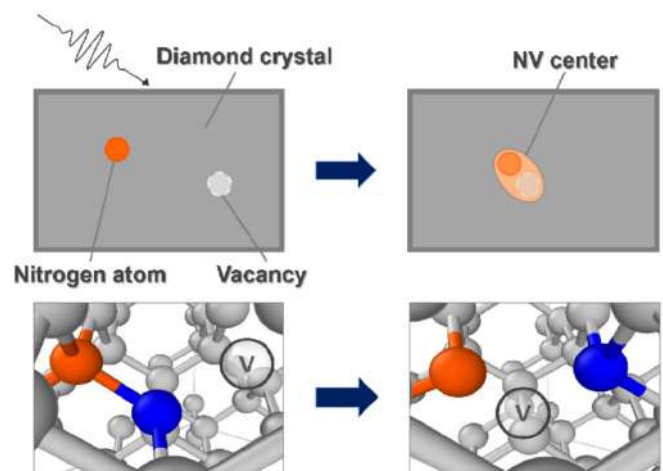


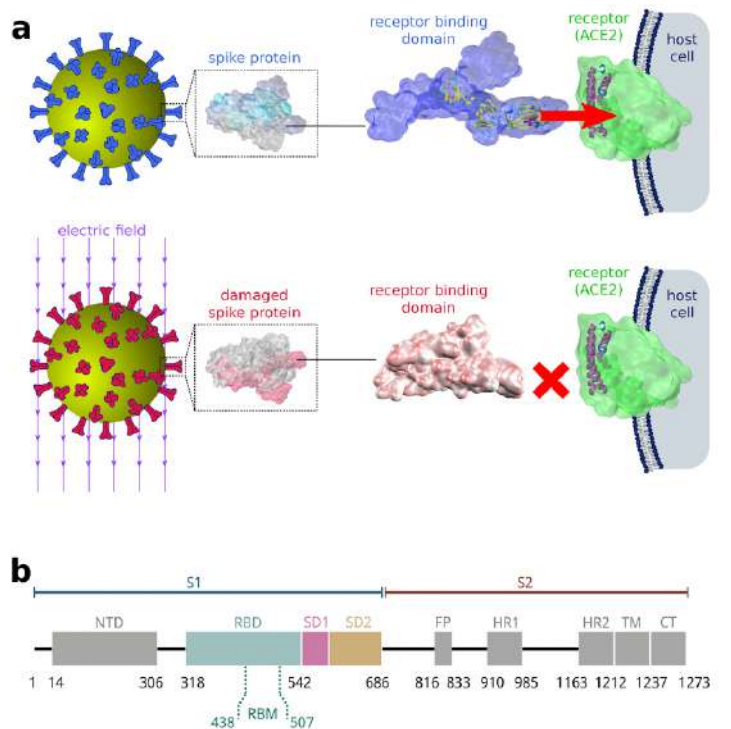
Abbildung 1: (oben) Schematische Darstellung der durch Femtosekundenlaser induzierten nichtthermischen NV-Zentrenbildung in Diamant. Die Laserenergie wird genutzt, um das ursprünglich abgetrennte Stickstoffatom mit der Vacancy zu verschmelzen, ohne den umgebenden Kristall zu beeinträchtigen. (unten) Darstellung der Simulationszelle in der Nähe der Stickstoffverunreinigung (orange) und der Kristallvakanz (transparent). Das dazwischen liegende Kohlenstoffatom (blau) wechselt innerhalb von 250 fs der Simulation seine Position mit der Leerstelle.

*Figure 1: (top) Schematic illustration of the femtosecond-laser induced nonthermal NV center formation in diamond. The laser energy is used to merge the initially separated nitrogen atom with the crystal vacancy with low impact on the surrounding crystal. (bottom) Closeups of our simulation cell near the nitrogen impurity (orange) and the crystal vacancy (transparent). The carbon atom in between (blue) changes its position with the vacancy within 250 fs of the simulation.*

Oberflächen im Vakuum und unter einer Wasserschicht zu beschreiben. Kürzlich hat die Gruppe auch zwei neue Methoden zur Konstruktion laserinduzierter analytischer interatomarer Potenziale entwickelt, die es ermöglichen, Molekulardynamiksimulationen in ultragroßem Maßstab mit der Genauigkeit der Dichtefunktionaltheorie durchzuführen. Bei einer dieser Metho-

Abbildung 2: (oben) Der Eintritt des SARS-CoV-2-Virus in die Zelle wird durch die Erkennung zwischen dem Spike-Glykoprotein (S-Protein) und dem Angiotensin-Converting-Enzyme-Rezeptor (ACE2) an der Wirtszellmembran vermittelt. Die Bindung zwischen dem S-Protein und ACE2 verändert sich dramatisch in Gegenwart von moderaten externen elektrischen Feldern, die drastische Konformationsänderungen und Schäden am S-Protein hervorrufen. (unten) Sequenz des S-Proteins (PDB IDs: 6VSB und 6M0J). Der in unseren Simulationen betrachtete Abschnitt ist farblich hervorgehoben. Abbildung entnommen aus C. Arbeitman et al., Nature 12, 5407 (2021).

Figure 2: (top) SARS-CoV-2 virus entry into the cell is mediated by the recognition between the spike glycoprotein (S protein) and the angiotensin-converting-enzyme receptor (ACE2) at the host cell membrane. The binding between the S protein and ACE2 becomes dramatically altered in the presence of moderate external electric fields, which induce drastic conformational changes and damage on the S protein. (bottom) Sequence of the S protein (PDB IDs: 6VSB and 6M0J). The segment considered in our simulations is highlighted in color. Figure extracted from C. Arbeitman et al., Nature Communications 12, 5407 (2021).



den handelt es sich um ein selbstlernendes Schema, das auf Polynomen basiert, bei der anderen um ein neuronales Netz. Weitere auf maschinellem Lernen basierende laserinduzierte interatomare Potenziale werden derzeit entwickelt.

Die biophysikalischen Forschungsaktivitäten der Gruppe begannen vor Jahren mit der Beschreibung der Proteinfaltung in Käfigen und unter dem Einfluss externer elektrischer Felder. Durch elektrische Felder induzierte Konformationsänderungen wurden für verschiedene Proteine und unter Verwendung verschiedener Modelle vorhergesagt. Die Gruppe analysierte

auch durch elektromagnetische Mikrowellenstrahlung induzierte Konformationsänderungen bei Proteinen, die an neurodegenerativen Krankheiten involviert sind. In diesem Jahr gelang der Gruppe die bemerkenswerte Vorhersage, dass das Spike-Protein des SARS-CoV-2-Virus deutlich empfindlicher auf elektrische Felder mittlerer Intensität reagiert. Diese Arbeit hat viel Aufmerksamkeit erregt und kann zu wichtigen Anwendungen führen, z. B. bei der Entwicklung von Luftfiltern. Nicht zuletzt forscht die Gruppe im Rahmen des von der DFG geförderten Graduiertenkollegs (GRK) "Biological Clocks on Multiple Time Scales" an der Beschreibung von biologischen Uhren.

## Dynamical Processes in Solids, Nanostructures and Biological Systems

The group of Professor Dr. Martin E. Garcia (Theoretical Physics II) performs research within CINSaT since 2004. The main scientific activities of the group were initially focused on the areas of Ultrafast Phenomena in Solids, with European and German funding through a Research Training Network and different DFG Priority Programs, and transport properties of deposited nanostructures, also on the basis of DFG grants. Later on, the

group acquired experience in the theoretical description of Laser Processing of Materials and different topics in Biophysics. The group actively collaborates with many Universities and Institutes within Germany and also in the United States, Japan, China, France, Spain, Italy, Portugal, Sweden, Switzerland, Russia, Argentina, Colombia and Mexico.

*Different theoretical approaches were developed in the group to describe the interaction of intense femtosecond laser pulses with solids and, particularly, laser induced thermal and nonthermal ultrafast structural transitions. The transient nonequilibrium state produced by the ultrashort laser pulses drives ultrafast phase transitions in different materials along pathways that are inaccessible under thermodynamic conditions. The group has developed a computational code called CHIVES (Code for Highly excited Valence Electron Systems) for performing ab-initio molecular dynamics simulations of laser excited solids. CHIVES is the fastest existing code for this purpose and has allowed Prof. Garcia's group to explain and predict different laser induced nonthermal phenomena, like thermal phonon squeezing, transient fractional diffusion, anisotropic energy transfer and anomalous pre-melting. On the other hand, the group is running ultralarge-scale atomistic-continuum simulations (including up to hundreds of millions of atoms) based on empirical potentials to describe, on the same time and space scales as in experiment, laser ablation of films, laser nanostructuring of surfaces in vacuum and under a layer of water. Recently, the group also developed two novel methods to construct laser-induced analytical interatomic potentials which allow to perform ultralarge-*

*scale molecular dynamics simulations with Density-Functional-Theory accuracy. One of these methods constitutes a self-learning scheme based on polynomials, and the other one consists of a neural network. More Machine-Learning based laser-induced interatomic potential are being developed.*

*The biophysical research activities of the group started years ago with the description of protein folding in cages and under the influence of external electric fields. Electric-field induced conformational changes were predicted for different proteins and using different models. The group also analyzed conformational changes induced by microwave electromagnetic radiation on proteins involved in neurodegenerative diseases. This year, the group made the remarkable prediction that the spike protein of the SARS-CoV-2 virus is significantly vulnerable to electric fields of moderate intensity. This work attracted much attention and can lead to important applications like, for instance, the development of air filters. Last but not least, the group is performing research on the description of biological clocks in the framework of the Research Training Group (RTG) "Biological Clocks on Multiple Time Scales" funded by the DFG.*



Abbildung 3: Mitglieder der Gruppe Theoretische Physik II während einer Wandertour im Jahr 2019.

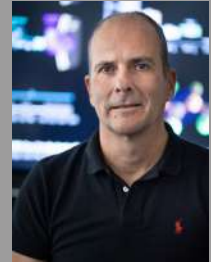
Figure 3: Members of the Theoretical Physics II group during a hiking tour in 2019.

## Weiterführende Informationen / *Further Information*

### **Prof. Dr. Martin E. Garcia**

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Str.40  
34132 Kassel  
AVZ - Raum 1279

Tel.: +49 561 804-4480  
Fax: +49 561 804-4006  
E-Mail: [m.garcia@uni-kassel.de](mailto:m.garcia@uni-kassel.de)  
Website: [www.physik.uni-kassel.de/garcia](http://www.physik.uni-kassel.de/garcia)  
Twitter: @GroupKassel







# Theorie nanostrukturierter Materialien

*Theory of nanostructured materials*



Prof. Dr. G. M. Pastor

Die Forschungsaktivitäten der Gruppe umfassen methodologische Entwicklungen zur Theorie stark korrelierter Fermionen, die Quantentheorie neuartiger magnetischer Materialien, die nicht-adiabatische Quantendynamik magnetischer Metalle sowie die Dynamik komplexer Systeme.

Als erstes Beispiel möchten wir unsere Arbeit zur laserinduzierten Magnetisierungsdynamik in Übergangsmetallverbindungen vorstellen. Bei der zugrundeliegenden Physik stehen der itinerante Charakter der Elektronen, deren Spin-Bahn-Wechselwirkung und deren elektronische Coulombwechselwirkung im Mittelpunkt der Prozesse, die im hoch angeregten Nicht-Gleichgewichtszustand ablaufen. Unsere Resultate demonstrieren die zentrale Bedeutung des Zusammenspiels zwischen der lokalen Spin-Bahn-Wechselwirkung und der Elektronenbewegung im Festkörper, die für das Auslösen der Bahnmomente und den Spintransfer unter den Atomen verantwortlich sind. Elementspezifische Demagnetisierungszeiten, Verzögerungen zu Beginn der lokalen Magnetisierungs-

dynamik und ultraschnelle Umverteilungen der spinpolarisierten Dichte werden aufgedeckt (s. Fig. 1). Das Verständnis der mikroskopischen Mechanismen des Zusammenbruchs der Magnetisierung auf einer Zeitskala von hundert Femtosekunden birgt neben einzigartigen Einsichten in fundamentale quantenmechanische Prozesse auch die Grundlage zur Entwicklung neuer Speichermedien, welche um Größenordnungen schneller, kleiner und effizienter und daher von enormer technologischer Bedeutung sein können.

Als Nächstes sei unsere Arbeit auf dem Gebiet der stark korrelierten Elektronen erwähnt, die sich mithilfe von geeigneten Vielteilchen-Modell-Hamiltonoperatoren beschreiben lassen. Eine neuartige Gitter-Dichtefunktionaltheorie (LDFT) wurde entwickelt, die es ermöglicht, die fundamentalen Konzepte der Dichtefunktionaltheorie (DFT) des inhomogenen Elektronengases auf diskrete Gittermodelle erfolgreich zu übertragen und damit die praktische Anwendbarkeit der DFT qualitativ zu erweitern. Damit wurde ein neuer Zugang zum Verständnis der Eigenschaften

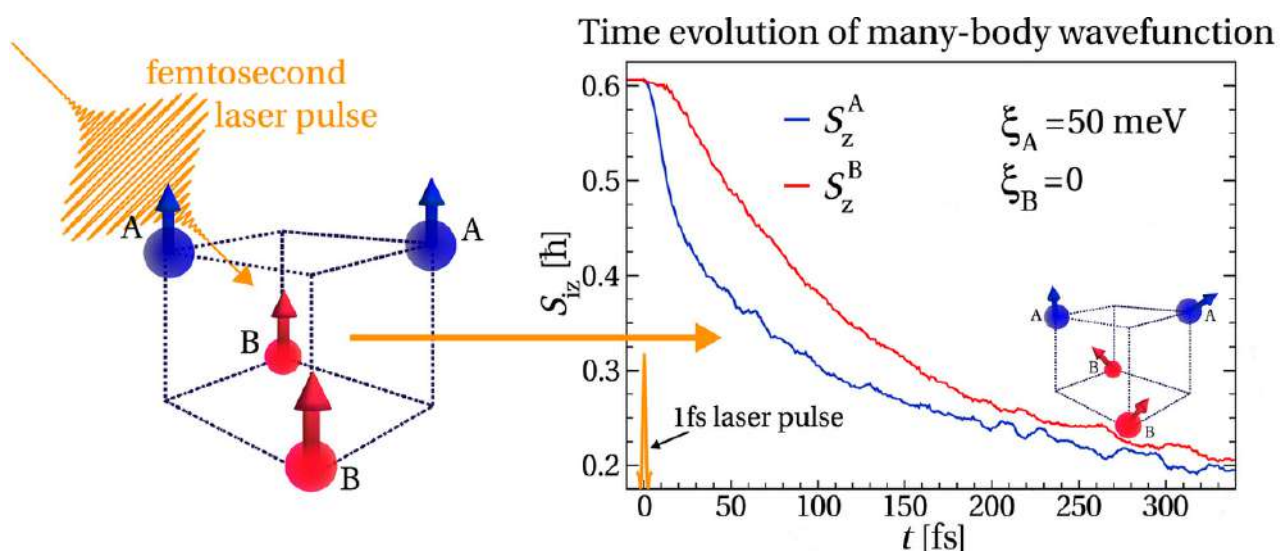


Abbildung 1: Ultraschnelle Magnetisierungsdynamik in einer binären Legierung. Die Zeitabhängigkeit der lokalen Spinpolarisationen  $S_z^A$  und  $S_z^B$  zeigt eine vergleichbare allerdings verzögerte Demagnetisierung aller Komponenten des Systems.

Figure 1: Ultrafast magnetization dynamics in a binary alloy. The time dependence of the local spin polarizations  $S_z^A$  and  $S_z^B$  shows a comparable but time-delayed demagnetization of the different alloy components.



stark korrelierter Elektronen geliefert. Um die Eigenschaften von Systemen mit schmalen Energiebändern zu untersuchen, haben wir das periodische Hubbard-Modell betrachtet. Aufgrund der Periodizität kann man die Wechselwirkungsenergie  $W$  als Funktional der Besetzungszahlen  $\eta_{k\sigma}$  der Einteilchen-Bloch-Zustände auffassen. Ein bemerkenswerter Zusammenhang zwischen der Wechselwirkungsenergie  $W$  und der Entropie  $S$  der Besetzungszahlverteilung  $\eta_{k\sigma}$  wurde entdeckt, welcher uns zu einer einfachen jedoch sehr effektiven Näherung für das Wechselwirkungsenergiefunktional  $W[\eta]$  führte. Mithilfe dieser Näherung haben wir wichtige Grundzustandseigenschaften des Hubbard-Modells in  $D = 1 - 3$  Dimensionen, sowie im Grenzfall  $D \rightarrow \infty$  berechnet. Hierzu zählen die Grundzustandsenergie  $E_0$ , die mittlere Anzahl der Doppelbesetzungen  $D$ , die kinetische Energie  $T$ , die Besetzungszahlen im Grundzustand sowie die Grundzustands-Einteilchendichtematrix  $\gamma_{ij\sigma}$  (s. Fig. 2). Der Vergleich mit entsprechenden exakten Resultaten zeigt, dass LDFT bemerkenswert genaue Resultate im gesamten Bereich von schwachen bis hin zu starken Korrelationen einschließlich des stark korrelierten Heisenberg-Grenzfalls  $U/t \rightarrow \infty$  liefert.

Auf einem ganz anderen Gebiet haben wir uns für das kollektive statische und dynamische Verhalten von zweidimensionalen Ensembles miteinander wechselwirkender magnetischer Nanoteilchen (MNPs) interessiert. Solche Systeme sind ausgesprochen wichtig für eine Reihe von Anwendungen, zu denen unter anderem Biosensoren, Krebstherapien und magnetische Speichermedien gehören. Zudem sind sie aufgrund ihres komplexen Vielteilchenverhaltens sehr herausfordernd aus Sicht der theoretischen Physik. In den Untersuchungen wurde mithilfe der Methodik der statistischen Physik, der Energielandschaften und Netzwerke gezeigt, dass Unordnung zu einer tiefgreifenden Transformation des statischen und dynamischen Verhaltens dieser Nanostrukturen führt. Schwach-ungeordnete Systeme sind sogenannte gute Struktursucher. Das bedeutet, dass sie relativ wenige metastabile Zustände und einen sehr stabilen Grundzustand haben. Ihre Dynamik ist demzufolge schnell und läuft ungehindert in Richtung des Grundzustands ab.

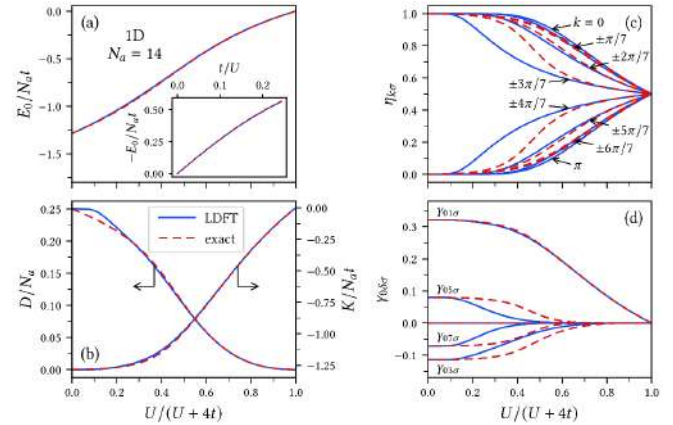


Abbildung 2: Grundzustandseigenschaften des halb gefüllten 1D Hubbard-Modells mit  $N_d = 14$  Gitterplätzen als Funktion der Wechselwirkungsstärke  $U/t$ . Der Vergleich zwischen LDFT-Ergebnissen und exakten Resultaten für die Grundzustandsenergie  $E_0$ , Anzahl der Doppelbesetzungen  $D$ , Besetzungszahlen  $\eta_{k\sigma}$  und Einteilchendichtematrix  $\gamma_{ij\sigma}$  demonstriert die Genauigkeit der Methode im gesamten Bereich von schwachen bis hin zu starken Korrelationen.

Figure 2: Ground state properties of the half-filled 1D Hubbard model as a function of the interaction strength  $U/t$ . The comparison between LDFT results and exact results for the ground-state energy  $E_0$ , number of double occupations  $D$ , occupation numbers  $\eta_{k\sigma}$ , and single-particle density matrix  $\gamma_{ij\sigma}$  demonstrates the accuracy of the method in the whole range from weak to strong correlations.

Im Gegensatz dazu haben stark-ungeordnete Systeme eine extrem große Anzahl an metastabilen Zuständen mit vergleichbaren Energien, die durch hohe Energiebarrieren voneinander getrennt sind. Dies führt zu einer äußerst komplexen und langsamen Dynamik, die durch verschiedene Zeitskalen geprägt ist und der von Gläsern entspricht. Ein Beispiel für die Komplexität ungeordneter Systeme wird in Figur 3 gezeigt, in der die Energielandschaft eines solchen Systems mithilfe eines Disconnectivity Graphen visualisiert wird.

*The research activities of the group include methodological developments on the theory of strongly correlated fermions, the quantum theory of novel magnetic materials, the non-adiabatic*

*quantum dynamics of magnetic metals, and the dynamics of complex systems.*

As a first example, we would like to present our work on laser-induced magnetization dynamics in transition metal compounds. The basic elements of the underlying physics are the itinerant character of  $d$  electrons, their Coulomb interactions and the spin-orbit coupling, which govern the dynamics of the laser-excited states. Our results demonstrate the central importance of the interplay between the local spin-orbit interaction and electronic motion in the solid. They are responsible for orbital momentum quenching and spin transfer among the atoms resulting in element-specific demagnetization times, delays in the onset of the local magnetization dynamics and ultrafast redistributions of spin-polarized density (see Fig. 1). Understanding the microscopic mechanisms of ultrafast demagnetization, on a time scale of hundreds of femtoseconds, provides not only unique insights into the fundamental quantum mechanical processes occurring in itinerant magnetism, but also constitutes the basis for developing novel storage media which could be orders of magnitude faster, smaller and more efficient than the currently available ones.

Further research activities concern the field of strongly correlated electrons, which are investigated in the framework of many-body model Hamiltonians. A novel lattice density functional theory (LDFT) has been developed which successfully applies the fundamental concepts of the density functional theory (DFT) of the inhomogeneous electron gas to discrete lattice models, thereby qualitatively extending the actual scope of DFT. In this way a new perspective to understanding the physics of strongly correlated systems has been achieved. In order to study the properties of narrow-band metals, we considered the periodic Hubbard model. Taking advantage of lattice-translational symmetry, one can express the interaction energy  $W$  as a functional of the occupation numbers  $\eta_{k\sigma}$  of the one-particle Bloch states. A remarkable correlation between the interaction energy  $W$  and the entropy  $S$  of the occupation number distribution  $\eta_{k\sigma}$  has been discovered, from which a simple but highly effective approximation to the interaction energy functional

$W[\eta]$  has been derived. With the help of this approximation we have successfully calculated the main ground-state properties of the Hubbard model in  $D = 1 - 3$  dimensions, as well as in the limiting case  $D \rightarrow \infty$ . These include the ground-state energy  $E_0$ , the average number of double occupations  $D$ , the kinetic energy  $T$ , the occupation numbers in the ground state  $\eta_{k\sigma}$ , and the

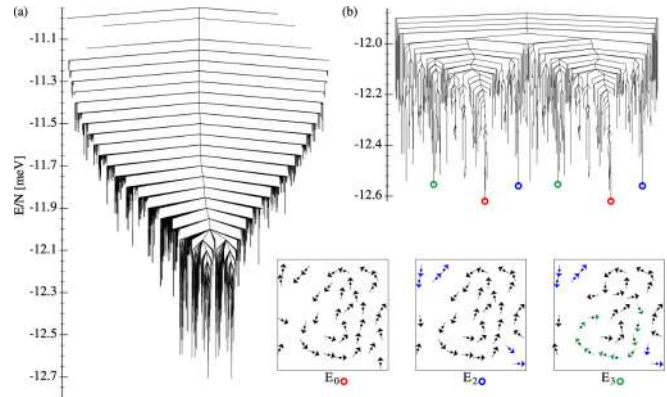


Abbildung 3: Disconnectivity Graph eines Ensembles zufällig angeordneter MNPs. In (a) werden alle metastabilen Zustände gezeigt, während (b) sich auf die niedrigsten 400 Zustände beschränkt. Man sieht, wie die zahlreichen niedrigen metastabilen Zustände durch große Energiebarrieren voneinander getrennt sind, die oft viel größer als die eigentlichen Energieunterschiede sind. Die Einschübe illustrieren die magnetischen Konfigurationen des Grundzustands ( $E_0$ ), des zweiten angeregten Zustands ( $E_2$ ) sowie des dritten angeregten Zustands ( $E_3$ ). Der erste angeregte Zustand (nicht gezeigt) ist dem Grundzustand sehr ähnlich.

Figure 3: Disconnectivity graph of a strongly disordered ensemble of MNPs. In (a) all metastable states are shown, while (b) is restricted to the lowest 400 states. Notice that the numerous low metastable states are separated by large energy barriers, often much larger than the actual energy differences. The insets illustrate the magnetic configurations of the ground state ( $E_0$ ), the second excited state ( $E_2$ ), and the third excited state ( $E_3$ ). The first excited state (not shown) is very similar to the ground state.

ground-state single-particle density matrix  $\gamma_{i\sigma}$  (see Fig. 2). Comparison with the corresponding exact results shows that LDFT yields remarkably accurate results in the whole range from weak to strong correlations including the strongly correlated Heisenberg limit  $U/t \rightarrow \infty$ .

In a completely different research field, we have investigated the collective static and dynamic behavior of two-dimensional ensembles of interacting magnetic nanoparticles (MNPs). These systems are most important for a number of applications, including biosensors, cancer therapies, and magnetic storage media. In addition, their complex many-particle behavior makes them very challenging from a theoretical physics perspective. Using the methodology of statistical physics, energy landscapes



and networks, we have shown that disorder leads to a profound transformation of the static and dynamic behavior of these nanostructures. Weakly disordered systems are so-called good structure seekers, which means that they have relatively few metastable states and a very stable ground state. Consequently, their dynamics is fast, proceeding unhindered towards the ground state and thermal equilibrium. In contrast, strongly-disordered

systems have an extremely large number of metastable states with comparable energies, separated by high energy barriers. This leads to an extremely complex and slow dynamics, which is characterized by the presence of different time scales as in structural or spin glasses. An example of the complexity of the energy landscape of disordered MNP ensembles is shown in Figure 3.

---

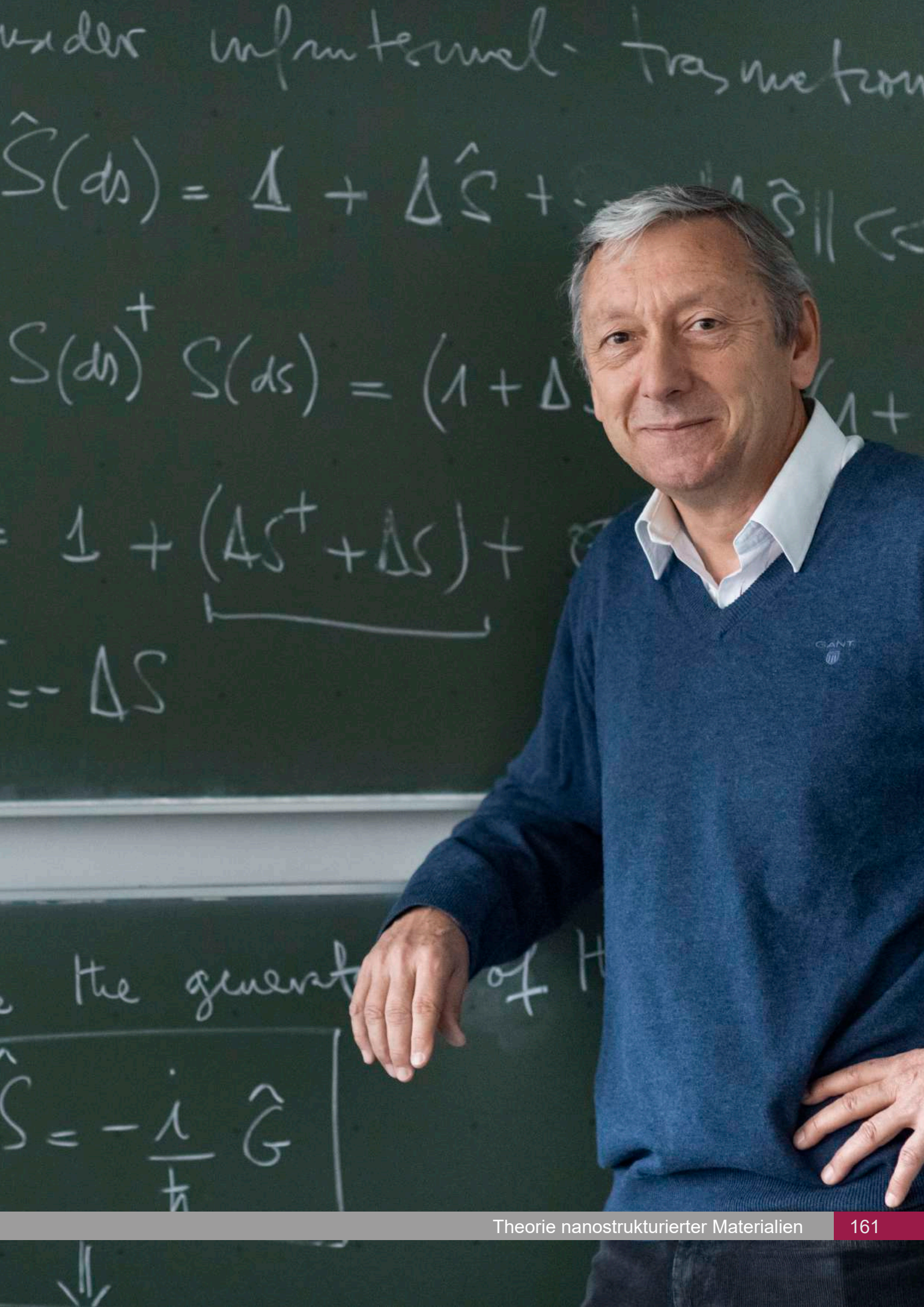
## Weiterführende Information / Further Information

### **Prof. Dr. G. M. Pastor**

Universität Kassel  
Heinr.-Plett-Straße 40  
34132 Kassel  
AVZ II - Raum 1190

Tel: +49 561 804-4780  
Fax: +49 561 804-4006  
Email: [pastor@uni-kassel.de](mailto:pastor@uni-kassel.de)  
Website: <https://www.uni-kassel.de/fb10/institute/physik/forschungsgruppen/nanopartikel-und-nanostrukturen/home>









Prof. Dr. Monika Stengl

### Biologische Rhythmen und olfaktorische Transduktion

Im Stengl-Labor arbeiten wir an den neuronalen Grundlagen des Verhaltens und verwenden Insekten als Modellsysteme, um die Informationskodierung im Gehirn zu untersuchen. Unsere wissenschaftlichen Interessen konzentrieren sich auf drei Bereiche: Sinnesphysiologie, Chronobiologie und Neuropeptidfunktion im Gehirn. In unseren sensorischen Physiologieprojekten konzentrieren wir uns darauf, wie Insekten Gerüche/Sexualpheromone erkennen, warum olfaktorische Rezeptorneuronen periphere zirkadiane Uhren sind und wie die Pheromon-/Geruchstransduktion über Neuropeptide moduliert wird. In unseren Chronobiologie-Projekten untersuchen wir, wie endogene biologische Uhren auf mehreren Zeitskalen von Millisekunden bis Stunden Zeit erzeugen: die Gegenwart, Vergangenheit und Zukunft von Organismen durch zeitgesteuerte Freisetzung von Neuropeptiden. Wir konzentrieren uns auf die olfaktorischen Rezeptorneuronen von Schmetterlings-schwärmern und Schaben, die Umwelt rhythmischen von Chemikalien erkennen, sowie auf periphere und zentrale zirkadiane Uhren der Madeira-Kakerlake, die den Schlaf-Wach-Rhythmus orchestrieren.

Hawkmoth *Manduca sexta*-Männchen lokalisieren ihre Partner durch den Nachweis weiblicher Sexualpheromone mit sensorischen Neuronen an ihren Antennen. Weibliche

Schmetterlings-schwärmer finden ihre Eiablagestelle über die von Pflanzen freigesetzten Duftstoffe (Abb. 1). Die Pheromon-Detektion ist erstaunlich sensitiv: Einzelne Pheromon-Moleküle werden detektiert, die über Ionenkanal-Gating potenzielle Veränderungen in den sensorischen Neuronen bewirken. Wie diese Transduktion bewerkstelligt wird, ist ein Schwerpunkt unserer Forschung. Neben anderen molekularen und zellulären Techniken setzen wir elektrophysiologische Analysen an primären Zellkulturen *in vitro* sowie Tip-Recordings und Pharmakologie *in vivo* ein. Interessanterweise sind die Pheromon-sensitiven Antennenneuronen Uhren auf mehreren Zeitskalen und scheinen bisher nicht identifizierte Neuropeptide/Neuropeptidrezeptoren zu exprimieren. Wir untersuchen, wie und warum die sensorischen Neuronen ticken und wie die Pheromon-/Geruchstransduktion über Neuropeptide verändert wird.

Es lokalisierte seine Eiablagestellen mit Antennensensillen, die von pflanzengeruchsempfindlichen olfaktorischen Rezeptorneuronen innerviert werden. (Abbildung von Tim Nödler). Wir kooperieren mit der Gruppe von Prof. Dr. F. Herberg, Lehrstuhl für Biochemie, die verschiedene cAMP / cGMP-Analoga und konstruierte FRET-Sensoren zur Untersuchung pheromonabhängiger Ionenkanäle einsetzen.

Unsere Forschung im Bereich Chronobiologie konzentriert sich auf die Mechanismen der Rhythmusgenerierung auf mehreren Zeitskalen in neuronalen Netzwerken und einzelnen neuropeptidergen zirkadianen Schrittmachern, die den Schlaf-Wach-Rhythmus bei der Madeira-Kakerlake steuern. Die Madeira-Kakerlake *Rhyarobia maderae* ist ein etabliertes Modellsystem der Chronobiologie, das sich besonders gut für Verhaltens- und Zellanalysen eignet. Interdisziplinäre Projekte innerhalb von CINSaT umfassen eine Kooperation mit Prof. Dr. C. Popov am Dep. der Technischen Physik. Ultrananokristalline Diamantfilme (UNCD) werden verwendet, um primäre Zellkulturen von



Abbildung 1: *Manduca sexta* Weibchen legt Eier auf ein Tabakblatt.

Figure 1: *Manduca sexta* female lays eggs on a tobacco leaf.

Insektenneuronen fest zu binden, um eine physiologische Analyse in Calcium-Imaging-Studien in Kombination mit Immunzytochemie zu ermöglichen. Aus dieser fruchtbaren Zusammenarbeit sind drei Publikationen hervorgegangen (Voss et al., 2012, 2016; Gestrich et al., 2018). In Kooperation mit der Gruppe von Prof. Dr. A. Ehresmann am Lehrstuhl für Experimentalphysik IV wurde ein automatisierter Lichtstimulationsaufbau entwickelt, um den zirkadianen Lichteingangspfad vom Schaben-Facettenauge zum zirkadianen

Schrittmacherzentrum zu untersuchen (Abb. 2). Mit diesem Aufbau untersuchten wir zwei Arten von Photorezeptorzellen im Facettenauge der Schabe und fanden Hinweise darauf, dass es sich um zirkadiane Uhrenneuronen handelt, die eine zeitabhängige Regulierung der Wellenlängenempfindlichkeit ausdrücken (Abb. 2 A, B). In Zusammenarbeit mit Prof. Dr. M. Garcia haben wir neue Werkzeuge zur Analyse großer elektrophysiologischer Datensätze des zirkadianen Uhrennetzwerks der Kakerlake entwickelt (Rojas et al., 2019).

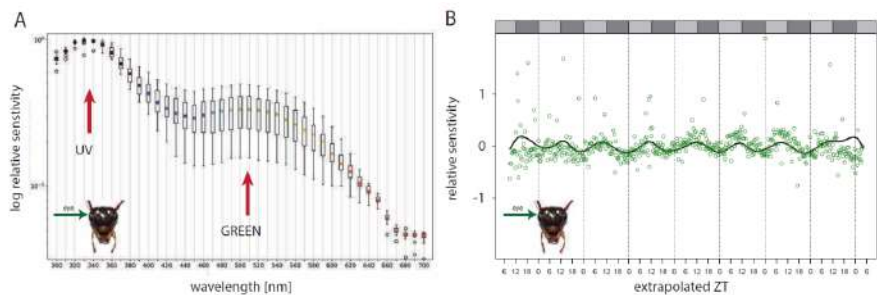
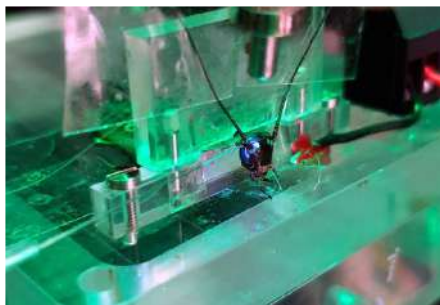


Abbildung 2: Elektrophysiologische Langzeitaufnahmen des Facettenauges der nachtaktiven Madeira-Kakerlake *Rhyparobia maderae*. Das Facettenauge des Insekts wird bei grüner Hintergrundbeleuchtung mit kurzen Lichtpulsen unterschiedlicher Frequenz stimuliert. A. Die beiden Empfindlichkeitsspitzen weisen auf mindestens zwei Klassen von Photorezeptoren im Auge hin: eine auf UV und eine auf grünes Licht eingestellt. B. Die extrazelluläre Langzeitaufzeichnung über 8 Tage bei konstanter Dunkelheit ergab einen endogenen circadianen Sensitivitätsrhythmus mit Maxima während der subjektiven Nacht. Dieses Projekt ist eine Kooperation mit Prof. A. Ehresmann (Physik).

Figure 2: Long-term electrophysiological recordings of the compound eye of the nocturnal Madeira cockroach *Rhyparobia maderae*. The insect's compound eye is stimulated with brief light pulses at different frequencies in green backlight illumination. A. The two peaks of sensitivity indicate at least two classes of photoreceptors in the eye: one tuned to UV and one to green light. B. The extracellular long-term recording over the course of 8 days in constant darkness revealed an endogenous circadian rhythm in sensitivity with maxima during the subjective night. This project is a collaboration with Prof. A. Ehresmann (Physics).

## Biological rhythms and olfactory transduction

In the Stengl lab we work on the neuronal basis of behavior, employing insects as model systems to study information encoding in brains. Our scientific interests center on three fields: sensory physiology, chronobiology, and neuropeptide function in brains. In our sensory physiology projects we focus on how insects detect odors / sex-pheromones, why olfactory receptor neurons are peripheral circadian clocks, and how pheromone/odor transduction is modulated via neuropeptides. In our

chronobiology projects we study how endogenous biological clocks on multiple time scales from milliseconds to hours generate time: the presence, the past, and the future of organisms via timed neuropeptide release. We focus on the olfactory receptor neurons of hawkmoths and cockroaches that detect environmental rhythms of chemicals, as well as on peripheral and central circadian clocks of the Madeira cockroach that orchestrate sleep wake rhythms.



*Hawkmoth Manduca sexta males locate their mates via detection of female sex-pheromones with sensory neurons on their antennae. Female hawkmoths find their oviposition sites via the plant-released odorants (Fig. 1). Pheromone detection is astoundingly sensitive: single pheromone molecules are detected, causing potential changes in the sensory neurons via ion channel gating. How this transduction is accomplished is a focus of our research. We employ electrophysiological analysis on primary cell cultures in vitro as well as tip-recordings and pharmacology in vivo, next to other molecular and cellular techniques. Interestingly, the pheromone-sensitive antennal neurons are clocks on multiple time scales and appear to express so far not identified neuropeptides/neuropeptide receptors. We study how and why the sensory neurons tick and how pheromone/odor transduction are modified via neuropeptides.*

*It located its oviposition sites with antennal sensilla that are innervated by plant-odor sensitive olfactory receptor neurons. (Figure by Tim Nödler). We cooperate with the group of Prof. Dr. F. Herberg, Department of Biochemistry employing different cAMP / cGMP analogs and engineered FRET sensors for the study of pheromone-dependent ion channels.*

*Our research in the field of Chronobiology focuses on the mechanisms of rhythm generation at multiple timescales in*

*neuronal networks and single neuropeptidergic circadian pacemaker neurons controlling sleep-wake cycles in the Madeira cockroach. The Madeira cockroach *Rhyarobia maderae* is an established model system of chronobiology, especially well suited for behavioral and cellular analysis. Interdisciplinary projects within CINSaT include a cooperation with Prof. Dr. C. Popov at the Dep. of Technical Physics. Ultrananocrystalline diamond (UNCD) films are employed to strongly attach primary cell cultures of insect neurons to allow for physiological analysis in calcium imaging studies combined with immunocytochemistry. Three publications resulted from this fruitful collaboration (Voss et al., 2012, 2016; Gestrich et al., 2018). In a cooperation with the group of Prof. Dr. A. Ehresmann at the Department of Experimental Physics IV an automated light stimulation setup was developed to investigate the circadian light input pathway from the cockroach compound eye to the circadian pacemaker center (Fig. 2). With this setup we distinguished two types of photoreceptor cells in the compound eye of the cockroach, and found evidence that they are circadian clock neurons expressing time-dependent regulation of wavelength sensitivity (Fig.2 A,B). In a collaboration with Prof. Dr. M. Garcia we developed new tools for the analysis of large electrophysiological data sets of the cockroach circadian clock network (Rojas et al., 2019).*

## Weiterführende Information / Further Information

### Prof. Dr. Monika Stengl

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Straße 40  
34132 Kassel  
AVZ II - Raum 2185

Tel: +49 561 804-4564  
Fax: +49 561 804-4146  
Email: [stengl@uni-kassel.de](mailto:stengl@uni-kassel.de)  
Website: <https://www.uni-kassel.de/fb10/institute/biologie/fachgebiete/tierphysiologie/startseite.html>



**Spokesperson for the DFG-funded Graduate College „Biological clocks on multiple time scales”**

<https://www.uni-kassel.de/fb10/institute/biologie/fachgebiete/tierphysiologie/startseite.html>

## Nachwuchsgruppe - Einzelzellanalyse in neuronalen Schaltkreisen - am Graduiertenkolleg „Multiskalenuhren“

PD Dr. Susanne Neupert ist Nachwuchsgruppenleiterin am Fachbereich Biologie, Tierphysiologie der Universität Kassel. Sie leitet die Forschungsgruppe „Einzelzellanalyse innerhalb neuronaler Schaltkreise“ an der Graduiertenschule „Multiskalenuhren“. Sie ist eine international anerkannte Expertin für Neuropeptidomik und Einzelzell-Massenspektrometrie. Dr. Neupert ist seit März 2021 Mitglied von CINSaT und beteiligt sich am Fokusbereich „Multiscale Bioimaging“. Die interdisziplinären Projekte ihres Teams verbinden Neurochemie, Entomologie, Neurowissenschaften und Neuroethologie. Schwerpunkt ihrer Forschung ist die strukturelle und funktionelle Analyse von Neuropeptiden und biogenen Aminen in Insektengehirnen, die Kontrolle des Fressverhaltens, des zirkadianen Ruhe-/Aktivitätsrhythmus und der Reaktionen auf Umweltstress (Abb. 1).

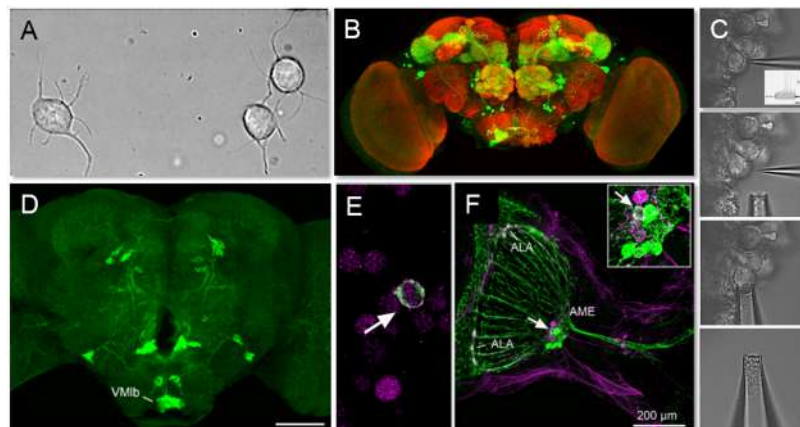
Neuropeptide sind Signalmoleküle des neuroendokrinen Systems, die in vielen biochemischen Prozessen als Neurotransmitter und Hormone fungieren können. In neuropeptidergen Neuronen werden Neuropeptide spezifisch zu verschiedenen nicht-synaptischen Freisetzungstellen transportiert und dort

freigesetzt. Neuropeptide signalisieren in Zeitskalen von Sekunden bis Stunden über eine Volumenübertragung, die weit voneinander entfernte neuronale Schaltkreise im Gehirn von Insekten und Säugetieren gleichermaßen beeinflusst. Ihr weit verbreitetes Vorkommen, strukturelle Vielfalt und räumliche Lokalisation im Nervensystem spiegeln ihren Einfluss auf verschiedenste physiologische Prozesse, neuronale Dysfunktionen und Verhaltensmuster wider. Ihre Funktionen sind aufgrund ihrer Konzentrationsabhängigkeit, posttranslationalen Modifikationen und der Anwesenheit anderer komodulierender Neuropeptide schwer zu charakterisieren. Neuropeptide signalisieren auch in konzertierten Aktionen mit biogenen Aminen, die zum Belohnungssystem von Säugetieren und Insekten gehören. Im Gegensatz dazu werden allgemeine Neurotransmitter wie Acetylcholin synthetisiert und an synaptischen Stellen freigesetzt, wobei Signale im Millisekundenbereich abgegeben werden. Ihre Kooperation und Funktionen bei der Verhaltenssteuerung zu verstehen, ist eine wichtige und aktuelle Aufgabe der Neurowissenschaften.



Abbildung 1: Analyse von Neuropeptiden und biogenen Aminen aus verschiedenen Proben. (A) primäre Zellkultur; (B) MS-basierte Analyse von intakten gfp-markierten Peptidergen Einzelzellen und Zellpopulationen; (C) intakte Nicht-Zielzellen [Neupert et al. (2018) ACS Chem Neurosci, 9: 2089–2096]; (D) gfp-markierte aminerge Zellen; (E) PFA-fixierte immunmarkierte Zellen; (F) Analyse von immunmarkierten Zellen durch quantitative Immunzytochemie. Bildnachweis E und F, Sohail Shoaib.

Figure 1: Analysis of neuropeptides and biogenic amines from different samples. (A) primary cell culture; (B) MS-based analysis of intact gfp-labelled peptidergic single cells and cell populations; (C) intact non-target cells [Neupert et al. (2018) ACS Chem Neurosci, 9:2089-2096]; (D) gfp-labelled aminergic cells; (E) PFA-fixed immunolabelled cells; (F) analysis of immunolabelled cells by quantitative immunocytochemistry. photo credit E and F, Sohail Shoaib.



Das Forschungsteam von Dr. Neupert arbeitet mit verschiedenen Modellarten. Die Fruchtfliege *Drosophila melanogaster* wird aufgrund ihres reichhaltigen genetischen Werkzeugkastens eingesetzt. Weiterhin werden die Schaben *Periplaneta americana* und *Rhyarobia maderae* eingesetzt, da es sich um große, langlebige Schädlinginsekten mit interessantem Verhalten handelt, die Vorteile für die Zell- und Verhaltensanalyse bieten. Grundlegende Merkmale des Zentralnervensystems sind bei Wirbeltieren und Wirbellosen evolutionär konserviert. Somit bieten die weniger komplexen Gehirne von Insekten viele experimentelle Vorteile. Neben dem Einsatz molekularer und genetischer Techniken liegt die Kernkompetenz ihres Teams in massenspektrometrischen Ansätzen wie der matrixunterstützten Laserdesorptions-/Ionisations-(MALDI)-Flugzeit(ToF)-Massenspektrometrie auf Einzelzelebene. Die Massenspektrometrie

ermöglicht hochempfindliche, genaue und globale peptidomische Analysen, die Veränderungen der Neuropeptid-Expression profilieren und gleichzeitig sowohl aktive als auch inaktive Neuropeptide messen können, um ihre Rolle bei vielen biologischen Problemen wie neurodegenerativen Erkrankungen, Schlaf-Wach-Rhythmen und Stoffwechselfunktionen zu verstehen. Ihr Team untersucht auch, welche Mechanismen die Freisetzung von Neuropeptiden/biogenen Aminen auf Einzelzelebene bestimmen.

Darüber hinaus werden Einzelzelltranskriptomik und immunzytochemische Studien eingesetzt, um Einzelzellfunktionen in komplexen neuronalen Schaltkreisen zu bestimmen. Dabei erforscht Dr. Neuperts Team: (1) die Ausstattung reifer Neuropeptide (Neuropeptidom) und deren potentieller Co-

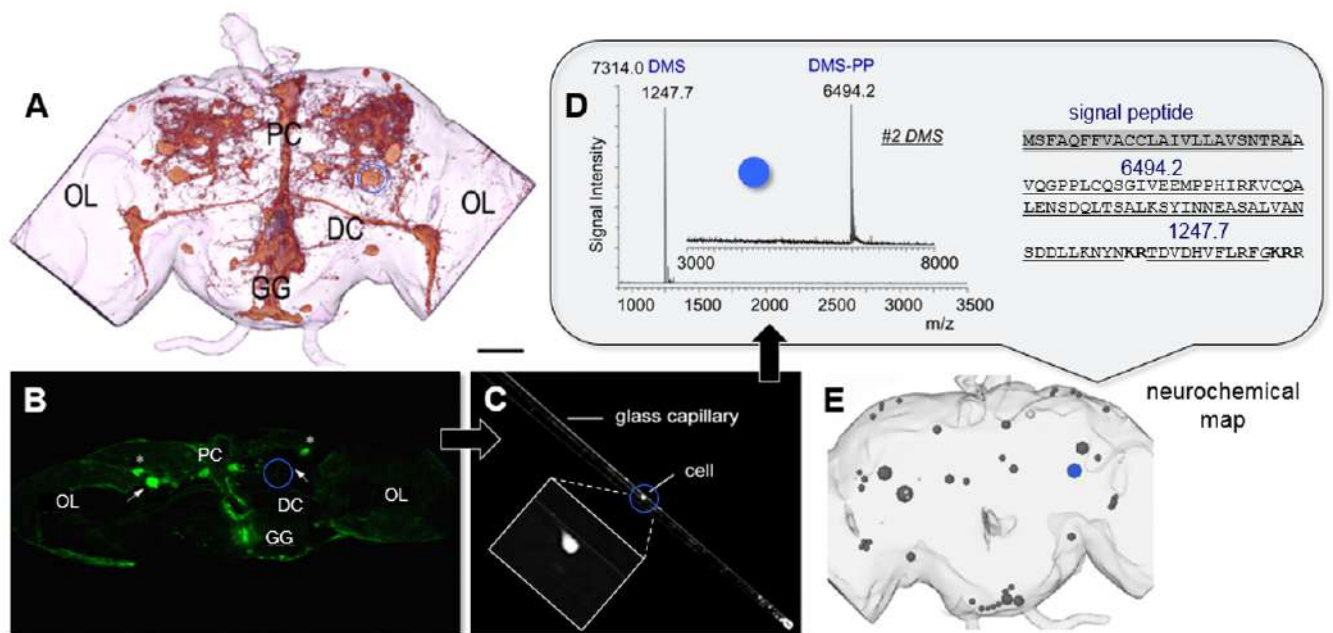


Abbildung 2: Analyse von Neuropeptiden und biogenen Aminen aus verschiedenen Proben. (A) primäre Zellkultur; (B) MS-basierte Analyse von intakten gfp-markierten Peptidergen Einzelzellen und Zellpopulationen; (C) intakte Nicht-Zielzellen [Neupert et al. (2018) ACS Chem Neurosci, 9: 2089–2096]; (D) gfp-markierte aminerge Zellen; (E) PFA-fixierte immunmarkierte Zellen; (F) Analyse von immunmarkierten Zellen durch quantitative Immunzytochemie. Bildnachweis E und F, Sohail Shoaib.

Figure 2: Mapping of neuropeptides to single neurons in the *Drosophila* brain. (A) 3D reconstruction of dimmed-expressing peptidergic neurons; (B) Single cell isolation from an intact brain; (C) Single cell harvesting with glass capillary-aided suction; (D) single cell MALDI-TOF MS analysis and sequence validation using genome data; and (E) Neurochemical mapping. [modified after Diesner et al. (2018) J Am Soc Mass Spectrom. 29(5):890-902. doi: 10.1007/s13361-017-1870-1]

Transmitter einzelner Zellen; (2) potentielle posttranslationale Modifikationen von Neuropeptiden, (3) differentielle Verarbeitungsereignisse von Neuropeptiden, die von einem einzelnen Vorläufergen kodiert werden; (4) Co-Lokalisationen von Neuropeptiden, die von verschiedenen Vorläufern kodiert werden, und (5) peptiderge und aminerge Karten neuronaler Schaltkreise mit Einzelzellauflösung (Abb. 2).

Neben der strukturellen Charakterisierung von Signalmolekülen untersucht ihr Team auch die räumliche Verteilung neuroaktiver Substanzen im Gehirn. Mit der bildgebenden Massenspektrometrie können in definierten Zeitintervallen und unter definierten physiologischen Bedingungen präzise Momentaufnahmen von Neuropeptid-Orten im Gehirn gewonnen werden (Abb. 3). Es müssen bessere quantitative Strategien entwickelt werden, um kleinvolumige Proben einzelner Zellen zu messen. Darüber hinaus müssen die Analyse von Neuropeptid-Freisetzungsstellen und posttranslationalen Modifikationen mit präziseren massenspektrometrischen Bildgebungsverfahren mit verbesserter räumlicher Auflösung in Hirnschnitten kombiniert werden. Dies wird unser Wissen um neue neurochemische Einblicke in neuronale Schaltkreise, neuronale Dysfunktionen, neurodegenerative Mechanismen, physiologische Prozesse und Verhaltensmuster von Organismen erweitern.

Die besondere Stärke der Forschung von Dr. Neupert liegt in der Entwicklung und Implementierung neuartiger Probenvorbereitungsprotokolle und hochempfindlicher Messinstrumente für Nervengewebe und kleinvolumige Proben zur Identifizierung von umweltsignalabhängigen G-Protein-gekoppelten Rezeptoren und Neuropeptiden/biogenetischen Aminen. Gene, ihre Verarbeitungs- und Freisetzungsrhythmen in einzelnen Zellen. Während die Technologie und Ansätze unter Verwendung von Insektenmodellsystemen entwickelt werden, ist der aus ihrer Forschung resultierende technologische Fortschritt weithin auf die groß angelegte Analyse von Peptiden und biogenen Aminen in vielen biologischen Systemen einschließlich des Menschen anwendbar. Das Verständnis der Rolle einzelner Zellen bei der Ätiologie und Entwicklung von Krankheiten kann für die Entwicklung pharmakologischer Behandlungen für eine Vielzahl von Krankheiten, darunter Herz-Kreislauf-Erkrankungen, Diabetes, psychische Erkrankungen, Schlaganfall und Krebs, von wesentlicher Bedeutung sein.

Im Rahmen des neuen Graduiertenkollegs (RTG) „Multiskalenuhren“ unter dem Dach von CINSaT an der Universität Kassel zielt das Forschungsprojekt von Dr. Neupert darauf ab, umweltsignalabhängige GPCRs- und Neuropeptid/biogene Amin-kodierende Gene zu identifizieren einzelner Uhrenzellen auf mehreren Zeitskalen in Larven und adulten *Drosophila*, die Nahrungsaufnahme und Schlaf regulieren.

---

## **Young research group -Single cell analysis within neuronal circuits- at graduate school “multiscale clocks”**

*PD Dr. Susanne Neupert is a young research group leader at the Department of Biology, Animal Physiology at the University of Kassel. She heads the research group “Single cell analysis within neuronal circuits” at the graduate school “multiscale clocks”. She is an internationally recognized expert in neuropeptidomics and single cell mass spectrometry. Dr. Neupert is member of CINSaT since March 2021 and participates in the focus area “Multiscale Bioimaging”. Her team’s interdisciplinary projects bridge neurochemistry, entomology, neuroscience, and neuroethology. Focus of her research is the structural and functional analysis of neuropeptides and biogenic amines in insect brains, controlling*

*feeding behavior, circadian rhythms of rest/activity, and responses to environmental stress (Fig 1).*

*Neuropeptides are signaling molecules of the neuroendocrine system that can act as neurotransmitters and hormones in many biochemical processes. In neuropeptidergic neurons neuropeptides are specifically transported to and released at various non-synaptic release sites. Neuropeptides signal at time scales of seconds to hours via volume transmission affecting far apart neuronal circuits in the brains of insects and mammals, alike. Their wide-spread occurrence, structural diversity and spatial*



localization in the nervous system reflect their influence in an extensive variety of physiological processes, neural dysfunctions, and behavioral patterns. Their functions are difficult to characterize, due to their dependence on concentration, posttranslational modifications, and the presence of other co-modulating neuropeptides. Neuropeptides also signal in concerted actions with biogenic amines that belong to the reward system in mammals and insects. In contrast, general neurotransmitters such as acetylcholine are synthesized and released at synaptic sites, signaling at the scale of milliseconds. To understand their cooperation and functions in the control of behavior is a major, timely task of neuroscience.

Dr. Neupert's research team is working with different model species. The fruit fly *Drosophila melanogaster* is employed due to its ample genetic toolbox. Furthermore, the cockroaches *Periplaneta americana* and *Rhyarobia maderae* are employed, because they are large, long-living pest-insects with interesting behavior, which offer advantages for cellular and behavioral analysis. Basic features of central nervous systems are evolutionary conserved in vertebrates and invertebrates. Thus, the less complex brains of insects offer many experimental advantages. Next to employing molecular and genetic

techniques, her team's main expertise is mass spectrometrical approaches such as matrix assisted laser desorption/ionization (MALDI) time-of-flight (TOF) mass spectrometry at the single cell level. Mass spectrometry enables high-sensitive, accurate, and global peptidomic analyses that can profile neuropeptide expression changes and simultaneously measure both active and inactive neuropeptides to understand their roles in many biological problems, such as neurodegenerative disorders, sleep-wake rhythms, and metabolic function. Her team also explores which mechanisms determine neuropeptide/biogenic amine release at the single cell level.

In addition, single cell transcriptomics and immunocytochemical studies are employed to determine single cell functions in complex neuronal circuits. Thereby, Dr. Neupert's team explores: (1) the equipment of mature neuropeptides (neuropeptidome) and their potential co-transmitter of individual cells; (2) potential post-translational modifications of neuropeptides, (3) differential processing events of neuropeptides that are encoded on a single precursor gene; (4) co-localizations of neuropeptides that are encoded by different precursors, and (5) peptidergic and aminergic maps of neuronal circuits with single cell-resolution (Fig 2).

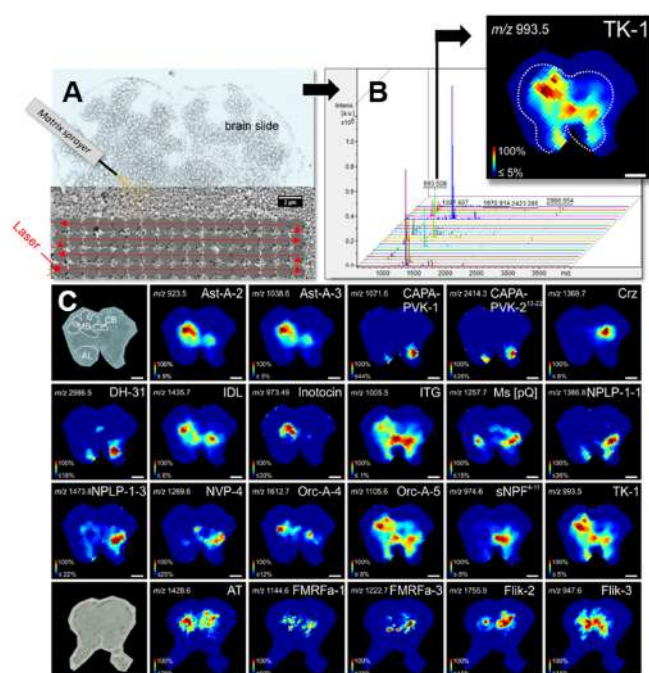


Abbildung 3: Analyse der räumlichen Verteilung von Neuropeptiden in Hirnschnitten der Ameise *Cataglyphis nodus*. (A) Matrixanwendung und Datenerfassung; (B) MALDI-MSI-Ionenkarte eines einzelnen Neuropeptids in einem Gehirnschnitt. MALDI-MSI-Ionenkarten zeigen die räumliche Verteilung von 22 Peptiden aus 16 Genen in zwei beispielhaften Ameisenhirnschnitten. (modifiziert nach: Habenstein et al. (2021) J Neurochem. 158(2):391-412. doi: 10.1111/jnc.15346.]

Figure 3: Analysis of the spatial distribution of neuropeptides in brain sections of the ant *Cataglyphis nodus*. (A) Matrix application and data acquisition; (B) MALDI-MSI ion map of a single neuropeptide in a brain section. MALDI-MSI ion maps show the spatial distribution of 22 peptides from 16 genes in two exemplary ant brain sections. (modified from: Habenstein et al. (2021) J Neurochem. 158(2):391-412. doi: 10.1111/jnc.15346.]

Next to structural characterization of signaling molecules, her team is also investigating the spatial distribution of neuroactive substances in the brain. With imaging mass spectrometry precise snapshots of neuropeptide locations in the brain can be obtained at defined time intervals and under defined physiological conditions (Fig 3). Better quantitative strategies need to be developed to be able to measure small-volume samples of single cells. Furthermore, analysis of neuropeptide release sites and posttranslational modifications need to be combined with more precise mass spectrometric-based imaging techniques with an improved spatial resolution in brain sections. This will be improving our knowledge to new neurochemical insights into neuronal circuits, neuronal dysfunctions, neurodegenerative mechanisms, physiological processes, and behavioral patterns of organisms.

The special strength of Dr. Neupert's research lies in the development and implementing of novel sample preparation protocols and highly sensitive measurement tools for neural tissues and small-volume samples to identify environmental

signal-dependent G-protein coupled receptors and neuropeptide/biogenic amine genes, their processing and releasing rhythms in single cells. While the technology and approaches are developed using insect model systems, the technology advancement resulting from her research is widely applicable to the large-scale analysis of peptides and biogenic amines in many biological systems including humans. Understanding the role of single cells in the etiology and development of disease can be essential for the development of pharmacological treatments for a variety of illnesses, including cardiovascular diseases, diabetes, mental illness, stroke, and cancer.

In the frame of the new research training group (RTG) "multiscale clocks" under the umbrella of CINSaT at the University of Kassel, the research project of Dr. Neupert aims at identifying environmental signal-dependent GPCRs- and neuropeptide/biogenic amine encoding genes of individual clock cells on multiple time scales in larval and adult *Drosophila* regulating feeding and sleeping.

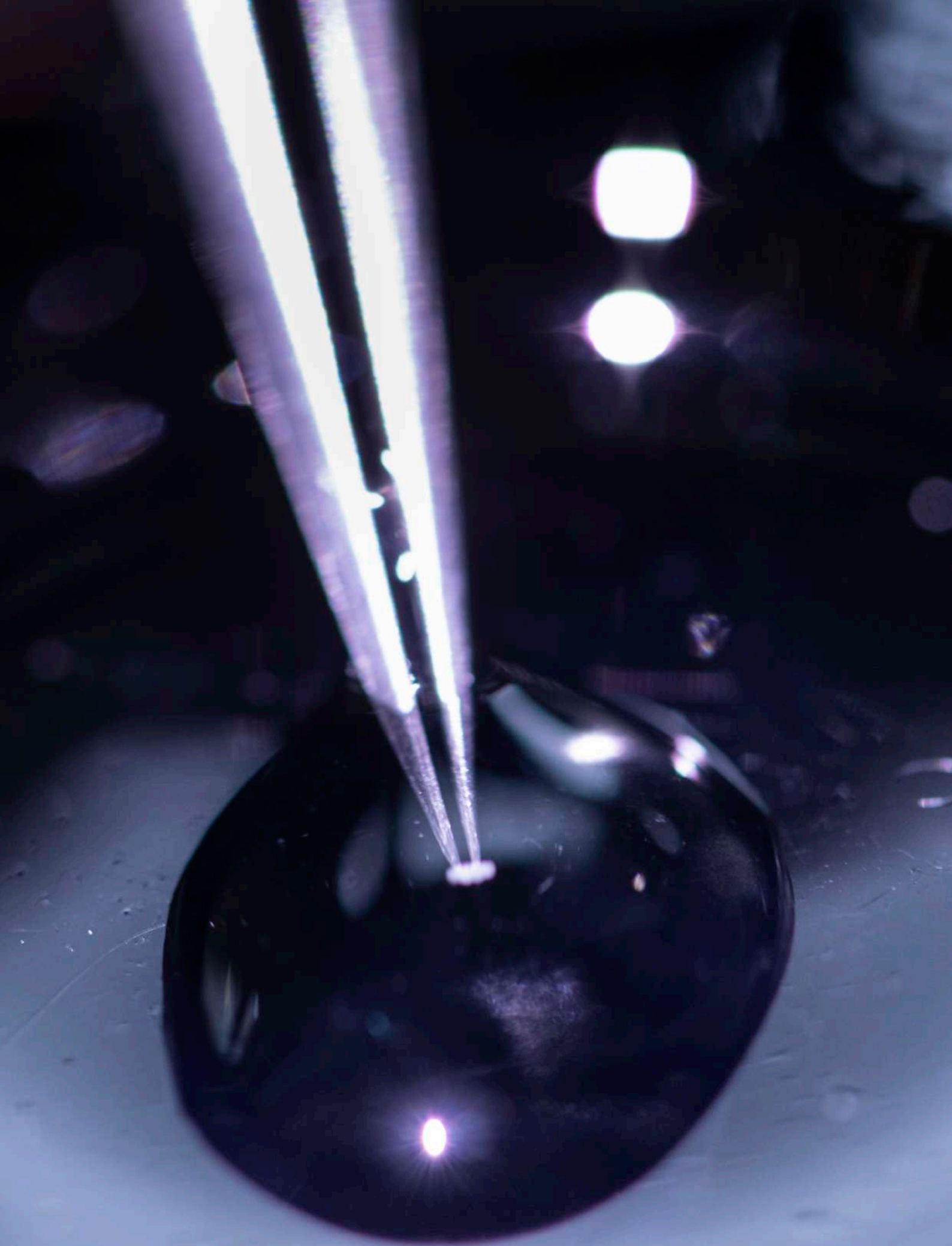
## Weiterführende Information / Further Information

### PD Dr. Susanne Neupert

University of Kassel  
Heinrich-Plett-Str. 40  
34132 Kassel  
AVZ - Raum 0464

Tel: +49 561 804-4727  
Fax: +49 561 804-4146  
E-mail: [sneupert@uni-kassel.de](mailto:sneupert@uni-kassel.de)  
Website: <https://www.uni-kassel.de/fb10/institute/biologie/fachgebiete/tierphysiologie/pd-dr-susanne-neupert-nachwuchsforscherguppe>





# Trennende & Fügende Fertigungsverfahren

*Separating & joining manufacturing processes*



Prof. Dr.-Ing. Prof. h.c. Stefan Böhm

## Einfluss von nanoskaligen Strukturen auf Trennen und Fügen moderner Materialien

Die Forschungsschwerpunkte von Professor Stefan Böhm, Leiter des Fachgebiets für Trennende und Fügende Fertigungsverfahren, weisen viele Schnittstellen mit der Mikro- und Nanowelt auf und begründen die Mitgliedschaft in CINSaT seit März 2021.

Als Teil des Fachbereichs Maschinenbau (FB15) der Universität Kassel zählen die zerspanenden Fertigungsverfahren zu den Forschungsinhalten des Fachgebietes. Ein weiterer Fokus liegt auf modernen Fügeverfahren, wobei speziell schweiß- und klebtechnische Fertigungsverfahren weiterentwickelt werden. Mit diesen Fertigungsverfahren einher geht ebenfalls die Anwendung und Optimierung zerstörender und zerstörungsfreier Prüfverfahren.

Im Schwerpunkt der Schweißtechnik befasst sich Professor Böhm mit den Verfahren des Laser-, Laser-Hybrid-, Laserauftrag-, Magnetpuls-, Elektronenstrahl- und Rührreißschweißens. In sämtlichen dieser Schweißverfahren liegt eine enge Verzahnung der Schweißprozesse mit den Materialwissenschaften vor, da die zugrundeliegende Mikrostruktur in der Fügezone durch die Prozessparameter beeinflusst wird. Durch Variation der Schweißparameter ergibt sich die Möglichkeit, die Eigenschaften der Verbindung zu verändern, wobei nur durch Kenntnis der Vorgänge auf Mikro- und Nanoskala eine anforderungsgerechte Ausführung von Schweißungen möglich wird. In diesem Zusammenhang gehen die Forschungsinhalte zur Schweißtechnik und die fachliche Ausrichtung des CINSaT-Konsortiums Hand in Hand.

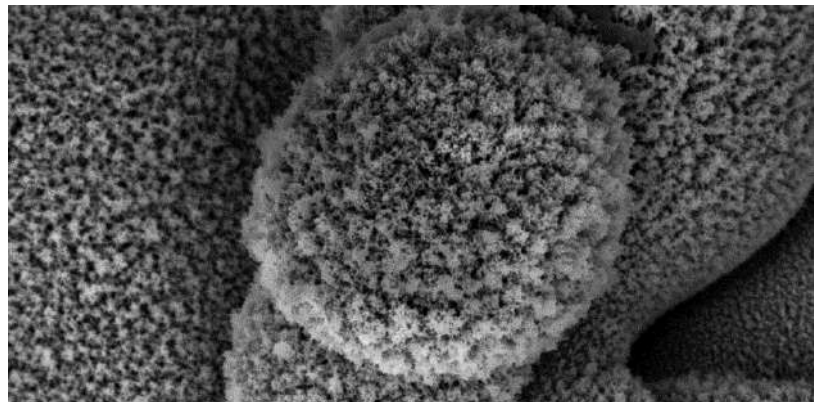
Im Bereich der Klebtechnik forscht Professor Böhm entlang der gesamten Prozesskette. So stehen (Weiter-)Entwicklungen von

Klebstoffen, auch vor dem Hintergrund der Nachhaltigkeit, im Interessensfokus. Hierbei spielen Chemie der Klebstoffsysteme sowie die Additive eine übergeordnete Rolle. In der Arbeitsgruppe Böhm werden daher Klebstoffsysteme formuliert oder für spezifische Anwendungen modifiziert. Da die Klebtechnik als Fügeverfahren sich besonders zur Verbindung verschiedener Werkstoffe anbietet, muss ein Haftungsaufbau auf sämtlichen Oberflächen zuverlässig erfolgen. So werden substratspezifische Vorbehandlungsverfahren, die beispielsweise Laser-, Plasma- oder nasschemische Prozesse beinhalten, für besonders stabile Grenzflächen eingesetzt. Die hierfür verantwortlichen physikalischen und chemischen Wechselwirkungen finden auf Nanoskala statt und spiegeln sich somit in CINSaT wieder.

Das Themenfeld der Werkzeugentwicklung wird von Professor Böhm primär durch Sägen und Schneiden von schwierig zerspanbaren Werkstoffen wie Steinen und Verbundmaterialien abgedeckt. Bei modernen Zerspanwerkzeugen spielen neben der Kantengeometrie auch die Zusammensetzung und Beschichtung eine übergeordnete Rolle, da Schneiden über lange Zeiträume scharf bleiben müssen. Hierfür werden von Professor Böhm Verfahren verwendet, die auf Mikro- bzw. Nanoskala eine Geometrie- und Werkstoffveränderung vornehmen. So können CVD-Beschichtungen oder die Laserimplantierung harter Partikel zu einer Verringerung von Reibung und Verschleiß der Werkzeugoberflächen führen. Auch in diesem Forschungsbereich bestehen viele Schnittstellen mit CINSaT.

Abbildung 1: Mittels Laser erzeugte Nanostruktur auf rostfreiem Stahl als klebtechnische Vorbehandlung.

Figure 1: Laser-generated nanostructure on stainless steel as pretreatment for adhesive bonding.





---

## ***Influence of nanoscale structures on cutting and joining of modern materials – Prof. Dr.-Ing. Stefan Böhm***

*The main research areas of Professor Stefan Böhm, Head of the Department for Cutting and Joining Manufacturing Processes, have many interfaces with the micro- and nano-world and justify the membership in CINSaT since March 2021.*

*As part of the mechanical engineering department (FB15) of the University of Kassel, the machining processes are part of the research content of chair. Another focus is on modern joining processes, where welding and adhesive manufacturing processes being further developed. The application and optimization of destructive and non-destructive testing methods also go along with these manufacturing processes.*

*In the focus of welding technology, Professor Böhm deals with the processes of laser, laser hybrid and laser cladding, magnetic pulse, electron beam and friction stir welding. The development of all of these welding methods is closely interlinked with materials science, as the underlying microstructure in the joining zone is influenced by the process parameters. By varying the process, it is possible to change the properties of the weld seam, whereby a requirement-based execution of welds is only possible with knowledge of the mechanisms on the micro- and nano-scale. In this context, the research content on welding technology and the technical orientation of the CINSaT consortium go hand in hand.*

*In the field of adhesive technology, Professor Böhm conducts research along the entire process chain. The development of adhesives, also against the background of sustainability, are in the focus of interest. The chemistry of the adhesive systems and the additives play a major role here. In the working group, adhesive systems are therefore formulated or modified for specific applications. Since adhesive bonding is particularly suitable as a joining method for a connection of different materials, adhesion must be built up reliably on all surfaces. Substrate-specific pretreatment processes, which include laser, plasma or wet chemical processes, for example, are used for particularly stable interfaces. The physical and chemical interactions responsible for this take place on a nanoscale and are thus reflected in CINSaT.*

*The topic of machining and tool development is primarily considered through sawing and cutting difficult-to-machine materials such as stone and composite. In such cutting tools, the composition and coating of the cutting tools play a major role in addition to the edge geometry, since cutting edges have to remain sharp over long periods of time. For this purpose, Professor Böhm uses methods to change the geometry and material on a micro or nano scale. For example, CVD coatings or the laser implantation of hard particles can lead to a reduction in friction and wear on the tool surfaces. There are also many interfaces with CINSaT in this research area.*

---

## **Weiterführende Informationen / Further Information**

### **Prof. Dr.-Ing. Prof. h.c. Stefan Böhm**

Universität Kassel  
Kurt-Wolters-Str. 3  
34125 Kassel

Tel: +49 561 804-3141  
E-mail: [s.boehm@uni-kassel.de](mailto:s.boehm@uni-kassel.de)  
Website: <https://www.tff-kassel.de>





# Werkstoffe des Bauwesens & Bauchemie

## Structural Materials & Construction Chemistry



Prof. Dr. rer. nat. Bernhard Middendorf

Das Team von Prof. Middendorf, Leiter des Fachgebiets Werkstoffe des Bauwesens und Bauchemie, konzentriert sich in der Forschung im Wesentlichen auf zementäre Strukturen und Spezialbetone wie Ultrahochleistungsbetone (UHPC), Schaumbetone und Betone mit alternativen umweltfreundlichen Bindemitteln. Alle wissenschaftlichen Fragen im Bereich der Spezialbetone beziehen sich auf Eigenschaftsoptimierungen; z.B. ist beim UHPC die Druckfestigkeit im Vergleich zu "normalem" Beton um ein Vielfaches höher, was aus einem packungsdichteoptimierten Mikrogefüge resultiert, welches auch für die wesentlich höhere Dauerhaftigkeit verantwortlich ist. Diese Gefügedichtigkeit der zementgebundenen Werkstoffe ist auf die Verwendung reaktiver Feinstoffe im Nanometerbereich (Silikastaub) und dem sehr geringen Wasser/Bindemittel-Verhältnis bei der Herstellung zurückzuführen, welcher wiederum nur bei Verwendung von leistungsfähigen Betonzusatzmitteln realisierbar ist, die eine gute Verarbeitbarkeit bei derart geringen Zugabemengen an Wasser ermöglichen.

Übergeordnetes Ziel ist die Korrelation mechanischer Eigenschaften mit der Gefügebildung auf mikro- und submikroskopischer Ebene, die mittels  $\mu$ -Computertomographie, Licht-, Rasterelektronen- und anderen Analysemethoden untersucht wird. Die Hydratationsmechanismen zementärer Materialien sind bis dato noch immer nicht vollständig entschlüsselt, insbesondere was die sehr frühen Reaktionen betrifft, z. B. bei der Auflösung reaktiver Zementklinkerphasen und der Keimbildung der wichtigsten festigkeitsgebenden Phasen, die als Calcium-Silikat-Hydrate (C-S-H-Phasen) zusammengefasst werden. Um diese Prozesse zu verstehen, sind auch Betrachtungen auf der Nanoskala unabdingbar. Aus diesem Grund werden am Fachgebiet Werkstoffe des Bauwesens atomistische Simu-

lationen in Kombination mit Experimenten durchgeführt, um das grundlegende Verständnis über die Hydratationsmechanismen von Portlandzement zu verbessern (Abb. 2). Atomistische Simulationen unter Verwendung von Reactive Force Fields (ReaxFF) in Kombination mit Metadynamik werden als effektiver Lösungsweg angesehen, um die chemischen Reaktionen an den Phasengrenzflächen zu untersuchen und zu verstehen. Dieser Ansatz wird verwendet, um die Hydratation der Zementklinkerphasen zu simulieren und den vollständigen Reaktionsweg für die Polymerisation der C-S-H-Phasen zu untersuchen. Ferner wird eine detaillierte experimentelle Studie für die Hydratation der reinen Klinkerphasen Alit ( $\text{Ca}_3\text{SiO}_5$ ) und Belit ( $\text{Ca}_2\text{SiO}_4$ ) durchgeführt, um deren Reaktivität durch Vergleich mit der atomistischen Simulation zu entschlüsseln. Diese vergleichende Studie von Computermodellierung und Laborexperimenten wird vertiefte Kenntnisse über die bisher unbekannten Reaktionsmechanismen der Zement erhärtung liefern. Aus den Ergebnissen wird ein gezielter Ansatz zur Verbesserung der Reaktivität von Zementklinkern bei der künftigen Entwicklung nachhaltiger Zemente möglich sein.

Prof. Middendorf leitet zusammen mit Prof. Niendorf den CINSaT-Forschungsschwerpunkt *Nanomaterialien*. Ein zentrales Thema dieses Schwerpunktes im CINSaT beinhaltet auch das Forschungsthema SMARTCon- Shape Memory Alloy Research for Technology of CONstructions. Die Nutzung von neuartigen, eisenbasierten Formgedächtnislegierungen in modernen Verbundwerkstoffen und Konstruktionen liegen im Fokus dieses angestrebten Verbundvorhabens, welches derzeit in der finalen Antragsphase zu einem Sonderforschungsbereich/Transregio steht.

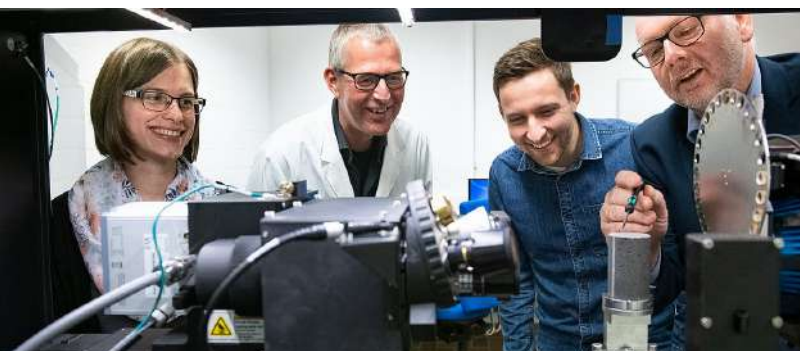


Abbildung 1: Bild von Prof. Middendorf und Kollegen am  $\mu$ -CT. Bild vom Termin am 28.10.2021

Figure 1: Image of Prof. Middendorf and colleagues at the  $\mu$ -CT. Image from the appointment on 28.10.2021



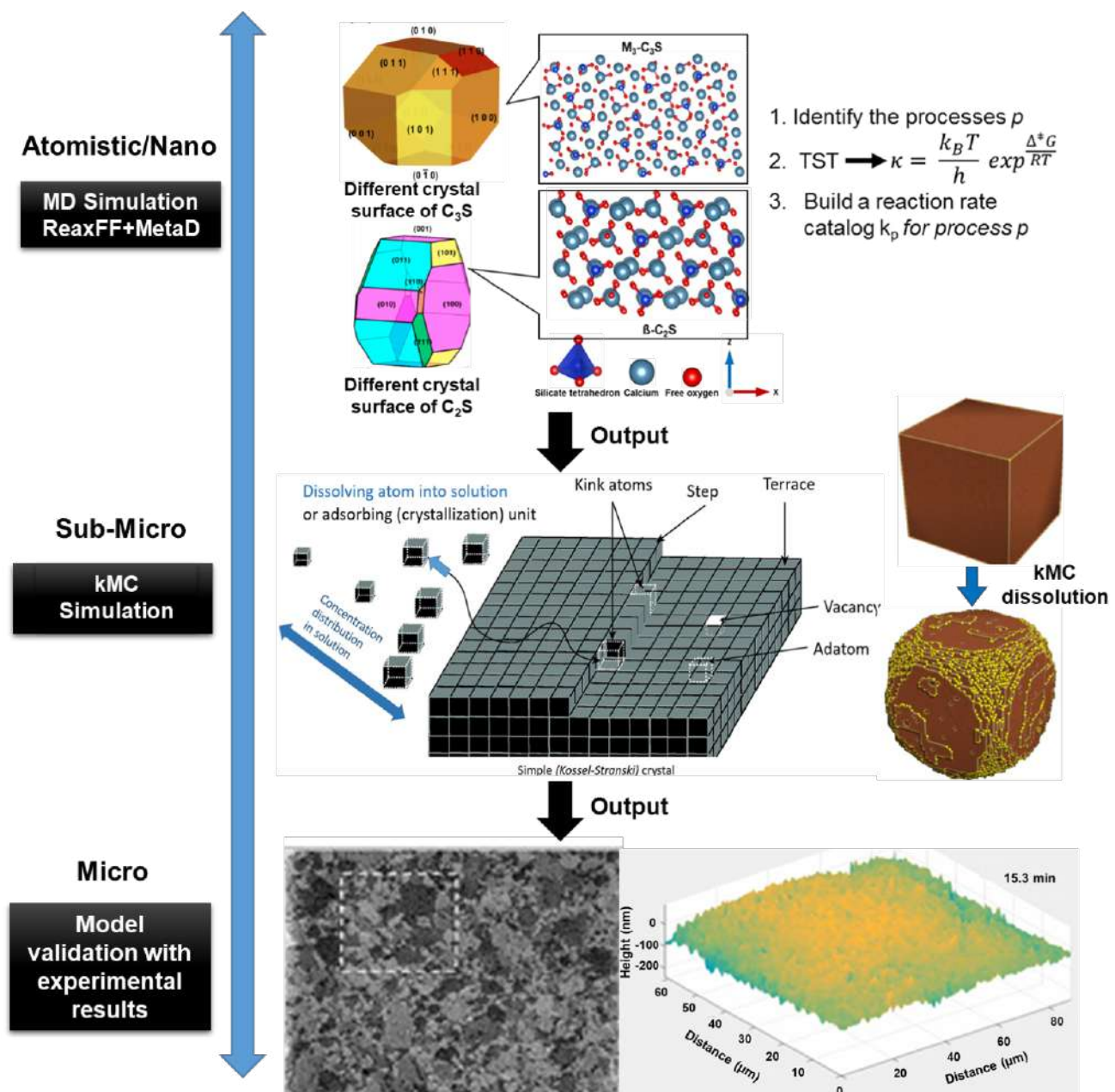


Abbildung 2: Die Verknüpfung zwischen den Skalen basiert auf der Übergangszustandstheorie (TST), um die individuellen Raten der atomistischen MetaD-Simulationen zu berechnen, die in die kMC-Simulationen eingespeist werden, um die mesoskopische Auflösungsrate zu erhalten. Die Ergebnisse der kMC-Simulationen zur hochskalierten Morphologie und den Reaktionsraten werden mit experimentellen Ergebnissen verglichen.

Figure 2: Interaction between the scales is based on the transition state theory (TST) to calculate the individual rates of the atomistic metaD simulations which are feeded to run the kMC simulations to obtain the mesoscopic dissolution rate. The kMC output on upscaled morphology and reaction rates are compared with experimental results.



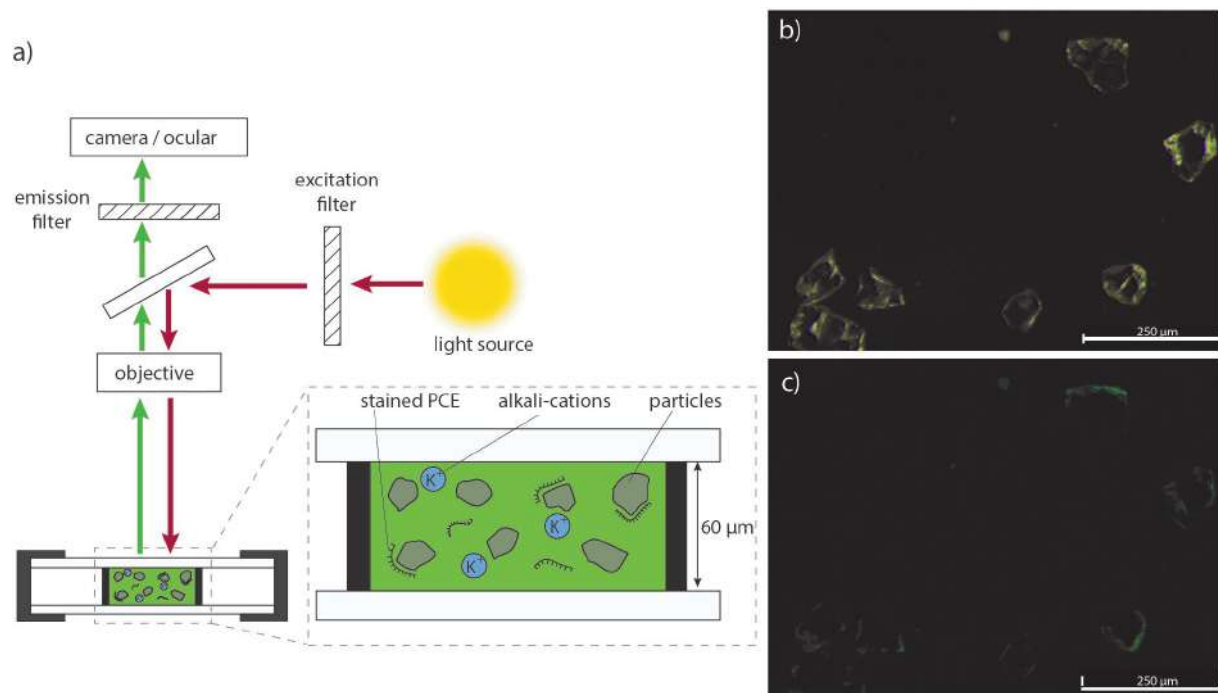


Abbildung 3: a) Setup von in situ Messung der PCE-Adsorption im Fluoreszenz-Mikroskop [WE21], (b) Hüttensandmehlpartikel im Auflicht, (c) Verteilung der Fließmittel angezeigt durch das Fluoreszenzsignal.

Figure 3: a) Setup of in situ measurements of PCE-adsorption using a fluorescence-microscope [WE21], (b) particles of Ground granulated blast furnace slag, (c) distribution of PCE by fluorescence in green.

Herr Dr. Alexander Wetzel, akademischer Rat im Fachgebiet von Prof. Middendorf, beschäftigt sich in seiner Forschung u.a. mit dem Adsorptionsverhalten von Fließmitteln (organische Zusatzmittel) auf mineralischen Oberflächen. Diese Fließmittel sind notwendig, um ein niedriges Wasser/Bindemittel-Verhältnis und damit gute Eigenschaften von Hochleistungsbetonen zu ermöglichen. Die Größen der Fließmittel variieren im Bereich von 5-20 nm und sind mit traditionellen mikroskopischen Methoden nicht sichtbar. Durch Anfärben (Staining) der Fließmittel mit Fluorochrom wird das Fließmittel im Fluoreszenzmikroskop oder konfokalen Laserscanmikroskop sichtbar. Im Rahmen der CINSaT-Kooperation wird ein Laser-Scanning-Mikroskop aus der Gruppe von Prof. Müller (Fachbereich 10) für hochauflösende Analysen genutzt.

Die in-situ-Methode, die im Rahmen des Projekts entwickelt wurde, ist ein hilfreiches Werkzeug, um die benötigten Fließmittel und andere chemische Zusatzmittel für die Verwendung in Betonen zu bestimmen, die aufgrund der Verwendung neuer und unterschiedlicher Komponenten immer komplexer werden. Zementfreie Bindemittelsystem auf Basis alkalisch aktivierter Materialien stellen eine CO<sub>2</sub>-ärmere Alternative dar. Diese Bindemittelsysteme basieren auf alumo-silikatischen Ausgangsstoffen, die im Vergleich zu Portlandzement keine oder unzureichende festigkeitsbildende Reaktion beim Anmischen mit Wasser zeigen. Durch Alkalilösungen aktiviert, können sie jedoch als Bindemittel eingesetzt werden und erreichen hohe Festigkeiten. Fließmittel, wie oben beschrieben, sind in solchen Systemen mit hohem pH-Wert nicht wirksam. Aktuell wird die Kompatibilität von Fließmitteln unterschiedlicher chemischer Strukturen und diverser alkalischer Anreger und Zementersatzstoffe erforscht (Abb. 3).

The team of Prof. Middendorf, head of the Department Construction Materials and Construction Chemistry, focuses its research mainly on cementitious structures and special concretes such as ultra-high performance concretes (UHPC), foamed concretes and concretes with alternative environmentally friendly binders. All scientific questions in the field of special concretes relate to property optimization; for example, in the case of UHPC, the compressive strength is much higher compared to "normal" concrete, resulting from a microstructure optimized for packing density, which is also responsible for the much higher durability. This microstructure density of cementitious materials is due to the use of reactive fines in the nanometer range (silica fume) and the very low water/binder ratio during production, which in turn can only be achieved by using high-performance concrete admixtures that allow good workability with such low amounts of water added.

The overall objective is to correlate mechanical properties with microstructure formation at the micro- and sub-microscopic level, which will be investigated by  $\mu$ -computed tomography (Fig. 1), light, scanning electron and other analytical methods. To date, the hydration mechanisms of cementitious materials are still not fully deciphered, especially with respect to the very early reactions, e.g., in the dissolution of reactive cement clinker phases and the nucleation of the main strength-giving phases, which are summarized as calcium silicate hydrates (C-S-H phases). In order to understand these processes, considerations on the nanoscale are also necessary. For this reason, atomistic simulations in combination with experiments are performed at the Department of Structural Materials and Construction Chemistry to improve the fundamental understanding of the hydration mechanisms of Portland cement (Fig. 2). Atomistic simulations using Reactive Force Fields (ReaxFF) in combination with metadynamics are considered an effective approach to study and understand the chemical reactions at the phase interfaces. This approach is used to simulate the hydration of the cement clinker phases and to study the complete reaction pathway for the polymerization of the C-S-H phases. Furthermore, a detailed experimental study for the hydration of the pure clinker phases Alite ( $\text{Ca}_3\text{SiO}_5$ ) and Belite ( $\text{Ca}_2\text{SiO}_4$ ) is carried out to decipher their reactivity by comparison with the atomistic simulation. This comparative study of computer modeling and laboratory experiments will provide in-depth

knowledge of the previously unknown reaction mechanisms of cement hardening. From the results, a targeted approach to improve the reactivity of cement clinkers will be possible in the future development of sustainable cements.

Together with Prof. Niendorf, Prof. Middendorf leads the CINSaT research focus on nanomaterials. A central theme of this focus in CINSaT also includes the research topic SMARTCon - Shape Memory Alloy Research for Technology of CONstructions. The use of novel, iron-based shape memory alloys in modern composites and constructions is the focus of this intended joint project, which is currently in the final application phase for a Collaborative Research Center Transregio.

Dr. Alexander Wetzel, lecturer in the department of Prof. Middendorf, deals in his research among other things with the adsorption behaviour of superplasticizers (organic additives) on mineral surfaces. These superplasticizers are necessary to enable a low water/binder ratio and thus good properties of high-performance concretes. The sizes of superplasticizers vary in the range of 5-20 nm and are not visible by traditional microscopic methods. By staining the superplasticizer with fluorochromes, the superplasticizer becomes visible in a fluorescence microscope or confocal laser scanning microscope. As part of the CINSaT collaboration, a laser scanning microscope from Prof. Müller's group (Faculty 10) is used for high-resolution analyses. This in-situ method, developed as part of the project, is a useful tool to determine the required superplasticizers and other chemical admixtures for use in concretes, which are becoming increasingly complex due to the use of new and different components. Binder systems based on alkali-activated materials provide a lower  $\text{CO}_2$  alternative compared to Ordinary Portland Cement. These binder systems are based on aluminosilicates precursors which, compared to Portland cement, show no or insufficient strength-forming reaction when mixed with water. However, activated by alkali solutions, they can be used as binders and achieve high strengths. Superplasticizers, as described above, are not effective in such high pH systems. Currently, the compatibility of superplasticizers of different chemical structures and various alkaline excitants and cement substitutes is being researched (Fig. 3).

## Literatur / Literature

- [1] Salah Uddin, K. M. (2020) 'Elucidation of Chemical Reaction Pathways in Cementitious Materials' (Doctoral dissertation) Faculty of Civil and Environmental Engineering, University of Kassel. <https://doi.org/10.17170/kobra-202009211835>
- [2] Salah Uddin, K. M.; Middendorf, B. (2019), Reactivity of different crystalline surfaces of C3S during early hydration by the atomistic approach, *Materials* 2019, 12(9), 1514; <https://doi.org/10.3390/ma12091514>
- [3] Wetzel, A., Link, J. and Middendorf, B. (2021), Adsorption of PCE in alkali-activated materials analysed by fluorescence microscopy. *Journal of Microscopy*. Accepted Author Manuscript. <https://doi.org/10.1111/jmi.13066>
- [4] Schleiting, M.; Wetzel, A.; Krooß, P.; Thiemicke, J.; Niendorf, T.; Middendorf, B.; Fehling, E. (2020): Functional microfibre reinforced ultra-high performance concrete (FMF-UHPC). *Cem. Concr. Res.* 130, 105993.
- [5] Singh, N.B.; Middendorf, B. (2020): Geopolymers as an alternative to Portland cement: An overview. *Constr. Build. Mater.* 237, 117455.
- [6] Arend, J.; Wetzel, A.; Middendorf, B. (2018): In-situ investigation of superplasticizers: From fluorescence microscopy to concrete rheology. *Cem. Concr. Res.* 113 178-185.
- [7] Wetzel, A.; Middendorf, B. (2019): Influence of silica fume on properties of fresh and hardened ultra-high performance concrete based on alkali-activated slag, *Cem. Concr. Comp.* 100, 53-59.

## Weiterführende Information / Further Information

### Prof. Dr. rer. nat. Bernhard Middendorf

Universität Kassel  
Mönchebergstraße 7  
34125 Kassel  
Raum 1109

Tel: +49 561 804-2601  
Fax: +49 561 804-2662  
E-mail: [middendorf@uni-kassel.de](mailto:middendorf@uni-kassel.de)  
Website: <https://www.uni-kassel.de/fb14bau/institute/institut-fuer-konstruktiven-ingenieurbau-iki/werkstoffe-des-bauwesens-und-bauchemie>

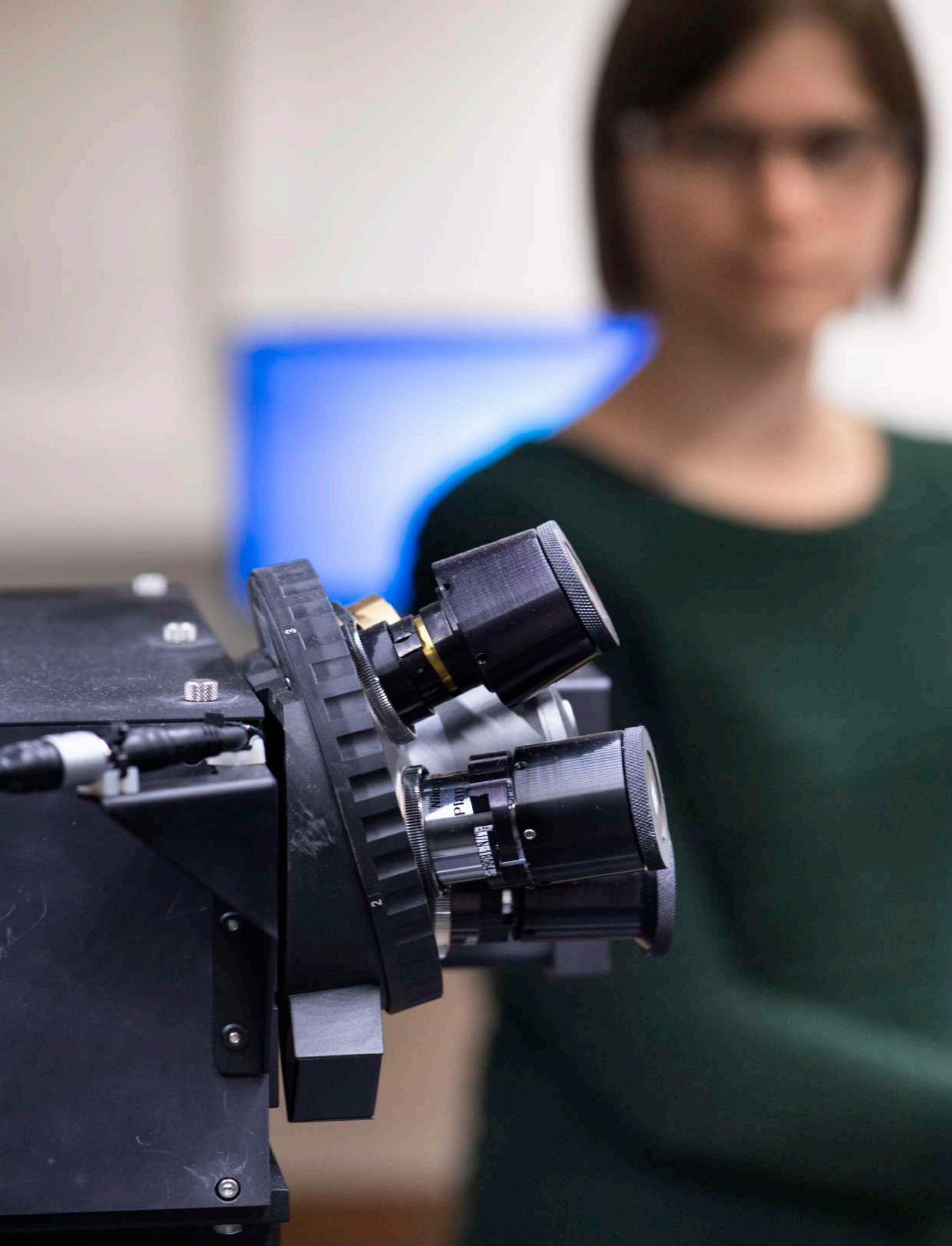


### Dr. phil. nat. Alexander Wetzel

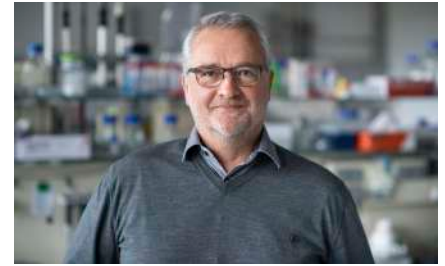
Universität Kassel  
Mönchebergstraße 7  
34125 Kassel  
Raum 1106

Tel: +49 561 804-2603  
Fax: +49 561 804-2662  
E-mail: [alexander.wetzel@uni-kassel.de](mailto:alexander.wetzel@uni-kassel.de)  
Website: <https://www.uni-kassel.de/fb14bau/institute/institut-fuer-konstruktiven-ingenieurbau-iki/werkstoffe-des-bauwesens-und-bauchemie>









Prof. Dr. Markus Maniak

### Maßgeschneiderte Proteinwerkzeuge für filigrane Arbeiten in lebenden Zellen

Freilebende Einzelzellen, wie die Amöbe *Dictyostelium*, welche das Modellsystem darstellt, an dem das Fachgebiet Zellbiologie exemplarisch forscht, kann man als vollwertige Organismen ansehen, in denen alle Strukturen und Funktionen in miniaturisierter Form vorliegen. Insbesondere die Endocytose, bei der in Partikel gebundene Nährstoffe aus der Umgebung aufgenommen, verdaut und unverdauliche Bestandteile abgegeben werden, sind der Art und Weise wie z.B. der Mensch Nahrung verwertet, nicht unähnlich. Sinngemäß Gleiches trifft auf die Wege von Lipiden zu, die im Menschen zwischen Darm, Leber, Fettgewebe und verbrauchenden Organen transportiert werden, was den verschiedenen Organellen innerhalb einer Zelle entspricht.

Hier sollen allerdings nicht die zellphysiologischen Fragestellungen diskutiert werden, denen das Fachgebiet nachgeht,

sondern der Werkzeugkasten beleuchtet werden, mit dem man die Zellfunktionen auf molekularer Ebene untersuchen kann. Die Werkzeuge sind dabei molekulargenetisch neu zusammengesetzte Proteine, in denen zwei oder mehr Eigenschaften in einer Weise kombiniert werden, die es so in der Natur nicht gibt.

Bei der Konzeption eines Werkzeugs ist zu bedenken, dass es an einem Ort in der Zelle eingesetzt werden soll, der nicht seinem natürlichen Zielort entspricht. Dazu haben wir neue Proteine zunächst in zahlreichen Kombinationen zusammengestellt und sie ein molekulares „Tauziehen“ in der Zelle veranstalten lassen, um diejenigen Komponenten zu finden, die am stärksten an einen gewünschten Ort binden. So wird z.B. das Protein ABP34, das alleine bevorzugt in der corticalen Randzone der Zelle vorkommt, vom Protein Vacuolin auf die Oberfläche von endosomalen Vesikeln gezerrt (Abb.1).

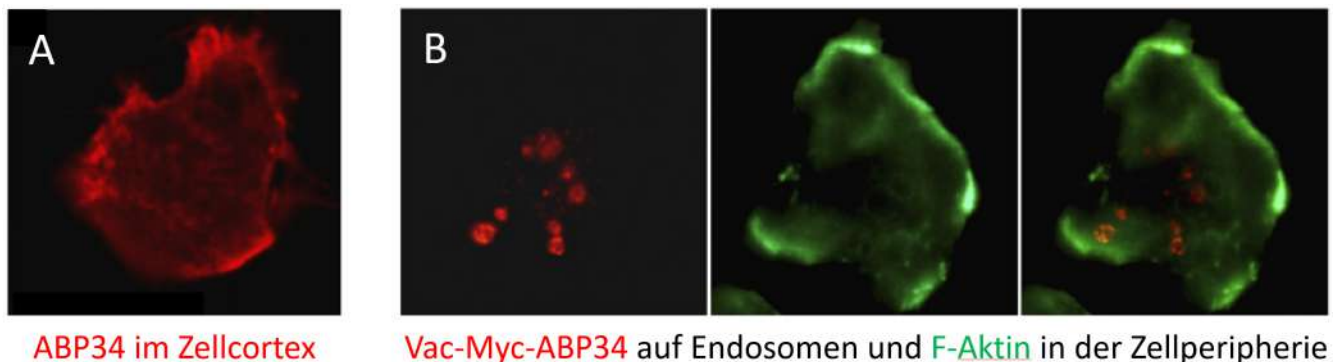


Abbildung 1: A: Das Aktin-bindende Protein mit der Größe 34 kDa (ABP34) ist entsprechend seiner namensgebenden Eigenschaft am Rand der Zelle, wo sich Aktin aufhält, zu finden. B: Ein neu komponiertes Protein aus drei Bestandteilen, nämlich dem endosomalen Vacuolin, einem Myc-Anteil zum Nachweis im Mikroskop, und dem beschriebenen ABP34 (Vac-Myc-ABP34) entscheidet sich für die Lokalisation auf Endosomen (die roten Bläschen sind bis zu 700 nm groß). Der Zellcortex, in dem Aktin (grün) zum Vergleich nachgewiesen ist, bleibt hingegen leer. Ganz rechts: Überlagerung des roten und grünen Bildes. (Abb.: Christian Schmauch).

Figure 1: A: The actin-binding protein of 34 kDa (ABP34) is found at the edge of the cell where actin resides, as its name already implies. B: A three-component newly constructed protein, consisting of the endosomal vacuolin protein, a Myc-moiety for microscopic detection, and the described ABP34 (Vac-Myc-ABP34) chooses to localize on endosomes (red vesicles, up to 700 nm in size). In contrast, the cell cortex remains empty, where actin (green) is counterstained for comparison. Far right: superposition of red and green images. (Fig. by Christian Schmauch).

Die jeweiligen Sieger unter den Proteinbausteinen in diesem Wettbewerb sind dann die Kandidaten für den zweiten Schritt. Hierbei wird ein Baustein mit hoher Affinität für einen bestimmten Ort neu kombiniert mit einem weiteren Protein bestimmter robuster Funktion, aber niedriger Ortspräferenz. Die zweite Komponente soll dann lokal einen biochemischen Prozess anstoßen. Hier war die Entstehung von filamentförmigem Aktin auf der Oberfläche von Lipidtröpfchen bzw. Peroxisomen gewünscht (Abb. 2).

Die unten gezeigte Rekrutierung von Aktin bindet jeweils eine bestimmte Sorte von Organellen in einer Wolke zusammen. Diese Beobachtung ist auch überraschend, weil die zielgerichtete Entfernung einer Aktinhülle von Endosomen, wo sie natürlicherweise vorhanden ist, diese Organellen verklumpen lässt. Auch technisch gesehen, bergen diese Ansätze immer wieder Überraschungen, z.B. wird das im obigen Beispiel gut funktionierende Protein VASP, wenn künstlich auf Endosomen verbracht, eine völlig überschießende Reaktion erzeugen, bei der

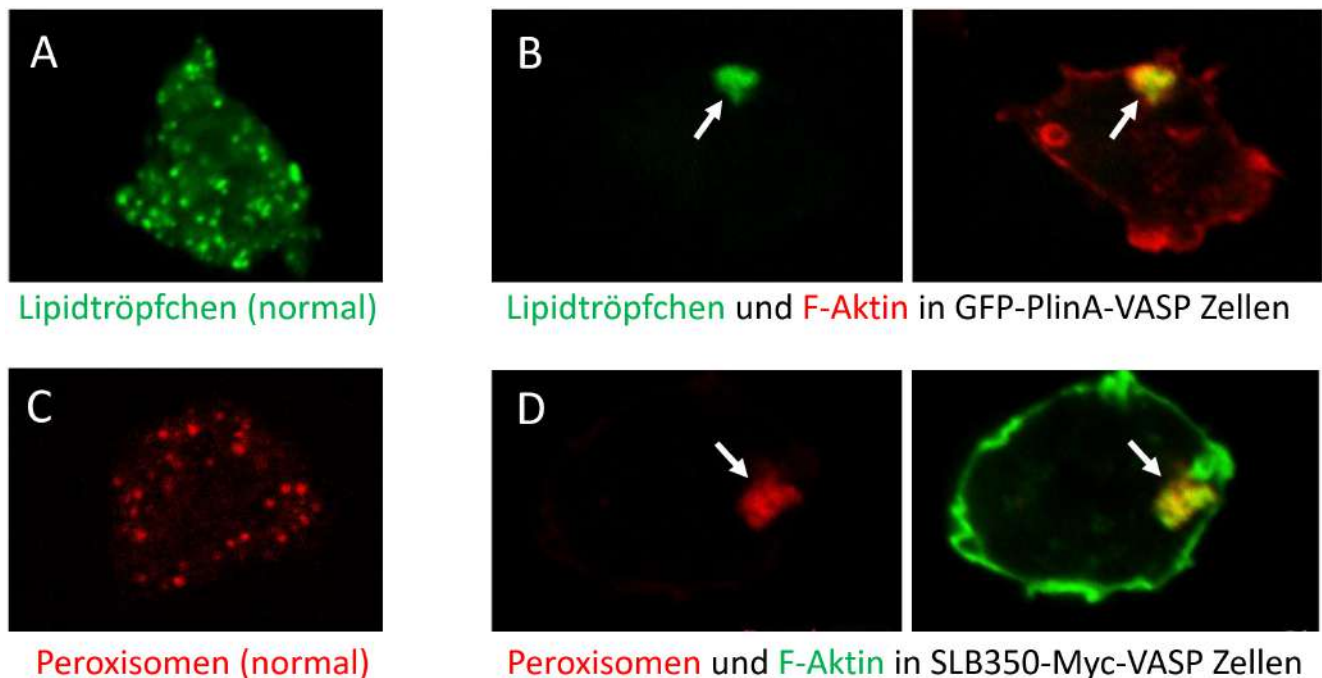


Abbildung 2: A: In einer „normalen“ Zelle sind die Lipidspeicherorganellen (chemisch grün gefärbt) zufällig verteilt. B: In Zellen, die GFP-PlinA-VASP produzieren, kann man die Lipidtröpfchen direkt erkennen, weil sie das grün fluoreszierende Proteins (GFP) an Perilipin (PlinA) gekoppelt tragen. Das zusätzlich angehängte VASP-Protein stimuliert lokal die Polymerisation von filamentösem (F-)Aktin (rot und Mischfarbe gelb in der Überlagerung ganz rechts), was zur Zusammenballung der Lipidtröpfchen führt. Der gleiche Effekt ist für molekulargenetisch rot markierte Peroxisomen (C) zu sehen, wobei VASP (in D) durch das Protein SLB350 und die Peroxisomenoberfläche rekrutiert wurde. In diesem Beispiel ist F-Aktin in der Überlagerung (ganz rechts) grün gefärbt. (Abb.: Susan Claußner).

Figure 2: A: In a "normal" cell, lipid storage organelles (stained in green by a chemical compound) are randomly distributed. B: In cells producing GFP-PlinA-VASP, the lipid droplets can be seen directly because they carry the green fluorescent protein (GFP) coupled to perilipin (PlinA). The additionally attached VASP protein serves to locally stimulate the polymerization of filamentous (F-)actin (red and green appear in yellow in the overlay on the far right), ultimately leading to the aggregation of the lipid droplets. The same effect is seen for peroxisomes labelled in red by molecular methods (C), where VASP (in D) was recruited to the peroxisome surface by the protein SLB350. In this example, F-actin is stained green in the overlay (far right). (Fig. by Susan Claußner).

ein Proteinklumpen in der Zelle entsteht, der, wie ein Krebsgeschwür im Körper, zu riesigen Ausmaßen heranwächst und die Zellgesundheit massiv beeinträchtigt.

Ziel der dritten Entwicklungsstufe der Werkzeuge ist die Rekrutierung jeweils zweier verschiedener Organellentypen aneinander. Voraussetzung dafür ist die Kombination von zwei Bausteinen, die eine ähnlich starke Bindung an die jeweils spezifische Organellenoberfläche aufweisen. So konnten wir das Endoplasmatische Retikulum mit Lipidtröpfchen verbinden oder Aggregate, bestehend aus Peroxisomen und Lipidtröpfchen, herstellen. Ein fluoreszierender dritter Baustein (z.B. GFP) erlaubt die direkte Visualisierung des Erfolges (Abb. 3).

Zuletzt stellt sich vielleicht doch noch die Frage nach dem Zweck dieser Werkzeuge. Entgegen der, auch unter erfahrenen Biologen, weit verbreiteten Meinung, ist die Zelle nicht nur ein Sack voller separater Organellensorten in jeweils unterschiedlich großer Anzahl. Jüngere Untersuchungen zeigen stattdessen auf vielfältige Weise, dass (fast) jede Organelle mit jeder Anderen in engen Kontakt tritt, und sei es auch nur vorübergehend. Diese Kontakte stellen die Basis für den Austausch verschiedener Stoffe zwischen den Organellen dar, von Calcium, über Membranlipide und Zwischenprodukten gemeinsamer Stoffwechselwege, bis hin zu Proteinen, die in einer Organelle so prozessiert werden, dass sie in einer anderen ihre biologische Funktion erfüllen. Zur Klärung solcher Fragen will das FG Zellbiologie mit den oben dargestellten Werkzeugen auch künftig Beiträge leisten.

---

## Customized protein tools for delicate work in living cells

*Free-living single cells, such as the amoeba Dictyostelium, represent the research model system of the Department of Cell Biology. These cells can be regarded as fully-fledged organisms, in which all structures and functions are present in miniaturized form. This is true in particular for endocytosis, where nutrients bound in particles are taken up from the environment, digested, and indigestible components are released. Overall, this process is similar to the way humans utilize food. In principle, the same applies to the pathways of lipids, which in humans are transported between the gut, liver, adipose tissue and consuming organs, as they correspond to distinct organelles within a cell.*

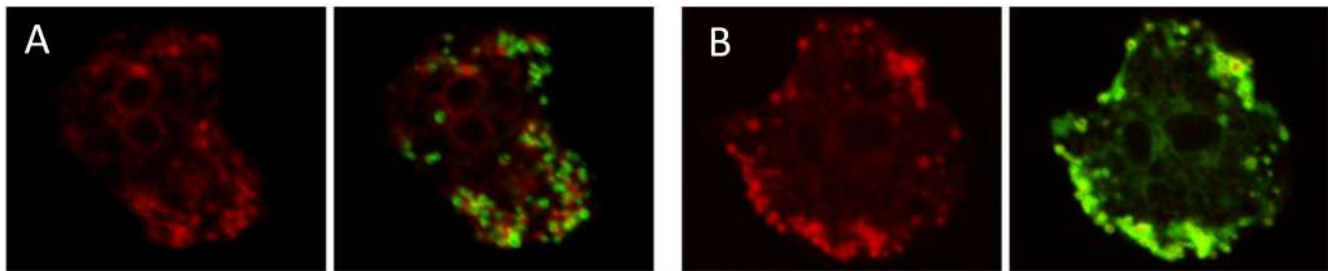
*Here, however, we will not discuss the issues pertinent to cell physiology that the team is pursuing, but rather highlight the toolbox that can be used to study cellular function at the molecular level. The tools here are tailored proteins, constructed by methods of molecular genetics, in which two or more properties are combined in a way that does not exist in nature.*

*When designing a tool, it is important to keep in mind, that it will be used at a location within the cell, which does not correspond to its natural target site. To do this, we first assembled new proteins in numerous combinations and let them engage in a*

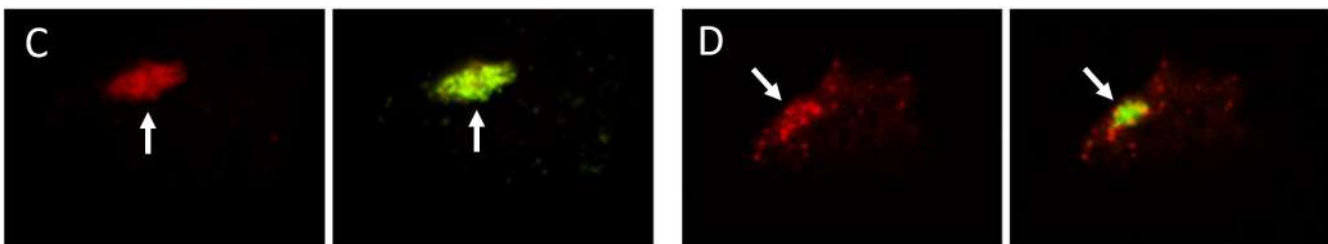
*molecular "tug-of-war" in the cell to identify those components, that bind most strongly to a desired location. For example, the protein ABP34, which alone is found preferentially in the cortical border zone of the cell, is pulled onto the surface of endosomal vesicles by the protein vacuolin (Fig.1).*

*The respective winners among the protein building blocks taking part in this competition, are the future candidates for the second step. Here, a component with high affinity for a specific site is recombined with another protein of a certain robust function but with low preference for a location within the cell. The second component is then expected to locally trigger a biochemical process. In this example, the formation of filamentous actin on the surface of lipid droplets or peroxisomes was attempted (Fig. 2).*

*The recruitment of actin shown above, assembles a particular type of organelles together in a cloud-like structure. This observation is somewhat surprising, because the targeted removal of an actin envelope from endosomes, where it is naturally present, leads to local aggregation of these organelles. Also, from a technical point of view, these approaches sometimes hold surprises, e.g., the protein VASP, which works well in the above example, when artificially targeted to endosomes, will*



Das **Endoplasmatische Retikulum** (A) und **Lipidtröpfchen** (B) überlappen mit **SSB420-PlinA-GFP**



**Peroxisomen** (C) und **Lipidtröpfchen** (D) verklumpen in der Zelle zusammen mit **Pex3-PlinA-GFP**

Abbildung 3: A und B: Das Werkzeugprotein SSB420-PlinA-GFP (grün) zeigt eine Tendenz zur Verteilung in der Zellperipherie. Da, wo es sich anreichert, z.B. rechts unten in der Zelle in A, ist die Färbung des Endoplasmatischen Retikulums (rot) auch besonders intensiv. Gleichzeitig umhüllt es aber auch Lipidtröpfchen (siehe rechts oben in der Zelle in B). Daraus folgt, dass diese mit dem ER benachbart vorliegen müssen. C und D: Die Verteilung des Proteins Pex3-PlinA-GFP (grün) stimmt mit der von Peroxisomen (rot in C) aber auch mit Lipidtröpfchen (rot in D) überein. Es bilden sich Aggregate bestehend aus beiden Organellen in der Pex3-PlinA-GFP produzierenden Zelle, wobei beide Organellen im Normalfall (vgl. Abb. 2 A und C) in der Zelle verstreut liegen. (Abb.: Peggy Paschke)

Figure 3: A and B: The protein-tool SSB420-PlinA-GFP (green) shows a tendency to distribute to the cell periphery. Where it accumulates, e.g. in the lower right of the cell in panel A, the staining of the endoplasmic reticulum (red) also becomes particularly intense. At the same time, however, it also coats lipid droplets (as seen in the top right edge of the cell in B). Thus, it can be deduced that lipid droplets must lie adjacent to the ER. C and D: The distribution of the Pex3-PlinA-GFP tool (green) coincides with that of peroxisomes (red in C) but also with lipid droplets (red in D). Tight aggregates consisting of both organelles are formed in the Pex3-PlinA-GFP producing cell, whereas both organelles would be randomly distributed in a normal cell (compare to Fig. 2 A and C). (Fig. by Peggy Paschke)

produce a completely exaggerated reaction, creating a protein clump in the cell that, like a tumour in the body, grows to huge size and massively compromises cell health.

The aim of the third stage of tool-development, is to recruit two different organelle types to each other. The prerequisite for this is a combination of two building blocks that show a similarly strong binding to the respective specific organelle surface. In this way, we were able to link the endoplasmic reticulum with lipid droplets, or alternatively, to produce aggregates consisting of peroxisomes

and lipid droplets. A fluorescent third component (e.g. GFP) allows for direct visualization of the process (Fig. 3).

Finally, a brief note on the purpose of these tools. Contrary to popular belief, even among experienced biologists, the cell is not just a bag full of spatially separated organelle species, each being present in varying numbers. Instead, recent studies show in various ways that (almost) every organelle comes into close contact with every other, even if only transiently. These contacts provide the basis for the exchange of various substances



*between organelles, ranging from calcium, over membrane lipids and metabolites, to entire proteins that are first processed in one organelle to then exert their biological function in another.*

*Employing the tools presented above, the department of Cell Biology intends to contribute to answering such questions.*

---

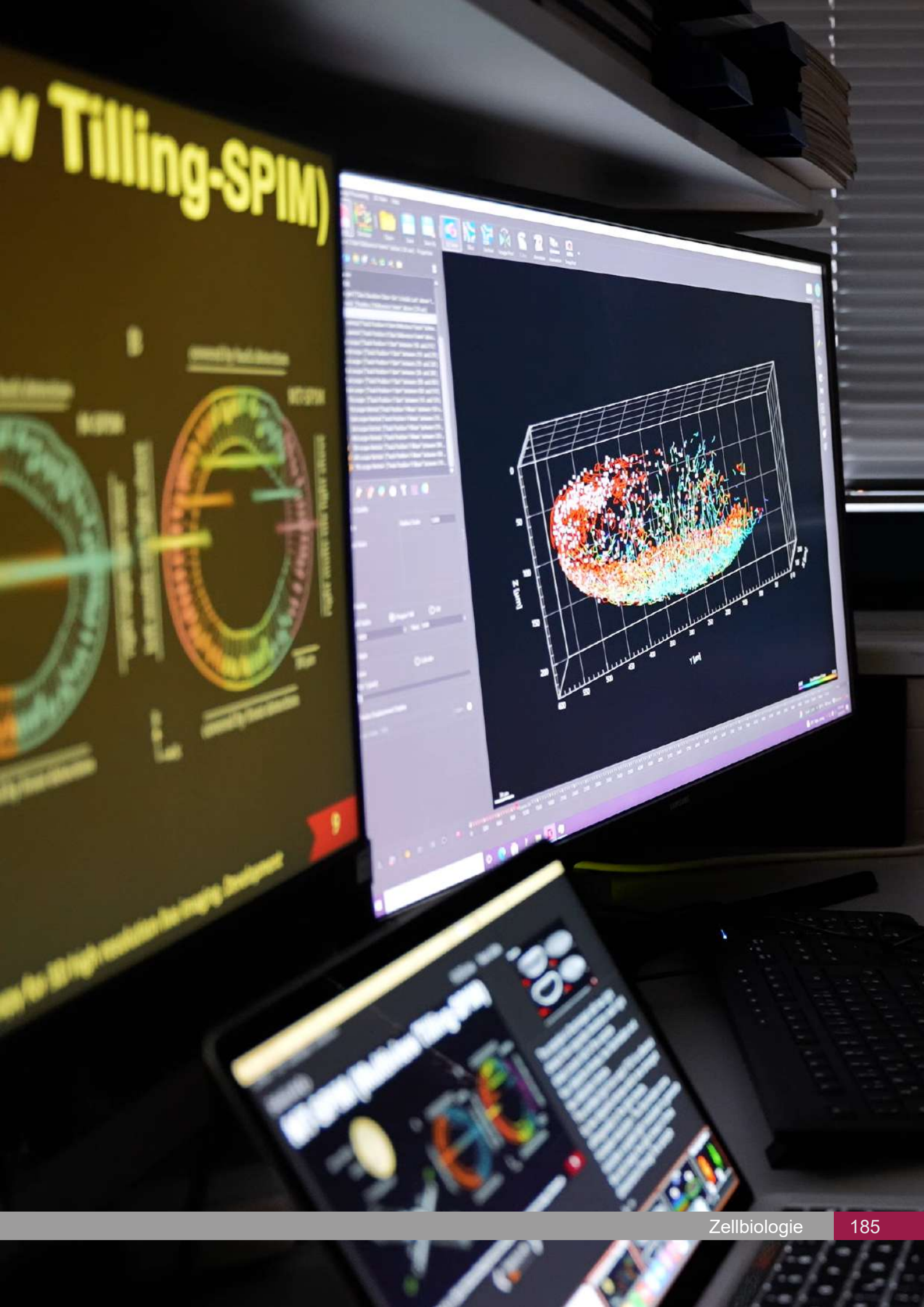
## Weiterführende Informationen / *Further Information*

### **Prof. Dr. Markus Maniak**

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Str. 40  
34132 Kassel  
IBC - Raum 1601

Tel: +49 561-804-4798  
Fax: +49 561 804-4592  
E-mail: [maniak@uni-kassel.de](mailto:maniak@uni-kassel.de)  
Website: <https://www.uni-kassel.de/fb10/institute/biologie/fachgebiete/zellbiologie/startseite>







Prof. Dr. Georg Mayer

### Erforschung winziger und urtümlicher Gehirne

In unserer aktuellen Forschung konzentrieren wir uns auf die Organisation und Evolution des Gehirns bei Tardigraden (Bärtierchen) und Onychophoren (Stummelfüßern). Diese Tiere bewohnen seit über 500 Millionen Jahren die Erde. Tardigraden sind winzige, miniaturisierte Tiere, die eine Körperlänge von 1 mm nicht überschreiten und aquatische sowie semi-aquatische Habitate besiedeln. Die Onychophoren sind hingegen ausschließlich terrestrische, bis zu 22 cm lange, räuberische Invertebraten, die einen klebrigen Schleim zum Beutefang (hauptsächlich am und im Boden lebende Arthropoden) einsetzen.

Aufgrund ihrer geringen Körpergröße besitzen Tardigraden eins der kleinsten Gehirne bei Vielzellern. Dennoch spielt das winzige Tardigraden-Gehirn eine Schlüsselrolle für unser Verständnis der Evolution des zentralen Nervensystems bei Panarthropoda (Tardigrada + Onychophora + Arthropoda). Deshalb haben wir das Nervensystem der Heterotardigraden-Art *Echiniscus testudo* mithilfe der Immunhistochemie untersucht, um die Anzahl und Lage der Trakte, Kommissuren und Neuropile zu demonstrieren. Wir haben fünf Synapsin-immunoreaktive Hauptdomänen entlang des Körpers festgestellt: ein großes einheitliches, hufeisenförmiges Neuropil im Kopf sowie vier Neuropile im Rumpf. Dieser Befund unterstützt die Hypothese, dass das dorsale Gehirn der Tardigraden seriell homolog mit den ventralen Rumpfganglien ist. Das ausgewählte Titelbild (Abb. 1) stellt die dorsale Region des sattelförmigen Gehirns von *E. testudo* mit einer zentralen, Synapsin-reichen Region dar, die dem zentralen Gehirn-Neuropil entspricht.

Onychophoren haben andererseits einige komplexe Verhaltensweisen entwickelt, darunter ihre Fangstrategie mithilfe eines „Sekundenklebers“, das aus einem Paar spezialisierter Kopffextremitäten herausgeschossen wird. Eine relativ komplexe Organisation des zentralen Nervensystems bildet Voraussetzung für diese Verhaltensweisen. Um den Ursprung und die Homologie der zerebralen Strukturen bei Panarthropoden zu klären, haben wir die Gehirnstruktur des Onychophoren *Euperipatoides rowelli* durch eine Kombination von Röntgen-Mikrocomputertomographie, Histologie, Immunhistochemie, konfokaler Mikroskopie



Abbildung 1: Deckblatt einer der aktuellen Ausgaben des Journal of Morphology, das eine konfokale Aufnahme des Gehirns der Bärtierchen-Art *Echiniscus testudo* (Heterotardigrada) zeigt. Anti-Synapsin-Immunfärbung (rot) und DNA-Gegenfärbung (türkis). Zu beachten ist die geringe Größe des Tardigraden-Gehirns, dessen Zentralneuropil lediglich ~30 µm breit ist. Aus Gross et. al. (2021), J. Morphol. 282:1298–1312.

Figure 1: Cover of one of the latest issues of the Journal of Morphology, showing a confocal micrograph of the brain of the water bear *Echiniscus testudo* (Heterotardigrada). Anti-synapsin immunolabeling (red) and nuclear counterstain (cyan). Note the small size of the tardigrade brain, with the central neuropil measuring only ~30 µm in width. From Gross et. al. (2021), J. Morphol. 282:1298–1312.



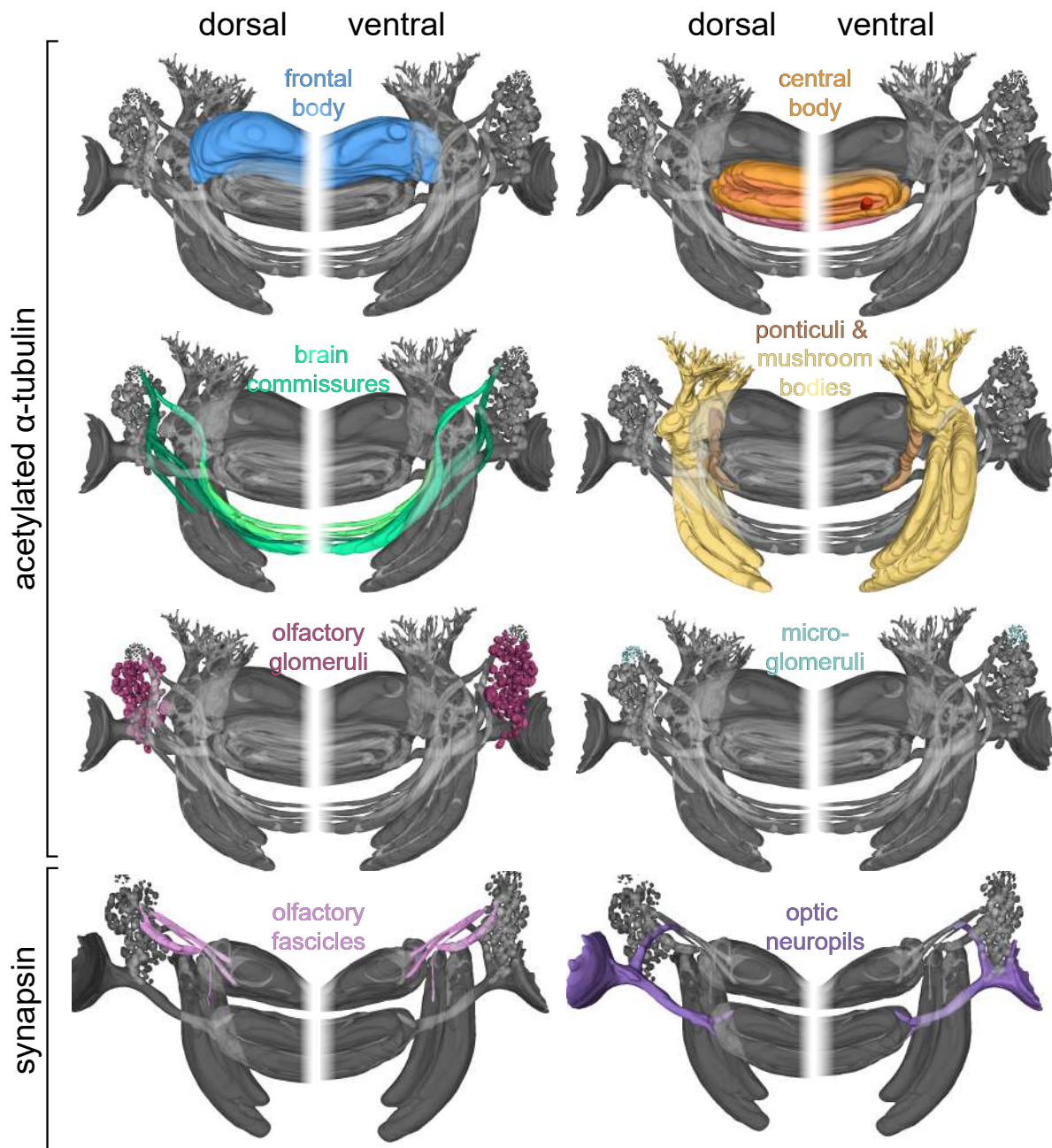


Abbildung 2: Dreidimensionale Rekonstruktionen der Kommissuren, Trakte, Loben und Neuropile im Gehirn der Stummelfüßer-Art *Euperipatoides rowelli* (Onychophora, Peripatopsidae). Die Rekonstruktionen basieren auf anti-azetylierten  $\alpha$ -Tubulin- und anti-Synapsin-Immunfärbungen. Zu beachten ist die auffällige Komplexität des Onychophoren-Gehirns. Verändert aus Martin et al. (in press), BMC Biol.

Figure 2: Three-dimensional reconstructions of individual commissures, tracts, lobes and neuropils in the brain of the velvet worm *Euperipatoides rowelli* (Onychophora, Peripatopsidae). The reconstructions are based on anti-acetylated  $\alpha$ -tubulin and anti-synapsin immunolabeling. Note the high complexity of the onychophoran brain. Modified from Martin et al. (in press), BMC Biol.



und dreidimensionaler Rekonstruktion analysiert (Abb. 2). Die erhaltene detaillierte Information haben wir genutzt, um eine konsistente und längst überfällige Terminologie für neuroanatomische Studien zu schaffen. Außerdem haben wir neue zerebrale Merkmale identifiziert, ausführliche Beschrei-

bungen der bisher unbekannten Gehirnregionen geliefert sowie weitere Strukturen und Neuropile im Onychophoren-Gehirn charakterisiert. Unsere Ergebnisse werden zur Verbesserung der Reproduzierbarkeit und Vergleichbarkeit der künftigen neuroanatomischen Studien an Invertebraten beitragen.

---

## **Exploration of Tiny and Ancient Brains – Prof. Dr. Georg Mayer**

*Our recent research has focused on the organization and evolution of the brain in tardigrades (water bears) and onychophorans (velvet worms). These creatures have inhabited the Earth for over 500 Million years. Tardigrades are small, miniaturized animals typically not exceeding half a millimeter in length, which live in aquatic or semi-aquatic environments, while onychophorans represent up to 22 cm-long, exclusively terrestrial predators that use sticky slime for capturing their prey, such as soil-dwelling arthropods.*

*Due to their small size, tardigrades possess some of the smallest brains found in multicellular animals. However, the tardigrade tiny brain is key to understanding the evolution of the central nervous systems across the hyperdiverse clade Panarthropoda (Tardigrada + Onychophora + Arthropoda). We therefore investigated the central nervous system of the heterotardigrade Echiniscus testudo using immunohistochemistry to visualize the number and position of tracts, commissures, and neuropils. We identified five major synapsin-immunoreactive domains along the body: a large unitary, horseshoe-shaped neuropil in the head and four neuropils in the trunk, supporting the hypothesis that the dorsal brain is serially homologous with the ventral trunk ganglia.*

*The selected cover image (Fig. 1) illustrates the dorsal part of the saddle-shaped brain of E. testudo, with the centrally located synapsin-rich region corresponding to the central brain neuropil.*

*Onychophorans, on the other hand, have developed a number of complex behaviors, including their hunting strategy using “superglue”, which is ejected from a pair of specialized head appendages. A prerequisite for these behaviors is a relatively complex organization of their central nervous system. To clarify the origins and homology of cerebral structures across panarthropods, we analyzed the brain architecture in the onychophoran Euperipatoides rowelli by combining X-ray micro-computed tomography, histology, immunohistochemistry, confocal microscopy, and three-dimensional reconstruction (Fig. 2). We have used this detailed information to generate a consistent terminology for neuroanatomical studies, which was long overdue. In addition, we identified novel cerebral traits, provided in-depth details on previously known brain areas, and characterized further structures and neuropils. We expect that our data will improve the reproducibility and comparability of future neuroanatomical studies of invertebrates.*

---

## Literatur / Literature

Martin, C., Jahn, H., Klein, M.M., Hammel, J.U., Stevenson, P.A., Homberg, U. & Mayer, G. (in press): The velvet worm brain unveils homologies and evolutionary novelties across panarthropods. *BMC Biology*.

Gross, V., Eppler, L. & Mayer, G. (2021): Organization of the central nervous system and innervation of cephalic sensory structures in the water bear *Echiniscus testudo* (Tardigrada: Heterotardigrada) revisited. *Journal of Morphology* 282:1298–1312.

## Weiterführende Informationen / Further Information

### Prof. Dr. Georg Mayer

Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Str.40  
34132 Kassel  
IBC - Raum 1301

Tel.: +49 561 804-4805  
Fax: +49 561 804-4800  
E-Mail: [georg.mayer@uni-kassel.de](mailto:georg.mayer@uni-kassel.de)  
Website: <http://www.uni-kassel.de/go/zoology>



# Impressum

## Adresse

Universität Kassel  
Center for Interdisciplinary Nanostructure Science and  
Technology (CINSaT)  
Heinrich-Plett-Straße 40  
34132 Kassel

## Kontakt

Tel.: +49 561 804-4384  
Email: [info@cinsat.uni-kassel.de](mailto:info@cinsat.uni-kassel.de)  
Website: [www.cinsat.de](http://www.cinsat.de)

## Redaktion

Prof. Dr. Johann Peter Reithmaier  
Dr. Daniel Merker

## Layout

Dr. Daniel Merker  
Florian Ott  
Olga Muss

## Druck

viaprinto  
Martin-Luther-King-Weg 30a  
48155 Münster

## Presserechtliche Verantwortlichkeit (ViSdP)

CINSaT Vorstand,  
Universität Kassel









