

FORSCHUNGS FORUM PADERBORN



UNIVERSITÄT PADERBORN
Die Universität der Informationsgesellschaft

12-2009



PADERBORNER WISSENSCHAFTSMAGAZIN

- Kunststofftechnik und Informationsgesellschaft
- Globalisierung, Altersarmut und Rentenversicherung
- Warum Cerealien glücklich machen
- Periodisch, meta und linkshändig
- Moleküle auf Partnersuche
- Entlohnung von Managern

IMPRESSUM

Herausgeber
Prof. Dr. Nikolaus Risch
Präsident der Universität Paderborn

Konzeption und Redaktion
Ramona Wiesner
Leiterin des Referats Hochschulmarketing
und Universitätszeitschrift
Warburger Str. 100, 33098 Paderborn
05251.60-2553, -3880
E-Mail: wiesner@zv.uni-paderborn.de
<http://www.uni-paderborn.de/hochschulmarketing>

ForschungsForum Paderborn (ffp) im Internet
<http://www.uni-paderborn.de/ffp>

Wissenschaftlicher Beirat
Prof. Dr. techn. Gitta Domik
Prof. Dr. phil. Jörg Jarnut
Prof. Dr.-Ing. Klaus Meerkötter
Prof. Dr. phil. Stephan Müller
Prof. Dr. rer. pol. Winfried Reiß
Prof. Dr. rer. nat. Wilhelm Schäfer
Prof. Dr. rer. nat. Artur Zrenner

Drucklegung
Februar 2009

ISSN (Print) 1435-3709

Layout
PADA-Werbeagentur
Heierswall 2, 33098 Paderborn

Anzeigenverwaltung
PADA-Marketingverlag
Heierswall 2, 33098 Paderborn
05251.527577

Auflage
5 000

Titel



Thermowächter von Tupperware

Wenn Kunststofftechniker der Universität Paderborn ihren Studierenden in einer Grundlagenvorlesung „Zwei-Komponenten-Spritzguss-Verfahren“ erklären, haben sie manchmal hochwertige Haushaltsprodukte als Anschauungsmaterial dabei. Wie zum Beispiel den blau-weißen Deckel des so genannten „Thermowächters“ von Tupperware, der Heißes heiß und Kaltes kalt hält. Bei der Herstellung solcher und anderer bunter, robuster und nahezu unverwundlicher Behälternisse wird Polypropylen (PP) aufgeschmolzen. Um diesen Prozess zu perfektionieren, muss er simuliert werden. Dies geschieht mithilfe der Software-Programme, die am Institut für Kunststofftechnik geschrieben

werden. Prof. Dr.-Ing. Volker Schöppner, Lehrstuhl für Kunststoffverarbeitung: „Innovative Produkte mit hochkomplexen Funktionen stellen enorme Anforderungen an den Herstellungsprozess. Mit unseren Softwareprodukten werden diese Prozesse ständig geprüft und weiterentwickelt.“ (Lesen Sie ab Seite 18)

Editorial



Ramona Wiesner
Leiterin des Referats Hochschulmarketing und Universitätszeitschrift

Liebe Leserinnen und Leser,

Computersimulationen sind in den Natur- und Ingenieurwissenschaften heute selbstverständlich. Dank neuer Algorithmen und leistungsfähigen Rechnern lassen sich inzwischen gigantische Datenmassen verarbeiten. Eine algorithmische Neuentwicklung in der Angewandten Mathematik sind die so genannten Wavelets – kleine Wellen mit großer Wirkung. Die schnelle Wavelet-Transformation bildet beispielsweise die Basis für den Bildkompressionsstandard JPEG2000 und wird für die verbesserte Berechnung von Wettervorhersagemodellen genutzt. Welches Potenzial in den Wavelets liegt, erfahren Sie ab Seite 46.

Was hat die griechische Mythologie mit moderner Konsumkultur und Ernährungsverhalten zu tun? Dieser Frage geht Juniorprofessorin Nicole M. Wilk in ihrer Forschungsarbeit nach. Lesen Sie ab Seite 6, wie virtuos die moderne Industrie die antike Folie zur Vermarktung ihres Functional Foods nutzt. So vermischen sich in Vollkorncerealien mit Schokostückchen Demeters Vollkornnähren mit Hades Schokoströmen für Genuss ohne Reue.

Ob Handyschalen, CDs, PET-Flaschen oder Tupperware – die Kunststofftechnik spielt im täglichen Leben eine bedeutende Rolle. Am Institut für Kunststofftechnik arbeiten Ingenieure mit Hochdruck daran, anwenderfreundliche Software zu entwickeln, die dazu beiträgt, Herstellungskosten zu reduzieren und die Qualität der Produkte zu steigern. Professor Volker Schöppner erläutert ab Seite 18 die gelungene Zusammenarbeit zwischen Hochschule und Industrie.

Warum sich ein Gecko sicher über vertikale glatte Flächen bewegen kann, faszinierte schon Aristoteles. Mit der Frage nach den Adhäsionskräften beschäftigt man sich auch am Lehrstuhl für Technische und Makromolekulare Chemie an der Universität Paderborn. Professor Guido Grundmeier und sein wissenschaftlicher Mitarbeiter Dr. Markus Valtiner stellen ab Seite 12 auszugsweise die komplexen Vorgänge in technischen Systemen (z. B. Klebstoffe und Lackierungen) auf molekularer Basis vor und zeigen auf, wie sich die Ergebnisse der Untersuchungen für die industrielle Anwendung, u. a. im Flugzeugbau, nutzen lassen.

Die lange beschworene Sicherheit der Renten ist durch Globalisierung und demografischen Wandel ins Wanken geraten. Juniorprofessor Tim Krieger von der Fakultät für Wirtschaftswissenschaften führte mit 180 Studierenden der Universität Bremen eine experimentell-empirische Untersuchung durch, um die Umverteilungswünsche im Rentensystem zu ermitteln. Das Ergebnis: Die Menschen wünschen sich eine ausgewogene Mischung von Grund- und einkommensabhängiger Rente. In seinem Artikel ab Seite 24 beleuchtet er, welche Schlussfolgerungen seine Studie für die staatlichen Rentensysteme zulässt.

Eine interessante Lektüre wünscht
Ihre Ramona Wiesner

Frühstücks-Mythen

Warum Cerealien „glücklich“ machen

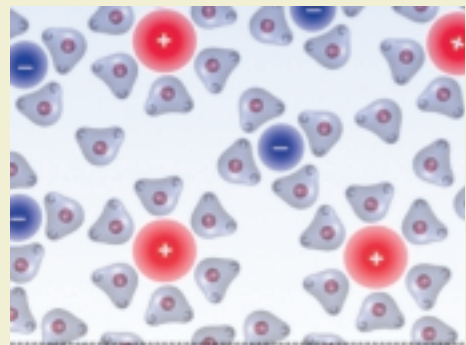
Jun.-Prof. Dr. Nicole M. Wilk



Von molekularem Fliegenfischen zu neuartigen Klebstoffen

Haftungsmessungen mit Einzelmolekülen auf Oxid- und Metalloberflächen

Prof. Dr.-Ing. Guido Grundmeier, Dr. Markus Valtiner



Kunststofftechnik im Zeitalter der Informationsgesellschaft

Das perfekte Kunststoffprodukt dank anwenderfreundlicher Software

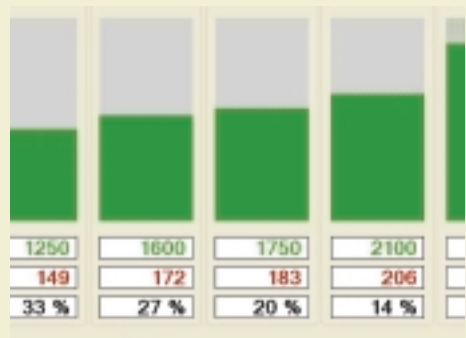
Prof. Dr.-Ing. Volker Schöppner, Prof. Dr.-Ing. Helmut Potente,
Dipl.-Ing. Karsten Anger, Dipl.-Ing. Robert Weddige



Wird die Globalisierung unser Rentensystem verändern?

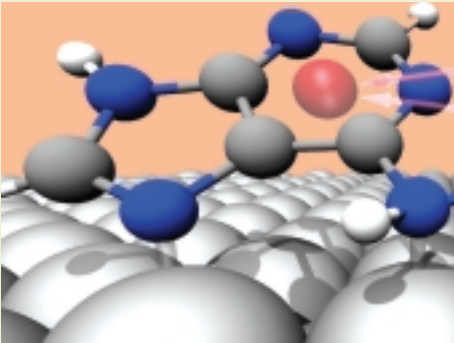
Gesellschaftliche Umverteilungspräferenzen im Rentensystem

Jun.-Prof. Dr. Tim Krieger



Seite 30

Moleküle auf Partnersuche
Molekulare Erkennung und Selbstorganisation auf atomarer Skala verstehen
Prof. Dr. Wolf Gero Schmidt



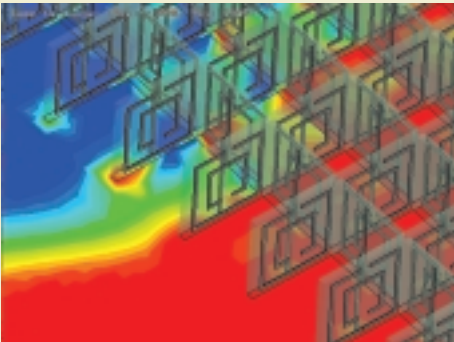
Seite 36

Entlohnung von Managern
Realoptionen im Zusammenspiel mit Anreizkonflikten
Prof. Dr. Dr. Georg Schneider

Ertrag/Liter	0,90 €
Kosten/Liter	1,15 €
Gewinn/Liter	-0,25 €
Umsatz	900 000,00 €
Gewinn/Verlust	-250 000,00 €

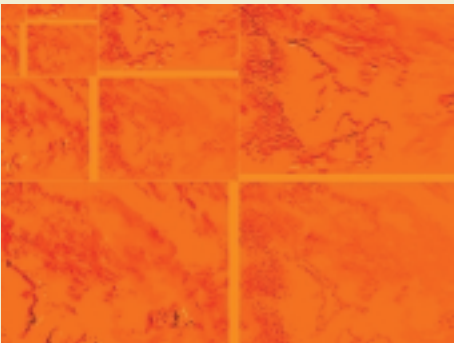
Seite 40

Periodisch, meta und linkshändig
Charakterisierung neuartiger Materialien durch Computersimulation
Prof. Dr.-Ing. Rolf Schuhmann, Dipl.-Ing. Bastian Bandlow



Seite 46

Wavelets: Kleine Wellen mit großer Wirkung
Algorithmische Neuentwicklungen in der Angewandten Mathematik
Prof. Dr. Angela Kunoth





Prof. Dr. rer. nat. Wilhelm Schäfer

Vorwort

Liebe Leserinnen und Leser,

„Alles, was zählt“ – unter diesem Motto ist mit 2008 das Jahr der Mathematik zu Ende gegangen. Seit dem Jahr 2000 richtet das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) im Rahmen der Initiative Wissenschaft im Dialog die Wissenschaftsjahre aus. In diesem Jahr fand die Wissenschaft der Mathematik Würdigung.

Der berühmte deutsche Mathematiker David Hilbert hat einmal auf die Frage, was aus einem seiner Studenten geworden sei, geantwortet: „Er ist jetzt Schriftsteller. Er hatte zu wenig Fantasie“. Eine mit Blick auf das vergangene Jahr der Geisteswissenschaften kontroverse und doch verbindende Aussage. Denn Mathematik ist Sprache. Für Galileo Galilei war das Buch der Natur sogar in der Sprache der Mathematik geschrieben. David Hilbert sah in ihr eine verbindende Brücke zwischen Denken und Beobachten, zwischen Theorie und Praxis. Mathematik ist die Kunst, das Wesentliche zu erkennen und diese Erkenntnisse effektiv zu strukturieren sowie logisch zu begründen. Die notwendigen Voraussetzungen hierzu sind freies, exaktes und abstraktes Denken, wobei zum freien Denken insbesondere Fantasie gehört, eben jene Fantasie, auf die sich Hilbert bezieht.

Mathematik kennt jeder von klein auf. Schließlich wird das Fach von Beginn an intensiv in der Schule gelehrt. Mit ihrer facettenreichen Bandbreite begegnet sie uns im Alltäglichen, beim Einkauf im Supermarkt, in der Architektur bis hin zum Wetterbericht und im Besonderen auch in vielen Berufsfeldern. Vom Ingenieur bis zum Psychologen, bildet Mathematik oftmals einen Grundstein des Wissens.

Für viele erscheint die Mathematik aber immer noch fremd. Das liegt wahrscheinlich am Unverständnis ihrer ureigenen Sprache. Die Mathematik hingegen benutzt die Sprache der Logik. Ihre Buchstaben und Sätze sind Zahlen und Formeln, die ihrer eigenen detaillierten Grammatik und Semantik folgen.

Diese Sprache beherrschen naturgemäß auch die beiden Preisträger des ersten vom Land Nordrhein-Westfalen vergebenen und mit 150 000 Euro dotierten Innovationspreises – Prof. Dr.-Ing. Reinhold Noé und Prof. Dr.-Ing. Ulrich Rückert vom Institut für Elektrotechnik und Informationstechnik unserer Universität. Ihnen ist es gelungen, mit moderner Lasertechnik die Übertragungsraten in Glasfaserkabeln zu vervierfachen, wobei das wirtschaftliche Potenzial durch die Nutzung vorhandener Kabel enorm ist und von Experten auf mehrere Milliarden Euro geschätzt wird.

Die Paderborner Forschung wurde aber auch noch in einem weiteren Innovationswettbewerb prämiert. Die Universität Paderborn ist mit dem Projekt „Benchmark Virtual Prototyping & Simulation“ einer von zwölf Siegern im „Hightech.NRW“-Wettbewerb des Innovationsministeriums, in dem über drei Jahre Spitzentechnologievorhaben in Tandemkonstruktionen von Wissenschaft und Industrie gefördert werden.

Die aktuelle Ausgabe des ForschungsForums Paderborn bietet mit Hinblick auf die vielfältigen Verknüpfungen der Mathematik mit den anderen Wissenschaftsdisziplinen und ihren Einfluss auf zahlreiche Lebensbereiche eine gelungene Mischung von aktuellen Themenstellungen.

In diesem Sinne wünsche ich Ihnen viel Spaß beim Lesen sowie viele interessante und vielleicht auch neue Sichtweisen auf die folgenden redaktionellen Beiträge.

Wilhelm Schäfer

Vizepräsident für Forschung und wissenschaftlichen Nachwuchs

Frühstücks-Mythen

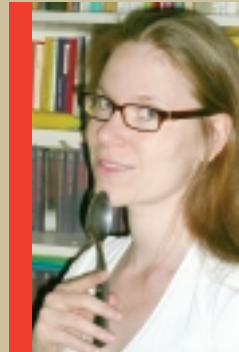
Warum Cerealien „glücklich“ machen

Jun.-Prof. Dr. Nicole M. Wilk

Keine Woche vergeht ohne neue Schreckensmeldungen über die gesundheitlichen Risiken einer unausgewogenen Ernährung. Laut der jüngsten Nationalen Verzehrsstudie sind die Deutschen so dick wie nie zuvor, jeder fünfte gilt als stark übergewichtig. Zugleich war man hierzulande nie so aufgeklärt: Ein vielgestaltiges Wissen über gesunde Ess- und Lebensstile entfaltet sich in Medien, Marketing und Wissenschaft als fester Bestandteil des kommunikativen Haushalts einer flexibilisierten Informationsgesellschaft. Dieses Wissen ist nicht statisch. Es geht aus dem „Gespräch“ mit den alltäglichen Nahrungsmitteln hervor, denen der Ernährungsdiskurs (auf Verpackungen, in Kochshows, Presseberichten und Konsumumgebungen) eine Stimme verleiht. Ausgehend von dieser These zeigt die vorgestellte Materialstudie im Zusammenwirken von sprach-, kultur- und kommunikationswissenschaftlichen Ansätzen, wie sich der vermeintliche Widerspruch zwischen Wissen und Verhalten auflöst, wenn die Funktion des Essens in den Blickpunkt rückt. Der Konsum bestimmter Speisen, vor allem des Functional Foods (das sind insbesondere Riegel, Snacks und Shakes mit gesundheitlichem Zusatznutzen) ist verknüpft mit moderner Identitätsarbeit und einem spezifischen „Aggressions- und Konfliktmanagement“.

Das tosende Meer und die Schluchten vor Syrakus im Rücken – Kore sitzt auf dem Kutschbock des goldenen Gefährts und lässt ihre Blicke über die dunklen Rosse zum blumentumrankten Tempel ihrer Mutter schweifen. Doch sie bemerkt die lieblichen Düfte nicht. Benommen fällt sie Demeter in die Arme und erzählt der verzweifelten Mutter von der Entführung und von ihm, Hades, dem Herrscher über Rausch und Genuss. Was sie verschweigt, ist, wie süß die Kerne waren, mit denen er sie im Schattenreich verführt hat, damit sie an seiner Seite wandle (Abbildung 1). Zwei Drittel des Jahres verbringt sie jedoch fortan wieder in der olympischen Oberwelt. Diesen Kompromiss hatte Demeter nach dem Raub ihrer Tochter mit Göttervater Zeus errungen. Ihr Druckmittel: Verdorrte Felder und Hungersnöte. Jahr um Jahr begibt sich nun Kore auf immer dieselbe Reise: Als Persephone steigt sie im Herbst ins Totenreich hinab, als Kore kehrt sie im Frühjahr in die olympische Oberwelt zu Demeter, der Herrscherin über Saat und Getreide (Abbildung 2), zurück.

Was hat diese alte Geschichte mit dem viel diskutierten Ernährungsverhalten in der westlichen Überflussesgesellschaft zu tun? Zunächst gehört der griechische Mythos von Hades



Jun.-Prof. Dr. Nicole M. Wilk lehrt seit 2007 an der Universität Paderborn Germanistische Sprachwissenschaft. Nach Forschungsarbeiten über das Frauenbild in der Werbung und die Rolle der Emotionalität in Sprachtheorien des 20. Jahrhunderts, widmete sie sich als wissenschaftliche Mitarbeiterin im Deutschlehramt an der Universität Hildesheim dem Konstruktionscharakter grammatischer Formen. Ihr aktueller Forschungsschwerpunkt liegt in der Kultursemiotik der Waren, insbesondere der Kultursemiotik des Essens.

und Persephone zum klassischen Bildungsgut. Als solches trägt er zweifelsohne Wert an sich. Doch aus kultursemiotischer Sicht leistet er noch viel mehr. Auf den Spuren einer verblüffenden Analogie trägt er zum Verständnis der modernen Konsumkultur bei und liefert Erklärungsansätze dafür, warum immer mehr Menschen unter Fehlernährung und ernährungsbedingten Krankheiten leiden, obwohl unsere Nahrung so hochwertig und das Ernährungswissen so profund ist wie nie zuvor.

Süße Liebe über dem Abgrund: Hades und Persephone

Grundmotiv der Geschichte ist die Entführung der kindlichen Kore durch den Totengott Hades, der sie zur Gemahlin nimmt. Der Bund ist besiegelt durch Kores Schwachwerden: Den süßen Früchten in der Unterwelt kann sie nicht widerstehen – eine Situation, die sie mit vielen Konsumenten, insbesondere weiblichen, teilt. Die Werbung spielt damit: Sympathieträger werden Opfer ihrer süßen und salzigen Leidenschaften. Die Granatapfelkerne, die Kore nascht, verhüllen symbolisch den Sexualakt und sind zugleich Zeichen einer neuen Identität frei nach der Volksmundformel „Wes Brot (Frucht) ich ess, des Lied ich sing“. Mit ihnen verleibt sich Kore die dionysische Gesinnung des Schattenreichs ein. Und zugleich die Macht: An Hades' Seite wird die blasse Tochter der Demeter zur mächtigen Herrscherin über die Toten, über alles Rauschhafte und Unbewusste, sie wird zur Unterweltgöttin Persephone.

Darstellungen aus dem 6. Jh. v. Chr. zeigen Persephone als stolze Göttin, während sie auf Mutter Demeters Schoß als blasses, hageres Mädchen erscheint. Ihre neue machtvolle Seite muss sie bei ihrer Rückkehr schamvoll verbergen. Denn als Hades ihr die Herrschaft über alles, was im Schattenreiche lebt und wandelt, versprach und noch dazu die



Abb. 1: Verhängnisvolle Verführung: Hades reicht Persephone die süßen Kerne des Granatapfels. Vase aus dem 6./7. Jh. v. Chr., gefunden in Vulci, bedeutende Fundstätte griechisch-etruskischer und griechischer Kunst, heute im British Museum, London.

größten Ehren bei den Unsterblichen, „jubelt die kluge Persephoneia, / Tat einen raschen Sprung vor Freude“, woraufhin der Herr ihr „(e)inen honigsüßen Kern der Granate zu essen“ gibt. Zwar geschieht das „heimlich“, doch Persephone findet Geschmack. Ovid stellt ihren Machtgenuss noch deutlicher heraus: Ihr „schmeckte“ die süße unterweltliche Kost, und darin gründet später ihr schlechtes Gewissen gegenüber der Mutter. Ein Drittel des Jahres schwingt sie fortan das Zepter über die Toten, von Frühjahr bis Herbst steht sie weiterhin an der Seite ihrer Mutter.

Diesen Weg fordert auch der verführerische Schokoriegel: Nach dem Eintauchen in die Unterwelt der Snacks und Riegel, in der es lustvoll knistert, knuspert und „cruncht“,

kehrt der Konsument reumütig zu Vollkorn, Obst und fettfreier Sühne zurück. Nun aber gibt es den Don Juan im Büßergewand: Vollkorncerealien mit Schokostückchen, süßen Nüssen oder Joghurtfrüchten! Ist der Teufelskreis rund um die mit Prestige und Bildung belegte Traumfigur damit gebannt?

Frühstückscerealien inszenieren den Zyklus aus Sünde und Abbitte

Symbolisch ja. Functional Food, d. h. Nahrungsmittel, die mit Zusatznutzen für Lebensqualität und Gesundheit beworben werden, liefert in Form von Frühstückscerealien eine moderne Version des antiken Dramas über die Spaltung in Rausch



Abb. 2: Demeter (römisch: Ceres), olympische Göttin des Getreides und der Fruchtbarkeit, „befreit“ Tochter Persephone von Frühjahr bis Herbst aus ihrer Rolle als Königin der Unterwelt.

und Pflicht. Die Werbetexte, ganze Cereal Stories mit Anleitung zum Selbsterleben, halten das persephonische Versprechen bereit, jene Spaltung zwischen Lust und Norm, Begehren und Zwang rückgängig zu machen, die im Prozess der Zivilisation auf spezifische Weise immer größer wurde.

Während der mittelalterliche Mensch seinen Gelüsten freien Lauf ließ, mit den Händen aß und nur wenige Tischmanieren zur Selbstbeherrschung gemahnten, legten die Verbote der bürgerlichen Gesellschaft dem Spiel der Affekte immer größere Beschränkungen auf. Das Essen mit eigenem Besteck vom eigenen Teller symbolisiert eine neue Esskultur der Abgrenzung, in der sich das Individuum als soziales Subjekt im Tischritual vergesellschaftete. Die Zwänge der Tischgemeinschaft werden im Laufe des 18. und 19. Jahrhunderts so weit verinnerlicht, dass sich das emotionale Leben des Menschen neu modelliert: Das Gewissen tritt dem Ich als Zensor gegenüber. Dieses zensierende Über-Ich lässt gesellschaftliche, staatliche oder klerikale Kontrollen überflüssig werden, da die erwünschten Verhaltensformen durch das Vorrücken der Scham- und Peinlichkeitsschwelle jedem Einzelnen zum Bedürfnis werden (vgl. Elias 1997: S. 180, S. 226). „Gouvernementalität“ nennt Michel Foucault diese Art der Selbstregierung (abgeleitet von Regieren und Mentalität). Sie äußert sich in der Beherrschung des eigenen Körpers, d. h. in der Einhaltung von Hygienevorschriften, in der Triebzügelung sowie der Mäßigung beim Essen.

Den stolzen Bürger des Industriezeitalters erkannte man noch an seinen Tischmanieren, etwa am gewandten Umgang mit Messer und Gabel, der Konsumbürger jedoch zeigt Lässigkeit in Sachen Etikette, isst gern im Stehen, nur mit

dem Löffel oder gar mit bloßen Händen (Fingerfood) und zieht sich zum Essen mehr und mehr zurück. Essstile werden seltener dazu eingesetzt, um anderen zu zeigen, wer man ist, als vielmehr um ein seelisches Gleichgewicht zu erzielen bzw. wiederherzustellen. Deutlich reduziert sind die Zeiten, in denen mit anderen Personen gemeinsam gegessen wird (DGE-Ernährungsbericht 2004, S. 78). Die Familie löst sich als Tischgemeinschaft allmählich auf. Gleichzeitig verbringen laut DGE-Ernährungsbericht die Deutschen immer mehr Zeit mit Essen – jedoch allein. Statt mit anderen bei Tisch Wir-Gefühle zu bekräftigen, sitzt der heutige Esser lieber vorm Fernseher, liest Zeitung oder nutzt die Gelegenheit, Verpackungen zu studieren, wozu er durch Verbrauchertipps aus Medien und Wissenschaft zusätzlich angehalten wird. Lebensmittel reagieren auf diese Situation. Sie versprechen u. a. Versöhnung des Unvereinbaren in einer immer komplexer werdenden Welt, Entlastung von Schuldgefühlen angesichts liberaler Selbstverantwortlichkeit jedes Einzelnen, Garantien in Zeiten schwindender Sicherheiten. Wie schafft Functional-Food-Marketing das?

Demeters Vollkornnähren plus Hades' Schokoströme gleich „Kellogg's Special K Choco“ oder „Nestlé Fitness Chocolat“

An diesem Punkt kann die antike Folie helfen, den Zufluchtsort zu bestimmen, den Konsumenten von Designerfood nehmen. Es ist ein Ort der Fiktionalität, der heilsamen Erzählungen, die in einer entzauberten Welt der Zahlen und Fakten rar geworden sind. Diese fiktionalen Orte bedienen sich einer wiederkehrenden Kollektivsymbolik, die im kulturellen Gedächtnis einer Gesellschaft aufgehoben ist. Diese Symbolwelt verhandelt Fragen der moralischen Orientierung und zeigt, wie auch das Märchen, Wege der Konfliktbewältigung. Gemeint sind Konflikte, die aus normativen Ansprüchen einer Gesellschaft (Pazifizierung) resultieren, wie der Unterdrückung aggressiver Impulse sowie Desintegrationsängste durch Widersprüche, die in sozialen Kontexten zünden und im Individuum detonieren. Der Mythos von Hades und Persephone liefert eine solche narrative Hilfe zur Bewältigung widersprüchlicher sozialer Rollenanforderungen. Kore soll liebe Tochter sein und möchte doch zugleich von den Früchten der Unterwelt kosten. Sie will mächtig werden wie die Mutter, aber nicht auf dem traditionellen Gebiet weiblicher Fruchtbarkeit und Reproduktion konkurrieren. So tritt sie die Herrscherinnenrolle im Totenreich an.

Übertragen auf die aktuelle Situation der Frau: Viele Frauen möchten ihre Fähigkeiten für eine berufliche Zukunft einsetzen, geraten aber in Wissenskonflikte, wenn sie ihren männlichen Konkurrenten Machtpositionen streitig machen. Um ihre Weiblichkeit zu bewahren, die selbst oder gerade bei hoch qualifizierten Frauen an beengenden Schönheitsidealen festgemacht wird, übt die „neue Frau“ freiwillig Verzicht. Ihre doppelte Vergesellschaftung in Familien- und Berufsleben führt zu widersprüchlichen, inkonsistenten Anforderungen, die jede Frau für sich selbst ausbalancieren muss: Die Work-Life-Balance ist allzu oft eine Entscheidung zwischen Karriere und Familie (vgl. Wilk 2002).

Happy End in der Schüssel

Ein glückliches Ende nimmt das Ausbalancieren von Unvereinbarkeiten im Mythos: Nach dem mit Gottvater Zeus errungenen Kompromiss zeigt sich Demeter versöhnlich. Das olympische Land soll wieder „prangen in mannshohen Ähren, Frühling wollte es werden“ (Homer, Demeterhymnos), und die Ähren bündeln sich zu Garben. Das Geschenk, das die moderne Konsumentin empfängt, ihre Herrscherinnenrolle im kulinarischen Hades antretend und gleichzeitig der diätetischen Demeter mit Vollkorn- und Gesundheitsversprechen huldigend, ist die Entlastung von Schuldgefühlen. Die Verpackungs-Dramaturgie der prototypischen Frühstückscerealie vereint den Rausch einer süßen Mahlzeit mit den Ansprüchen an Vernunft und Rollentreue: Nestlé *Fitness Chocolat* enthält 13,2 Prozent Milkschokolade, aber auch „38 Prozent Vollkorn für eine Wunschfigur, die bleibt“. Im Vordergrund werden Schokoladenstückchen in eine Ährenlandschaft gebettet, so als wären sie eine natürliche Variante des Getreides (Abbildung 3). Auch wenn das Produkt mit 23 Prozent Zucker als Hauptmahlzeit nicht mehr zu empfehlen ist (vgl. Arbeitskreis für Ernährungsforschung 2004, S. 29ff.), warnt die Verpackung vor der „Naschfalle“ durch zu große Pausen zwischen den Mahlzeiten und empfiehlt neben frischem Obst und einer Portion Nüssen *Fitness* Vollkorncerealien für zwischendurch. Hier entsteht ein irreführendes Paradigma aus austauschbaren Lebensmitteln, die aber ganz unterschiedliche Wirkung auf den Organismus haben. Die süße Cerealienmahlzeit ist Naschwerk im Mantel des gestrengen Über-Ichs, das in einem Akt des lustvollen Knusperns Schuld in Lust und gute Laune verwandelt. Mit ihrer Knusprigkeit bieten die Flakes einen sozialverträglichen Aggressionsabbau: Man lässt es krachen und widersetzt sich so auf symbolische Weise ungeliebten Zwängen und Angepasstheiten, die einem buchstäblich nicht mehr schmecken. Doch die neue Cerealienmahlzeitkultur hat noch einen weiteren Vorteil, der mit der Konsistenz der Flakes zusammenhängt: Im Vergleich zu anderen Knusperprodukten (Chips, Keksen etc.) verwandeln sich die knusprigen Cerealien in der Milch spätestens nach einer Viertelstunde in weichen Brei, der sich widerstandslos löffeln lässt. Dieser Fastfood-Nahrungstyp des Weichen (von der Nudel bis zum Hamburger) spiegelt eine Aggressionshemmung wider, wie sie im Verlauf der Zivilisation – im Kontrast zum Hauen und Stechen des Mittelalters – immer weiter fortgeschritten ist. Die Schuldgefühle, die aus zivilisatorisch bedingter unterdrückter Wut hervorgehen, schwinden nun im Genuss der funktionellen Frühstückscerealien mit ihrer sinnlichen Ambivalenz aus kraftvoll maskulinem Beißen und femininem Lutschen, zerstörerischem Kauen und passivem Schlucken. So wird Aggression in narzisstisches Genießen umgelenkt oder in der Symbolik des Mythos: Der doppelgesichtigen Kore-Persephone, die einen Kompromiss zwischen symbiotischer Verschmelzung mit der Mutter und süßer Macht der Unterwelt erringt, entspricht das weibliche Paradox des Engel-Emanzen-Typs (vgl. das Madonna-Hure-Paradox), mütterlich, aber autonom, anschmiegsam und doch konkurrenzorientiert.



Abb. 3: Schokoladenstückchen gebettet in kernige Ähren: Die Cerealienmahlzeit Nestlé Fitness Chocolat (vgl. Verpackung von Nestlé Chocolat 2008) vereint die gesundheitspolitische „Unterwelt“ des Süßen mit der sicheren Vollkorngarantie.

Der süße Kompromiss

Wieso wird gerade dieser Traum vom Kompromiss unvereinbarer Rollenanforderungen, wie ihn die mythische Sage erzählt, heute in der Lebensmittelwerbung aufgegriffen und befriedigt? Hängt dies mit den Rahmenbedingungen einer flexibilisierten Informationsgesellschaft mit ihren multiptionalen Lebensentwürfen zusammen, die nicht nur auf die Arbeitswelt, sondern auch auf die körperliche Identitätsbildung übergreifen? Offenbar bringt Freiheitsgewinn auch Verunsicherungen mit sich. Konsumkulturen sind nur scheinbar demokratisch: Sie schenken dem Individuum die Wahl zwischen konsumdefinierten Lebensstilen, aber siebürden ihm auch die Verantwortung für die Lebensentscheidungen auf. Der Mensch hat sich nicht mehr in ein durch Herkunft und Status vorgegebenes Schicksal einzufügen. Frauen sind nicht mehr auf die Rolle der Hausfrau und Mutter festgelegt. Doch die Vielfalt bringt eben auch Konflikte mit sich. Diese nähren Sehnsüchte, die die Konsumgüterwerbung regulierend auffängt.

Nicht nur Erzählungen, auch Beispiele aus der Bildenden Kunst können diese Kollektivsymbolik spiegeln. Ein thematisch relevanter Bezug findet sich in der Arbeit *Cold Cereal* #25 des amerikanischen Pop-Art-Künstlers Wayne Thiebaud von 1964, die nicht „Balance“ und „vollwertig“, sondern



VG Bildkunst, Bonn 2008

Abb. 4: Hauptsache „frei“: Popart-Künstler Wayne Thiebaud nimmt in der Arbeit „Cold Cereal #25“ (1964) die kommerziell ausgenutzte Sehnsucht nach Spannungs- und Konfliktfreiheit ins Visier.

„Freiheit“ als zentralen Schlüsselbegriff der Cerealienfrühstückskultur erschließt (Abbildung 4). Die Formel „frei von Zucker, Farb- und Zusatzstoffen etc.“ spielt mit der Mehrdeutigkeit des Befreiungsbegriffs und offenbart u. a. eine Sehnsucht nach Konfliktfreiheit, in der die persephonische Zerrissenheit bildlich versöhnt wird. Das Attribut fügt sich so in die Metaphorik eines allzeit offenen, stets wahl- und aufnahmebereiten Konsumtypus, der in seiner jugendlichen Frische das Frühstück als (Lebens-)Mahlzeit des beginnenden Tages jederzeit genießen kann. Der Wunsch nach Freiheit und Balance wächst in Zeiten, in denen nicht nur Flexibilität als Eigenschaft, sondern gar die flexible Identität an sich gefordert ist. Weibliche Rollenkonflikte entstehen da zum einen in der Schere aus Karrierewunsch und Mutterdasein, aber auch in Bezug auf andere Lebensstile in sozialer vs. ökonomischer Sphäre, Natur- vs. Kulturbereich, Pflege- vs. Wettbewerbsorientierung. Die kommerziell genutzten Spielarten dieser persephonischen Doppelvergesellschaftung hat Nicole M. Wilk erstmals in ihrer Magisterarbeit zum Frauenbild in der Werbung herauspräpariert (vgl. Wilk 2002). Dass mithilfe von Körpermythen neue Sozialisationsformen im Konsum entstehen, wies sie in weiteren kleineren Studien nach, zuletzt in einem Aufsatz über die „ges(ch)ichtslose Frau“ (vgl. Wilk 2008). Nachdem ihr 2006 eine Fundierung der Kultursemiotik des Essens in der Zeitschrift für Semiotik gelungen ist, konnte Wilk im Oktober 2008 die kultursemiotische Erforschung des Essens und seiner literarischen, theatralen und alltäglichen Mythen durch die Leitung der Sektion „Das Konkrete im kulinarischen Prozess: Semiotik der Spei-

se“ auf dem 12. internationalen Kongress der Deutschen Gesellschaft für Semiotik (DGS) an der Universität Stuttgart fortsetzen. Ein Tagungsband ist in Planung. Parallel dazu erforscht Wilk im Anschluss an ihre Dissertation zur Semantik der Affekte und des Unbewussten grundlegend die Vertextungsstrategien des Lebendigen (vom psychischen Schreibapparat bei Sigmund Freud bis zum modernen DNA-Computing). Dafür bietet Paderborn mit dem Heinz Nixdorf MuseumsForum sowie den international aufgestellten Informationswissenschaften eine einzigartige Forschungsumgebung.

Eine Kultursemiotik der Waren untersucht das „Gespräch“ zwischen Mensch und Produkt

In seiner quasitherapeutischen Funktion gewinnt das neue Functional Food den Stellenwert eines „Gesprächspartners“, der in einem regulativen Food Talk den Menschen in ein „gestaltendes Gespräch“ (Baudrillard 2007) mit sich selbst, d. h. in einen sozialisierenden Aushandlungsprozess von Werten und Gefühlen verwickelt, der ehemals am Esstisch und anderen Gemeinschaftsorten stattfand. Lebensglück wird dabei als allein genossenes Glück entworfen. In einer neuen Kampagne von Köln mit dem TV-Slogan „Die Schüssel zum Glück“, werden auf den Packungsrücken verschiedenerlei Glücksmomente ausgemalt, die das Müsli „noch ein bisschen größer macht“. Es sind darunter „das Glück einer Auszeit“, „das Glück der Freiheit“, „das Glück von etwas Besonderem“ oder ganz einfach „das Glück, sich etwas gegönnt zu haben“ – nicht aber das Glück der Freund-

schaft, Liebe oder gegenseitiger Hilfe. Warenästhetik reagiert hier auf das gesellschaftliche Phänomen der Individualisierung und Versingelung, in der die Dinge Funktionen des zwischenmenschlichen Lebens übernehmen.

Das Produkt bietet sich als Glücks- oder Konfliktshelfer an, indem es dem Menschen eine Geschichte erzählt. Und „Geschichten werden erzählt, um etwas zu vertreiben. Im harmlosesten, aber nicht unwichtigsten Falle: die Zeit. Sonst und schwerer wiegend: die Furcht“, erläutert Hans Blumenberg die Rolle des Mythos im Leben des Menschen (Blumenberg 1979, S. 194). Die Gründe für den Kauf moderner Lebensmittel werden somit erst verständlich, wenn in Produktstudien die soziokulturelle Folie bestimmt werden kann, auf der in der heutigen Ökonomie Waren als Zeichen zirkulieren und ihnen dabei Werte und Gefühle eingeschrieben werden. Auf diese Weise geht die Kultursemiotik der Waren, die Lehre von den „plappernden“ Zeichenbeziehungen zwischen Mensch und produziertem Ding, den Motiven nach, die Konsumenten beim Kauf von Functional Food leiten, oder prosaischer: welche Ungeheuer sie essend vertreiben. Die Sprach- und Kulturanalyse enthüllt hierbei ein Stück gesellschaftliche Wirklichkeit.

Am Beispiel der süßen Cerealien: Dank ihrer Vollkorn-Leistungssteigerungsemantik kann man mit ihnen symbolische Opfer bringen (man tut was für seine Form), und zugleich verheißen sie ein schokounterweltliches Glück ganz wie im Mythos. Doch das Glücksversprechen hat als Kehrseite die „düstere“ Drohung des unförmigen Körpers als sozialen Makel – eine Drohung, die kommerzielle Interessen bedient – oder mit den Worten Homers: „Doch wer die Opfer (an die Getreidegöttin Demeter/Ceres) nicht darbringt oder sie meidet, wird niemals/ Teilhaft solchen Glücks; er vergeht in modrigem Döster.“ (Homer, Demeterhymnos 480–482)

Literatur

ARBEITSKREIS FÜR ERNÄHRUNGSFORSCHUNG (2004): FRÜHSTÜCKSCEREALIEN – NEUE UND BEKANNTE GETREIDEPRODUKTE. HERSTELLUNG, QUALITÄTSVERÄNDERUNGEN, BIO-ANGEBOT. S. 29FF.

BAUDRILLARD, JEAN (2007): DAS SYSTEM DER DINGE. ÜBER UNSER VERHÄLTNIS ZU DEN ALLTÄGLICHEN GEGENSTÄNDEN. 3. AUFLAGE. FRANKFURT/M.

BLUMENBERG, HANS CH. (1979): ARBEIT AM MYTHOS. ABGEDRUCKT IN: TEXTE ZUR MODERNEN MYTHENTHEORIE. STUTTGART 2003, S. 194–218.

DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR ERNÄHRUNG (DGE) (HRSG.) (2004): ERNÄHRUNGSBERICHT 2004. BONN: DGE.

ELIAS, NORBERT (1997): ÜBER DEN PROZESS DER ZIVILISATION. SOZIOGENETISCHE UND PSYCHOGENETISCHE UNTERSUCHUNGEN. 2 BÄNDE [1969]. FRANKFURT/M.

FOUCAULT, MICHEL (2004): GESCHICHTE DER GOUVERNEMENTALITÄT. 2 BÄNDE. FRANKFURT/M.

WEIHER, ANTON (1989): HOMERISCHE HYMNEN. 5. AUFLAGE. MÜNCHEN.

WILK, NICOLE M. (2002): KÖRPERCODES. DIE VIELEN GESICHTER DER WEIBLICHKEIT IN DER WERBUNG. FRANKFURT/M./ NEW YORK.

WILK, NICOLE M. (2006): „ISS DICH SCHLANK!“ – SEMIOTISCHE GRUNDLAGEN KULINARISCHER HANDLUNGEN: DAS BEISPIEL DER LEBENSMITTELWERBUNG. ZEITSCHRIFT FÜR SEMIOTIK. BD. 28, HEFT 2–4, S. 345–403.

WILK, NICOLE M. (2008): DIE GES(CH)ICHTSLOSE FRAU: ÜBERLEGUNGEN ZUM VERLUST VON WEIBLICHEN VORBILDERN IN DER WERBUNG. IN: HOLTZ-BACHA, CHRISTINA (HRSG.): STEREOTYPE?: FRAUEN UND MÄNNER IN DER WERBUNG. S. 50–75.

Kontakt

Jun.-Prof. Dr. Nicole M. Wilk

Institut für Germanistik und Vergleichende Literaturwissenschaft

05251.60-2890

nicole.m.wilk@upb.de

Von molekularem Fliegenfischen zu neuartigen Klebstoffen

Haftungsmessungen mit Einzelmolekülen auf Oxid- und Metalloberflächen

Prof. Dr.-Ing. Guido Grundmeier, Dr. Markus Valtiner

Das Fachgebiet der Adhäsionsforschung stellt sich als ein fächerübergreifendes Gebiet dar, welches von der Biologie bis zur Entwicklung neuer Materialien reicht. Die Frage nach den Adhäsionskräften ist sowohl sehr grundlegender als auch sehr anwendungsnaher Natur. So erfordert die Entwicklung neuer Materialien kombinierte experimentelle und theoretische Studien, um Wechselwirkungskräfte in durch diese in ihrer Funktionalität bestimmten Werkstoffe vorauszusagen. Hierbei bedarf es der engen Kooperation zwischen Chemie, Physik und Materialwissenschaft. Zu den aktuellen Themen des Paderborner Lehrstuhls für Technische und Makromolekulare Chemie gehören dementsprechend neben den angewandten Fragestellungen wie der Entwicklung und Charakterisierung molekular modifizierter Grenzflächen auch zunächst sehr grundlagenorientierte wie die nach der Quantifizierbarkeit der Haftung eines einzelnen Moleküls auf einer einkristallinen Oxidoberfläche. Jedoch bilden auch diese Grundlagen die Basis für die langfristige Entwicklung neuer Werkstoffe und Werkstoffverbunde auf Basis theoretischer Werkzeuge. In diesem Artikel wird ein Teilaspekt der komplexen Vorgänge in technischen Systemen – die Haftung von einzelnen Molekülen auf verschiedenen atomar definierten Substraten – auf molekularer Basis vorgestellt und diskutiert. Dieser Artikel zeigt beispielhaft, welche Erkenntnisse man auf Basis wohl definierter Untersuchungen generieren und anschließend auch für die Entwicklung neuartiger Grenzflächenchemie umsetzen kann.

Motivation

Die Fragen von Haftung in der Natur und in der Technologie (z. B. Verklebung von Stein und Holz mit Birkenpech bereits oder die Entwicklung von Leimen einige tausend Jahre vor Christus) haben die Menschheit seit jeher fasziniert. Schon Aristoteles beschäftigte 400 v. Chr., dass sich der Gecko so sicher über vertikale glatte Flächen bewegen kann. Es zählte zu einem der spannenden Themen der Adhäsionsforschung der vergangenen Jahre, ein genaues Verständnis der zugrunde liegenden physikalischen Phänomene der Haftung dieser faszinierenden Tiere zu erreichen [1, 2]. Letztendlich konnte man die Haftung auf die Wirkung molekularer Haftungsmechanismen der mikro- und nanostrukturierten Füße des Gecko zurückführen. Genau diese Mechanismen haben aber auch eine enorme Bedeutung für Fragen der Haftung in technischen Systemen wie z. B. Klebstoffen und Lackierungen, die in der Vergangenheit jedoch meist rein empirisch entwickelt wurden. Moderne industrielle Anwen-



Prof. Dr.-Ing. Guido Grundmeier leitet seit Dezember 2006 den Lehrstuhl für Technische und Makromolekulare Chemie an der Universität Paderborn. Nach seiner Dissertation an der Universität Erlangen und einem Forschungsaufenthalt an den renommierten Bell Laboratories (USA, NJ) war er am Max-Planck-Institut für Eisenforschung (Düsseldorf) als Gruppenleiter tätig. Dort etablierte er im Rahmen seiner Habilitation eine Forschungsgruppe auf dem Gebiet der Adhäsionswissenschaften. Zudem wurde er zum Leiter des Christian-Doppler-Labors berufen. Im Juli 2006 schloss Prof. Grundmeier seine Habilitation auf dem Gebiet der Grenzflächenchemie und Oberflächentechnik an der Ruhr-Universität Bochum ab.

dung im Bereich des Flugzeugbaus, wo man durch Einsatz von Klebstoffen zukünftig verstärkt Leichtbaukonstruktionen ermöglichen möchte sowie im Bereich der Mikroelektronik, wo man mittlerweile im Bereich einiger zehn Nanometer strukturiert, erfordern ein tiefer gehendes Verständnis von Grenz- und Oberflächenphänomenen auf molekularer und atomarer Ebene. Nur auf Basis dieses Verständnisses wird es in Zukunft möglich sein, effizient neuartige nanostrukturierte Werkstoffe und Grenzflächen mit hoher Funktionalität und Stabilität zu generieren. Genau an jenem Punkt setzt ein wesentlicher Teilaspekt der Arbeiten am Lehrstuhl für Technische und Makromolekulare Chemie an [3].

Im Bereich der Adhäsionswissenschaften war es von herausragender Bedeutung, neue Messmethoden zu entwickeln, welche die Bestimmung molekularer Haftungskräfte erlauben. Eine der wichtigsten relevanten Techniken – die Nahfeld-Rastersonden-Technik – wurde Anfang der 80er Jahre in den IBM Laboratorien maßgeblich von Binnig, Quate und Gerber entwickelt und mit dem Nobelpreis gewürdigt. Es handelt sich dabei um eine Technik, die es erlaubt, durch eine Sonde im Nahfeld einer Probenoberfläche verschiedene physikalische Größen, wie elektrostatische Felder, magnetische Felder, Tunnelströme oder intermolekulare Kräfte experimentell zu erfassen und diese auch zur Abbildung von Topographie zu nutzen (siehe Abbildung 1 (A)). In diesem Artikel werden ausschließlich Messungen von Kraftfeldern thematisiert, welche mithilfe der so genannten Rasterkraftmikroskopie (AFM, engl. für Atomic Force Microscopy) experimentell zugänglich sind.

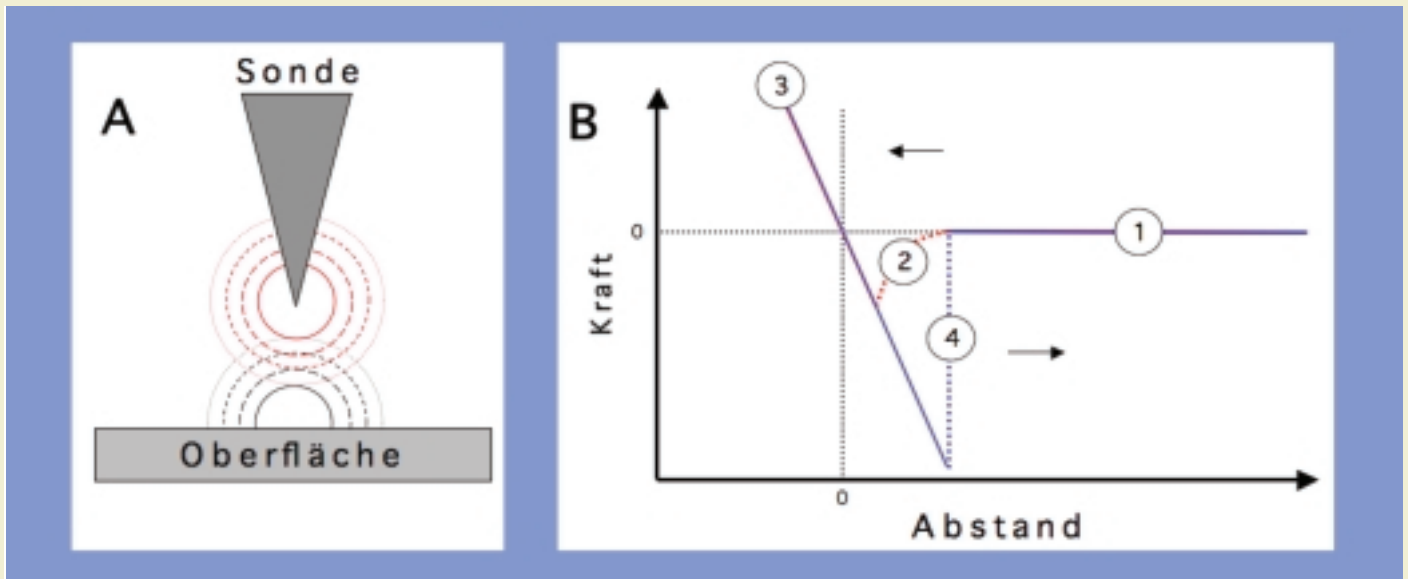


Abb. 1: (A) Bei der Nahfeld-Rastersonden-Technik werden mit einer Sonde lokale Felder vermessen, um dadurch unterschiedlichste Eigenschaften einer Probe zu erfassen. (B) Typische Kraftabstands-Mikroskopie-Messung.

Prinzip der Messungen

Das Prinzip der AF-Mikroskopie (Abbildung 1 (B)) beruht auf einer definierten sehr kleinen Probensonde, welche auf einem Cantilever mit bekannter Federkonstante aufgebracht ist, mit einer Probenoberfläche in definierten Kontakt gebracht und anschließend wieder von der Oberfläche entfernt wird, wobei die Auslenkung des Cantilevers über einen Laser mit Sub-Nanometer-Präzision gemessen wird. Die Auslenkung des Cantilevers kann direkt als eine – durch eine physikalische Wechselwirkung zwischen Probe und Probensonde verursachte – Kraft interpretiert werden. Nähert man sich der Probenoberfläche aus großer Entfernung, in der Wechselwirkungskräfte gleich Null sind, an, so wird die Sonde weitreichende Wechselwirkungen, wie beispielsweise elektrostatische Coulomb-Wechselwirkungen, ab einer Entfernung von ca. 100 nm spüren und sich entsprechend auslenken (2 Abbildung 1 (B)). Sind die Kräfte abstoßend, so wird der Cantilever nach oben auslenken, sind die gemessenen Kräfte anziehend, so wird der Cantilever zur Probenoberfläche hin ausgelenkt. Kommt die Sonde der Oberfläche sehr nahe (in etwa 2–5 nm), so werden die weitreichenden elektrostatischen Wechselwirkungen überlagert von den nun stärkeren kurzreichweitigen elektromagnetischen Wechselwirkungen, wie beispielsweise der attraktiven Van der Waals Wechselwirkung, und die Probensonde wird von der Oberfläche angezogen.

Im Kontakt mit der Oberfläche werden dann Kräfte quantenmechanischer Natur wirksam, welche verhindern, dass sich die Atome aufgrund der sich überlappenden Molekülorbitale zu nahe kommen. Bei mechanisch nicht deformierbaren Proben erhält man eine ideale lineare Abhängigkeit von Kraft und Abstand (ideal elastischer Kontakt, 3 Abbildung 1 (B)). Sind Probe oder auch Probensonde jedoch plastisch verformbar, so können die Abweichungen von der idealen linearen Abhängigkeit beispielsweise als Deformationsarbeit interpretiert werden.

Zieht man nun die Probensonde wieder von der Oberfläche weg, so wird diese so lange im Kontakt mit der Oberfläche bleiben, wie die Haftkräfte zwischen Probenoberfläche und Probensonde größer sind als die rücktreibende Federkraft des Cantilevers. Übersteigt die Federkraft die Adhäsionskraft, so wird die Probensonde von der Oberfläche entfernt und der Cantilever kehrt in seine Ruhelage zurück (4 Abbildung 1 (B)). Damit hat man einen direkten Zugang, um die Haftungskräfte zwischen zwei definierten Oberflächen, wie in Abbildung 1 (B) dargestellt, zu messen (Abbildung 2).

In der Gestaltung von Sonden- und Substratoberfläche liegt nun ein wesentlicher Teil der wissenschaftlichen Herangehensweise. Der Cantilever ist typischerweise zwischen 200–400 µm lang, 40–50 µm breit sowie 2–3 µm dick. Die Spitze der Probensonde hat meist einen Durchmesser von weniger als 10 nm und für spezielle Anwendungen sogar bis zu kleiner 2 Nanometer. Ein Elektronenmikroskopiebild einer typischen AFM-Probensonde ist in Abbildung 2 dargestellt. Das AFM erlaubt damit die Messung von Oberflächentopo-

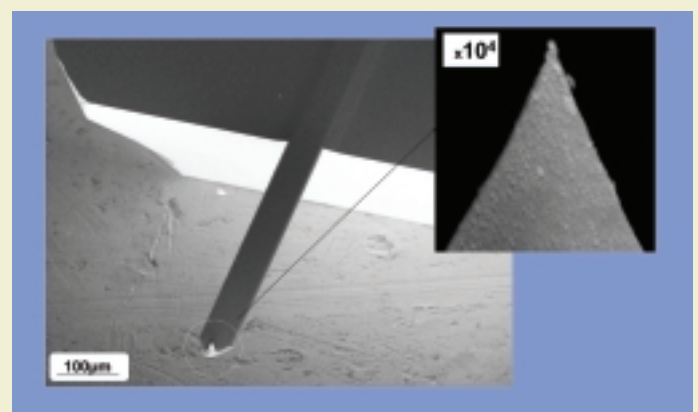


Abb. 2: Rasterelektronenmikroskop-Aufnahme eines typischen AFM-Cantilevers mit einer goldbeschichteten Sonde. Die 10.000-fach vergrößerte Aufnahme der Sonde zeigt auch die feine Struktur der nur 20–40 Nanometer großen Körner an der Spitze dieser Sonde. Bei den Messungen werden Wechselwirkungen mit der Spitze durch die Verbiegung der Feder vermessen.

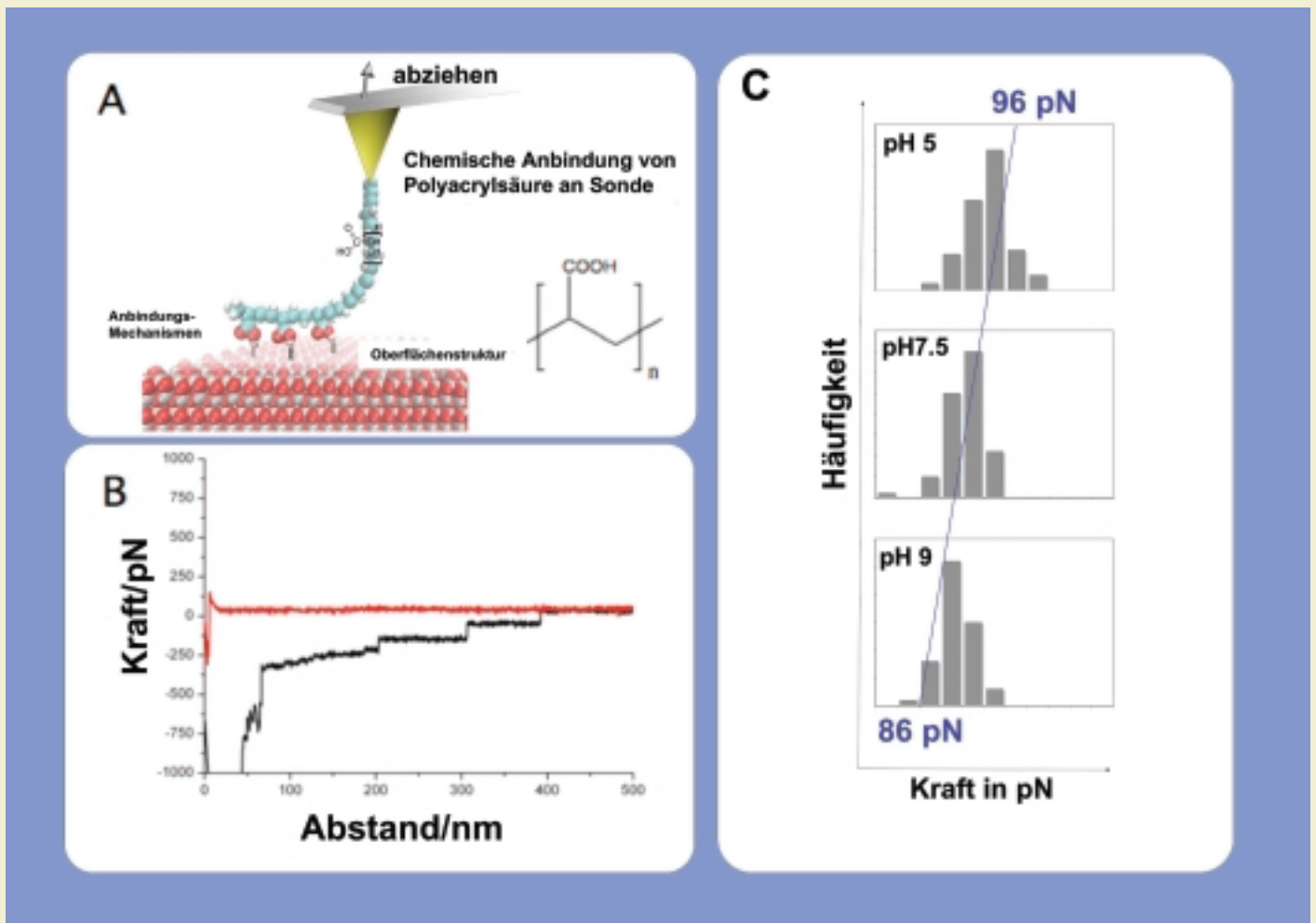


Abb. 3: (A) Prinzip der Einzelmolekül-Messungen. (B) Typische Kraftabstands-Kurve auf einer Goldoberfläche. (C) Tendenz der Haftkraft von Polyacrylsäure als Funktion des pH-Wertes. Die Histogrammverteilung zeigt die typische Streuung der gemessenen Werte.

graphien mit einer Auflösung im Bereich weniger Nanometer sowie die Messung von Wechselwirkungskräften im Nano-newton-Bereich. Mit deutlich größerem experimentellen und theoretischen Aufwand ist es aber möglich, einzelne Oberflächenatome zu erkennen sowie Kräfte im Piconewton-Regime (10^{-12} Newton) zu messen. Zum Vergleich: Die Graviationskraft, gegen welche eine Stubenfliege zu kämpfen hat, liegt bei etwa 10^{-3} Newton, die eines Geckos bei 10^{-1} Newton. Diese erstaunliche Sensitivität ermöglicht daher auch den Zugang zur Messung von interatomaren und -molekularen Wechselwirkungskräften, welche typischerweise im Nano- sowie Piconewton-Bereich innerhalb von wenigen Nanometern wirksam sind.

Grundlegende Idee der Einzelmolekül-Untersuchungen

Die zugrunde liegende Idee zur Messung von Haftkräften einzelner Moleküle ist verblüffend einfach und wurde vor fünf Jahren im Arbeitskreis um Prof. Dr. Hermann Gaub an der LMU München entwickelt [4, 5]. An die AFM-Probensonde werden dazu relativ langkettige Polymermoleküle (mit spezifischen Funktionalitäten) chemisch verankert. Dazu bedient man sich der Chemie der so genannten selbstorganisierten organischen Schichten, welche es erlauben, eine bestimmte chemische Funktionalität an einer Oberfläche – in

diesem Fall der Probensonden-Oberflächen – zu immobilisieren (Abbildung 3 (A)). Damit kann man nun ein Molekül, das quasi nach dem Schlüssel-Schloss-Prinzip eine entgegengesetzte chemische Funktionalität trägt, an der Oberfläche chemisch anbinden.

Somit hat man mit der funktionalisierten Probensonde die Möglichkeit, vergleichbar mit dem Fliegenfischen, ein langkettiges Makromolekül auf eine Oberfläche zu „werfen“. Zieht man nun wieder an dieser molekularen Angelschnur, so wird man im Fall von schwachen spezifischen Wechselwirkungen zwischen Molekül und Oberfläche eine konstante Kraft zum Ablösen der „Angelschnur“, also einem einzelnen Molekül, benötigen. Gibt es jedoch spezifische Stellen einer Oberfläche, mit welchen das Molekül verstärkt wechselwirken kann, muss mehr Kraft aufgebracht werden, um dieses Molekül von diesen Positionen zu lösen.

Einziger limitierender Faktor für dieses Prinzip wäre eine stärkere Anbindung des Moleküls an die Oberfläche der Probe im Vergleich zur Anbindung an der Probensonde. Man würde dann quasi die Kraft messen bei welcher die Angelschnur reißt. Glücklicherweise kann man aber ein Experiment meist entsprechend gestalten, um dieses Phänomen gezielt zu vermeiden oder dies auch gezielt zu nutzen, um damit die mechanischen Eigenschaften von Einzelmolekülen – wie etwa deren Elastizität – zu untersuchen. Dieser Aspekt

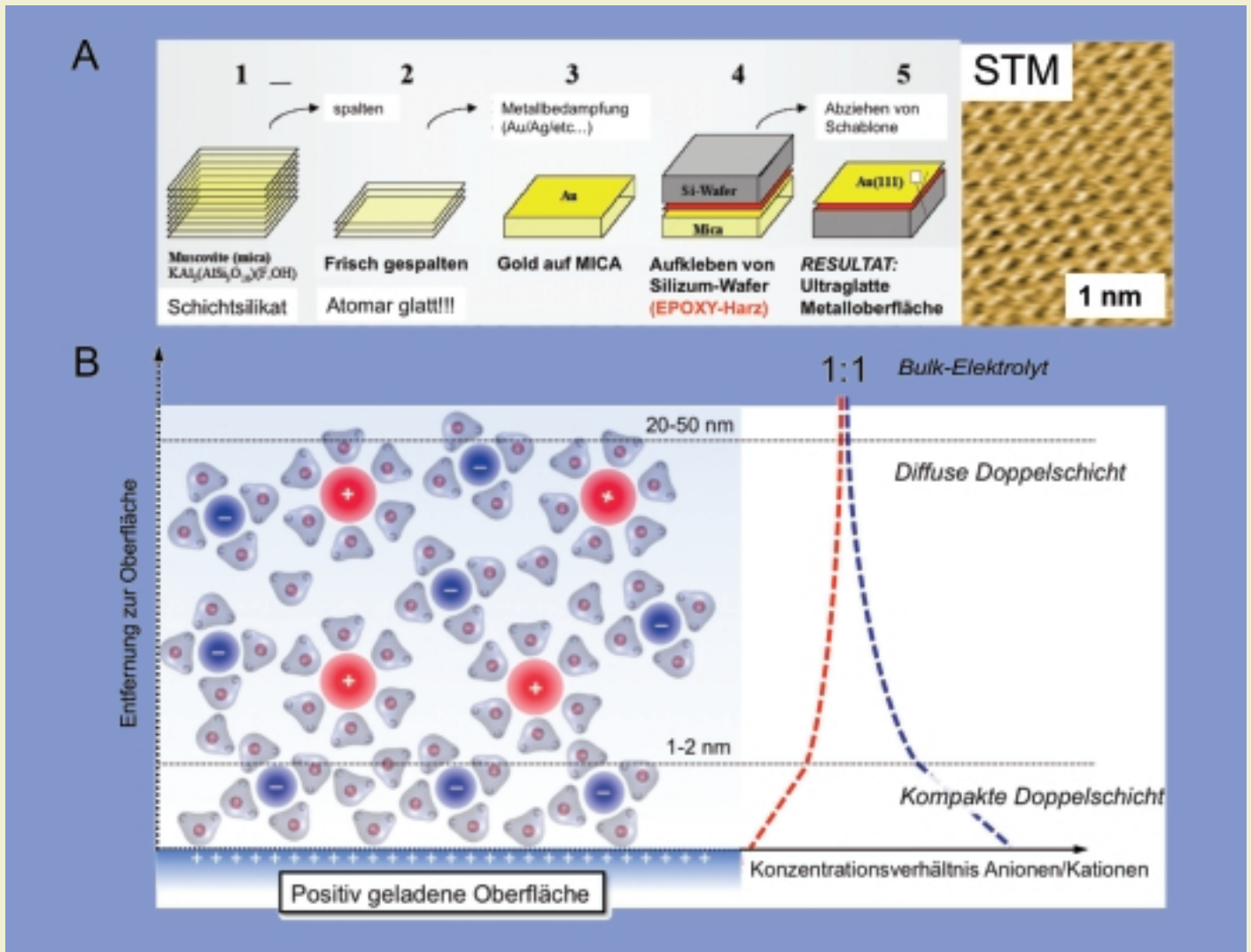


Abb. 4: (A) Prinzip des Template-Strippings. Auf den resultierenden Oberflächen kann man mithilfe von Rastertunnelmikroskopie (STM) atomar aufgelöst die glatte Topographie zeigen. Die runden Erhebungen im Topographiebild stellen einzelne Goldatome dar. (B) Aufbau der elektrolytischen Doppelschicht. Eine positiv geladene Oberfläche zieht bevorzugt negative Anionen an bzw. eine negativ geladene Oberfläche bevorzugt Kationen. Im Wechselspiel zwischen dieser gerichteten Migration und thermisch angetriebener Diffusion entsteht dadurch eine so genannte elektrolytische Doppelschicht mit Anreicherung entgegengesetzt geladener Ionen an einer geladenen Oberfläche.

spiegelt die Anforderungen an das Design und die genaue Planung der experimentell untersuchten Systeme wider, um auch tatsächlich in der Lage zu sein, spezifische molekulare Wechselwirkungen einerseits zu messen und andererseits auch durch gut gewählte Blindversuche korrekt interpretieren zu können (Abbildung 3).

Dementsprechend fokussieren sich die Arbeiten im Arbeitskreis auf Untersuchungen molekularer Haftkräfte, auf die Entwicklung von speziellen Modellsystemen (Oxid- und Metalloberflächen in Wechselwirkung mit Makromolekülen) und Methodiken, welche die soeben angesprochenen Aspekte beleuchten. Zum Nachweis der prinzipiellen Messbarkeit monomolekularer Kräfte wurden Versuche an Goldoberflächen, welche keine topographischen Unebenheiten und keine Oxidbelegung aufweisen, durchgeführt. Die Goldproben wurden dazu nach einem speziellen Verfahren, dem so genannten „Template-Stripping“, hergestellt. Dazu wird Gold mittels einer physikalischen Metallbedampfungsanlage auf eine ultra-glatte Schablone gedampft. Als Vorlage wird hierzu eine atomar-glatte Muskovit-Oberfläche (ein

Schichtsilikat) verwendet. Zieht man anschließend die Goldschicht von der Vorlage ab, erhält man atomar-glatte Goldoberflächen mit einer Vorzugsorientierung (111), welche die Oberflächenbeschaffenheit der atomar-glaten Vorlage widerspiegeln (Abbildung 4 (A)). Damit kann man auf diesen Goldproben jegliche Art von Wechselwirkungen, welche durch topographische oder spezifisch chemische Einflüsse induziert würden, ausschließen (Abbildung 4).

Einzelmolekül Adhäsionsversuche

Für die Einzelmolekül-Desorptionsversuche wurden an die Probensonde Polyacrylsäure-Makromoleküle kovalent gebunden [4, 5]. Führt man auf Au(111)-Oberflächen Einzelmolekül-Desorptionsversuche in wässrigen Elektrolyten (in diesem Fall 1mM $NaClO_4$ -Lösung) durch, so erhält man typischerweise Kraftabstandskurven, welche beim Zurückziehen der Probensonde Plateaus mit konstanter Kraft aufweisen (Abbildung 3 (B)). Dies bedeutet, dass man eine konstante Kraft aufwenden muss, um diese Einzelmoleküle von der

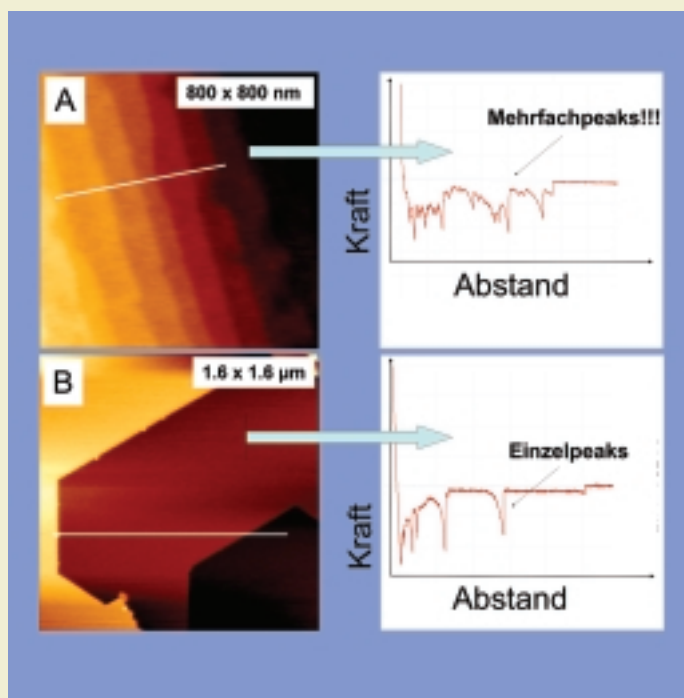


Abb. 5: (A) Typische Kraftabstandskurve eines Einzelmolekül-„peel-off“-Versuchs auf einer facettierten Oberfläche. (B) Typische Kraftabstandskurve eines Einzelmolekül-„peel-off“-Versuchs auf einer großflächig glatten Oberfläche. Nur vereinzelt können hierbei Stellen erhöhter Adhäsion gefunden werden, was direkt mit der atomaren Struktur der Oberfläche korreliert.

Oberfläche abziehen. Wird ein einzelnes Molekül komplett von der Oberfläche abgezogen, so detektiert man einen Sprung in der Kraftabstandskurve. Dieser Sprung kann nun mit der Kraft, die man aufwenden muss, um ein einzelnes Makromolekül von der Oberfläche abziehen, direkt korreliert werden. Die lineare Abhängigkeit der Abzieh- oder auch Desorptionskraft zeigt, dass die Einzelmoleküle auf der gesamten Oberfläche homogen gebunden immobilisiert werden können, wobei die Bindungskraft von 80–90 Piconewton eine relativ schwache Bindung durch Van der Waals Kräfte nahelegt.

Variiert man nun auch den pH-Wert der Lösung, so ändert sich einerseits die Oberflächenladung der Goldoberfläche, da Gold in Abhängigkeit vom pH-Wert spezifisch geladene Atome oder Moleküle aus der Elektrolytlösung adsorbieren kann. Dadurch bildet sich im Bereich der Oberfläche eine so genannte elektrolytische Doppelschicht aus. Die Adsorption von geladenen Spezies wie etwa Hydroxid-Ionen oder Hydronium-Ionen (deren Konzentrationsverhältnis ja vom pH-Wert der Lösung abhängt) bewirkt ihrerseits wieder eine bevorzugte Anziehung von entgegengesetzt geladenen, solvatisierten (also von Wasser umgebenen) Begleit-Ionen, in diesem Fall Na^+ oder ClO_4^- Ionen, sowie einen Konzentrationsabfall der gleich geladenen Begleit-Ionen. Damit baut sich eine geladene Doppelschicht aus, wobei die Konzentrationsverhältnisse der oberflächlich an- bzw. abgereicherten Ionen sich in Richtung der Elektrolytlösung wieder der eigentlichen 1:1 Elektrolytkonzentration annähern (Abbildung 4 (B)).

Andererseits findet das gleiche Phänomen auch um das Polymermolekül Makromolekül statt, da die Carboxylatfunktionalität des Polymers, wie in Abbildung 3 (A) dargestellt,

pH-Wert abhängig entsprechend als *protonierte* und damit ungeladene Funktionalität oder eben als *deprotonierte* und somit negativ geladene Funktionalität vorliegt (Abbildung 5). Adsorbieren diese Moleküle nun an Goldoberflächen bei sehr sauren pH-Werten von 4,5, so liegt eine Situation der Adsorption einer nahezu ungeladenen $-\text{COOH}$ Kette auf einer positiv geladenen Goldoberfläche vor. Erhöht man den pH-Wert, werden sich sowohl Oberfläche als auch Polymerkette negativ laden. Dies wiederum bewirkt einen Abfall der gemessenen Absorptionskräfte, da die elektrostatischen Wechselwirkungen zwischen Polymer und Oberfläche abstoßend werden (Abbildung 3 (C)). Die Absenkung der Adsorptionskräfte beträgt in diesem Fall nur ca. 10 Prozent. Dies bedeutet aber, dass die Van der Waals Kräfte zu ca. 90 Prozent die Wechselwirkung zwischen diesen Polymermolekülen sowie der Goldoberfläche dominieren. Die elektrostatischen Kräfte sind somit nicht ausschlaggebend für eine Anhaftung der Polymermoleküle auf der Oberfläche von Gold.

Um diese grundlegenden Untersuchungen auch auf andere technisch relevante Systeme zu übertragen, wurden spezielle einkristalline ZnO-Modelloberflächen entwickelt [6, 7] und Desorptionsversuche, wie soeben auf Gold beschrieben, durchgeführt. Ein entscheidender Vorteil dieser speziell entwickelten ZnO-Oberflächen ist dadurch gegeben, dass man die Oberflächenbeschaffenheit kontrollieren kann. Es ist einerseits möglich, diese Oberflächen mit atomar-glatten Terrassen im μm -Bereich darzustellen. Andererseits kann man die Topographie der Oberflächen auch so darstellen, dass atomar-glatte Terrassen im Abstand von 40 nm bis 100 nm von Stufenkanten getrennt sind. Damit kann der Einfluss der Topographie auf die gemessenen Desorptionsversuche definiert untersucht werden. Die Versuche auf diesen Substraten zeigen eindeutig, wie stark die Haftungskraft der Einzelmoleküle von lokalen Unterschieden des Substrats abhängen kann (Abbildung 5). Im Vergleich zeigen die beiden Substrate, dass an Kanten des Zn-Oxids (welche eine andere Oberflächenchemie aufweisen) die Adhäsionskraft wesentlich stärker ist. Die lokale Koordinationschemie, welche aufgrund der Verwendung von einkristallinen ZnO-Oberflächen auch an den Kanten exakt definiert und rationalisierbar ist, stellt somit einen der bedeutendsten Faktor dar, um eine Erhöhung der Adhäsion zu erreichen (Abbildung 5). Mithilfe eines grundlegenden Verständnisses wird es damit in Zukunft auch für industriell relevante Systeme möglich sein, wissenschaftsbasiert die lokale Koordinationschemie von ZnO dahingehend zu beeinflussen, um adhäsionsverstärkende Effekte zu erzielen. Dies ist ein wichtiger Aspekt speziell im Bereich der zinkbeschichteten Stahlbandprodukte, welche großteils passivierende ZnO-Oberflächen aufweisen.

Zusammenfassung und Ausblick

Am Lehrstuhl für Technische und Makromolekulare Chemie konnte ein wesentlicher Beitrag zum molekularen Verständnis von Haftungsphänomenen auf technisch relevanten Zinkoxid-Oberflächen geleistet werden. In erster Linie konnte gezeigt werden, dass Einzelmolekül-Adhäsionsversuche, wie

sie in der Polymerphysik schon standardisiert durchgeführt werden, auch im Bereich der Materialwissenschaften zu erstaunlichen Ergebnissen mit hoher technischer Relevanz führen können. Es ist damit gelungen, die lokale ZnO-Koordinationschemie im Bereich der Stufenkanten, welche unterkoordinierte Zink-Atome aufweisen, direkt mit der gemessenen Erhöhung der Haftkraft zu korrelieren. In Zukunft werden diese fundamentalen Ergebnisse einerseits im technisch relevanten Bereich umgesetzt, um Haftungsverstärkung zu erreichen. Andererseits wird weiter an der Entwicklung von Modellsystemen zum Verständnis der komplexen Adhäsionschemie speziell auch innerhalb von organischen Kompositsystemen gearbeitet. Eine der größten Herausforderungen bei neuartigen Lackierungssystemen ist die Inkorporation von speziell entwickelten Nanocontainern, welche Selbstheilung sowie Korrosionsschutz für verschiedenste technisch relevante Oberflächen bieten. Dabei wird einer der bedeutendsten Faktoren die lokale Haftungschemie und innerhalb dieser die Nanokomposite sowie die Anbindung zum jeweiligen Substrat darstellen. Abschließend sei erwähnt, dass die vorgestellten Arbeiten natürlich nur einen kleinen Teilaspekt der komplexen Wechselwirkungen und Vorgänge innerhalb technisch relevanter Systeme abdecken. Am Lehrstuhl werden daher auch unterschiedlichste weitere Aspekte auf grundlegender sowie angewandter Basis untersucht. Ein umfassender Überblick ist auf der Homepage des Lehrstuhls zu finden (<http://chemie.uni-paderborn.de/fachgebiete/tc/ak-grundmeier>).

Literatur

- [1] K. AUTUMN: PHILOSOPHICAL TRANSACTIONS OF THE ROYAL SOCIETY A-MATHEMATICAL PHYSICAL AND ENGINEERING SCIENCES 366, 1575 (2008).
- [2] H. J. GAO: MECHANICS OF MATERIALS 37, 275 (2005).
- [3] G. GRUNDMEIER: ANNUAL REVIEW OF MATERIALS RESEARCH 35, 571 (2005).
- [4] C. FRIEDSAM: EUROPHYSICS LETTERS 72, 844 (2005).
- [5] C. FRIEDSAM: JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER 16, S2369 (2004).
- [6] M. VALTINER: LANGMUIR 24, 5350 (2008).
- [7] M. VALTINER: PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9, 2406 (2007).



Dr. Markus Valtiner ist seit 2006 wissenschaftlicher Mitarbeiter des von Prof. Grundmeier geleiteten Christian-Doppler-Labors. Im Rahmen seiner Dissertation beschäftigte er sich mit der Untersuchung von Stabilisierungs- sowie Adhäsionsmechanismen auf Zinkoxiden.

Kontakt

Prof. Dr.-Ing. Guido Grundmeier

Fakultät für Naturwissenschaften

Lehrstuhl für Technische und Makromolekulare Chemie

05251.60-3646

g.grundmeier@tc.upb.de

Kunststofftechnik im Zeitalter der Informationsgesellschaft

Das perfekte Kunststoffprodukt dank anwenderfreundlicher Software

Prof. Dr.-Ing. Volker Schöppner, Prof. Dr.-Ing. Helmut Potente, Dipl.-Ing. Karsten Anger, Dipl.-Ing. Robert Weddige

Am Institut für Kunststofftechnik der Universität Paderborn werden kunststofftechnische Grundlagen zur Auslegung von Maschinen mithilfe der Informationstechnik in Softwareprodukte umgesetzt. Nur eine Maschine, die optimal ausgelegt ist, erzielt maximale Leistungen. Die dafür erforderlichen Softwareprodukte, allen voran REX (Rechnergestützte Extruderauslegung), PSI (Paderborner Spritzgießsimulation) und SIGMA (Simulation von Doppelschneckenextrudern), kommen in der Kunststoffmaschinenindustrie mit großem Erfolg zur Anwendung. Im idealen Fall garantieren sie die Reduzierung von Herstellkosten bei steigender Qualität des Produkts. Da innovative Produkte mit hochkomplexen Funktionen enorme Herausforderungen an die Produktion stellen, wird dieser Prozess von Ingenieuren am Institut für Kunststofftechnik ständig geprüft, weiterentwickelt und perfektioniert. Die Finanzierung der Softwareprodukte ist seit etwa 20 Jahren über Konsortien internationaler Firmen gesichert.

Vereinfacht gesagt beschäftigt sich die Kunststoffverarbeitung damit, aus granulatförmigem Rohmaterial Produkte des täglichen Lebens und Produkte für den industriellen Gebrauch herzustellen. Beispielsweise Getränkeflaschen, Verpackungsmaterialien oder Dichtungen. Prinzipiell wird zwischen Herstellungs- und Weiterverarbeitungsverfahren unterschieden. Bei den Herstellungsverfahren sind der Extrusions- und der Spritzgießprozess die wichtigsten Wertschöpfungsprozesse zur Herstellung von Kunststoffproduk-



Prof. Dr.-Ing. Volker Schöppner ist seit 2007 Professor für Kunststoffverarbeitung am Institut für Kunststofftechnik Paderborn (KTP). Zuvor war er in verschiedenen Positionen bei der Hella KGaA in Lippstadt (Automobilzulieferer) tätig, zuletzt verantwortlich für die Scheinwerfer-Produktionstechnologie. Von 1989 bis 1999 war Volker Schöppner wissenschaftlicher Mitarbeiter und Oberingenieur am KTP. In dieser Zeit promovierte er zum Thema „Simulation der Plastifiziereinheit von Einschneckenextrudern“.



Prof. Dr.-Ing. Helmut Potente gründete 1980 das Institut für Kunststofftechnik Paderborn (KTP). Bis August 2004 war er dessen Leiter und Inhaber des Lehrstuhls „Technologie der Kunststoffe“. Von Oktober 1982 bis Oktober 1983 war Helmut Potente Dekan des Fachbereichs Maschinenbau. Seit 2004 ist er Professor emeritus und leitete bis Ende 2008 gemeinsam mit Prof. Dr. Volker Schöppner das KTP. Des Weiteren ist Potente Vorstandsmitglied des Vereins zur Förderung der Kunststofftechnologie.



Abb. 1: Kooperationspartner des KTP ist u. a. die Firma Battenfeld aus Bad Oeynhausen, die komplette Extrusionslinien anbietet. Bestandteil einer solchen Linie ist dieser gegenläufige Doppelschneckenextruder 2-92-28V zur Herstellung von PVC-, Druck- und Abwasserrohren.

ten. Die Extrusion (extrudere: hinausstoßen, hinaustreiben) dient der kontinuierlichen Fertigung von Endlosprodukten aus Kunststoffen, wie Abwasserrohre oder Verpackungsfolie. Dies geschieht mithilfe von Maschinen, die Einschnecken- oder Doppelschneckenextruder genannt werden. Durch den diskontinuierlichen Spritzgießprozess werden Bauteile mithilfe von Spritzgießautomaten hergestellt, die aufgrund ihrer Geometrie nicht kontinuierlich verarbeitet werden können. Produktbeispiele für den Spritzgießprozess sind Handyschalen, CDs oder PET-Flaschen-Vorformlinge. Deutlich wird: Die Kunststofftechnik spielt in unserem täglichen Leben eine wichtige und bedeutende Rolle.

Herzstück der Extrusionslinie ist die Schnecke

In beiden Prozessen, dem Extrusions- sowie dem Spritzgießprozess, spielt die Plastifiziereinheit, auch „Schnecke“



Foto: Melos GmbH, Melle

Abb. 2: Rekorde werden auf speziellen Bodenbelagsystemen gelaufen. Diese Kunststoffbeläge können nahezu jede beliebige Farbe erhalten. Bevor sie in einer Halle oder einem Stadion liegen, sehen sie in Form von Granulat so aus. Die Produkteigenschaften der Belagsysteme für Sport-, Freizeit- oder Gewerbebereich werden ständig verbessert.

genannt, eine entscheidende Rolle. Die Plastifiziereinheit ist nötig, um das Granulat beziehungsweise das Rohmaterial durch Reibung (durch die Drehbewegung) und durch Wärmezufuhr (von außen über Heizungen) aus dem festen in den schmelzförmigen Zustand zu überführen. In der Plastifiziereinheit wird das Granulat sozusagen aufgeschmolzen. Die Funktionsweise ist ähnlich wie bei einem herkömmlichen Fleischwolf, allerdings entsteht in einer Plastifiziereinheit mehr Reibungsenergie, und es wird zusätzlich Wärme eingebracht. Erst wenn die Kunststoffschmelze am Ende der Plastifiziereinheit gut durchmischt und vollständig aufgeschmolzen ist, erfolgt die Übergabe an das Werkzeug. Im Werkzeug wird diese Schmelze in die Form des Endproduktes (Rohr, Folie oder Handyschale) gebracht.

Prozessverläufe werden theoretisch vorhergesagt

Die Anforderungen an die Schmelze werden durch das Endprodukt vorgegeben. Sie müssen durch die verfahrenstechnische Auslegung der Plastifiziereinheit beziehungsweise der Schnecke und des dazugehörigen Zylinders garantiert werden. Verfahrenstechnische Auslegung heißt, dass beispielsweise ein bestimmter Druck- und Temperaturverlauf über der gesamten Länge der Schnecke erreicht werden soll. Deshalb ist die theoretische Vorhersage der Prozessverläufe in und am Ende der Plastifiziereinheit von entscheidender Bedeutung. Nur so kann die Schnecke optimal für die ver-

langten Produkteigenschaften auslegt werden. Darüber hinaus sind der Massedurchsatz, der bei einer bestimmten Drehzahl und vorausgesetzten Randbedingungen durch die Plastifiziereinheit erreicht wird (Prozesswirtschaftlichkeit), oder die Massetemperatur an der Schneckenspitze (Pro-



Foto: Playmobil, Geobra Brandstätter GmbH & Co. KG

Abb. 3: Einige Hersteller von Spielzeug, hier am Beispiel von Playmobil, sind echte Innovationstreiber. So wurde in der Vergangenheit etwa das Verfahren Montagespritzguss, bei dem zwei Teile beweglich ineinander gespritzt werden, erfunden.

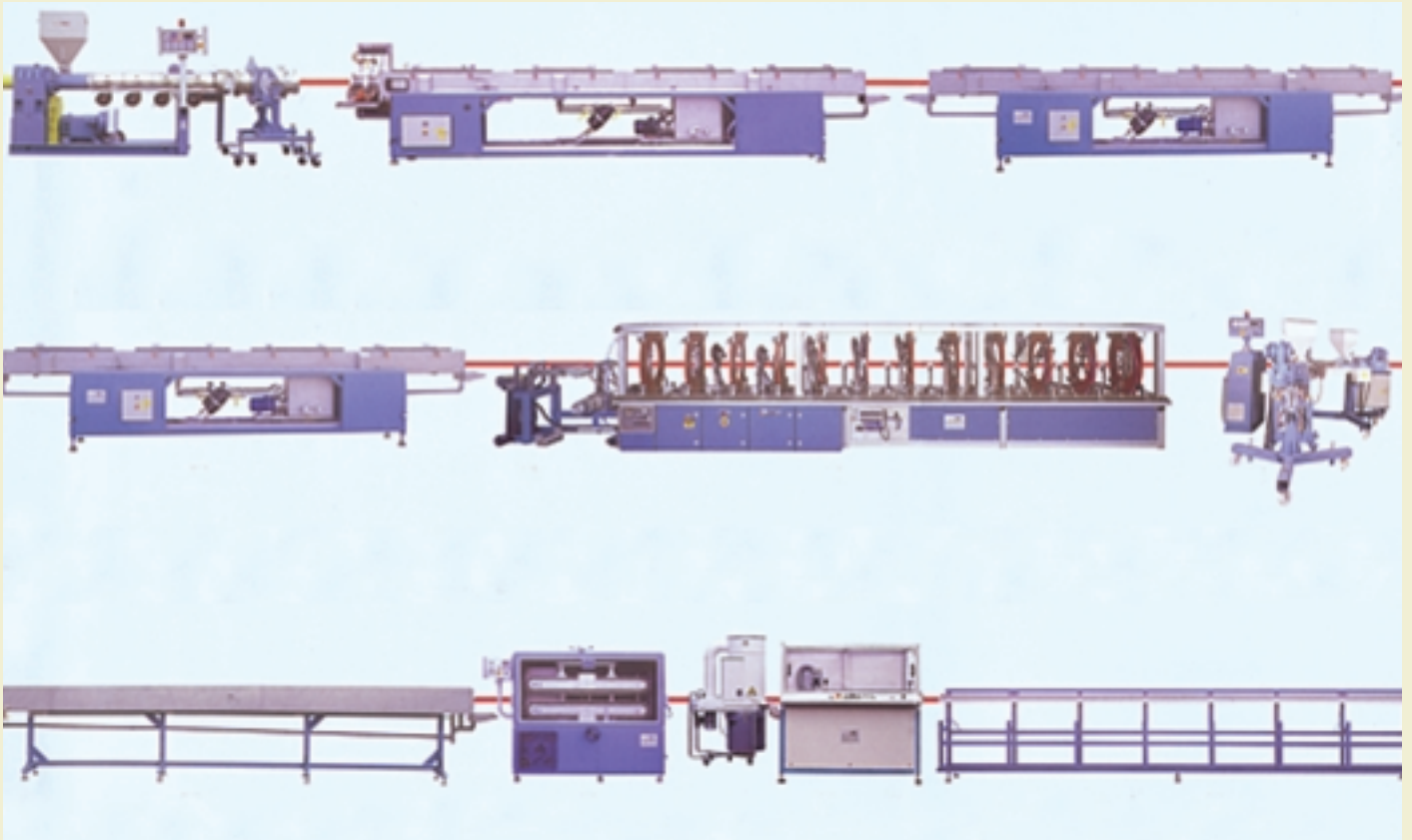


Foto: Extrudex GmbH, Mühlacker

Abb. 4: Eines der Haupteinsatzgebiete der Extrusion ist die kontinuierliche Herstellung von Profilen, Platten, Folien und Rohren, für die hier beispielhaft ein Anlagenaufbau zu sehen ist: Es beginnt mit dem Extruder, in dem das Kunststoffgranulat aufgeschmolzen wird und anschließend durch ein Werkzeug den Rohrquerschnitt erhält. Das heiße Rohr verlässt, gezogen durch einen Raupenabzug am Ende der Kette, den Extruder und wird in einen Vakuumtank gezogen. Hier wird das Rohr durch eine Kalibrierhülse unter Vakuum auf das richtige Maß gebracht. Anschließend durchläuft es zwei Kühltanks, in denen das heiße Rohr abgekühlt und in seiner Form fixiert wird. Zum Schluss wird es auf die gewünschte Länge gesägt und nach Bedarf gestapelt.

duktqualität) von entscheidender Bedeutung für die Qualität der Maschine.

Hinter der Vorhersage der Prozessverläufe stecken mathematische Berechnungsgrundlagen. Diese meist analytischen Berechnungswerkzeuge innerhalb der Simulationsprogramme basieren auf mathematisch-physikalischen Modellen zur Berechnung der Prozessverläufe einer Plastifiziereinheit. Durch die Verwendung analytischer Berechnungsgrundlagen sind die Rechenzeiten im Gegensatz zu numerischen Computer-Programmen deutlich kürzer, und sie benötigen wesentlich geringere Rechnerkapazitäten.

Softwaretools für die gesamte Branche

Aufgrund der am Institut für Kunststofftechnik erarbeiteten Kopplung einzelner Funktionszonen einer Schnecke ist es möglich, mit hoher Genauigkeit auch komplexe Schneckenkonfigurationen zu berechnen und eine Vorhersage der Prozessverläufe und der Prozessparameter zu treffen. Diese Softwaretools heißen REX (Rechnergestützte Extruderauslegung) beziehungsweise PSI (Paderborner Spritzgießsimulation) und SIGMA (Simulation von Doppelschneckenextrudern). Sie sind für die gesamte Branche von Interesse. Finanziert werden sie von Konsortien internationaler Firmen, die im intensiven Wettbewerb miteinander stehen. Auf diese Art kann die Hochschule ihre Unabhängigkeit wahren, während die Unternehmen sich die Kosten teilen können. Gemeinsa-

me Anwendertreffen am Institut für Kunststofftechnik waren zunächst für die teilnehmenden Unternehmen gewöhnungs-



Foto: Tupperware Deutschland GmbH

Abb. 5: Hochwertige Haushaltsware dient in der Grundlagenvorlesung „Zwei-Komponenten-Spritzguss-Verfahren“ manchmal als Anschauungsobjekt. Mithilfe der Software-Programme, die am KTP geschrieben werden, können Produktionsprozesse bei der Herstellung von PP-Produkten simuliert und perfektioniert werden.



Foto: Eva Potente

Abb. 6: Waren früher aus Stahlblech und schwer zu schleppen: Mülleimer. Das ist mit der Kunststoffvariante in Rot oder Blau leichter geworden. Und seitdem sich Rollen unter den Mülleimern aus Kunststoff befinden, lassen sie sich leicht an den vorgesehenen Platz befördern.

bedürftig, da zum Teil vertrauliche Entwicklungsthemen behandelt werden. Mit der Zeit überwiegt jedoch der Reiz, diese Entwicklungsthemen auch mit Kollegen des Wettbewerbers fachlich zu diskutieren.

Ohne Materialdaten sind Simulationsergebnisse wertlos

Für die erfolgreiche Simulation von Verarbeitungsprozessen, Fließ- oder Abkühlvorgängen werden die genauen Eigenschaften der zu verarbeitenden Materialien benötigt. Diese stehen in der Materialdatenbank PAM (Paderborner Materialdatenbank). Wichtige Parameter sind das rheologische Verhalten (Viskosität), das thermodynamische Verhalten (wie Wärmeleitung und -kapazität, Enthalpiewerte und Kristallitschmelz- bzw. Glasübergangstemperatur), Dichte (von Feststoff und Schmelze sowie Schüttdichte), technologische Daten (Granulatabmessungen) und das tribologische Verhalten (Reibwerte). Alle genannten Parameter sind nicht nur stark vom Kunststoff abhängig, sondern zusätzlich auch druck-, temperatur- und belastungsabhängig. Vor jeder Simulation muss das Materialverhalten des entsprechenden Kunststoffs bestimmt werden. Mit PAM können Materialdatensätze erstellt, ausgewertet und verglichen werden, denn ohne geeignet und fachgerecht aufgearbeitete Materialdaten sind die Simulationsergebnisse wertlos. Grundlage für die Berechnung von Stoffwertfunktionen in PAM sind Laborversuche. Die Materialparameter sind enorm wichtig, da bereits geringe Ungenauigkeiten zu großen Abweichungen in der Prozessverlaufs- und Prozessparameterberechnung führen. Durch solche Ungenauigkeiten können die ausgelegten Plastifiziereinheiten fehlerhafte Geometrien aufweisen und somit kein optimales Ergebnis erfüllen. Im schlimmsten Fall kann es sogar passieren, dass die geforderten Qualitätskriterien der Schmelze an der Schneckenspitze nicht erfüllt werden. Dann ist die Plastifiziereinheit für diesen Anwendungsfall unbrauchbar.



Foto: Ferromatik

Abb. 7: Die K-Tec 155 2F der Firma Ferromatik wird seit vier Jahren für verschiedene Forschungsprojekte im Bereich der Hart-Weich-Verbindungen von Thermoplasten und TPE verwendet. Darüber hinaus verfügt die Maschine, die im Verarbeitungslabor der Kunststofftechniker steht, über die Verfahrensvariante des „Monosandwich“ zur Herstellung von Sandwichbauteilen.

Fazit:

Der Praxistest ist gnadenlos

Forschungsergebnisse aus der Ingenieurwissenschaft sind für die industrielle Praxis nicht einfach nutzbar: Die Berechnungsmethoden stellen zu hohe Anforderungen an die vorhandene Zeit und den mathematischen Ausbildungsstand



Foto: Christiane Bernert

Abb. 8: Firmen, deren Mitarbeiter mit Softwareprodukten aus dem Institut für Kunststofftechnik arbeiten, bekommen regelmäßige Schulungen in Paderborn. Vorne links Prof. Dr.-Ing. Helmut Potente, hinten rechts Prof. Dr.-Ing. Volker Schöppner.

des Praktikers. Seinen volkswirtschaftlichen Nutzen hat Wissen jedoch nur, wenn es in der industriellen Forschung tagtäglich genutzt wird. Das KTP setzt deswegen seit Jahren auf die Entwicklung anwenderfreundlicher Software als Werkzeug für den Ingenieur. Die mathematischen Zusammenhänge werden als Black Box verpackt, so dass der Benutzer nur die Eingangsgrößen beschreiben muss. Aufgrund seines Prozessverständnisses ist das meist kein Problem, ebenso wenig die Interpretation der Ergebnisse. Hierdurch ändert sich der Zeitaufwand massiv: Die Berechnung der Maschinen erfordert durch die komfortable Umsetzung weniger Zeit als vorher, obwohl die Berechnungsvorgänge wesentlich umfangreicher sind.

Aus dem täglichen Praxistest ergeben sich aus Sicht der forschenden Ingenieure eine Reihe von Vorteilen: Der intensive Einsatz der Berechnungsmethoden ist ein gnadenloser Test für die Qualität. Abweichungen zwischen Theorie und Realität werden zurückgemeldet und befruchten so die Weiterentwicklung und kontinuierliche Verbesserung der wissenschaftlichen Erkenntnisse.

Die Mitarbeiter des Instituts für Kunststofftechnik, die sich mit der Erarbeitung des Wissens weiterqualifizieren, haben in der anwendenden Industrie potenzielle Arbeitgeber. In den vergangenen Jahren hat eine Vielzahl junger Ingenieure ihren Weg in genau die Unternehmen gefunden, deren Wettbewerbsfähigkeit von der zielgenauen Berechnung der Maschinen abhängt.

Durch die Kontakte zur Industrie und die dabei zustande kommenden Drittmittel erweitert sich die maschinelle Ausstattung des Instituts. Die Ausbildung der Studierenden wird verbessert.

Seit 25 Jahren ist die Modellierung von Materialregressionen und die Modellierung des Prozessverhaltens von Einschnecken- und Doppelschneckenaggregaten mit REX/PSI, SIGMA und PAM ein wichtiger Forschungsschwerpunkt am Institut für Kunststofftechnik. Experimentelle und theoretische Arbeiten, die auf diesem Gebiet durchgeführt wurden, waren die Grundlage für diverse Dissertationen im Ein- und Doppelschneckenbereich. Entscheidender Pluspunkt aller wissenschaftlichen Arbeiten am KTP ist, dass sie nicht im Elfenbeinturm der Universität ihr Dasein fristen, sondern ihre Anwendung in der Industrie finden. Fehler werden nicht jahrelang kopiert, sondern in der Praxis sichtbar und ausgemerzt.

Literatur

BEAUMONT J.-P.: SUCCESSFUL INJECTION MOLDING, MUNICH: CARL HANSER VERLAG (2002)

HENSEN F., KNAPPE W., POTENTE H.: HANDBUCH DER KUNSTSTOFF-EXTRUSIONSTECHNIK, BAND 1 UND 2, CARL HANSER VERLAG, MÜNCHEN, WIEN (1986 UND 1989)

JOHANNABER F., MICHAELI W.: HANDBUCH SPRITZGIESSEN, MÜNCHEN: CARL HANSER VERLAG (2004)

OSSWALD T.-A., BEAUMONT J.-P.: INJECTION MOLDING HANDBOOK, MUNICH: CARL HANSER VERLAG (2008)

POTENTE H.: AUSLEGEN VON SCHNECKENMASCHINEN-BAUREIHEN KUNSTSTOFF-FORTSCHRITTSBERICHTE – BAND 6, CARL HANSER VERLAG MÜNCHEN, WIEN (1981)

WHITE J. L., POTENTE H.: SCREW EXTRUSION, CARL HANSER VERLAG (2003)

RAUWENDAAL C.: POLYMER EXTRUSION, MÜNCHEN, HANSER VERLAG (2001)

SCHÖPPNER V.: VERFAHRENSTECHNISCHE AUSLEGUNG VON EXTRUSIONSANLAGEN, DÜSSELDORF, VDI VERLAG (2001)



Dipl.-Ing. Karsten Anger war bis 2008 wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Kunststofftechnik. Er promovierte zum Thema „Modellierung temperierter Schnecken“.



Dipl.-Ing. Robert Weddige ist seit 2007 wissenschaftlicher Mitarbeiter am KTP und forscht auf den Gebieten „Feststoff-Förderung“ und „Partikel-Simulation“.

Kontakt

Dipl.-Ing. Martin Schäfers, Oberingenieur

Institut für Kunststofftechnik Paderborn

05251.60-3052

martin.schaefers@ktp.upb.de

Wird die Globalisierung unser Rentensystem verändern?

Gesellschaftliche Umverteilungspräferenzen im Rentensystem

Jun.-Prof. Dr. Tim Krieger

Globalisierung und demographischer Wandel können den Wunsch der Menschen nach Umverteilung im Rentensystem beeinflussen. Die vorliegende experimentell-empirische Untersuchung zeigt auf, durch welche Kanäle Veränderungen der Umverteilungspräferenz verursacht werden. Die Ergebnisse deuten darauf hin, dass bestimmte Formen der Umverteilung trotz zunehmender Einkommensungleichheit reduziert werden sollen, sofern nicht die Altersarmut überproportional zunimmt.

Mit seiner Forderung nach einer „angemessenen“ Rente für langjährige Beitragszahler, d. h. einer Rente über dem Sozialhilfesatz, trat Nordrhein-Westfalens Ministerpräsident Jürgen Rüttgers im Frühjahr 2008 eine intensive politische Debatte über das Thema Altersarmut los. Während Rentner heutzutage zu den am wenigsten von Armut betroffenen Bevölkerungsgruppen zählen, wird sich das Armutsrisiko in den nächsten Jahrzehnten unter anderem durch den demographischen Wandel und die dadurch notwendig gewordenen Rentenreformen erhöhen. Während Rüttgers Vorschlag den Nerv der Bevölkerung traf und später in der Politik – mit Abstrichen – aufgegriffen wurde, stellt er aus Sicht der Gesetzlichen Rentenversicherung (GRV) eine Abkehr von der bisherigen Systematik dar, nach der – im Prinzip – jeder erworbene Rentenpunkt den gleichen Wert haben soll; d. h. beispielsweise, dass zwei Personen mit einem Einkommen von 80 Prozent des Durchschnittseinkommens in einem Jahr genau 0,8 Rentenpunkte erhalten und diese (wie auch alle Rentenpunkte aus den restlichen Beitragsjahren) genau denselben Rentenanspruch begründen. Nach Rüttgers Vorschlag würde jedoch ein Rentenpunkt für Geringverdiener mit 34 Beitragsjahren weniger wert sein als ein Rentenpunkt für – ansonsten identische – Personen, die 35 Beitragsjahre haben und damit von der vorgeschlagenen Sonderregelung profitieren können.

Ähnliche Formen der so genannten intragenerativen Umverteilung, d. h. der Umverteilung von unterschiedlichen Bevölkerungsgruppen innerhalb ein und derselben Generation (etwa von Reich zu Arm, zugunsten von Frühergeständlern oder von Männern zu Frauen), weisen nahezu alle existierenden Rentensysteme aus politischen, ökonomischen und sozialen Gründen auf. In Deutschland gehören hierzu unter anderem die Kriegsfolgelasten, die Rente nach Mindesteinkommen, die Integration ostdeutscher Rentenbezieher in die GRV oder die Berücksichtigung von Ausbildungs- und Erziehungszeiten. Der Rentenzahlung steht dabei keine eigene Beitragszahlung gemäß den normalen Grundsätzen der GRV



Jun.-Prof. Dr. Tim Krieger ist seit 2006 Juniorprofessor für Internationale Wirtschaftspolitik an der Fakultät Wirtschaftswissenschaft der Universität Paderborn. Seine Forschungsschwerpunkte liegen in den Bereichen Sozialpolitik in alternden und sich globalisierenden Gesellschaften, Migration und internationale Faktormobilität. In der Lehre vertritt er die Bereiche Wirtschaftspolitik, Sozialpolitik sowie Politische Ökonomie.

gegenüber. Im internationalen Vergleich zeigt sich, dass der Umfang oder Grad dieser Art von Umverteilung in erheblichem Maße von der konkreten Ausgestaltung der Rentensysteme abhängt und sich deutlich unterscheiden kann. Die Erklärung des Zustandekommens solcher Unterschiede ist seit etwa zehn Jahren ein zentrales Thema der Forschung auf dem Gebiet der Rentenversicherungstheorie, die sich traditionell eher mit der Umverteilung zwischen den Generationen (intergenerative Umverteilung) beschäftigt. Zentrale Fragestellungen sind dabei u. a., wieso Rentensysteme mit starker intragenerativer Umverteilung – gemessen am Bruttoinlandsprodukt – tendenziell kleiner als Systeme ohne diese Umverteilung sind und ob der internationale Wettbewerb zwischen den Staaten um Investitionen und hochqualifizierte Arbeitskräfte zu einem (ungewollten) Abbau von Umverteilung führt. Eine Reihe von Forschungsfragen ist in diesem Zusammenhang jedoch noch ungeklärt und soll im Folgenden genauer betrachtet werden. Hierbei geht es insbesondere um die Frage, inwieweit Änderungen bestimmter Einflussfaktoren – etwa der Einkommensverteilung oder der Lebenserwartung – die Präferenzen (hiermit werden in der ökonomischen Theorie Vorlieben und Geschmäcker für bestimmte Alternativen formal umschrieben) für intragenerative Umverteilung ändern. Diese Fragestellung ist vor allem vor dem Hintergrund zweier der wichtigsten gesellschaftlichen Trends – der Alterung der Gesellschaften und der Globalisierung – von hoher Relevanz. Eine detaillierte Beschreibung der Untersuchung findet sich in Krieger und Traub (2008a,b).

Erste empirisch-experimentelle Untersuchung zur Umverteilung in Rentensystemen

Die Untersuchung von Präferenzen, insbesondere von

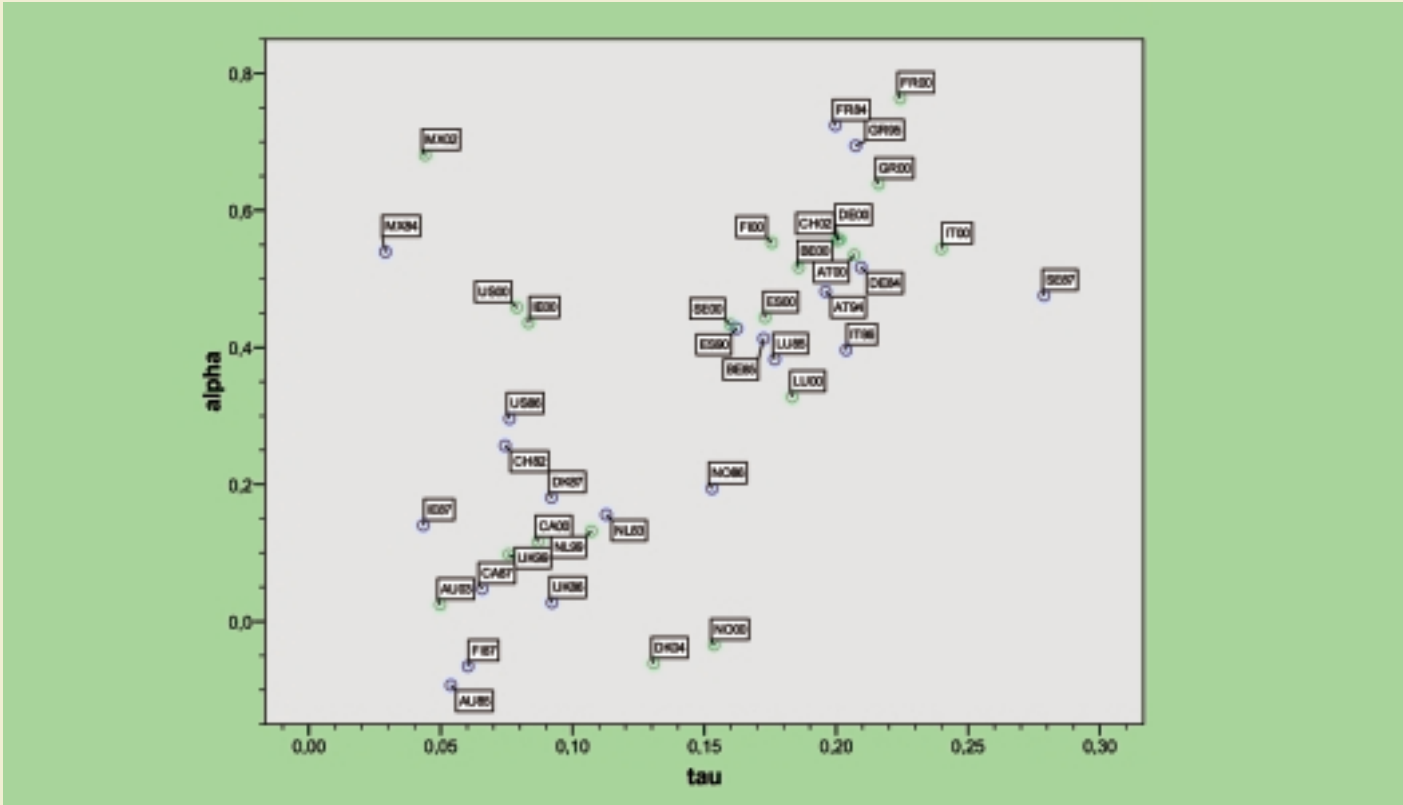


Abb. 1: Veränderung des Bismarckfaktors („alpha“) und der Generosität („tau“) der staatlichen Rentensysteme von 20 OECD-Ländern (ca. 1985/grün bis 2000/blau).

Umverteilungspräferenzen, ist methodisch anspruchsvoll, weil eine direkte Befragung kaum unabhängig von realen Umverteilungssystemen wie dem existierenden Rentensystem möglich ist und die Befragten zum Teil zu strategischen statt ehrlichen Antworten veranlasst. Fragt man beispielsweise danach, wie hoch eine neu einzuführende Mindestrente à la Rüttgers sein solle, so könnte es sinnvoll sein, ähnlich wie bei Tarifverhandlungen einen zu hohen Wert anzugeben, weil man davon ausgeht, dass im politischen Prozess ohnehin nur ein Bruchteil dieser Forderung durchgesetzt wird. Die „wahren“ Präferenzen lassen sich auf diese Weise nur schwer ermitteln. Die vorliegende Untersuchung wählt daher erstmalig im Kontext von intragenerativer Umverteilung in Rentensystemen den Weg eines ökonomischen Laborexperiments, das im Sinne des Wirtschaftsnobelpreisträgers von 2002, Vernon Smith, eine tatsächliche Offenlegung von Präferenzen erlaubt. Zusätzlich zu dem Experiment wird eine empirische Analyse von Daten individueller Arbeits- und Renteneinkommen aus der Luxembourg Income Study (LIS) für 20 OECD-Länder durchgeführt, die eine Überprüfung der Aussagegüte des Experiments erlaubt. Die Messung des Grads an intragenerativer Umverteilung in Rentensystemen erfolgt formaltheoretisch mit Hilfe des so genannten Bismarckfaktors (in Anlehnung an den Begründer des deutschen Rentensystems, Reichskanzler Otto von Bismarck). Dieser Faktor beschreibt eine gewichtete Kombination aus einer Grundrente und einer einkommensabhängigen Rente. Die Grundrente, die hier beispielhaft für alle oben beschriebenen Formen der intragenerativen Umverteilung steht, ist dabei eine für alle Mitglieder des Rentensystems

einheitliche Zahlung, die unabhängig von zuvor geleisteten Beitragszahlungen ist. Da die Beitragszahlungen jedoch in der Regel am individuellen Einkommen orientiert sind, ist dieser Teil des Rentensystems hochgradig umverteilend. Die Bezieher hoher Einkommen leisten hohe Beiträge, erhalten jedoch nur die einheitliche Grundrente, so dass die Zahler niedriger Beiträge Nettoleistungsempfänger sind. Anders dagegen bei der einkommensabhängigen Rente, die genau proportional zu den individuellen Beiträgen ausgezahlt wird. Verdient eine Person ein doppelt so hohes Einkommen wie eine zweite Person, so erhält sie auch eine doppelt so hohe Rente. Reale Rentensysteme enthalten – wie oben angedeutet – beide Elemente in unterschiedlicher Stärke. Die (lineare) Kombination der beiden Elemente bei gegebener Größe des Rentensystems erlaubt es dann, in Form des Bismarckfaktors den Grad der intragenerativen Umverteilung zu ermitteln und zu vergleichen. In der Literatur wird ein Rentensystem mit einheitlicher Rente für alle, d. h. einem Bismarckfaktor von Null, als reines Beveridge-System (benannt nach dem Begründer des englischen Rentensystems, Sir William Henry Beveridge) bezeichnet. Ein Bismarckfaktor von Eins beschreibt ein Rentensystem ohne jegliche intragenerative Umverteilung und wird als reines Bismarck-System bezeichnet. Empirisch beruht der Bismarckfaktor auf einem Vergleich von Renten- und Arbeitseinkommen am unteren und oberen Ende der Einkommensverteilung, die zueinander ins Verhältnis gesetzt werden. Haben die Renteneinkommen der ärmsten 20 Prozent der Rentenbezieher die gleiche Höhe wie die Renteneinkommen der reichsten 20 Prozent der

Generositätsindex	Bismarckfaktor	
	Anstieg	Reduktion
Anstieg	<i>Österreich (AT)</i> <i>Belgien (BE)</i> <i>Kanada (CA)</i> <i>Finnland (FI)</i> <i>Frankreich (FR)</i> <i>Irland (IE)</i> <i>Italien (IT)</i> <i>Mexiko (MX)</i> <i>Spanien (ES)</i> <i>Schweiz (CH)</i> <i>Vereinigte Staaten (US)</i>	<i>Dänemark (DK)</i> <i>Griechenland (GR)</i> <i>Luxemburg (LU)</i> <i>Norwegen (NO)</i>
Reduktion	<i>Australien (AU)</i> <i>Deutschland (DE)</i> <i>Großbritannien (UK)</i>	<i>Niederlande (NL)</i> <i>Schweden (SE)</i>

Tab. 1: Klassifikation der betrachteten Länder hinsichtlich der Veränderung von Bismarckfaktor und Generosität zwischen 1985 und 2000.

Rentenbezieher, so bedeutet dies, dass jeder Rentenbezieher exakt die gleiche Rente erhält und somit ein reines Beveridge-System vorliegt. Haben dagegen die 20 Prozent der ärmsten Arbeitseinkommensbezieher auch die 20 Prozent niedrigsten Renteneinkommen (analog für die reichsten 20 Prozent), so liegt Proportionalität und damit ein reines Bismarcksystem vor. Auf Basis der Einkommensverteilungsdaten der LIS kann ein Ländervergleich vorgenommen werden, bei dem untersucht wird, wie sich der Bismarckfaktor im Zeitablauf verändert hat, wobei zusätzlich betrachtet wird, ob sich auch die Generosität des Rentensystems verändert hat, d. h. das Niveau der Renten relativ zu den Arbeitseinkommen. Abbildung 1 und Tabelle 1 zeigen diese Entwicklung für den Zeitraum von 1985 bis 2000.

Abnahme des Grads an intragenerativer Umverteilung im Laufe der Zeit

Es zeigt sich, dass die überwiegende Zahl der Länder (14 von 20), darunter Deutschland, den Grad an intragenerativer Umverteilung zum Teil erheblich reduziert hat, indem der Bismarckfaktor erhöht wurde. Besonders ausgeprägte Veränderungen lassen sich vor allem in den skandinavischen Ländern, aber auch in Irland und der Schweiz beobachten. Eine Reihe dieser Länder hat im Beobachtungszeitraum große Rentenreformen durchgeführt. Konkret kann eine Absenkung des Umverteilungsgrads beispielsweise dadurch geschehen, dass für die Berechnung der Rente nicht die zehn Jahre mit den höchsten Einkommen oder die letzten drei Jahre vor dem Ruhestand gewertet werden, sondern alle Beitragsjahre, wie dies in der GRV von jeher getan wird. Die Beziehung von individuellem Einkommen und späterer Rente wird hierdurch gestärkt und unter anderem strategisches Verhalten von Unternehmen verhindert. So könnte ein niedriges Einkommen mit dem Versprechen auf zusätzliche

Zahlungen in den letzten drei Jahren vereinbart werden, um – zu Lasten der Versichertengemeinschaft – überdurchschnittliche Rentenleistungen zu erzeugen, die das niedrige Ausgangsgehalt kompensieren. Ein anderer Weg zur Absenkung wurde in Deutschland gegangen, wo u. a. Ausbildungszeiten nicht mehr rentensteigernd berücksichtigt werden. Wurden ursprünglich 13 Jahre der Schul- und Ausbildungszeit anerkannt, wurde dies zunächst auf sieben, dann drei und nun null Jahre zurückgeschraubt. Die Beobachtung, dass der Grad an intragenerativer Umverteilung reduziert wurde, lässt zunächst noch keine Rückschlüsse darüber zu, warum es zu dieser Entwicklung gekommen ist. Dazu bedarf es einer ökonometrischen Analyse, in der (mögliche) kausale Zusammenhänge überprüft werden, die aus Hypothesen abgeleitet wurden. Hierbei zeigt sich jedoch eine entscheidende Schwäche der Analyse auf Basis der LIS-Daten. Zwar stellt LIS die besten internationalen Daten zu Einkommensverteilungen zur Verfügung, jedoch ist ihr Umfang im Rahmen dieser Untersuchung bescheiden, weil insgesamt nur 20 Länderbeobachtungen verwendet werden können. Aus diesem Grund wird die Analyse durch das ökonomische Experiment, in dem über 4 500 Beobachtungen erzeugt werden, unterstützt. Dies hat auch Konsequenzen für die Auswahl der betrachteten Kausalzusammenhänge. Sinnvollerweise sollte der Untersuchungsgegenstand in der empirischen Analyse und im Experiment derselbe sein, damit die Ergebnisse verglichen werden können. Weil aber ein Experiment aus unterschiedlichen Gründen nicht beliebig ausgedehnt werden kann (z. B. führt jede Einführung einer zusätzlichen Variablen mit zwei Ausprägungen zu einer Verdoppelung der Auszahlungen für die Teilnehmer), werden im Folgenden nur zwei zentrale Hypothesen aus der aktuellen Literatur zur intragenerativen Umverteilung in Rentensystemen näher beleuchtet.

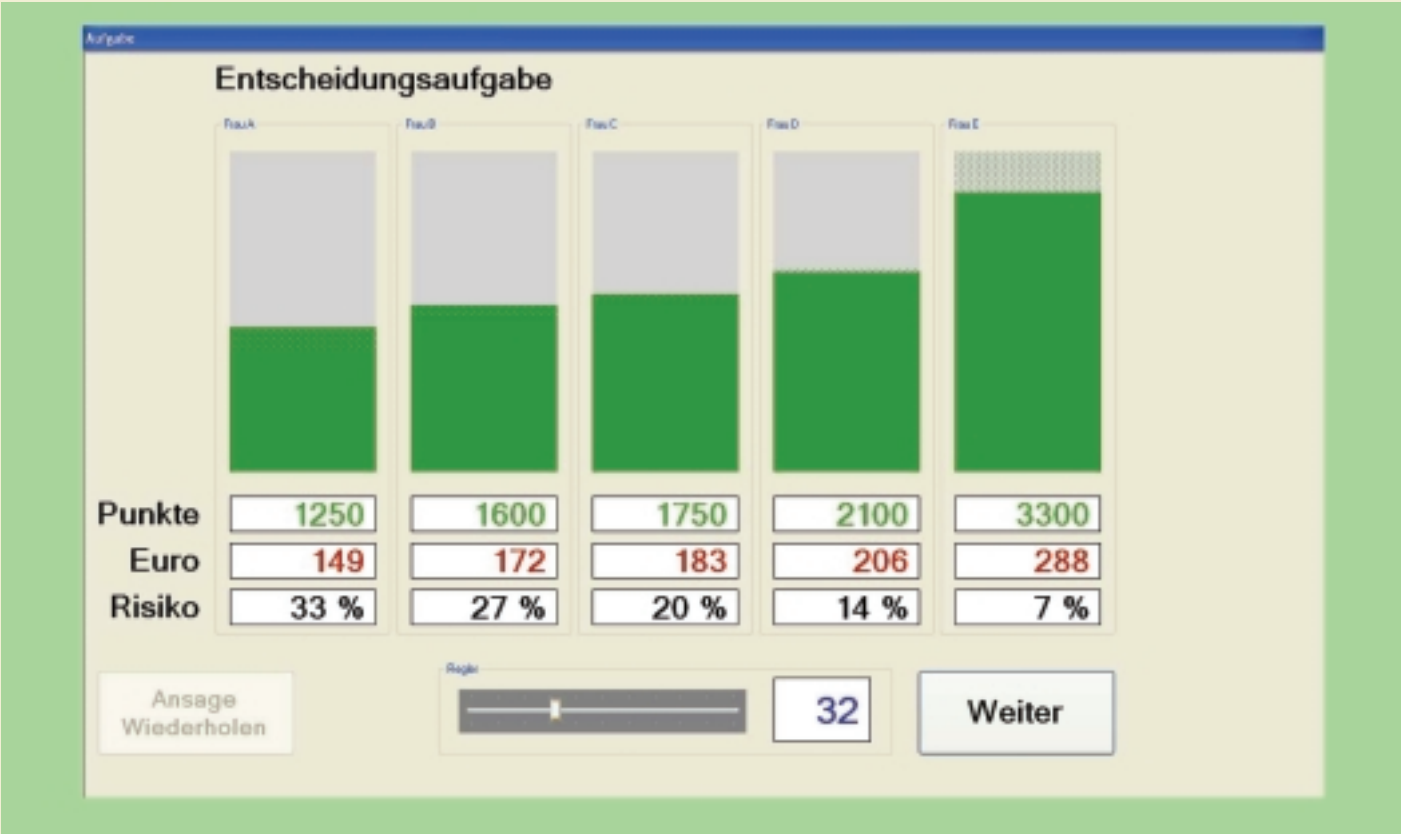


Abb. 2: Bildschirm mit zu bearbeitender Entscheidungsaufgabe (Beispiel).

Die zu untersuchenden Hypothesen beziehen sich auf die zwei folgenden Eigenschaften von Rentensystemen, von denen eine Umverteilungswirkung erwartet wird. Einerseits soll die Verteilung der Alterseinkommen betrachtet werden, weil – dies ist Hypothese 1 – die Umverteilung durch das Rentensystem einen erheblichen Effekt auf die Nettoeinkommensverteilung hat und damit nach Conde-Ruiz und Profeta (2007) die Präferenzen für Umverteilung beeinflusst. Hierbei wird auf die drei ersten zentralen Momente der Einkommensverteilung abgestellt, d. h. auf den Mittelwert, die Varianz und die Schiefe. Je höher der Mittelwert, desto reicher sind die Menschen im Durchschnitt. Je höher die Varianz, desto stärker streut das Einkommen in dem Sinne, dass die Reichen reicher und die Armen ärmer werden. Schließlich, je höher die Schiefe, desto stärker nimmt der Anteil der Armen relativ zu den Reichen zu. Jedes Zentralmoment kann potenziell die Umverteilungspräferenz beeinflussen. So würde ein steigender Mittelwert – isoliert betrachtet – dafür sorgen, dass ein Teil der Armen über die Armutsschwelle rutscht und damit nicht mehr arm in einem absoluten Sinne ist. Dies könnte die Gesellschaft dazu veranlassen, den Grad an Umverteilung zugunsten der Armen zu reduzieren. Dagegen liegt es nahe zu vermuten, dass, weil zunehmende Varianz und Schiefe die Armen ärmer und zudem die Zahl der Armen größer werden lässt, mehr Umverteilung gewünscht wird. Andererseits sollte nach Borck (2007) und Gorski et al. (2007) – dies ist Hypothese 2 – auch die Lebenserwartung eine Rolle im Zusammenhang mit der intragenerativen Umverteilung spielen, insbesondere deshalb, weil sich zeigt, dass Bezieher hoher Einkommen tendenziell länger leben. Sie würden von einer Grundrente also profitieren, weil sie

diese – zulasten der Ärmern mit niedrigerer Lebenserwartung – im Durchschnitt über einen längeren Zeitraum beziehen.

Experiment enthüllt die „wahren“ Präferenzen

Im Experiment wurden die Teilnehmer (180 Studierende der Universität Bremen) einer Entscheidungssituation, bei der Unsicherheit über die zukünftige Einkommensposition und die Lebenserwartung herrschte, ausgesetzt. Abbildung 2 zeigt beispielhaft eine dieser Entscheidungssituationen, bei der eine (Alters-)Einkommensverteilung vorgegeben war, die mit Hilfe eines Reglers verändert werden konnte. Der Regler

Einflussfaktor	LIS-Daten-Analyse	Experiment
Generosität	↑	↑
Mittelwert	↔	n. V.
Varianz	↑	↑
Schiefe	↓	↓
Lebenserwartung	↑	symmetrisch: ↔ asymmetrisch: ↑

Tab. 2: Zusammenfassung der Ergebnisse (Richtung der Veränderung des Bismarckfaktors bedingt durch jeweiligen Einflussfaktor).



Abb. 3: Durchführung des Experiments in der Mensa der Universität Bremen (Hintergrund: Studierende führen Entscheidungsaufgaben durch; Vordergrund: Die Projektleiter Juniorprofessor Dr. Tim Krieger (links) und Prof. Dr. Stefan Traub (Universität Bremen, rechts).

gab hierbei den Umverteilungsgrad bzw. den Bismarckfaktor an. Die Aufgabe der Teilnehmer war es, die Verteilung zu wählen, die ihnen „am besten gefällt“. Hierbei war zu beachten, dass nach der Wahl eine Lotterie stattfand, in der die eigene Einkommensposition, die später mit etwas Glück in bar ausgezahlt wurde, bestimmt wurde. Wurde z. B. ein hoher Bismarckfaktor gewählt, so war die Streuung der Einkommen sehr hoch und man konnte einer hohen oder niedrigen Auszahlung zugelost werden. Wurde der Umverteilungsgrad dagegen hoch angesetzt, so waren sich die möglichen Auszahlungen sehr ähnlich und es bestand kein Risiko, eine sehr niedrige Auszahlung zu erhalten. Insgesamt wurden zehn Teilnehmer als Gewinner ausgelost und erhielten Auszahlungen in Höhe von 3 379 Euro. Einer der Gewinner hatte allerdings das Pech, in der zweiten Auslosung („Lebenserwartungslotterie“) ohne eine Auszahlung zu bleiben. Hiermit wurde eine niedrige Lebenserwartung simuliert. Obwohl als Gewinner ausgelost, erreichte diese Person das „Rentenalter“ nicht. Die Struktur des Experiments fand damit hinter dem „Schleier des Nichtwissens“ (Rawls, 1971) statt, bei dem angenommen wird, dass eine Gesellschaftsordnung idealerweise von „unvoreingenommenen“ Menschen (d. h. ohne Kenntnis ihrer eigenen späteren Position im Leben) ausgestaltet werden sollte. Im Experiment wurde dies durch die Wahl des Bismarckfaktors vor der Durchführung der Auslosungen simuliert. Die Teilnehmer agierten dabei als „involvierte soziale Planer“, die eine Entscheidung für die Gesellschaft treffen, in der sie später leben werden. Dieser Aufbau des Experiments ist präferenzenthüllend, weil es für die Teilnehmer keinen Sinn machte, sich strategisch statt gemäß ihren eigenen Präferenzen hinsichtlich des

Bismarckfaktors zu verhalten.

Die Untersuchung des Einflusses dieser Parameter auf den Grad der Umverteilung zeigt eine hohe Übereinstimmung zwischen empirischer Analyse und Experiment (Tabelle 2). Es zeigt sich, dass die Menschen eine Mischung von Grund- und einkommensabhängiger Rente wünschen. Dies entspricht der Boulding-Hypothese (Boulding, 1962, S. 83: “Society lays a modest table at which all can sup and a high table at which the deserving can feast”). Dabei ist zusätzlich festzustellen, dass die Grundrente zwar mit dem allgemeinen Einkommen steigt, jedoch nicht so schnell wie die durchschnittliche Rente. Dies bedeutet, dass die Grundrente – ähnlich wie die offizielle Armutsschwelle – zwar ein relatives Konzept ist, das – auf einem niedrigeren Niveau – Teilhabe an den gesellschaftlichen Aktivitäten erlauben soll, die Empfänger an Einkommenszuwächsen der gesamten Gesellschaft jedoch nur unterproportional beteiligt werden. Bezüglich der Streuung und der Schiefe der Einkommen ergibt sich ein überraschendes Ergebnis. Während eine zunehmende Schiefe – wie erwartet – zu einer stärkeren Umverteilungspräferenz führt, weil der soziale Planer eine starke Zunahme der Zahl der Armen unakzeptabel findet, führt eine zunehmende Spreizung zwischen niedrigen und hohen Einkommen durch eine steigende Varianz zu einem höheren Bismarckfaktor, also zu einem geringeren Umverteilungswunsch. Dieses der ursprünglichen Vermutung vollkommen entgegengesetzte Ergebnis wird von beiden Analysemethoden bestätigt und ist hoch signifikant. Die Erklärung hierfür ist in einer empirisch-experimentell zwar bestätigten, aber der Standardtheorie nicht entsprechenden Form individueller Präferenzen (so genannte „randomisierte“ Präferenzen

zen, vgl. Traub et al., 2008) zu suchen, die die für die Ungleichheitsmessung zentrale Annahme des Transferprinzips verletzt. Konkret legt hier ein teilweise eigennütziger sozialer Planer nur einen verringerten Wert auf die Ergebnisgleichheit (im Sinne einer möglichst gleichen Verteilung der Einkommen) und betont stattdessen die Möglichkeit, bei steigender Ungleichheit unter den Empfängern hoher Einkommen zu sein. Dies kann durch einen Abbau von Umverteilung erreicht werden.

Schließlich ergibt sich hinsichtlich der Lebenserwartung ein damit verbundener Abbau intragenerativer Umverteilung. Dies liegt im Experiment an der Verbindung hoher Einkommen mit hoher Lebenserwartung (gibt es diese Beziehung nicht, so ist der Effekt insignifikant). Der soziale Planer erkennt, dass durch das längere Leben der reicheren Individuen eine Verteilung der Renten vor allem unter diesen Personen besonders sinnvoll ist, weil so die Renten im Erwartungswert höher sind. Intragenerative Umverteilung wird abgebaut.

Mehr Umverteilung durch Globalisierung und demographischen Wandel?

Aus diesen Ergebnissen lassen sich einige wichtige Schlussfolgerungen für die staatlichen Rentensysteme in den Zeiten von Globalisierung und demographischem Wandel ableiten. Geht man davon aus, dass die Globalisierung im Sinne der klassischen Handelstheorie durch Abbau von Handelschranken und verbesserte Mobilität der Produktionsfaktoren Arbeit und Kapital zu steigenden Einkommen (wenn auch gegebenenfalls verbunden mit einer stärkeren Streuung selbiger) führt und gleichzeitig die Alterung der Gesellschaft voranschreitet, so deuten die Vorzeichen dieser Einflussfaktoren entsprechend der vorherigen Analyse darauf hin, dass der Grad an intragenerativer Umverteilung – im Einklang mit den Wünschen der Gesellschaft – weiter abnehmen wird. Die Rentensysteme bewegen sich verstärkt in Richtung Bismarcktyp. Dieser Trend wird allerdings beschränkt, wenn sich die Schiefe der Einkommensverteilung verändert, weil dann ein starker Wunsch nach zusätzlicher intragenerativer Umverteilung in der Gesellschaft entsteht. Tatsächlich wird vielfach angenommen, dass die Zahl der Globalisierungsverlierer größer als die der Gewinner sein und dass es eine stark steigende Altersarmut geben wird. Beides erhöht die Zahl der Armen und damit die Schiefe der Verteilung. Tritt diese Entwicklung in starkem Maße ein, dann wird sich auch die GRV einer Entwicklung in Richtung auf ein System mit starker Grundrentenausrichtung kaum entziehen können (und dann war der Vorschlag von Jürgen Rüttgers nur ein erster Schritt auf diesem Weg). Allerdings wäre dies eine verfehlte Reaktion, denn der Bismarckfaktor ist ein rentenpolitisches Instrument, das so konstruiert ist, das es zwar die Varianz, aber nicht die Schiefe der Renteneinkommensverteilung verändern kann. Mit anderen Worten: Zunehmende Altersarmut führt zu einem verstärkten Wunsch, den Grad an intragenerativer Umverteilung mit Hilfe des Bismarckfaktors abzubauen, ohne dass dies das Problem der Altersarmut beheben würde.

Literatur

BORCK, R. (2007): ON THE CHOICE OF PUBLIC PENSIONS WHEN INCOME AND LIFE EXPECTANCY ARE CORRELATED. JOURNAL OF PUBLIC ECONOMIC THEORY 9, 711–725.

BOULDING, K. (1962): SOCIAL JUSTICE IN SOCIAL DYNAMICS. IN: BRANDT, R. (HRSG.): SOCIAL JUSTICE, ENGLEWOOD CLIFFS: PRENTICE-HALL, 73-92.

CONDE-RUIZ, I.; PROFETA, P. (2007): THE REDISTRIBUTIVE DESIGN OF SOCIAL SECURITY SYSTEMS. ECONOMIC JOURNAL 117, 686–712.

GORSKI, M.; KRIEGER, T.; LANGE, T. (2007): PENSIONS, EDUCATION AND LIFE EXPECTANCY. DISKUSSIONSPAPIER NR. 07/04 DER DFG FORSCHERGRUPPE “HETEROGENE ARBEIT”, UNIVERSITÄT KONSTANZ.

KRIEGER, T.; TRAUB, S. (2008A): BACK TO BISMARCK? SHIFTING PREFERENCES FOR INTRAGENERATIONAL REDISTRIBUTION IN OECD PENSION SYSTEMS. CENTER FOR INTERNATIONAL ECONOMICS WORKING PAPER No. 2008-06, UNIVERSITY OF PADERBORN.

KRIEGER, T.; TRAUB, S. (2008B): EMPIRISCHE UND EXPERIMENTELLE EVIDENZ ZUR STAATLICH ORGANISIERTEN ALTERSSICHERUNG UND ZU GESELLSCHAFTLICHEN UMVERTEILUNGSPRÄFERENZEN IN OECD-LÄNDERN. DEUTSCHE RENTENVERSICHERUNG 63 (2008), 1, S. 85–102.

RAWLS, J. (1971): A THEORY OF JUSTICE. OXFORD: OXFORD UNIVERSITY PRESS.

TRAUB, S.; SEIDL, C.; SCHMIDT, U. (2008): AN EXPERIMENTAL STUDY ON INDIVIDUAL CHOICE, SOCIAL WELFARE, AND SOCIAL PREFERENCES. EUROPEAN ECONOMIC REVIEW (IM DRUCK).

Kontakt

Jun.-Prof. Dr. Tim Krieger

Fakultät Wirtschaftswissenschaft

Department Economics

05251.60-2117

tim.krieger@notes.upb.de

Moleküle auf Partnersuche

Molekulare Erkennung und Selbstorganisation auf atomarer Skala verstehen

Prof. Dr. Wolf Gero Schmidt

Die meisten Moleküle in lebenden Organismen liegen in zwei spiegelbildlichen Formen vor, die sich wie rechte und linke Hand nicht zur Deckung bringen lassen. Für viele Lebensprozesse ist es entscheidend, dass Moleküle der rechts- oder linkshändigen Form einander erkennen und spezifische Bindungen eingehen. Über diese so genannte chirale Erkennung in der Biologie hinaus, wird der molekularen Erkennung und Selbstorganisation ein großes technologisches Potenzial bei der Realisierung von funktionalen Nanostrukturen, z. B. auch bei der weiteren Miniaturisierung elektronischer Bauelemente zugeschrieben. Doch welche Mechanismen sind eigentlich dafür verantwortlich, dass sich Moleküle erkennen und unter bestimmten Bedingungen langreichweitig geordnete, supramolekulare Strukturen bilden? Quantenmechanische Simulationsrechnungen für komplexe Systeme mit weit über tausend Atomen können diese Frage im Detail beantworten und darüber hinaus Hinweise geben, wie Selbstorganisationsprozesse gezielt beeinflusst werden können.

Die Integrationsdichte elektronischer Bauelemente auf Siliziumchips folgt seit Jahrzehnten erstaunlich genau einer von Gordon Moore, Mitbegründer des Chipherstellers Intel, bereits 1965 gefundenen Regel: „Moore's Law“ besagt, dass sich die Zahl der Transistoren auf einem Chip etwa alle zwei Jahre verdoppelt. Ermöglicht wird dies durch die Verkleinerung der lithographischen Strukturen der Chips. Bei den momentan produzierten Transistoren der 65-Nanometer-



Prof. Dr. Wolf Gero Schmidt studierte Physik an der Friedrich-Schiller-Universität Jena. Nach Lehr- und Forschungstätigkeiten u. a. an der University of South Africa, der North Carolina State University und der Massey University Auckland ist er seit 2006 Inhaber eines Lehrstuhls für Theoretische Physik an der Universität Paderborn. Er untersucht Fragestellungen der Nanowissenschaften mit quantenmechanischen Modellen und numerischen Methoden.

Generation hat die Gate-Oxidschicht eine Dicke von 1.2 Nanometer, das sind nur etwa fünf SiO_2 -Lagen! Auch Testchips mit nur 32 Nanometer Strukturbreite wurden bereits realisiert. Die Miniaturisierung der Bauelemente hat damit bereits heute zu Strukturgrößen buchstäblich atomarer Dimensionen geführt. Da liegt der Gedanke nahe, solche Strukturen nicht mit dem zunehmend aufwändigeren Top-Down-Ansatz, d. h. durch lithographische Prozesse, zu realisieren, sondern dem Beispiel der Natur folgend den Bottom-Up-Ansatz der molekularen Selbstorganisation zumindest ergänzend auszunutzen. Obwohl es zurzeit utopisch anmutet, dass sich komplexe elektronische Schaltkreise unter geeigneten Bedingungen spontan aus einer Vielzahl von Molekülen bilden, ist es der Forschung in einer Reihe von

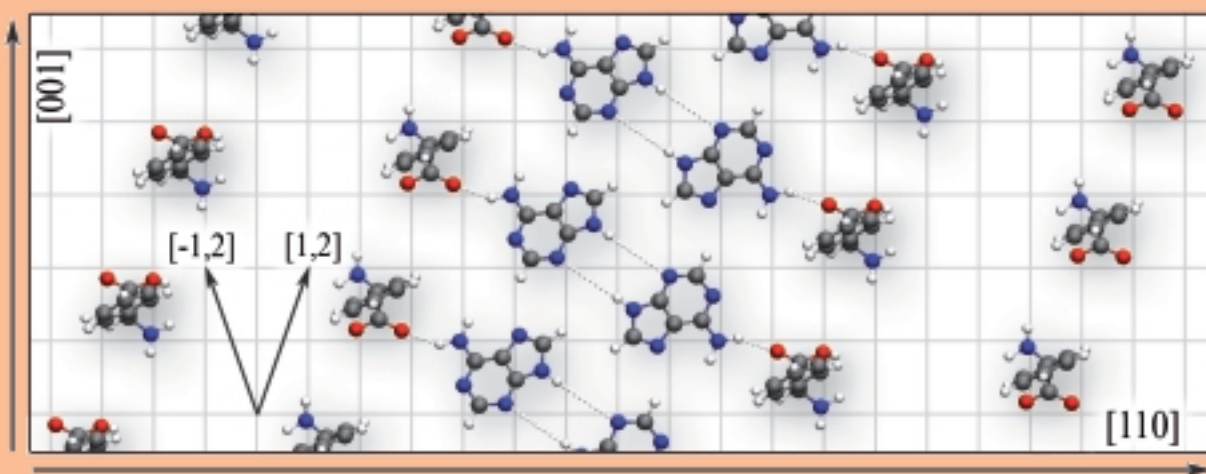


Abb. 1: Experimentell beobachtete Anordnung von Adenin und Phenylglycin auf der Kupfer-(110)-Oberfläche. Schematische Darstellung nach einer rastertunnelmikroskopischen Aufnahme von Chen und Richardson, 2003. Die Oberflächeneinheitszellen der Kupferoberfläche sind grau eingezeichnet.

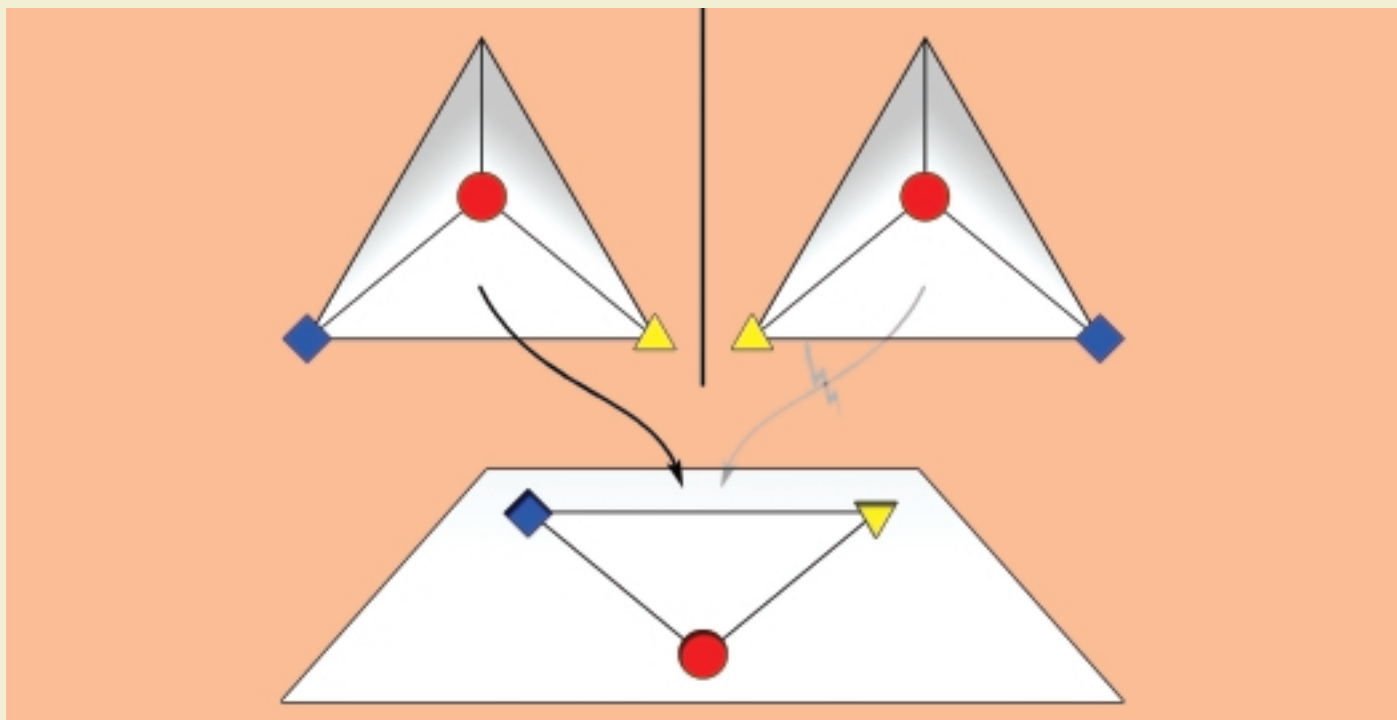


Abb. 2: Schematische Darstellung des Dreipunktmodells enantiospezifischer Reaktionen. Während der links dargestellte Enantiomer drei Bindungen mit dem Reaktionspartner unten eingehen kann, ist das für sein rechts dargestelltes Spiegelbild nicht möglich.

Fällen gelungen zu zeigen, dass eine derartige Technologie grundsätzlich zur Realisierung von Bauelementen geeignet ist. Resonatorstrukturen aus selbstorganisierten organischen Molekülen auf Metalloberflächen (Pennec et al., 2007) sind ein aktuelles Beispiel in dieser Hinsicht. Die Natur, welche mithilfe einiger weniger molekularer Bausteine, den Aminosäuren, eine unglaubliche Vielfalt an Lebensformen entwickelt hat, zeigt, dass sich prinzipiell auch sehr komplexe funktionale Strukturen mittels molekularer Selbstorganisation bilden lassen.

Eine wesentliche Voraussetzung zur gezielten Ausnutzung der Selbstorganisationsfähigkeit von Molekülen ist das detaillierte Verständnis der molekularen Erkennung auf atomarer Skala. Dabei stellt sich die Kombination von hochauflösenden Experimenten unter kontrollierten und wohldefinierten Bedingungen mit numerischen Simulationen auf Höchstleistungsrechnern als zunehmend erfolgreich heraus. Die dabei gewonnenen Ergebnisse vermitteln nicht nur neue Einsichten bei Untersuchungen fundamentaler Fragen wie der nach dem Ursprung des Lebens, sondern geben auch begründete Hoffnung, die molekulare Selbstorganisation zur Realisierung komplexer funktionaler Strukturen ausnutzen zu können.

Moleküle, die schwach auf chemisch inerten oder Metallsubstraten gebunden sind, stellen ein dem Experiment und der Theorie gleichermaßen zugängliches Laborsystem zur Untersuchung der molekularen Erkennung dar (Schmidt et al., 2006). Solche Systeme können mit den hochentwickelten spektroskopischen Werkzeugen der Oberflächenanalytik detailliert untersucht und gegebenenfalls auch beeinflusst werden, z. B. mit der Spitze eines Rastertunnelmikroskops. Abbildung 1 zeigt als ein Beispiel – welches im Folgenden näher betrachtet werden soll – die gemessenen molekularen Positionen nach der Adsorption der DNA-Base Adenin und

einer kleinen Aminosäure (Phenylglycin) auf einer kristallinen Kupferoberfläche (Chen & Richardson, 2003). Deutlich zu erkennen ist die Ausbildung einer langreichweitigen Ordnung der Moleküle. Die Adeninmoleküle bilden Dimerreihen aus, parallel zu denen sich die Aminosäuren beidseitig in je zwei molekularen Reihen anlagern. Was verursacht die Ausbildung dieser Struktur mit atomarer Präzision? Die Ordnung reicht offensichtlich weit über den Nächsten-Nachbar-Abstand des Kupfersubstrats hinaus und übersteigt damit typische chemische Bindungslängen um ein Mehrfaches. Noch spannender wird der experimentelle Befund, wenn man die Händigkeit der adsorbierten Aminosäuren untersucht. Phenylglycin ist ein chirales Molekül, d. h. es tritt in zwei Enantiomeren, S- und R-Phenylglycin auf, bei denen die Atome in gleicher Weise miteinander verknüpft sind, die sich jedoch durch eine Drehung nicht zur Deckung bringen lassen. Wird nach der Adsorption von Adenin auf die Kupferoberfläche eine Mischung aus gleichen Anteilen beider Phenylglycin-Enantiomere aufgebracht, tritt eine chirale Selektion durch die Adenin-Dimerreihen auf. Dimerreihen mit einer Orientierung parallel zur [1,2]-Richtung, d. h. so wie in Abbildung 1 gezeigt, werden ausschließlich durch S-Phenylglycin dekoriert. Eine attraktive Wechselwirkung mit dem ebenfalls auf der Oberfläche vorhandenen R-Phenylglycin wird nicht beobachtet. Im Gegensatz dazu lagert sich R-Phenylglycin ausschließlich parallel zu Adenin-Dimerreihen in [-1,2]-Richtung an. Was ist die Ursache dieser langreichweitigen chiralen Erkennung? Enantiospezifische, d. h. chiral selektive chemische Reaktionen werden gemeinhin mittels eines so genannten Dreipunktmodells erklärt, siehe Abbildung 2. Nach diesem Modell beruht die chirale Selektivität ähnlich wie ein Schlüssel-Schloss-System auf der Passung von drei Bindungsstellen, die nur für einen der beiden möglichen Enantiomere gewährleistet ist. Aber welche Wechsel-

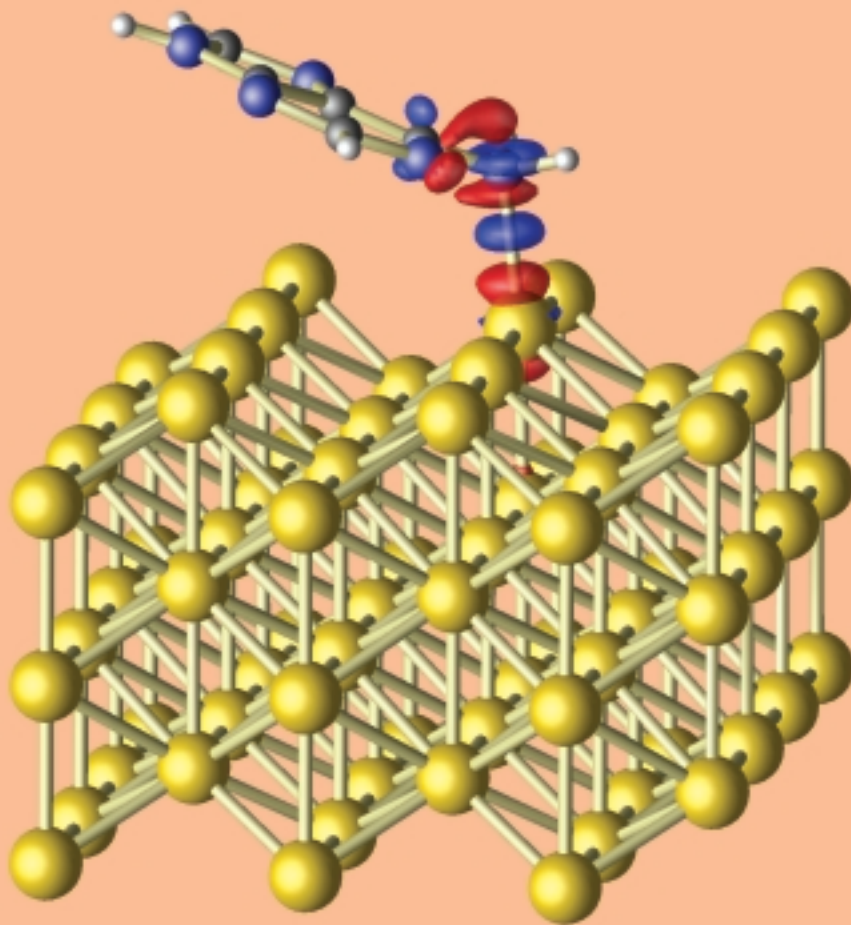


Abb. 3: Umverteilung der metallischen und molekularen Valenzelektronendichte hervorgerufen durch die gegenseitige Polarisierung von Adenin und Kupferoberfläche. Elektronenverarmungs- bzw. -anreicherungsgebiete sind mit roten bzw. blauen Isoflächen gekennzeichnet. Daten von Rauls, Blankenburg & Schmidt, 2008.

wirkungen zwischen Adenin und Phenylglycin können im Falle der in Abbildung 1 gezeigten Adsorptionsstruktur mit diesen drei Bindungs- oder auch Kontaktstellen identifiziert werden (Abbildung 2)?

Seit wenigen Jahren können – dank der Verfügbarkeit von massiv-paralleler Rechentechnik und dafür optimierter Algorithmen – solche Fragen mittels numerischer Simulationen untersucht werden. Da die zu erwartenden Wechselwirkungen vergleichsweise klein sind und Energieunterschiede typischerweise im Milli-Elektronenvolt-Bereich liegen, erfordern zuverlässige Antworten und tragfähige Vorhersagen quantenmechanische Rechnungen mit einer sorgfältigen Kontrolle aller physikalischen und numerischen Näherungen. Für die quantenmechanische Simulation von über tausend Atomen, wie sie im vorliegenden Fall für die Modellierung der Oberfläche und der Adsorbatmoleküle benötigt werden, ist die Dichtefunktionaltheorie die Methode der Wahl. Durch die simultane Berechnung der elektronischen Zustände und Basisfunktionen auf mehreren hundert Prozessoren können innerhalb einiger Tage bis zu wenigen Wochen numerisch auskonvergierte und physikalisch zuverlässige Adsorptionsgeometrien berechnet werden.

Sowohl für Adenin als auch Phenylglycin zeigt sich, dass es

infolge der Adsorption auf Kupfer zu einer beträchtlichen Umverteilung von Elektronen sowohl innerhalb des Moleküls als auch zwischen Kupfer und dem Molekül kommt. Dies wird auch bei Betrachtung von Abbildung 3 deutlich. Hier ist die Differenz der Ladungsdichten von Adenin adsorbiert auf Kupfer und der einzelnen Teilsysteme, d. h. der reinen Kupferoberfläche und des Adeninmoleküls in der Gasphase gezeigt. Eine detaillierte numerische Analyse der verschiedenen Beiträge zur Gesamtenergie des Adsorbatsystems zeigt, dass in dem vorliegenden Fall die Bindung wesentlich durch eine gegenseitige Polarisierung von Molekül und Substrat verursacht ist. Das freie Elektronenpaar der Amino-Gruppe induziert eine positive Bildladung in der Kupferoberfläche, die wiederum die Aminogruppe polarisiert (Preuss, Schmidt & Bechstedt, 2005). Ein ähnliches Verhalten, wenn auch stärker ergänzt durch kovalente Beiträge, charakterisiert auch die Bindung von Phenylglycin zur Kupferoberfläche (Blankenburg & Schmidt, 2006).

Der adsorptionsinduzierte Elektronentransfer verursacht eine elektrostatische Wechselwirkung zwischen Adenin und Phenylglycin, die empfindlich von der Orientierung, dem Abstand und der räumlichen Anordnung der funktionalen Gruppen innerhalb des Moleküls abhängt. Die Orientierung

und der Abstand der Moleküle sind nicht frei wählbar. Erste ist durch die Bindung zwischen Metalloberfläche und Adsorbat bestimmt, die steckbrettartig nur bestimmte Anordnungen erlaubt. Der Abstand zwischen den Adeninketten und der ersten molekularen Reihe Phenylglycin wird durch die Bildung von Wasserstoffbrückenbindungen bestimmt. Die räumliche Anordnung der funktionalen Gruppen innerhalb des Phenylglycin ist jedoch für die beiden Enantiomere unterschiedlich und führt zu unterschiedlichen Wechselwirkungsenergien. Letztlich ist es die Position der Aminogruppe innerhalb des Phenylglycins, die verantwortlich für die chirale Selektivität ist (Blankenburg & Schmidt, 2007). Das ist in Abbildung 4 schematisch veranschaulicht. Dem Substrat kommt in diesem Falle offensichtlich eine Schlüsselrolle bei der chiralen Erkennung zu. Zum einen ist der Ladungstransfer zwischen Kupfer und den Adsorbatmolekülen ursächlich für die enantiospezifische Wechselwirkung, zum anderen ist die laterale Fixierung der Adsorbate durch energetisch bevorzugte Substratbindungsplätze dafür eine notwendige Voraussetzung. Die Berechnung der Adsorption von Adenin auf dem gleichfalls sehr häufig für Untersuchungen molekularer Selbstorganisationsprozesse genutztem Graphit-Substrat zeigt z. B. ein völlig anderes Bindungsverhalten (Ortmann, Schmidt & Bechstedt, 2005). Dadurch wird die Perspektive einer gezielten Steuerung der molekularen Erkennung durch eine geeignete Wahl des Substrats deutlich.

Nachdem die chirale Erkennung zwischen den Adenindimerreihen und den benachbarten Phenylglycin-Molekülen aufgeklärt ist, stellt sich die Frage, warum sich in einem wohldefinierten und reproduzierbaren Abstand zur ersten Phenylglycin-Reihe eine zweite molekulare Reihe von Phenylglycin anordnet (Abbildung 1). Auch hier können Dichtefunktionalrechnungen eine Antwort geben. In Abbildung 5

ist die berechnete Potenzialenergiefläche gezeigt, die von einem Phenylglycin wahrgenommen wird, welches zusätzlich zu einer bereits vorhandenen Phenylglycin-dekorierten Adenin-Reihe adsorbiert wird. Die energetisch bevorzugten Adsorptionsgebiete (blau farbkodiert) stimmen sehr gut mit dem experimentell gemessenen Reihenabstand überein. Als Ursache der lokalen Variation der Adsorptionsenergie können periodische Ladungsdichteschwankungen an der Kupferoberfläche identifiziert werden. Diese adsorbatinduzierten, so genannten Friedeloszillationen modulieren lokal die Besetzung der bindenden und antibindenden Orbitale der Adsorbat-Substrat-Bindung und somit die Bindungsenergie selbst. Auch hier lassen sich aus den Rechnungen unmittelbare Anküpfungspunkte für eine gezielte Beeinflussung der langreichweitigen molekularen Anordnung gewinnen. Die Wellenlänge und Amplitude der Friedeloszillationen – und damit die entsprechenden Eigenschaften der Potenzialenergiefläche – lassen sich nämlich durch die Variation von Substrat und Adsorbat modifizieren.

Anhand der numerischen Analyse eines konkreten experimentellen Befunds zur langreichweiten molekularen Erkennung und Selbstorganisation wurde somit gezeigt, wie Dichtefunktionalrechnungen gemessene Daten für sehr komplexe supramolekulare Strukturen nicht nur reproduzieren und erklären, sondern es darüber hinaus erlauben, konkrete Hinweise zur gezielten Steuerung der Ordnungsprozesse abzuleiten. Obwohl mit dem damit gewonnenen Verständnis der molekularen Erkennung auf atomarer Skala einerseits ein wesentlicher erster Schritt in Richtung auf das eingangs genannte Ziel – der Entwicklung von Bottom-Up-Ansätzen für die Realisierung funktionaler Nanostrukturen – getan ist, werden andererseits die weiteren auf diesem Weg zu erwartenden Schwierigkeiten jetzt eher noch deutlicher.

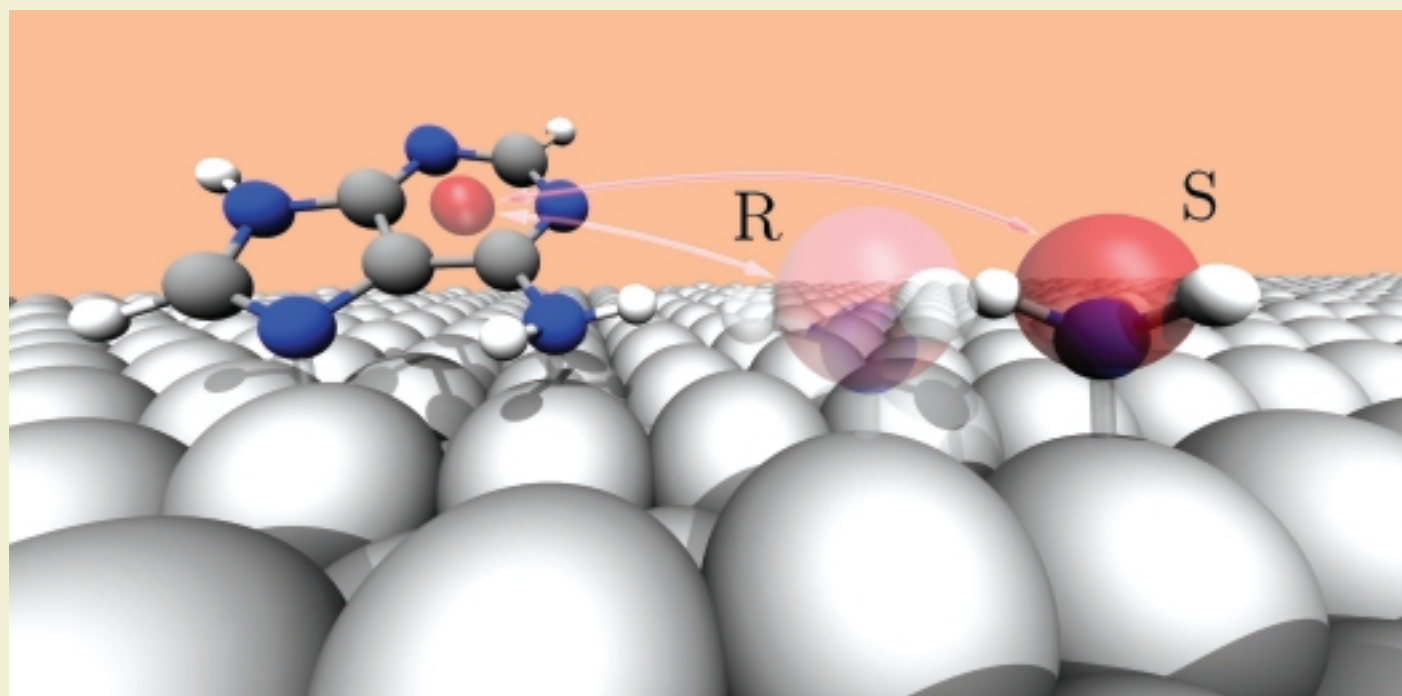


Abb. 4: Schematische Darstellung der repulsiven Coulombwechselwirkung zwischen Adenin und der Aminogruppe des S- bzw. R-Phenylglycins (halbtransparent). Aufgrund des unterschiedlichen Abstands der Ladungsschwerpunkte kommt es zu einer chiralen Erkennung (Blankenburg & Schmidt, 2007).

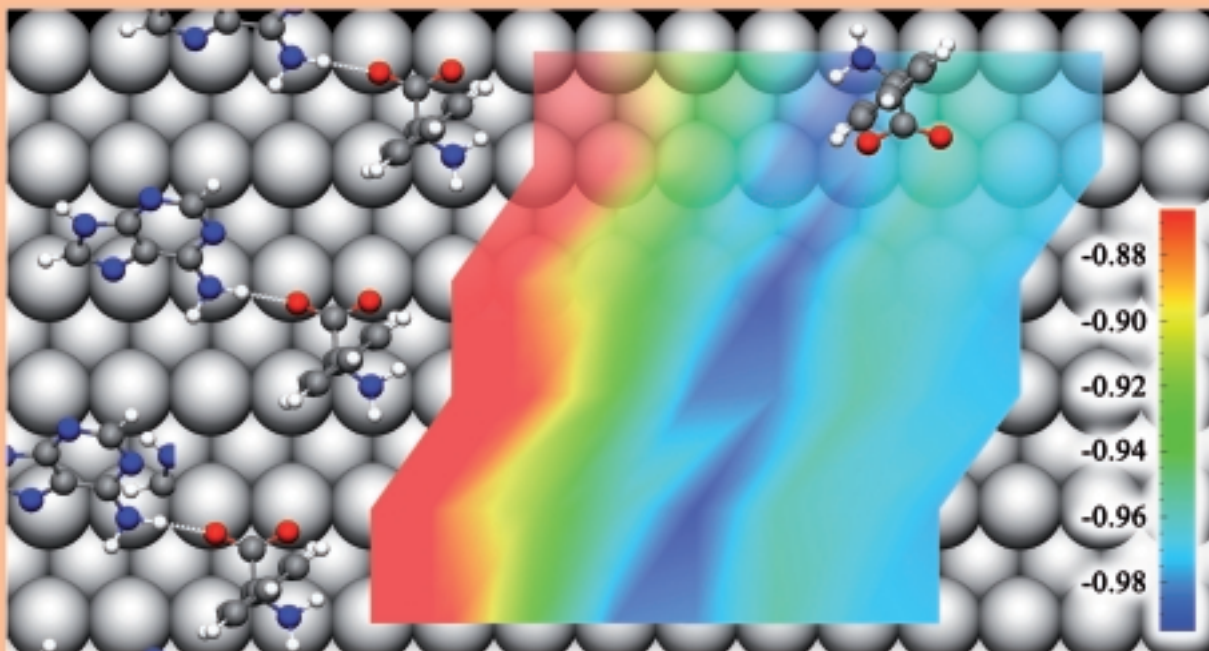


Abb. 5: Farbkodiert ist die berechnete Adsorptionsenergie (in eV) eines Phenylglycins in Abhängigkeit von seiner lateralen Position auf der Kupferoberfläche in Bezug auf eine bereits vorhandene Phenylglycin-dekorierte Adenin-Reihe gezeigt.

Literatur

Y. PENNEC, W. AUWÄRTER, A. SCHIFFRIN, A. WEBER-BARGONI, A. RIEMANN, J. V. BARTH: SUPRAMOLECULAR GRATINGS FOR TUNEABLE CONFINEMENT OF ELECTRONS ON METAL SURFACES, NATURE NANOTECHNOLOGY 2, 99 (2007).

S. BLANKENBURG, W. G. SCHMIDT: LONG-RANGE CHIRAL RECOGNITION DUE TO SUBSTRATE LOCKING AND SUBSTRATE-ADSORBATE CHARGE TRANSFER, PHYS. REV. LETT. 99, 196107 (2007).

Q. CHEN, N. V. RICHARDSON: ENANTIOMERIC INTERACTIONS BETWEEN NUCLEIC ACID BASES AND AMINO ACIDS ON SOLID SURFACES, NATURE MATERIALS 2, 324 (2003).

W. G. SCHMIDT, K. SEINO, M. PREUSS, A. HERMANN, F. ORTMANN, F. BECHSTEDT: ORGANIC MOLECULE ADSORPTION ON SOLID SURFACES: CHEMICAL BONDING, MUTUAL POLARISATION AND DISPERSION INTERACTION, APPL. PHYS. A 85, 387 (2006).

M. PREUSS, W. G. SCHMIDT, F. BECHSTEDT: COULOMBIC AMINO GROUP-METAL BONDING: ADSORPTION OF ADENINE ON Cu(110), PHYS. REV. LETT 94, 236102 (2005).

E. RAULS, S. BLANKENBURG, W. G. SCHMIDT: DFT CALCULATIONS OF ADENINE ADSORPTION ON COIN METAL (110) SURFACES, SURF. SCI. 602, 2170 (2008).

S. BLANKENBURG, W. G. SCHMIDT: ADSORPTION OF PHENYLGLYCINE ON COPPER: DENSITY FUNCTIONAL CALCULATIONS, PHYS. REV. B 74, 155419 (2006).

F. ORTMANN, W. G. SCHMIDT, F. BECHSTEDT: ATTRACTED BY LONG-RANGE ELECTRON CORRELATION: ADENINE ON GRAPHITE, PHYS. REV. LETT 95, 186101 (2005).

Kontakt

Prof. Dr. Wolf Gero Schmidt

Fakultät für Naturwissenschaften – Theoretische Physik

05251.60-2335

W.G.Schmidt@upb.de

Entlohnung von Managern

Realoptionen im Zusammenspiel mit Anreizkonflikten

Prof. Dr. Dr. Georg Schneider

Managergehälter sind sowohl aus wissenschaftlicher Sicht als auch in der Tagespresse ein stark diskutiertes Thema. Eine aktuelle Suche bei Google liefert 56 000 Einträge – darunter auch ein Artikel aus dem *manager magazin* (7/2004) mit dem Titel „Fette Katzen – Verdienen Europas Konzernchefs zu viel? Ein Leistungstest des *manager magazin* zeigt, welche Vorstandschefs ihr Geld wert sind – und wer trotz mäßiger Leistung abkassiert“. Wie der gerade erwähnte Untertitel zeigt, wird die Diskussion hochgradig emotional geführt. Aus betriebswirtschaftlicher Sicht sind noch einige Probleme zu klären, um die Frage nach einer geeigneten Managemententlohnung beantworten zu können. Bisher wurden Fragestellungen im Zusammenhang mit der Entlohnung von Managern nur unter recht einfachen Modellvoraussetzungen behandelt. Im Allgemeinen hat das Management die Möglichkeit, flexibel auf sich ändernde Umweltzustände zu reagieren. Es besteht beispielsweise die Möglichkeit, aber nicht die Pflicht, ein Projekt abubrechen. Diese Aspekte sollten in der Diskussion einer geeigneten Managementvergütung berücksichtigt werden.

Das Beispiel

Enron – Realoptionen

Ein typisches Beispiel ist die inzwischen berüchtigte Firma Enron. Enron hat bewusst unprofitable Kraftwerke zur Erzeugung von elektrischem Strom errichtet. Dies hat den Vorteil gehabt, dass die Baukosten unter denen von Kraftwerken, die dem aktuellen Standard entsprochen hätten, liegen. Die Einnahmen, welche durch den gewöhnlichen Marktpreis erzielt worden wären, hätten die Kosten, den Strom zu produzieren um 30 Prozent unterschritten. Allerdings hat Enron auf die stark schwankenden Strompreise in den USA, die ohne weiteres auf das zehnfache Niveau anwachsen konnten, gesetzt. Bei einem solchen Preis wäre die Produktion bei weitem profitabel und folglich war es die Strategie von Enron, nur in Zeiten hoher Strompreise zu produzieren. Dies ist möglich, da die Unternehmen über das errichtete Kraftwerk zwar die Möglichkeit, nicht aber die Verpflichtung zum Produzieren von elektrischem Strom haben. Das entspricht aber genau der Definition einer (finanzwirtschaftlichen) Option. In diesem Fall beruht die Option nicht auf einer „künstlichen Konstruktion“, sondern basiert auf einer realen ökonomischen Situation – auf der Existenz des Kraftwerkes. Man spricht daher von dem Vorliegen einer Realoption. Zu dem Zeitpunkt der Veröffentlichung dieser Strategie war das Unternehmen Enron noch der Star der US-Wirtschaft.



Prof. Dr. Dr. Georg Schneider ist seit 2008 Inhaber des Lehrstuhls für Betriebswirtschaftslehre, insbesondere Externes Rechnungswesen, den er bereits im Sommersemester 2007 vertreten hat. Schneider ist sowohl in Mathematik, wo er sich mit Räumen holomorpher Funktionen und deren Operatoren beschäftigt hat, als auch in Betriebswirtschaft promoviert. Seine Forschungsschwerpunkte liegen in der Zusammenführung der Agency Theorie mit der Theorie von Realoptionen und Anwendungen dieser Theorien im Rechnungswesen.

Inzwischen ist die Firma als eines der Negativbeispiele in die Wirtschaftsgeschichte eingegangen. Das Unternehmen hat nachweislich auf vielfältige Art und Weise seine Bilanzen manipuliert, um seine ökonomische Lage besser darzustellen. Dies hat unter anderem Anleger getäuscht und zu einer Überbewertung des Unternehmens am Markt geführt. In der reinen Rechnungswesens- bzw. Wirtschaftsprüfungs-forschung wurde dieser Tatsache Rechnung getragen, und es wurden Modelle entwickelt, die einerseits erklären, wieso Bilanzmanipulation – in Fachkreisen spricht man auch von Earnings Management – betrieben wird, und wie und unter welchen Umständen sie verhindert werden kann bzw. sollte.

Erklärungsversuch

für das Versagen von Enron

Das Grundproblem, das im Falle von Enron bestanden hat, wurde in der bisherigen Forschung im Rechnungswesen allerdings nicht behandelt. Es besteht wohl eher in betriebswirtschaftlichen Fehlentscheidungen als in der Tatsache, dass Rechnungslegungsinformationen falsch berichtet werden. Dies lässt sich wie folgt erklären: A priori ist die Strategie, Realoptionen künstlich aufzubauen, einleuchtend und sollte dem Unternehmen den gewünschten ökonomischen Vorsprung in Bezug auf seine Konkurrenten bringen. In diesem Falle wäre auch keine Bilanzmanipulation vonnöten gewesen. Es muss also etwas nicht nach Plan gelaufen sein. Ein möglicher Erklärungsansatz könnte sein, dass zwar die Realoptionen aufgebaut, aber nicht sichergestellt wurde, dass diese von dem Management bzw. mittleren Management richtig ausgeübt wurden. Dies wird an einem extrem simplifizierten Beispiel, das in der folgenden Tabelle dargestellt wird, illustriert.

Das betrachtete Beispiel modelliert eine Raffinerie. Diese

Ertrag/Liter	0,90 €	1,00 €	1,10 €	1,20 €	1,30 €
Kosten/Liter	1,15 €	1,15 €	1,15 €	1,15 €	1,15 €
Gewinn/Liter	-0,25 €	-0,15 €	-0,05 €	0,05 €	0,15 €
Umsatz	900 000,00 €	1 000 000,00 €	1 100 000,00 €	1 200 000,00 €	1 300 000,00 €
Gewinn/Verlust	-250 000,00 €	-150 000,00 €	-50 000,00 €	50 000,00 €	150 000,00 €
Gewinn (optimal)	0,00 €	0,00 €	0,00 €	50 000,00 €	150 000,00 €

Tab. 1: Illustration der falschen Ausübung einer Realoption.

kann entweder produzieren, wobei in diesem Falle eine Million Liter verarbeitet werden würden, oder es besteht die Option, nicht zu produzieren. In der Tabelle ist der Ertrag pro Liter in einer Raffinerie verarbeiteten Erdöls für fünf verschiedene Szenarien dargestellt. Er variiert zwischen 0,90 Euro und 1,30 Euro. Die Kosten pro Liter betragen für alle Szenarien 1,15 Euro. In der betrachteten Situation gehen wir davon aus, dass eine maximale Menge von einer Million Liter erzeugt werden kann. Die Differenz aus Ertrag pro Liter und Kosten pro Liter stellt den Gewinn bzw. den Verlust pro Liter dar. Pro Liter macht man folglich in den ersten drei Szenarien einen Verlust und erst in den beiden letzten Szenarien, die einen hohen Marktpreis für verarbeitetes Erdöl widerspiegeln, kann ein Gewinn erwirtschaftet werden. Es wäre also optimal, in den ersten drei Szenarien die Option, nicht zu produzieren, zu nützen. Dies würde weder zu einem Gewinn noch zu einem Verlust führen. Es ist nun zu beachten, dass nicht das Unternehmen selbst bzw. dessen Eigentümer die Produktionsentscheidung treffen, sondern Manager, die abweichende Interessen haben. Wir gehen davon aus, dass die Entlohnung des Managers an den Umsatz gebunden ist. D. h., je höher der Umsatz, desto höher die Entlohnung des Managers. Der Umsatz für die verschiedenen Szenarien ist in Tabelle 1 in der vierten Zeile dargestellt. Wird nicht produziert, so gibt es auch keinen Umsatz. Der Manager wird folglich die Option, nicht zu produzieren, nie nützen. Dies führt zu dem Ergebnis, das in Zeile fünf dargestellt ist. Das Problem könnte natürlich behoben werden, indem der Manager entsprechend des Gewinns entlohnt wird. Oft ist die geeignete Größe aber nicht so offensichtlich. Das Beispiel ist hier nur zur Veranschaulichung einfach gewählt. Zusammenfassend kann angemerkt werden, dass hier der Manager des Unternehmens offensichtlich andere Anreize hat, als dessen Eigenkapitalgeber. Man spricht also von Anreizkonflikten oder im Fachjargon auch von Agency-Konflikten.

Optionsbewertung

Im obigen Beispiel hätte die Option zwar grundsätzlich einen positiven Wert. Beispielsweise könnte über die Option, nicht zu produzieren, in dem ersten Szenario ein Verlust

von 250 000 Euro abgewendet werden. Dies würde dem so genannten Inneren Wert der Option entsprechen. Dieser wird für jedes Szenario einzeln bestimmt. Will man einen Wert der Option unabhängig von dem spezifischen Szenario bestimmen, so muss man den Szenarien – in der Ökonomie spricht man von Umweltzuständen – Wahrscheinlichkeiten zuordnen bzw. eine spezielle stochastische Annahme unterstellen. Oft wird hier die Brownsche Bewegung unterstellt, mit der sich schon Albert Einstein aus physikalischer Sicht beschäftigt hat. Ein Durchbruch ist hier mit der inzwischen berühmten und mit dem Nobelpreis ausgezeichneten Bewertungsformel von Black und Scholes gelungen. Das Resultat stützt sich auf einige restriktive Annahmen. Erstens wird ein so genannter vollkommener und vollständiger Markt angenommen. D. h. unter anderem, dass keine Transaktionskosten anfallen. Noch schlimmer wiegt die Tatsache, dass keine Anreizkonflikte berücksichtigt werden. Eine Berücksichtigung wäre allerdings nicht nur bei Realoptionen wünschenswert, sondern auch für klassische Optionen und bei der Bewertung anderer Finanzinstrumente. So sind etwa die Anekdoten von Fondsmanagern legendär, die entsprechend des Transaktionsvolumens des von ihnen verwalteten Portfolios entlohnt werden. Sie führen extrem viele Transaktionen durch, die ökonomisch nicht sinnvoll sind. Dies erhöht zwar deren Entlohnung, nicht aber den Ertrag des Portfolios.

Zusammenführung zweier Theorien

Es scheint also geboten und wünschenswert, die Optionsbewertung mit der Agency-Theorie zu verbinden. Derzeit gibt es nur recht wenig Forschung und erzielte Resultate in diesem Zusammenhang. Die Bedeutung beider Theorien lässt sich allein schon an den verliehenen Nobelpreisen verdeutlichen. Der Nobelpreis auf Seiten der Optionsbewertung wurde bereits erwähnt. Der Preis wurde den beiden Wissenschaftlern Myron Samuel Scholes und Robert C. Merton 1997 für das Resultat aus dem Jahre 1973 verliehen. Robert C. Merton hat das Resultat unabhängig von Black und Scholes gefunden. Fischer Black war zu diesem Zeitpunkt schon verstorben (1995). Auf Seiten der Agency-Theo-

				Jahr		
	0	1	2	3	4	5
Erträge		2	2	2	2	2
Investition	-5					
Internal Rate of Return	29 %					

Tab. 2: Beispiel eines unsicheren Investitionsprojektes.

rie gab es bereits zwei Nobelpreise an insgesamt 6 Wissenschaftler. Im Jahre 2001 wurde der Nobelpreis George A. Akerlof, Michael Spence und Joseph E. Stiglitz verliehen. Erst kürzlich – im Jahre 2007 – wurden die drei Wissenschaftler Leonid Hurwicz, Eric S. Maskin und Roger B. Myerson ausgezeichnet. Es würde den Rahmen dieses Artikels sprengen, alle Leistungen der erwähnten Forscher darzustellen. Zwei wichtige Resultate seien aber erwähnt, um die Bedeutung der Agency-Theorie zu veranschaulichen. In der klassischen Ökonomie sind Marktgleichgewichte immer effizient. Dies bedeutet etwa, dass sich Objekte nach dem Handeln bei den Personen, die ihnen die größte Wertschätzung beimessen, befinden. Dieses Resultat – auch 1. Wohlfahrtstheorem genannt – wird oft als Rechtfertigung für die Marktwirtschaft angeführt. Man spricht auch von der unsichtbaren Hand des Marktes. Akerlof konnte mittels seines „Market for Lemons“ zeigen, dass die Effizienz von Märkten im Allgemeinen nicht erhalten bleibt, wenn man die zentrale Annahme der symmetrischen Informationsverteilung fallen lässt. Es ist plausibel, dass verschiedene Marktakteure unterschiedliche Informationen besitzen. Beispielsweise sollte ein Manager eines Unternehmens mehr Informationen über dieses besitzen als ein Inhaber eines kleinen Anteils von Aktien. Wie gerade erwähnt, entstehen Agency-Probleme oft aufgrund von asymmetrisch verteilter Information. Wird zum Beispiel das Verhältnis des Eigentümers eines Unternehmens und dessen Managers betrachtet, so ist es nur plausibel, einen Vertrag zu betrachten, den der Eigentümer mit dem Manager abschließt. Ein zentrales Resultat, das auf Myerson zurückgeht, besagt, dass man sich bei der Suche nach dem optimalen Vertrag auf solche beschränken kann, bei denen der (weniger informierte) Eigentümer den Manager nach der privaten Information befragt und dieser auch den Anreiz

hat, wahrheitsgemäß zu berichten. Man spricht folglich auch von dem Revelationsprinzip. Aufgrund der großen Bedeutung der soeben beschriebenen Gebiete scheint es sinnvoll, diese zusammenzuführen. Dies stellt einen Schwerpunkt am Lehrstuhl für Betriebswirtschaft, insbesondere Externes Rechnungswesen dar, wobei von einer vereinheitlichten Theorie neue Erkenntnisse in der Betriebswirtschaft zu erwarten sind.

Anwendungen
im Rechnungswesen

Um zu veranschaulichen, wie sich Anreizprobleme auf Rechnungswesensfragestellungen auswirken, sei das folgende Beispiel betrachtet. Auf ein simultanes Betrachten von Realoptionen sei hier verzichtet. Ein Unternehmen führt Ölbohrungen durch. Es ist bekannt, dass statistisch betrachtet nur eine von fünf Bohrungen zum Erfolg führt. Eine Bohrung kostet 1 Million Euro. Im Falle eines Erfolges führt sie zu Einnahmen von je 2 Millionen Euro in den folgenden 5 Jahren. Insgesamt entspricht das einer (durchschnittlichen) Verzinsung von 29 Prozent (siehe Tabelle 2). Wird der Manager allerdings anhand von Kennzahlen wie etwa dem Return on Investment (ROI) entlohnt, können ökonomische Fehlentscheidungen auftreten. Dies lässt sich, wie in Tabelle 3 dargestellt, erläutern. Es wird davon ausgegangen, dass der (finanzielle) Aufwand, der zu keinem Erfolg führt – hier die 4 Millionen – in Periode 0 gewinnmindernd ist. Dies ist eine übliche Praxis im Rechnungswesen und wird auch als „Successful Efforts Accounting“ bezeichnet. Des Weiteren wird die Auszahlung für die erfolgreiche Bohrung über die fünf Perioden verteilt. Hier wird die lineare Abschreibung angewendet – d. h. in jeder Periode wird derselbe Betrag gewinnmindernd erfasst. Es werden also 0,2 Millionen pro Jahr gewinnmindernd berücksichtigt. Somit

				Jahr		
	0	1	2	3	4	5
Erträge		2	2	2	2	2
Aufwand	4	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2
Gewinn	-4	1,8	1,8	1,8	1,8	1,8
Buchwert	1	0,8	0,6	0,4	0,2	0
ROI		180 %	225 %	300 %	450 %	900 %

Tab. 3: Überschätzen der Verzinsung

ergibt sich in den Perioden 1 bis 5 jeweils ein Gewinn von 0,8 Millionen Euro. Der Buchwert ist hier die erfolgreiche Investition abzüglich der Abschreibungen, und der ROI einer Periode ergibt sich als Quotient des Gewinns und des Buchwertes des Vorjahres. Er sollte eigentlich die Verzinsung des Projektes widerspiegeln. Es ist offensichtlich, dass hier die Verzinsung deutlich übertrieben dargestellt ist; es wird hier nämlich der Gewinn einer zu kleinen Investition gegenübergestellt. Auch die Abschreibung ist nicht geeignet gewählt. In dem einfachen Beispiel wurden Anreizkonflikte nur implizit betrachtet und nicht explizit modelliert. Eine umfassende Analyse mit Einbezug von Anreizkonflikten wurde in Pfeiffer und Schneider (2007) durchgeführt. Weitere Resultate zum Zusammenspiel von Anreizkonflikten und Realoptionen finden sich in Harreiter, Pfeiffer und Schneider (2007).

Literatur

SCHNEIDER, GEORG, PFEIFFER, THOMAS: RESIDUAL INCOME-BASED COMPENSATION PLANS FOR CONTROLLING INVESTMENT DECISIONS UNDER SEQUENTIAL PRIVATE INFORMATION, IN: MANAGEMENT SCIENCE, MARCH 2007; 53: 495–507

SCHNEIDER, GEORG, HARREITER, BARBARA, PFEIFFER, THOMAS: ARE REAL OPTIONS MORE VALUABLE IN THE PRESENCE OF AGENCY CONFLICTS?, IN: REVIEW OF MANAGERIAL SCIENCE, 2007; 3: 185–207

Internetquellen

MANAGER MAGAZIN: [HTTP://WWW.MANAGER-MAGAZIN.DE/MAGAZIN/ARTIKEL/0,2828,305486,00.HTML](http://www.manager-magazin.de/MAGAZIN/ARTIKEL/0,2828,305486,00.HTML) VOM 28.07.2004

Kontakt

Prof. Dr. Dr. Georg Schneider
Fakultät für Wirtschaftswissenschaften
Lehrstuhl für Betriebswirtschaftslehre, insbes.
Externes Rechnungswesen
05251.60-2914
georg.schneider@notes.upb.de

Periodisch, meta und linkshändig

Charakterisierung neuartiger Materialien durch Computersimulation

Prof. Dr.-Ing. Rolf Schuhmann, Dipl.-Ing. Bastian Bandlow

Die Simulation von elektromagnetischen Feldern durch Computerprogramme ist ein Forschungsgebiet im Schnittpunkt der Elektrotechnik, Mathematik und Informatik. Ein vergleichsweise neues Einsatzgebiet ist die Analyse neuartiger Materialien, in denen durch geeignete Mikro- oder Nanostrukturierung die elektromagnetische Wellenausbreitung gezielt beeinflusst werden kann. Mit Hilfe von Simulationen können dabei auf schnelle und zuverlässige Weise die Eigenschaften solcher synthetischer Materialien analysiert und ihre Entwicklung wesentlich unterstützt werden. Simulationen geben außerdem wichtige Impulse zum theoretischen Verständnis und der Modellbildung der untersuchten Strukturen. Ein besonders prominentes Beispiel sind so genannte linkshändige Metamaterialien, die theoretisch lange postuliert wurden, aber erst in den letzten Jahren auch realisiert werden konnten und einige überraschende Effekte für elektromagnetische Wellenausbreitung versprechen.

Einführung

Am Anfang der Entwicklung von Algorithmen zur Computersimulation elektromagnetischer Felder standen Anwendungen in der Maschinentechnik und in Großforschungsanlagen. Mit der steigenden Kapazität und Anzahl der zur Verfügung stehenden Rechenanlagen breitet sich diese Technologie aber in rasanter Weise auf viele Gebiete



Abb. 1: James Clerk Maxwell (1831–1879).



Prof. Dr.-Ing. Rolf Schuhmann leitet seit Ende 2005 das Fachgebiet Theoretische Elektrotechnik am Institut für Elektrotechnik und Informationstechnik. Seine Forschungsinteressen liegen in der Weiterentwicklung von Simulationsansätzen für elektromagnetische Felder. Hauptanwendungsbereiche sind die Modellierung und Berechnung von Feldern und Wellen bei hohen Frequenzen bis in den optischen Bereich, insbesondere auch die Charakterisierung periodischer Strukturen.

der Elektro- und Informationstechnik aus: Jede Komponente der Mikrowellentechnik, jeder elektrische Antrieb, jedes moderne Kraftfahrzeug, jedes Handy und jede Radarantenne wird heute mit Unterstützung derartiger Simulationsrechnungen entwickelt. Die heute auch in Arbeitsplatzrechnern verfügbare Rechenleistung führt dabei zum Wunsch nach immer komplexeren Simulationsverfahren, in denen z. B. Kopplungen zu anderen physikalischen Effekten (Erzeugung und Abhängigkeit von Wärme, Bewegung, Schall, Luftströmung und vieles mehr) mit berücksichtigt werden sollen und können. Auch die Größe der Simulationsrechnungen steigt immer weiter an; Probleme mit über einer Milliarde Unbekannten werden durchaus auch ohne Großrechenanlagen und Supercomputer in Angriff genommen. Dies erfordert eine stetige Weiterentwicklung der Simulationsalgorithmen nach dem Prinzip „größer – schneller – genauer“, ihre Anpassung an neue Anwendungsgebiete und ihre effiziente Implementierung auf modernen Rechnerarchitekturen.

Elektromagnetische Feldsimulation

Der Kern der Simulation klassischer elektromagnetischer Felder ist die Lösung von nur vier physikalischen Grundgleichungen, die nach J. C. Maxwell (1831–1879, Abbildung 1) die Maxwellschen Gleichungen genannt werden. Es handelt sich um Integral- oder Differentialgleichungen, die in allgemeiner Form Zusammenhänge zwischen den elektromagnetischen Grundgrößen herstellen. Dies sind die elektrische Feldstärke und Flussdichte, die magnetische Feldstärke und Flussdichte sowie als Quellen der Felder Stromdichten und Ladungsdichten. Die Vielzahl möglicher Lösungen und die damit verbundene Herausforderung bei der Behandlung im Computer ergibt sich zunächst aus der Form der elektromagnetischen

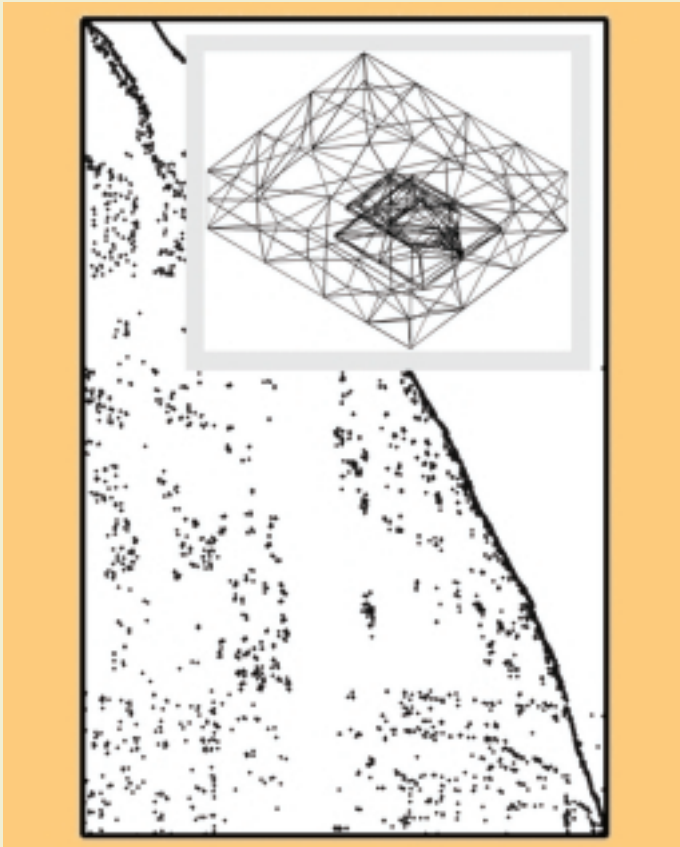


Abb. 2: Dreidimensionales Rechengitter (oben rechts) und Besetzungsstruktur einer der Systemmatrizen.

Quellen, die sich u. a. in ihrer Frequenz unterscheiden: Langsam veränderliche Felder führen zu den Problemklassen der Statik und der Quasistatik mit Anwendungen z. B. in der Hochspannungstechnik oder im Bereich elektrischer Maschinen. Davon hebt sich in der technischen Nutzung, aber auch in der mathematischen Behandlung die Ausbreitung von elektromagnetischen Wellen bei höheren Frequenzen ab. Sie kommen hauptsächlich in der Informations- und Kommunikationstechnik zum Einsatz, von Mikrowellenschaltungen und Antennen bis hin zur Ausbreitung von Licht.

Neben der Frequenz der Felder spielt noch die räumliche Verteilung der Materialien eine wesentliche Rolle, die über ihre Kenngrößen Leitfähigkeit (κ), Permittivität (ϵ) und Permeabilität (μ) beschrieben werden. Bereits im linearen Fall kann dadurch eine Vielzahl von Effekten auftreten bzw. gezielt hervorgerufen werden, wie etwa die Leitung, Streuung oder Fokussierung elektromagnetischer Wellen. Die eigentlichen atomaren Mechanismen innerhalb der Materie werden dabei meist außer Acht gelassen und durch eine makroskopische (gemittelte) Modellierung ersetzt.

Daraus ergibt sich schließlich der folgende Ablauf in der Modellbildung zur Berechnung elektromagnetischer Felder:

1. Zunächst muss die Materialverteilung des Problems im Computer abgebildet werden: Für technische Strukturen führt dies zum Einsatz von *Computer Aided Design* (CAD), oder die Daten werden aus bereits vorhandenen CAD-Modellen importiert.
2. Zur Behandlung der Differential- oder Integralgleichungen müssen diese diskretisiert werden:

Während eine Differentiation z. B. auf einer Grenzwertbildung hin zu unendlich kleinen Schrittweiten beruht, stehen im Computerprogramm nur endlich viele Werte zur Verfügung. An dieser Stelle muss der Simulationsalgorithmus mit einer Näherung auskommen, deren Qualität unbedingt bekannt sein muss oder besser noch nach Wunsch eingestellt werden kann.

3. Dies führt schließlich zu einer algebraischen Formulierung, also einer Sammlung sehr vieler Gleichungen für eine große Anzahl von Freiheitsgraden (*Degrees of Freedom*) des diskreten Modells. Diese Zustandsgrößen der Methode können sich z. B. auf Feldkomponenten an bestimmten Stellen des Rechengebiets beziehen. Das algebraische Problem muss mit geeigneten Verfahren der numerischen Mathematik gelöst werden.
4. Schließlich können im *Postprocessing* die tatsächlich interessierenden Zielgrößen berechnet werden, z. B. Felder, Spannungen, Kräfte, Streuparameter oder Verlustleistungen.

Ein besonders allgemeines Verfahren zur elektromagnetischen Feldsimulation ist die 1977 von Thomas Weiland [1] vorgeschlagene **Methode der finiten Integration** (FIT), deren Anwendung und Weiterentwicklung auch einen Schwerpunkt der Forschung am Fachgebiet TET bildet. Die FIT zählt wie auch die verwandten Methoden der finiten Differenzen (FD) und finiten Elemente (FE) zu den Volumengitter-Methoden: Der gesamte Raum wird zunächst mit einem dreidimensionalen Rechengitter belegt (Abbildung 2), durch das die Materialverteilung einfach modelliert werden kann. In jeder einzelnen Zelle werden dann die Maxwell'schen Gleichungen lokal in algebraische Form überführt. Dabei entsteht eine Reihe von großen Systemmatrizen, die sich aufgrund ihrer dünnen Besetzungsstruktur hervorragend für die Behandlung im Rechner eignen (Abbildung 2). Eine der herausragenden Eigenschaften von FIT ist die näherungsfreie Übertragung wichtiger physikalischer Erhaltungssätze (Energie, Ladung) in das numerische Modell mit der Folge, dass die berechneten Ergebnisse ein hohes Maß an Konsistenz aufweisen [5]. Da jede Zelle des Volumengitters unterschiedliche Materialparameter ϵ, μ, κ besitzen darf, können mit Methoden wie FIT insbesondere solche Probleme effizient behandelt werden, die sich durch eine stark inhomogene Materialverteilung auszeichnen. Problematisch sind dagegen elektrisch große Anordnungen, also Strukturen mit großen Abmessungen im Vergleich zu den auftretenden Wellenlängen: Da die Wellen für hinreichend genaue Ergebnisse mit einigen Gitterschrittweiten (typisch: mindestens zehn) abgetastet werden müssen, ergeben sich im Dreidimensionalen schnell sehr große algebraische Gleichungssysteme. Die heutige auf Standardhardware (PCs) realisierbare Größenordnung liegt bei einigen Millionen Unbekannten, das entspricht umgerechnet circa 30 bis 40 Wellenlängen pro Raumrichtung. Auf modernen Clustern oder Parallelrechnern liegt die Kapazitätsgrenze um einige Größenordnungen höher und wird ständig weiter ausgedehnt.

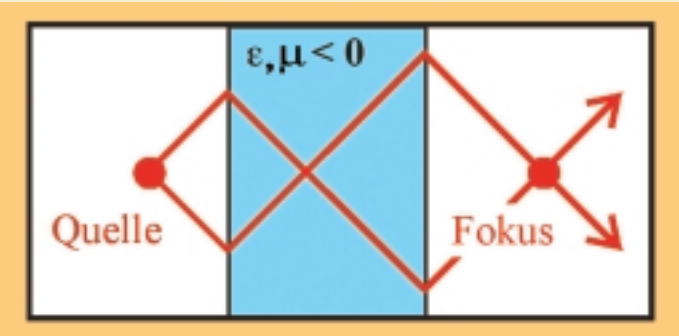


Abb. 3: Vorzeichenwechsel im Snellschen Brechungsgesetz für ein linkshändiges Metamaterial.

Linkshändige Metamaterialien

Ein relativ neues Anwendungsgebiet von elektromagnetischer Feldsimulation ist die Analyse von neuartigen funktionalen Materialien, mit deren Hilfe die Wellenausbreitung gezielt beeinflusst oder gesteuert werden kann. Besondere Aufmerksamkeit in Physik und Ingenieurwissenschaften haben in den letzten Jahren so genannte linkshändige Metamaterialien (LHM) ausgelöst, die im Gegensatz zu natürlich vorkommenden Werkstoffen gleichzeitig eine negative Permeabilität und Permittivität aufweisen. Bereits in einer theoretischen Arbeit von Veselago im Jahre 1968 [2] wurde die Möglichkeit solcher negativen Materialparameter postuliert und einige überraschende Konsequenzen abgeleitet: So bilden die elektrischen und magnetischen Feldvektoren mit der Ausbreitungsrichtung (Wellenvektor) ein „Linke-Hand-System“ (daher auch „LHM“), und der Brechungsindex n und damit auch der Transmissionswinkel im Snellschen Brechungsgesetz wechselt sein Vorzeichen (vgl. Abbildung 3). Eine praktische Realisierung eines LHM wurde erst durch das Konzept so genannter Metamaterialien ermöglicht, synthetischen Medien, deren elektromagnetische Eigenschaften durch eine spezielle Feinstrukturierung gezielt eingestellt werden. Den Durchbruch erzielte der britische Physiker Pendry, der 1999 eine Mikrostruktur zur Synthese einer negativen Permeabilität vorschlug [3]. Seine Idee grif-

fen Shelby, Smith und Schultz an der Universität von San Diego auf, denen kurz darauf erstmals der Aufbau und die messtechnische Validierung eines LHM gelang [4]. Seitdem beschäftigt sich eine Vielzahl von Arbeitsgruppen weltweit mit der Synthese und Analyse von LHM, nicht zuletzt ausgelöst durch ein millionenschweres Förderprogramm der US-amerikanischen DARPA-Behörde.

Die Wirkungsweise von LHM steht nicht etwa im Widerspruch zu den physikalischen Gesetzmäßigkeiten, sondern beruht auf einem Zwei-Skalen-Effekt: Es handelt sich um periodische Anordnungen, deren Zellgröße wesentlich kleiner ist als die verwendeten Wellenlängen. Als Beispiel zeigt Abbildung 4 ein Metamaterial aus einem in konventioneller planarer Technik aufgebauten Array von „Split Ring Resonatoren“ (SRR), gekoppelt mit dünnen metallischen Drähten (auf der Rückseite des Substratmaterials). Der äußere Durchmesser der Ringresonatoren beträgt hier 3 Millimeter, die Zellgröße des Arrays 5 Millimeter. Der LHM-Effekt tritt bei einer Frequenz von circa 9,5 GHz auf, dies entspricht einer Freiraumwellenlänge von 32 Millimeter. Als Folge dieser kleinen Abmessungen können elektromagnetische Wellen die Details der Feinstruktur nicht auflösen, und eine makroskopische Betrachtung mit gemittelten Feldgrößen ist zulässig. Von hier ist es dann nur noch ein kleiner Schritt zu den negativen Materialwerten: Sie entstehen durch bekannte und vollständig verstandene Resonanzeffekte in den SRR-Strukturen, die zu dispersivem Verhalten und negativen „Überschwingern“ in den Frequenzgängen der Materialwerte führen.

Als Anwendungen von linkshändigen Metamaterialien werden zurzeit eine Reihe von Ideen diskutiert: Flache Linsen wie in Abbildung 3 und 4 angedeutet, könnten zu verbesserten, kompakten optischen Komponenten führen, allerdings ist die Frage der zugelassenen Mindestdicke noch nicht abschließend geklärt. Auch in der Mikrowellentechnik können mit linkshändigen Wellen (und im Vorzeichen umgedrehten Wellenzahlen) sehr kompakte Bauelemente realisiert werden, erste Ergebnisse aus der Filtertechnik sind viel versprechend.

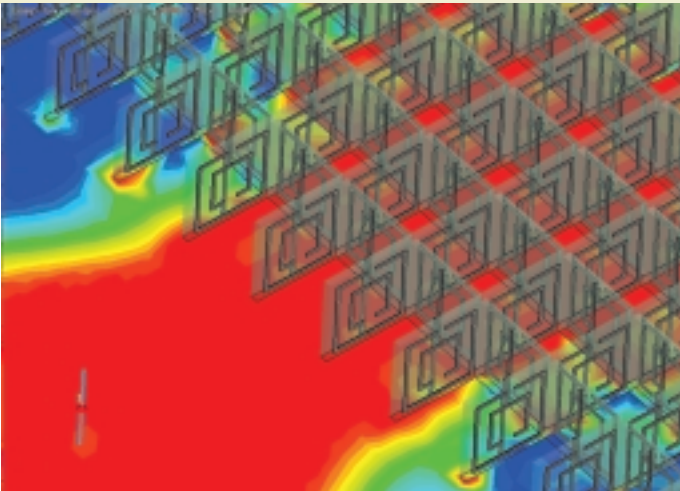
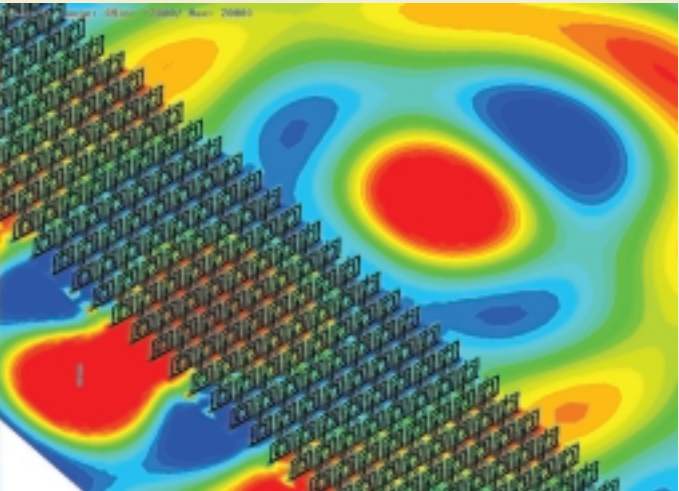


Abb. 4: Wellenausbreitung in einem linkshändigen Metamaterial (LHM), das aus einem „Split Ring Resonator“ (SRR) in konventioneller planarer Technik aufgebaut ist. Im linken Bild erkennt man die Fokussierung der Welle durch eine planare Linse (Anregung durch Dipolantenne). Die Vergrößerung rechts zeigt einige Zellen des SRR-Arrays. (Simuliert mit CST MICROWAVE STUDIO. CST AG, Darmstadt)

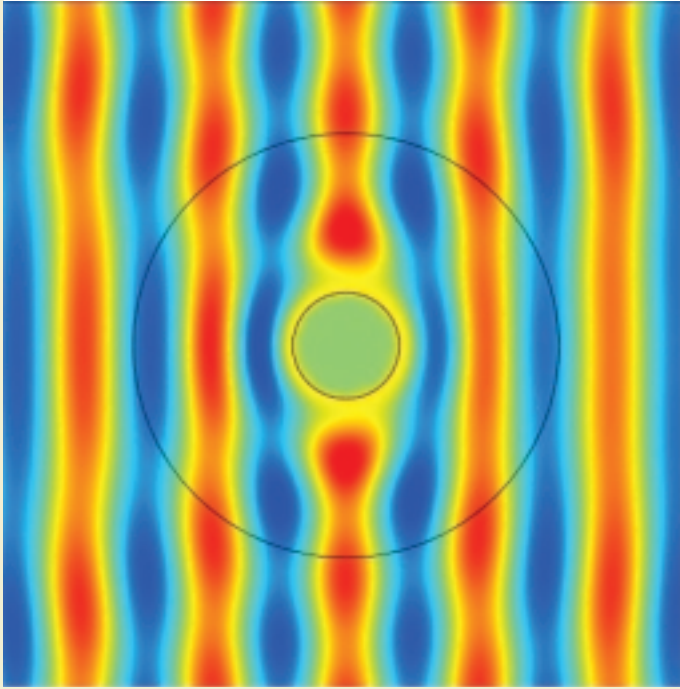


Abb. 5: Simulationsrechnungen zu elektromagnetischem Cloaking mit Metamaterialien: Die Wellen werden um ein Objekt herumgeführt. (Projektarbeit am Fachgebiet TET: A. Chinaev, M. Kelling, 2008. Simuliert mit COMSOL Multiphysics, COMSOL AB, Stockholm)

Spektakulär ist das vorgeschlagene Konzept einer elektromagnetischen Tarnkappe (Cloak) [6], bei der die Wellen um ein zu verbergendes Objekt herumgeführt werden und sich anschließend wieder zu einer ebenen, nahezu ungestörten Wellenfront vereinigen. Wie auch eine Projektarbeit am Fachgebiet TET mit Hilfe von Feldsimulationen nachweisen konnte (Abbildung 5), ist das Prinzip dieser Idee richtig, allerdings müssen für eine Realisierung noch große Probleme gelöst werden, die u. a. die fehlende Breitbandigkeit und die Verluste in den Materialien betreffen.

Ein noch weitgehend offenes Feld für Forschungen findet man schließlich im Bereich optischer Wellenausbreitung, also bei sehr hohen Frequenzen und entsprechend kleinen Wellenlängen. Hier sind die technologischen Ansprüche, Feinstrukturen im Nanometerbereich zu realisieren, ungleich höher (aber Lösungen durchaus in Reichweite). Macht man sich aber klar, dass in klassischen Lehrbüchern zur Optik die relative Permeabilität durchweg als Eins angesetzt wird (also der Wert des Vakuums), dann wird erkennbar, welches Potenzial für Anwendungen in einer weitgehend frei einstellbaren Permeabilität (mit positiven oder gar negativen Werten) liegen könnte.

Simulation von LHM

Das Ziel der Simulation von Metamaterialien ist zurzeit noch nicht vorwiegend die Entwicklung von Komponenten, sondern zunächst die Charakterisierung der Materialien, also die Berechnung von effektiven Werten für die Permeabilität und die Permittivität. Wie häufig bei periodischen Strukturen, versucht man, die Komplexität der Berechnungen dadurch zu reduzieren, dass nur eine Einheitszelle betrach-

tet wird, hier also ein einzelner Split Ring Resonator (SRR). Nach geeigneter Anregung dieser Einheitszelle in der Simulation kann z. B. aus den reflektierten und transmittierten Signalen auf das so genannte makroskopische Verhalten des gesamten Arrays geschlossen werden. Periodische Strukturen werden in diesem Sinne als ein Zwei-Skalenproblem behandelt: Für die Simulation der Einheitszellen sind Methoden wie die FIT auf ideale Weise geeignet, da hier alle geometrischen Details berücksichtigt werden und die entstehenden algebraischen Probleme noch eine gemäßigte Größe besitzen. (Typisch: zwischen 10^4 und 10^6 Unbekannte). Schließlich kann in einer zweiten Simulation das LHM durch ein äquivalentes, homogenes Material ersetzt werden, in dem keine Feinauflösung mehr notwendig ist.

Aktuelle Forschungstrends

Insbesondere für den ersten Schritt, die robuste Extraktion der effektiven Materialwerte, konnten am Fachgebiet in Kooperation mit der TU Darmstadt eine Reihe von Methoden entwickelt werden. Ein Schwerpunkt liegt dabei auf der physikalischen Gültigkeit der effektiven Modelle, die ein garantiert passives und stabiles Verhalten zeigen [7]. Neueste Forschungen weisen dagegen darauf hin, dass das Modell der effektiven Materialwerte nur begrenzte Gültigkeit besitzt und z. B. bei kleinen Einheitszellen zu deutlichen Fehlern führen kann, so dass eine Beschreibung mit Dispersionskurven vorzuziehen ist [8]. Weiterhin wurden eine Reihe von physikalischen Effekten bisher nur ansatzweise berücksichtigt, wie etwa das dispersive und nichtlineare Verhalten der verwendeten Grundmaterialien (Metalle und Dielektrika), insbesondere im optischen Bereich. Das Fachgebiet kooperiert auf diesem Gebiet mit einer Reihe von Arbeitsgruppen aus Elektrotechnik und Physik, u. a. im neuen DFG-Graduiertenkolleg 1464, „Mikro- und Nanostrukturen in Optoelektronik und Photonik“ an der Universität Paderborn, aber auch mit Partnern an der TU Darmstadt und der University of Akron in Ohio, USA, sowie dem kommerziellen Anbieter von Feldsimulationssoftware CST AG in Darmstadt.

Resümee

Simulationen haben sich heute zur dritten Säule wissenschaftlicher Erkenntnis neben Theorie und Experiment entwickelt: Sie ermöglichen verlässliche Vorhersagen über das Verhalten technischer Systeme in Bereichen, die aufgrund ihrer Komplexität weder reinen theoretischen Modellen noch zuverlässigen (und bezahlbaren!) Messungen zugänglich sind. Dies gilt insbesondere auch für den aktuellen Trend in der Materialforschung, funktionale Materialien durch Mikro- und Nanostrukturierung zu realisieren und damit das Engineering ihrer elektromagnetischen Eigenschaften zu ermöglichen.

Die Grundlage einer zuverlässigen Simulation ist eine konsistente Modellbildung in dem Sinne, dass wichtige Eigenschaften der physikalischen Strukturen erhalten bleiben. Dies gelingt u. a. mit der Methode der finiten Integration, die sich mit ihrem zugrunde liegenden dreidimensionalen

Rechengitter auf ideale Weise für die Simulation solcher Materialien eignet. So lange dabei „nur“ einzelne Einheitszellen der periodischen Strukturen simuliert werden müssen, bleibt der Aufwand an Rechenleistung (Speicherbedarf und CPU-Zeit) in vertretbarem Rahmen. Dagegen führen komplette Arrays schnell zu Rechenzeiten zwischen einigen Stunden und mehreren Tagen. Eine weitere Zielrichtung der Forschung muss daher die Erweiterung und Implementierung der Algorithmen auf parallelen Rechenanlagen sein, wie sie an der Universität Paderborn z. B. im PC² zur Verfügung stehen.

Die Ergebnisse der letzten Jahre in der Forschung über links-händige Metamaterialien im Mikrowellen- und optischen Frequenzbereich weisen eindeutig darauf hin, dass die negativen effektiven Materialwerte, die von Beginn an einen Großteil der Faszination an dieser neuartigen Technik ausmachen, offensichtlich ein nur in engen Schranken einsetzbares Modell darstellen. Dies tut dem großen Potenzial solcher Materialien natürlich keinen Abbruch, erfordert aber die Entwicklung neuer Modellierungstechniken, wenn die Materialien tatsächlich in Komponenten der Elektrotechnik und Optik eingesetzt werden sollen. Auch diese Einsicht ist vorwiegend der Simulationstechnik zu verdanken, die sich in der Materialwissenschaft somit ein neues Anwendungsfeld erobert hat.

Literatur

- [1] T. WEILAND: A DISCRETIZATION METHOD FOR THE SOLUTION OF MAXWELL'S EQUATIONS FOR SIX-COMPONENT FIELDS, ELECTRONICS AND COMMUNICATION (AEÜ) 31, 3, PP. 116–120, 1977.
- [2] V. G. VESELAGO: THE ELECTRODYNAMICS OF SUBSTANCES WITH SIMULTANEOUSLY NEGATIVE VALUES OF ϵ AND μ , SOVIET PHYSICS USPEKHI 10, 4, PP. 509–514, 1968.
- [3] J. B. PENDRY, A. J. HOLDEN, D. J. ROBBINS, W. J. STEWART: MAGNETISM FROM CONDUCTORS AND ENHANCED NONLINEAR PHENOMENA, IEEE TRANSACTIONS ON MICROWAVE THEORY AND TECHNIQUES 47, 11, PP. 2075–2084, 1999.
- [4] R. A. SHELBY, D. R. SMITH, S. SCHULTZ: EXPERIMENTAL VERIFICATION OF A NEGATIVE INDEX OF REFRACTION, SCIENCE 292, PP. 77–79, 2001.
- [5] R. SCHUHMAN, T. WEILAND: A COMMON FRAMEWORK FOR COMPUTATIONAL ELECTROMAGNETICS ON THREE-DIMENSIONAL GRIDS, THE RADIO SCIENCE BULLETIN 319, 2006, PP. 20–31.
- [6] J. B. PENDRY, D. SCHURIG, D. R. SMITH: CONTROLLING ELECTROMAGNETIC FIELDS, SCIENCE 312, 5781, PP. 1780–1782, 2006.
- [7] G. LUBKOWSKI, R. SCHUHMAN, T. WEILAND: EXTRACTION OF EFFECTIVE METAMATERIAL PARAMETERS BY PARAMETER FITTING OF DISPERSIVE MODELS, MICROWAVE AND OPTICAL TECHNOLOGY LETTERS 49, PP. 285–288, 2007.
- [8] B. BANDLOW, R. SCHUHMAN, G. LUBKOWSKI, T. WEILAND: ANALYSIS OF SINGLE-CELL MODELING OF PERIODIC METAMATERIAL STRUCTURES, IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS 44, 6, PP. 1662–1665, 2008.



Dipl.-Ing. Bastian Bandlow
ist seit 2006 wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fachgebiet Theoretische Elektrotechnik. Sein Forschungsgebiet sind periodische Strukturen und Metamaterialien.

Kontakt

Prof. Dr.-Ing. Rolf Schuhmann

Institut für Elektrotechnik und Informationstechnik

05251.60-3013

schuhmann@tet.upb.de

Wavelets: Kleine Wellen mit großer Wirkung

Algorithmische Neuentwicklungen in der Angewandten Mathematik

Prof. Dr. Angela Kunoth

In den letzten Dekaden hat nicht nur die massiv gestiegene Leistung von Computern die Simulation vielfältiger und immer komplexerer Phänomene aus Natur- und Ingenieurwissenschaften ermöglicht. Vor allem dank der Entwicklung intelligenter Rechenvorschriften können immer gigantischere Datenmassen strukturiert und analysiert werden. Viele dieser Rechenvorschriften, auch Algorithmen genannt, sind selbst aus dem täglichen Leben nicht mehr wegzudenken.

Einer der Top 10 Algorithms of the 20th Century

Zum Ende des vergangenen Jahrtausends haben zwei Autoren die ihrer Meinung nach einflussreichsten zehn Algorithmen des 20. Jahrhunderts zusammengestellt [6]. Ihr Hauptkriterium: größter Einfluss auf die Entwicklung und praktische Anwendung in den Natur- und Ingenieurwissenschaften. Einer dieser Algorithmen, die schnelle Fourier-Transformation (Fast Fourier Transform oder abgekürzt FFT), bildet die Basis für den 1992 festgelegten JPEG-Bildkompressionsstandard.

Bildkompression mit dem JPEG-Standard

Durch die Entwicklung digitaler Fotografie und des Internets, das ohne Bilder oder Videos nicht vorstellbar ist, entstand die Problematik, große Datenmengen zu komprimieren und so schneller prozessieren und übertragen zu können. Doch schon vor dieser Zeit waren Anwender nicht nur aus Effizienzgründen darauf aus, (Mess-)Signale und zweidimensionale Grafiken zu analysieren und deren wesentliche Merkmale zu identifizieren. Leitlinie war und ist dabei oft, die vom menschlichen Auge wahrgenommenen Spezifika einer Grafik zu kondensieren: Die Grafik an sich soll zwar mit ihren wesentlichen Eigenschaften erkennbar sein, man soll aber



Prof. Dr. Angela Kunoth
Professorin für Mathematik und Inhaberin des Lehrstuhls für Komplexe Systeme. Forschungsschwerpunkte sind numerische Methoden für partielle Differentialgleichungen, speziell Multiskalenansätze auf der Basis von Wavelets.

deutlich weniger Informationen benötigen, um sie darzustellen und weiterzuverarbeiten. Die mathematische Grundidee dazu ist, das Objekt, dargestellt als Funktion, in einfache Bausteine zu zerlegen. Die klassische, seit Jahrhunderten verwandte Methode ist die Fourieranalyse, bei der ein Signal in eine Summe trigonometrischer Funktionen und damit in seine Frequenzanteile zerlegt wird. Bei der Kompression werden dann weniger wichtige Anteile verworfen. Die Fourieranalyse benötigt für ein mit N Punkten dargestelltes diskretes Signal eine Anzahl von Rechenoperationen, die proportional zu N^2 ist. Für eine typische Signalgröße von $N=1\,024=2^{10}$ erscheinen $N^2=2^{20}$ angesichts von GigaFlop-Rechnern unbedeutend. Doch bereits bei einem Bild der Größe $1\,024 \times 1\,024$ ist $N=2^{20}$, also $N^2=2^{40}$. Aus Sekundenbruchteilen für kleine N können so schnell Stunden für die Berechnung eines Bildes werden. Daher ist es nur zu verständlich, dass die von Cooley & Tukey 1965 veröffentlichte schnelle Fourier-Transformation (FFT) sogleich große Berühmtheit erlangte und ihre Bezeichnung zu Recht trägt: Sie kommt mit einer Anzahl von Rechenoperationen aus, die proportional zu $N \log N$ ist. Ihr Geheimnis: eine verschachtel-

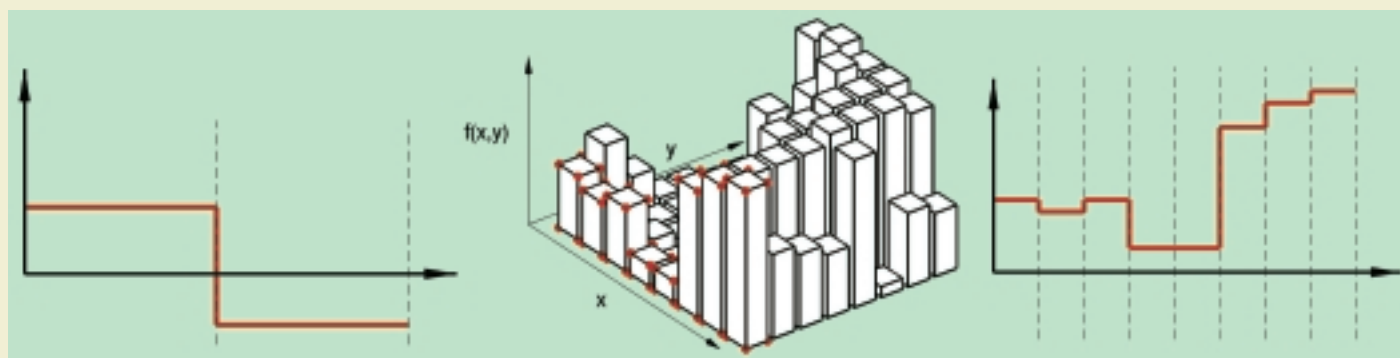


Abb. 1: Haar-Wavelet (links); Bild als zweidimensionale Funktion (Mitte); stückweise konstante Funktion (rechts).

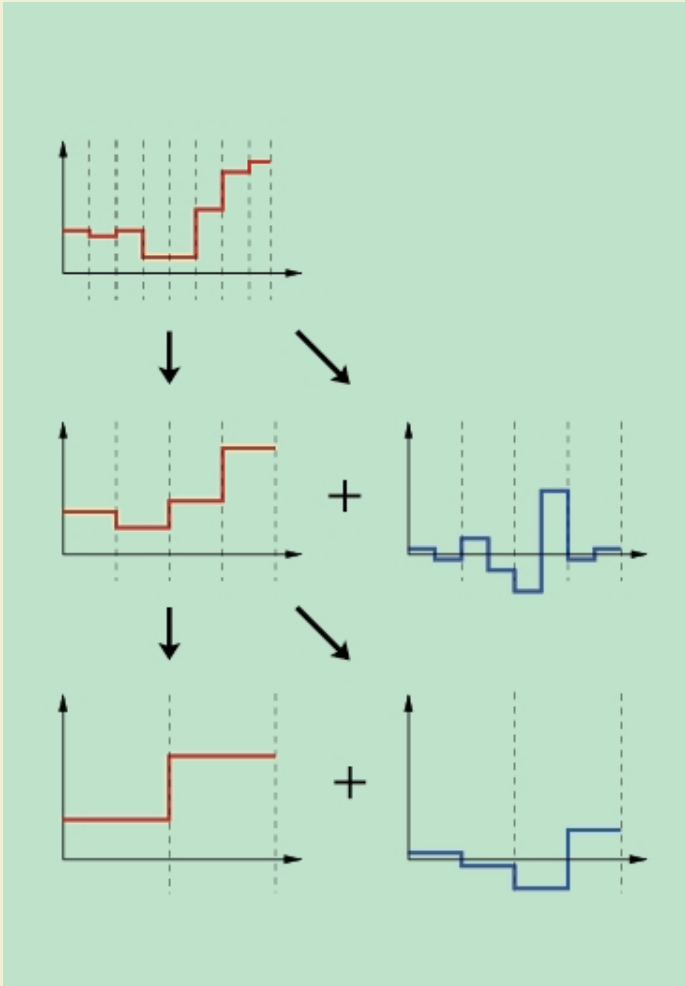


Abb. 2: Multiskalenzerlegung einer stückweise konstanten Funktion.

te, rekursive Berechnung der notwendigen Ingredienzen. Dasselbe Ergebnis, nur mit weniger Komplexität. Natürlich ist ein solcher Algorithmus auf jedem Rechner, so groß und leistungsstark er auch ist, vorzuziehen. Übrigens ist diese raffinierte Methode schon lange vor dem Computerzeitalter, wahrscheinlich bereits 1805 von Carl Friedrich Gauss entwickelt worden, auch wenn er keine Abschätzungen über die Kosten der Berechnungen angegeben hat.

Schneller als FFT

Natürlicherweise tritt die Frage auf, ob man eine ähnliche Zerlegung in Frequenzanteile noch schneller bewältigen

kann. Und was ist bestmöglich? Klar ist, dass die Prozessierung eines durch N Datenpunkte gegebenen Objektes mindestens proportional zu N viele, kurz $O(N)$, Rechenoperationen benötigt: Jeder Datenpunkt sollte mindestens einmal berücksichtigt werden. Also ist ein Algorithmus zur Datenanalyse bestmöglich, der nur $O(N)$ Komplexität verlangt. Und trotz ihrer weiten Verbreitung ist die Fourieranalyse nicht optimal: Ihre Bausteine sind Sinus- und Cosinusfunktionen, die aufgrund ihrer Nicht-Lokalität nicht sehr geeignet sind, lokale Spezifika wie scharfe Kanten darzustellen. Somit begann die Suche nach geeigneteren Bausteinen.

Wavelets: Klein aber fein

Schon 1911 entwickelte Haar eine auf stückweise konstanten Funktionen bestehende Approximation, deren Bausteine sich allein aus Stauchungen und Verschiebungen der in Abbildung 1 auf der linken Seite dargestellten Funktion erzeugen lassen. Dieses heißt heute Haar-Wavelet. „Wavelet“ bedeutet „kleine Welle“ und soll ein ähnliches Schwingungsverhalten wie trigonometrische Funktionen suggerieren; die Funktion soll aber nur in einem lokalen Bereich „leben“, sich von Null unterscheiden. Auf Basis des Haar-Wavelets lassen sich beliebige stückweise konstante Objekte wie die in Abbildung 1 rechts visualisierte Funktion exakt in Komponenten verschiedener Skalen zerlegen. Das Basischema ist in Abbildung 2 zu sehen. Nach einer solchen Zerlegung lassen sich kleinskalige Details wie die blauen Anteile rechts je nach Bedarf verwerfen, ohne dass sich der Charakter des Ausgangsobjekts nach Rekonstruktion aus der Zerlegung wesentlich verändert. Bilder werden dabei als zweidimensionale Funktionen betrachtet (Abbildung 1 (Mitte)), deren Schnitt entlang einer Koordinatenachse wieder ein Histogramm wie in Abbildung 1 (rechts) ist. Das Problem bei dieser Art der Zerlegung: Diese Bausteine sind nur sehr grob und nicht gut geeignet, glatte Signale zu repräsentieren. Durch die gestiegenen Anforderungen zur Verarbeitung von Daten begann in den 1980ern ein regelrechtes Wettrennen um lokalisierte glatte Waveletbasen. Dieses gewann die heute an der Princeton University arbeitende belgische Physikerin Ingrid Daubechies mit ihrer 1988 vorgestellten Konstruktion der orthonormalen Wavelets mit kompaktem Träger [5]. Die daher Daubechies-Wavelets genannten Bausteine lassen sich je nach gewünschter Glattheit auf Kosten von weniger Lokalität konstruieren, und ein

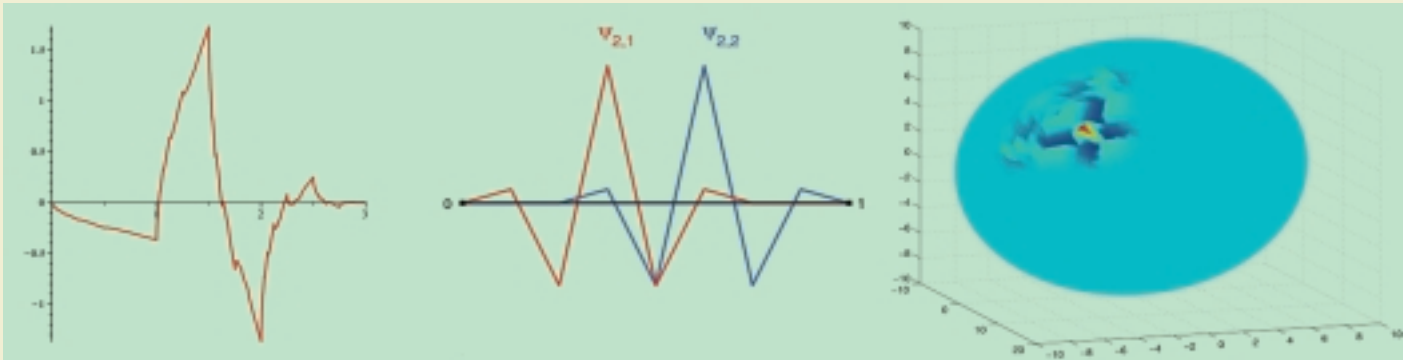


Abb. 3: Basis-Wavelet: Daubechies-Wavelet (links); biorthogonale Spline-Wavelets (Mitte); Spline-Wavelets auf der Sphäre (rechts).

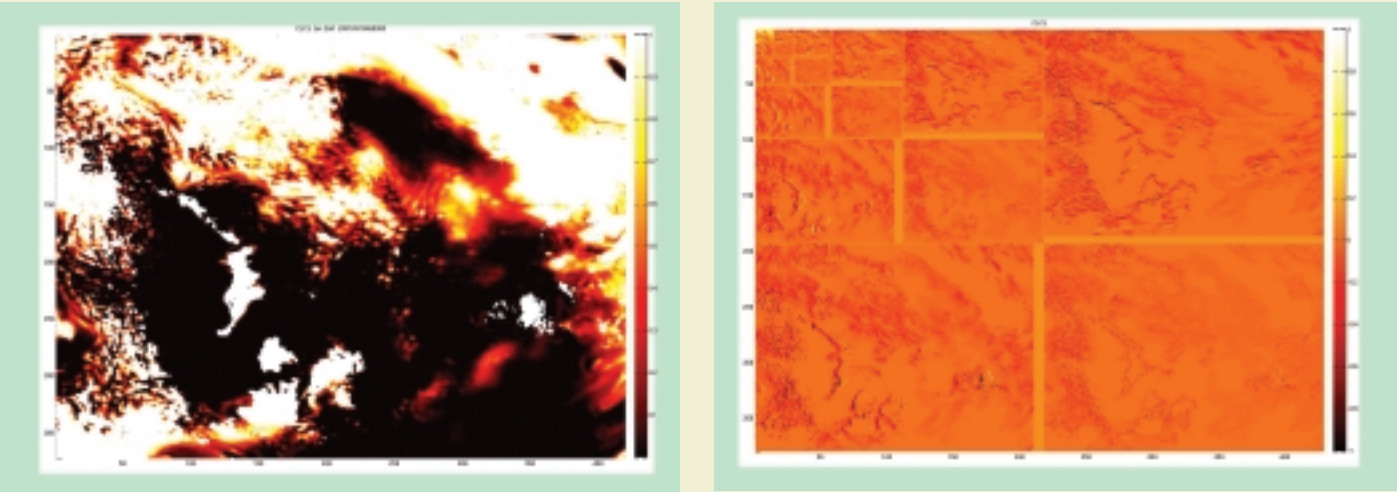


Abb. 4: Wolkenbedeckungsgrad tiefliegender Wolken, 19. September 2001; links: Originaldaten (Prof. Simmer, Meteorologisches Institut, Universität Bonn); rechts: transformierte Daten nach Anwendung der schnellen Wavelet-Transformation.

wellenähnliches Verhalten ist hier eher als bei dem Haar-Wavelet zu erkennen. Anhand der in Abbildung 3 links dargestellten Funktion lässt sich allerdings erahnen, dass die Konstruktion schwierig ist. Es ist sogar so, dass man diese Funktion gar nicht explizit angeben kann: Selbst die Erzeugung dieser Grafik erforderte eine algorithmusbasierte Auswertung. Dies tut der Wirksamkeit einer Analyse bestehend auf Daubechies-Wavelets als Bausteine allerdings keinen Abbruch. Und die resultierende schnelle Wavelet-Transformation (Fast Wavelet Transformation, kurz FWT) hat beweisbare Komplexität $O(N)$. Zwar ist der Baustein kompliziert und schwierig zu konstruieren, aber darauf basierende Algorithmen sind nicht zu schlagen. Daher ist es nicht verwunderlich, dass bereits 2000 ein neuer Bildkompressionsstandard namens JPEG2000 festgelegt wurde, der auf Wavelets basiert. Für diesen war im übrigen das US-amerikanische FBI maßgeblich treibende Kraft: Es sollte eine effizientere Methode zur Speicherung und zum Vergleich von Fingerabdrücken gefunden werden [1]. Spätestens bei dieser Anwendung wird deutlich, dass eine hohe Kompression keinesfalls die Qualität beeinträchtigen darf. In Abbildung 4 ist das Ergebnis einer aktuellen Kooperation

mit der AG Prof. Simmer vom Meteorologischen Institut der Universität Bonn zu sehen. Die Grafik auf der linken Seite zeigt den Wolkenbedeckungsgrad tiefliegender Wolken einer besonderen Wettersituation am 19. September 2001 über einem westlichen Teil von Nordrhein-Westfalen. Das Auge erkennt umfangreiche kleinskalige Variabilität, was sich konkret in vielen Schauern ausdrückt. Interessant sind nun scharfe Übergänge und multiskalige Strukturen. Nach Transformation der Daten mit Hilfe der FWT kann man in der rechten Grafik gut die Struktur der Wettersituation erkennen. Diese Datenanalyse wird dazu benutzt, den Strahlungstransfer effizient und hochgenau zu berechnen, um damit wiederum operative Wettervorhersagemodelle zu verbessern.

Waveletanalyse
implizit gegebener Objekte

Das Prinzip der Zerlegung von Objekten in Bausteine verschiedener Skalen an unterschiedlichen Orten, Multiskalenanalyse genannt, lässt sich auf viele Probleme aus den Ingenieur- und Naturwissenschaften verallgemeinern. Simulationen dynamischer Prozesse basieren in der Regel auf partiellen Differentialgleichungen: Diffusions- oder Trans-

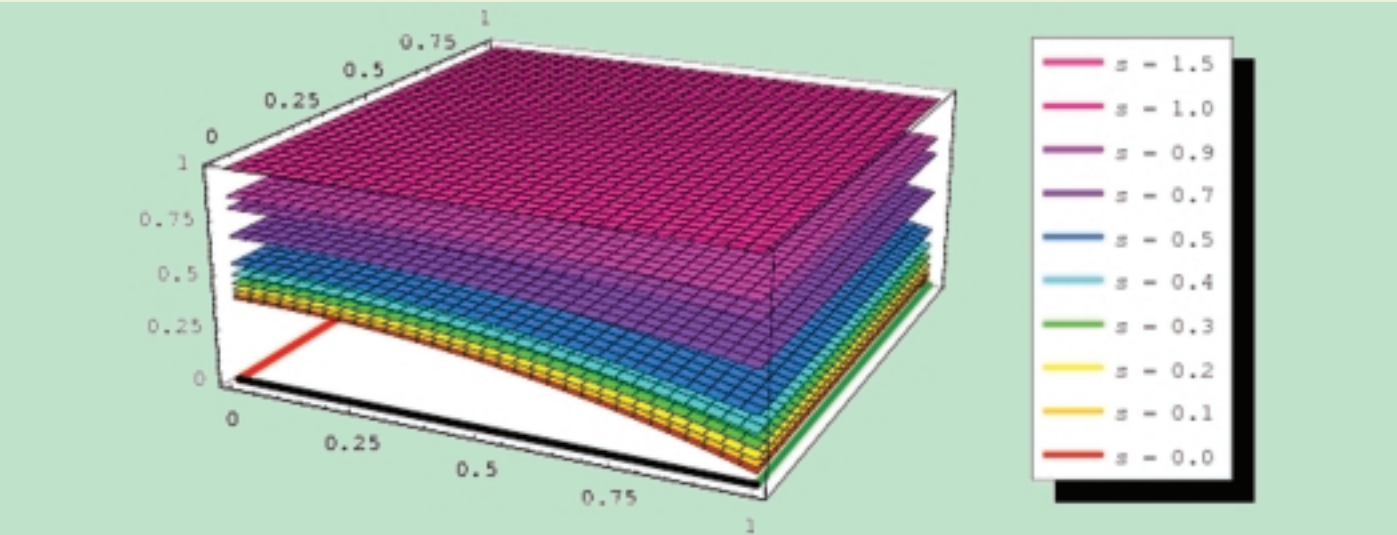


Abb. 5: Lösung eines Kontrollproblems [8], Variation eines Glattheitsparameters.

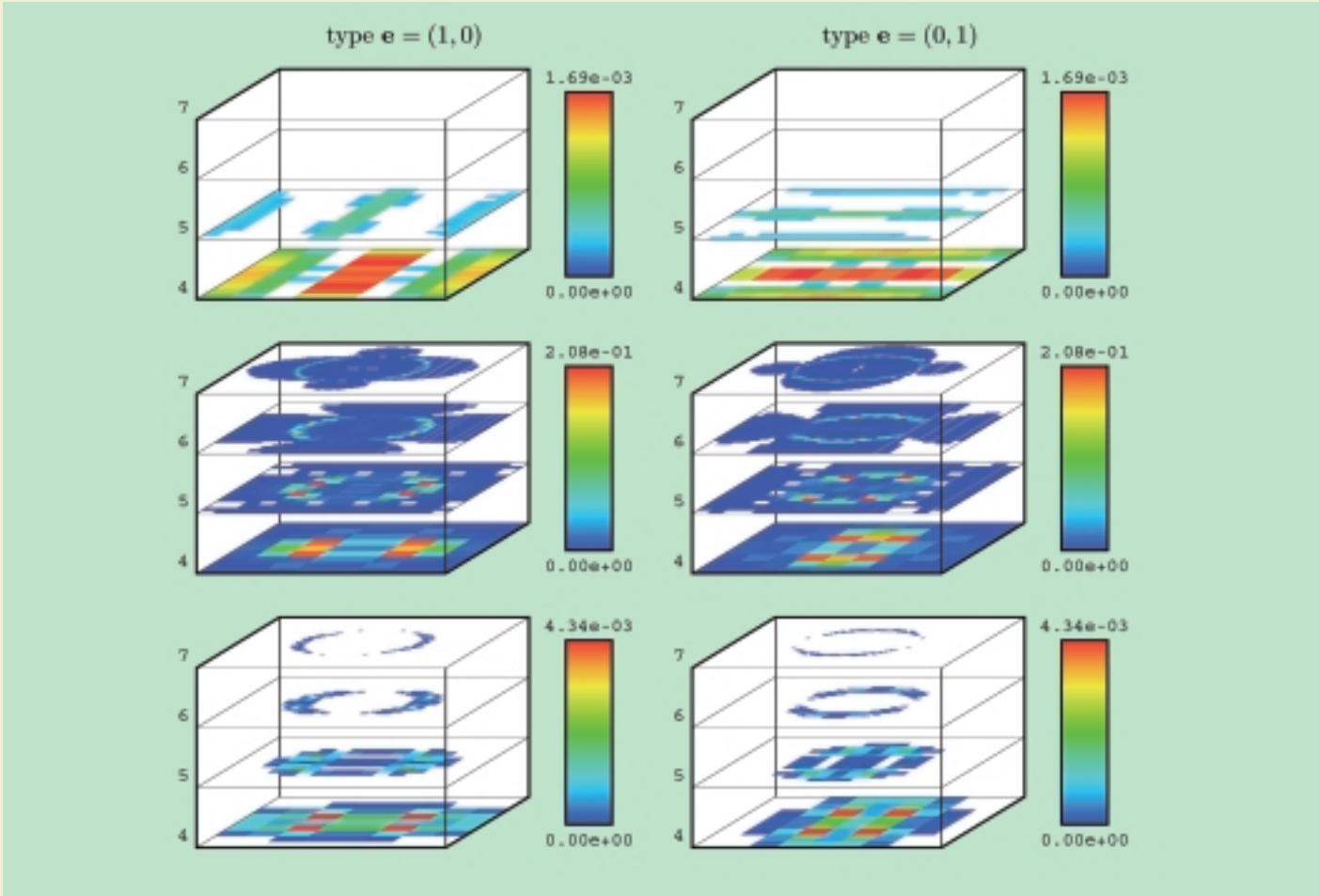


Abb. 6: Lösung eines Kontrollproblems mit Zustand in Form einer vulkanförmigen Funktion [2].

portphänomene führen auf das Problem, die Lösung solcher Gleichungen effizient zu berechnen. Hier kann man sich zu Nutze machen, dass viele Prozesse auch multiskaliger Natur sind. Eine Anwendung wurde in den vergangenen Jahren im Projekt C1 „Waveletmethoden für Systeme von Operatorgleichungen“ im Rahmen des DFG-geförderten Sonderforschungsbereichs SFB 611 an der Universität Bonn untersucht. Konkret ging es um die beweisbar effiziente Lösung von Kontrollproblemen, die durch stationäre partielle Differentialgleichungen beschränkt sind. Die Lösungen solcher Gleichungen sind implizit durch ein System von Differentialgleichungen gegeben, was eine besondere Schwierigkeit im Hinblick auf effiziente Berechnung beinhaltet. Als Beispiel mag die Kontrolle der Wassertemperatur in einem Schwimmbad dienen. Für diese Anwendungen sind die Daubechies-Wavelets aufgrund ihrer fraktalen Struktur nicht gut geeignet, um alle Aspekte entsprechender Algorithmen auch praktisch auf dem Rechner umzusetzen. Entsprechende Verallgemeinerungen wie die in [4] entwickelten und auch auf komplizierteren Geometrien wie Sphären realisierten Spline-Wavelets [7] erwiesen sich als die Bausteine der Wahl, Abbildung 3 (Mitte und rechts): Diese sind stückweise Polynome und lassen sich gut und schnell lokal auswerten. Die Lösungen solcher Kontrollprobleme hängen oft von Modellparametern ab. In [2, 8] wurden nicht nur beweisbar optimal effiziente Methoden mit Komplexität ON entwickelt,

wobei N die Gesamtanzahl der verfügbaren Freiheitsgrade sind. Diese ermöglichen damit auch umfangreiche Parameterstudien wie in Abbildung 5 dargestellt. Für glatte Lösungen wurden schnelle Algorithmen entwickelt, die theoretisch abgesichert und praktisch validiert die bestmögliche Komplexität auf der Basis iterativer Lösungsverfahren für lineare Gleichungssysteme liefern [3]. Schneller geht's nicht.

Wavelets:
Ein mathematisches Mikroskop

Bei Vorliegen von Singularitäten wie scharfen Kanten erwartet man, dass eine lösungsangepasste Verteilung der Freiheitsgrade bessere Genauigkeit liefert. Genau hier können wiederum Wavelets zum Einsatz kommen: Man kann ein mathematisches Mikroskop entwickeln, mit dessen Hilfe man in Regionen starker Singularität einzoomen kann. Abbildung 6 aus [2] zeigt die Verteilung von Freiheitsgraden von Wavelets bei Approximation einer vulkanähnlichen Struktur als gewünschtem Zustand. In jeder Grafik sind von unten nach oben die Freiheitsgrade für kleiner werdende Skalen aufgetragen. In der Kontrollfunktion in der letzten Reihe sieht man deutlich das Herausarbeiten des Vulkanrandes. Als Angewandte Mathematiker schätzt man bei diesen Resultaten, dass nicht nur die numerischen Ergebnisse ausgesprochen überzeugend sind: Vorab liefern Wavelets ein zwar schwieriges, aber äußerst potenzielles Werkzeug,

mit dem sich die optimale Komplexität von Algorithmen beweisen lässt. Dies ist umso bemerkenswerter, als dass hier kontinuierliche, implizit gegebene Funktionen gesucht werden. Diese neuartige Denkweise lässt viele Numeriker von einem Paradigmenwechsel innerhalb dieses Teilgebiets der Angewandten Mathematik sprechen.

„The Top Ten of the 21st Century?“

Zu diesem Zeitpunkt scheint es vermessen, die schnelle Wavelet-Transformation in die Liste der Top Ten Algorithmen dieses Jahrhunderts aufzunehmen. Wahrscheinlich ist, dass viele Algorithmen, die unterschiedliche Skalen ausnutzen und von optimaler linearer Komplexität sind, sich einen Platz teilen werden. Zur Lösung komplexer partieller Differentialgleichungen wird man immer stärker iterative Algorithmen einsetzen, die ihrerseits optimale Komplexität vorweisen – wenn der zugrundeliegende Operator wohlkonditioniert ist. Letzteres lässt sich auch auf Basis von Wavelets ohne Mühen erreichen. Krylov-Unterraum-basierte Algorithmen wie das Verfahren der konjugierten Gradienten zur Lösung eines großen dünnbesetzten linearen Gleichungssystems schaffen es auch schon in die letzte Top Ten-Liste.

Literatur

- [1] J. N. BRADLEY, C. M. BRISLAWN: COMPRESSION OF FINGERPRINT DATA USING THE WAVELET VECTOR QUANTIZATION IMAGE COMPRESSION ALGORITHM, LOS ALAMOS NAT. LAB, TECH. REP. LA-UR-92-1507, APR. 1992, FBI REPORT. [HTTP://WWW.C3.LANL.GOV/~BRISLAWN](http://www.c3.lanl.gov/~BRISLAWN)
- [2] C. BURSTEDDE: FAST OPTIMISED WAVELET METHODS FOR CONTROL PROBLEMS CONSTRAINED BY ELLIPTIC PDES, DISSERTATION, UNIVERSITÄT BONN, OKTOBER 2005. URN: URN:NBN:DE:HBZ:5N-06826

- [3] C. BURSTEDDE, A. KUNOTH: A WAVELET-BASED NESTED ITERATION-INEXACT CONJUGATE GRADIENT ALGORITHM FOR ADAPTIVELY SOLVING ELLIPTIC PDES, NUMER. ALGOR. 48 (1–3), 2008, PAGES 161–188.
- [4] W. DAHMEN, A. KUNOTH, K. URBAN: BIORTHOGONAL SPLINE-WAVELETS ON THE INTERVAL - STABILITY AND MOMENT CONDITIONS, APPL. COMP. HARM. ANAL. 6, 1999, PAGES 132–196.
- [5] I. DAUBECHIES: ORTHONORMAL BASES OF COMPACTLY SUPPORTED WAVELETS, COMM. PURE APPL. MATH., 41 (1988), PAGES 909–996.
- [6] J. DONGARRA, F. SULLIVAN: GUEST EDITORS INTRODUCTION TO THE TOP 10 ALGORITHMS, COMPUTING IN SCIENCE & ENGINEERING, VOLUME 2, ISSUE 1, JAN.–FEB. 2000, PAGES 22–23.
- [7] A. KUNOTH, J. SAHNER: WAVELETS ON MANIFOLDS: AN OPTIMIZED CONSTRUCTION, MATH. COMP. 75, 2006, PAGES 1319–1349.
- [8] R. PABEL: WAVELET METHODS FOR ELLIPTIC CONTROL PROBLEMS WITH DIRICHLET BOUNDARY CONTROL, DIPLOMARBEIT, UNIVERSITÄT BONN, DEZEMBER 2005; DOI:10.2370/236_232.

Kontakt

Prof. Dr. Angela Kunoth

Fakultät für Elektrotechnik, Informatik und Mathematik

05251.60-2711 bzw. -2713

kunoth@math.upb.de