

**Umsetzung der Strategie der Johannes Kepler Universität  
Entwicklungskonzept zum Exzellenzschwerpunkt  
“Chemical Design and Process Development“**

Positionspapier zum wissenschaftlichen Zielthema

# **Functional Structures**

o.Univ. Prof. Dr. Mag. Niyazi Serdar Sariciftci  
Physikalische Chemie  
Johannes Kepler Universität Linz

## **1. Zielsetzung:**

Dieses Positionspapier präsentiert detaillierte Gedanken und Pläne über die Weiterentwicklung der wissenschaftlichen Forschungsschwerpunkte an den chemischen Instituten der Johannes Kepler Universität Linz im Forschungsthema „Functional Structures“. Dieses Thema wurde im Umfeld der Strategieentwicklungen mit den anderen Exzellenz- und Aufbauschwerpunkten

- i.) Nanoscience and Nanotechnology
- ii.) Biosystemanalyse
- iii.) Informationselektronik

koordiniert und abgestimmt. Als solches wird dieses Positionspapier in diesem Umfang als ein wichtiger Teil der Gesamtforschungsstrategie der Technisch Naturwissenschaftlichen Fakultät der Johannes Kepler Universität agieren.

Es ist das Ziel dieses Positionspapiers die verschiedenen vorhandenen Stärken in der wissenschaftlichen Forschung an den chemischen Instituten der JKU in diesem Thema zu fokussieren, zu erweitern und in Zusammenarbeit mit anderen Schwerpunkten zu einer strategischen Stärke der JKU ausbauen.

## **2.) Ist Zustand:**

An den chemischen Instituten werden zu diesem Thema verschiedene Forschungsschwerpunkte behandelt, die aber weitgehend unkoordiniert und individuell gestaltet sind. Im einzelnen:

- 1.) Organische Molekülsynthese: wird von der Abteilung organischer Chemie und im Institut für organische Technologie durchgeführt.
- 2.) Anorganische Synthese: wird von der Abteilung anorganische Chemie behandelt.
- 3.) Dünnschichtherstellung und Charakterisierung wird vom Institut für anorganische Technologie dargestellt.
- 4.) Photoaktive Polymere und Nanokomposite für Optoelektronik werden in Zusammenarbeit mit der organischen Halbleiterphysik von der Physikalischen Chemie behandelt.

- 5.) Membrane und Nanostrukturen für Reaktions- und Trennsysteme werden im Institut für Verfahrenstechnik realisiert.
- 6.) Analytische Methoden (auch in Zusammenarbeit mit der Bioanalytik) werden in der Abteilung für analytische Chemie behandelt.
- 7.) Morphologie und Rheologie der Polymere werden in der Abteilung physikalische Chemie Polymerwissenschaften untersucht.

Alle diese Aktivitäten sind in sich wissenschaftlich zu beurteilen, weisen kaum Überlappungen auf und es existiert nur eine informelle Kooperation. Die verschiedenen Kooperationen mit wissenschaftlichen Gruppen anderer Fachbereiche existieren und sind teilweise sehr erfolgreich, basieren aber grundsätzlich auf individuelle Anstrengungen und Verbindungen. Als Resume kann man zusammenfassen, dass die Basis für den Exzellenzschwerpunkt Chemical Design and Process Development auf dem Thema „Functional Structures“ erfolgreich existiert aber eine konkrete Umsetzung einer Reorganisation bedarf. Das Ziel dieser Reorganisation wird die Fokussierung der verschiedenen Forschungsrichtungen zu diesem Thema sein.

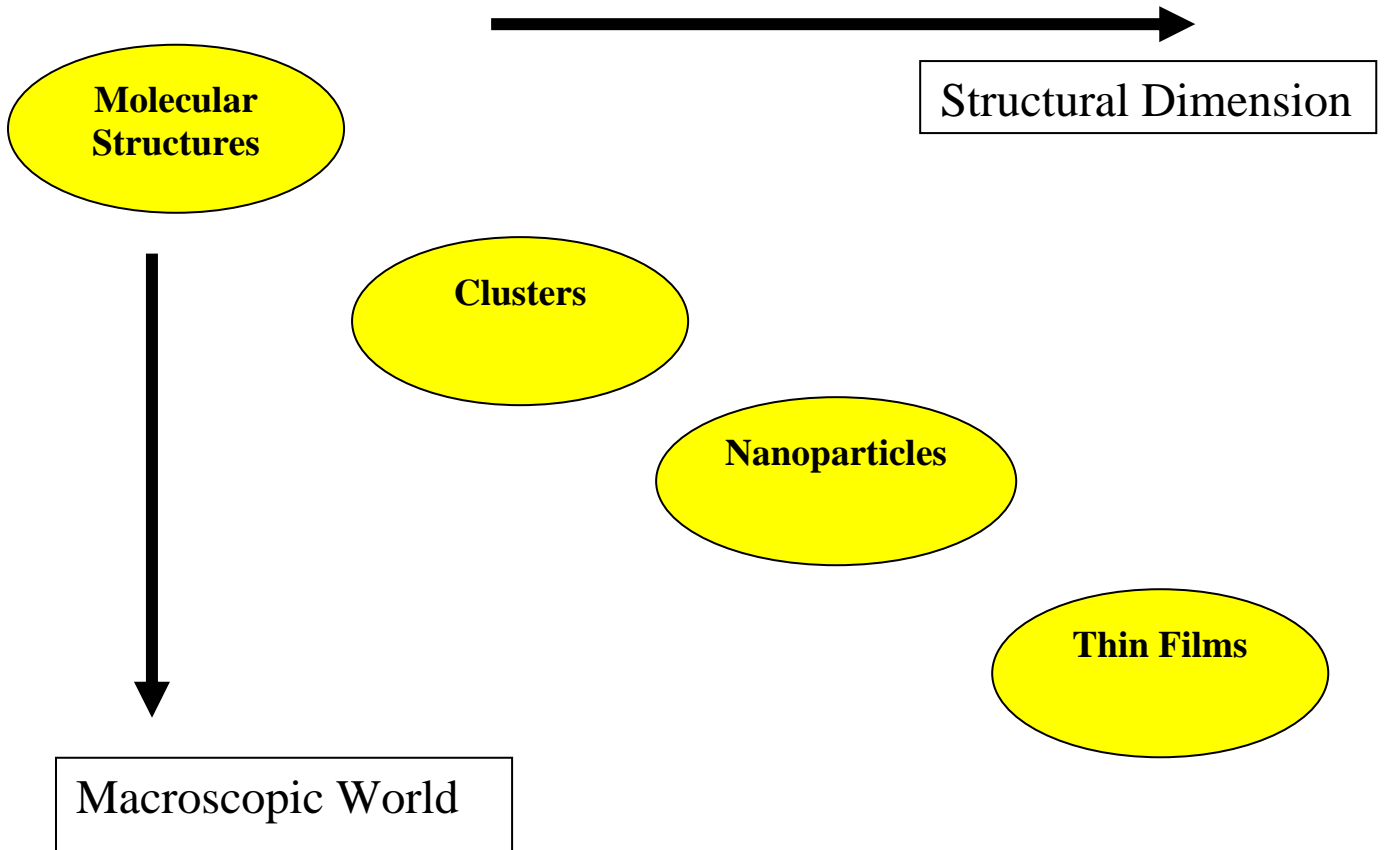
### **3. Was ist die Strategie der „Functional Structures“ ?**

Die verschiedenen Materialien, die in den letzten Jahren in der modernen Frontlinie der interdisziplinären Naturwissenschaften weltweit entwickelt wurden, besitzen die strukturelle Fähigkeit, eine ganz bestimmte Funktion wahrzunehmen und zu erfüllen. Diese Strukturen reichen von komplizierten Molekülen bis hin deren organisierte Überstrukturen (Cluster, Nanopartikel) einerseits und Dünnschichtstrukturen andererseits. Der Aufbau der Moleküle sowie deren Ensemble zu einem Cluster oder Nanopartikel ist nicht willkürlich, sondern wird schon im Vorfeld für eine ganz bestimmte Funktion gedacht, konzipiert, synthetisiert und organisiert. Diese Funktionen können vielfältig sein, z.B:

- i.) Trennfunktion für bestimmte andere Stoffe (Membrane etc, Verfahrenstechnik)
- ii.) Erkennungsfunktion für gezielte Analyten (Analytische Chemie, Biosensors)
- iii.) Lichtabsorptionsfunktion für Energieumwandlung (Molekulare Solarzellen, Physikalische Chemie)
- iv.) Lichtabsorptionsfunktion für destruktive Interaktion mit Krebszellen (Photosensitive Molekülsynthese für Tumortherapie, organische Chemie)
- v.) Supraleitereigenschaften der Dünnschichten (anorganische Technologie)

vi.) Feuerhemmende Schutzfunktion der Moleküle (organische Technologie)

Die verschiedenen Strukturen in diesem Thema „Functional Structures“ werden wie folgt zusammengefasst werden:



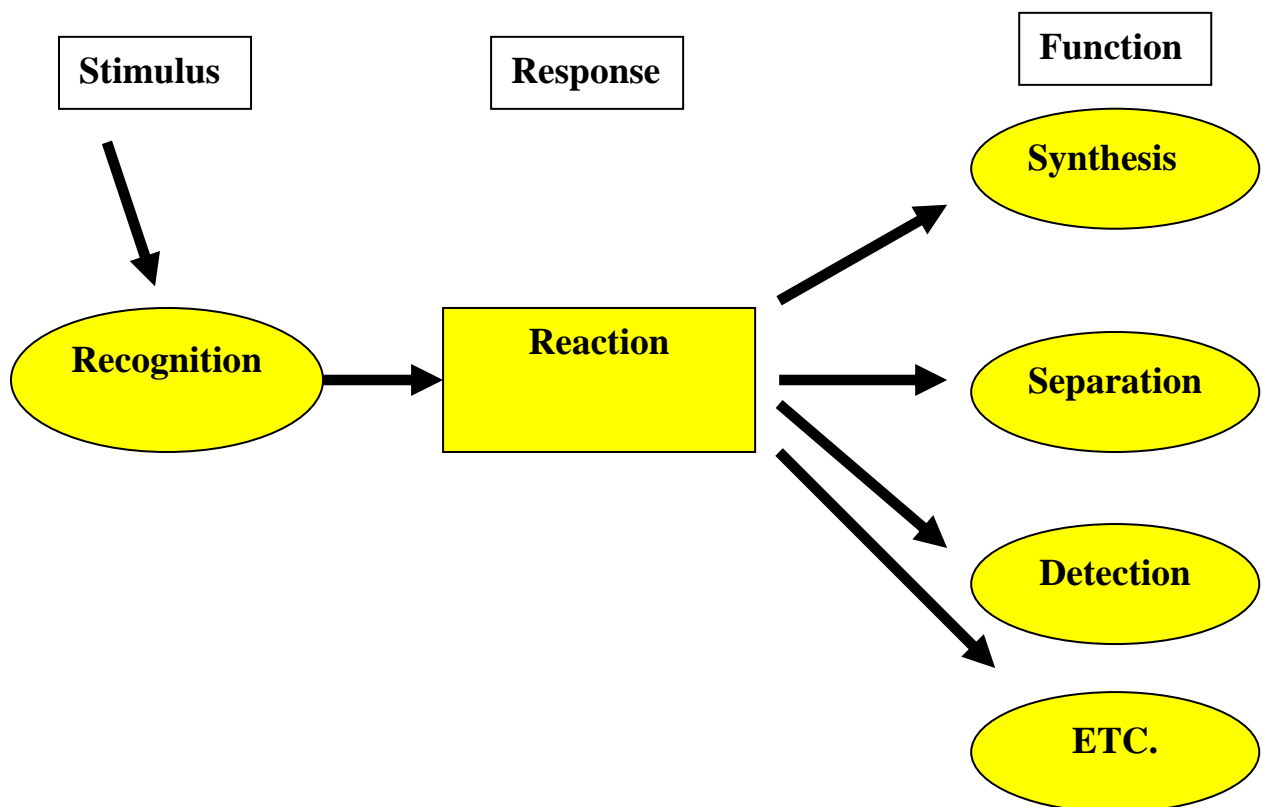
In der molekularen Struktur liegt die primäre Eigenschaft. Nach verschiedenen Kriterien zusammengesetzte Molekülensembles (cluster) können ganz verschiedene zusätzliche Eigenschaften mitbringen. Diese Superstrukturen zeigen eine weitreichende Möglichkeit ganz gezielte Eigenschaften aus Molekülensembles herauszuholen und diese für gezielte Funktionen einsetzen. Ein Beispiel dazu ist die Nanokompositsolarzelle, die eine Eigenschaft der Photovoltaik besitzt, die keiner der Komponenten einzeln zuzuordnen ist und nur im Ensemble auftaucht.

Nanopartikel sind ganz besondere Ensembles, die in verschiedenen Größen nasschemisch hergestellt werden können und vom makroskopischen Feststoff unabhängige Eigenschaften haben. Dieser Nanobereich wird in einem anderen Exzellenzschwerpunkt eingereicht und in

diesem Punkt der Nanopartikelsynthese stellt dieses Positionspapier eine enge Zusammenarbeit mit der Nano-Initiative der JKU vor.

Dünnschichten sind technologisch besonders attraktiv (große Flächenproduktion) und werden in verschiedenen Anwendungen eingesetzt. Als solches haben Dünnschichtstrukturen verschiedene Spezialfunktionen zu erfüllen. Diese reichen von Erkennungs-, und Adsorptions-, bis hin zu den Separationsfunktionen. Diese Spezialfunktionen machen solche Dünnschichtstrukturen zu einem „high tech“ Produkt und in diesem Sektor der Spezialfunktionen wird auch das Gesamtthema der „Functional Structures“ konzentriert sein. Je gezielter, intelligenter und selektiver eine Spezialfunktion wird, desto wertvoller wird die Anwendungen solcher Strukturen.

Als ein schematischer Ausschnitt des Reaktionsablaufes funktioneller Strukturen kann man zusammenfassen:



„Es ist das Ziel und das Thema dieses Exzellenzschwerpunktes, Strukturen zu erzeugen, die eine ganz bestimmte Funktion erfüllen können und sollen. „

Die Materialsynthese, sowie Materialzusammensetzung (assembly) sowie Testanalyse der speziellen Funktionen ist die Forschungsstärke der verschiedenen chemischen Institute der JKU, die durch gezielte Kooperationen gebündelt werden soll. Die Zielfunktionen, die solche Strukturen darstellen sollen, werden in Zusammenarbeit mit dem lokalen, nationalen sowie internationalen Industrieumfeld abgestimmt und dadurch eine hohe Anwendungsmöglichkeit für diese neugeschaffenen Strukturen gesucht.

#### **4. Soll Zustand (Zeitraum ca 10 Jahre)**

Die anstehenden Neubesetzungen der Professuren an den chemischen Instituten in den nächsten fünf bis sieben Jahren sowie an anderen fachübergreifenden Institutionen werden als Lenkung der Strategie angesehen. Es wird beabsichtigt folgende Kompetenzen auszubauen und/oder zu ergänzen:

- a.) Synthese von funktionellen Molekülen (Nachfolge Prof. Schmidt, sowie Nachfolge Prof. Falk): In diesem Teilgebiet der „functional materials“ wird die molekulare Synthese von speziellen organischen und bio-organischen Molekülen als strategisches Ziel gesetzt. In Zusammenarbeit mit der Bioscience-Initiative der JKU werden diese „functional molecules“ auf deren „Funktion“ selektiert und interdisziplinär eingesetzt.
- b.) Synthese von Nanopartikel und Nanocluster (Nachfolge Prof. Boller): In diesem Teilgebiet der nasschemischen Synthese von halbleitenden Nanopartikeln besteht ein eindeutiger Nachholbedarf. Solche Halbleiternanopartikel werden sowohl Einsatz in der Nanoinitiative und der Bioscience der JKU als auch direkten Zugang zu dem bestehenden Forschungsschwerpunkt der physikalischen Chemie (Nanokompositsolarzellen) Zugang finden.
- c.) Herstellung und Charakterisierung von funktionellen Dünnschichten (Nachfolge Prof. Gritzner): Hier sind oxidische und andere Dünnschichtstrukturen gemeint und zum funktionellen Einsatz als Grundlage für gezielte Molekül- oder Nanopartikelimmobilisierung verstanden. Weiters werden solche Dünnschichten als Oberflächen- und Zwischenflächenmodifikation (Surface and Interface modifications) verfahrenstechnischen Einsatz finden. Mit den Instituten für Verfahrenstechnik, physikalische Chemie, Oberflächenphysik, Biophysik sowie angewandte Physik wäre eine naheliegende Zusammenarbeit möglich.

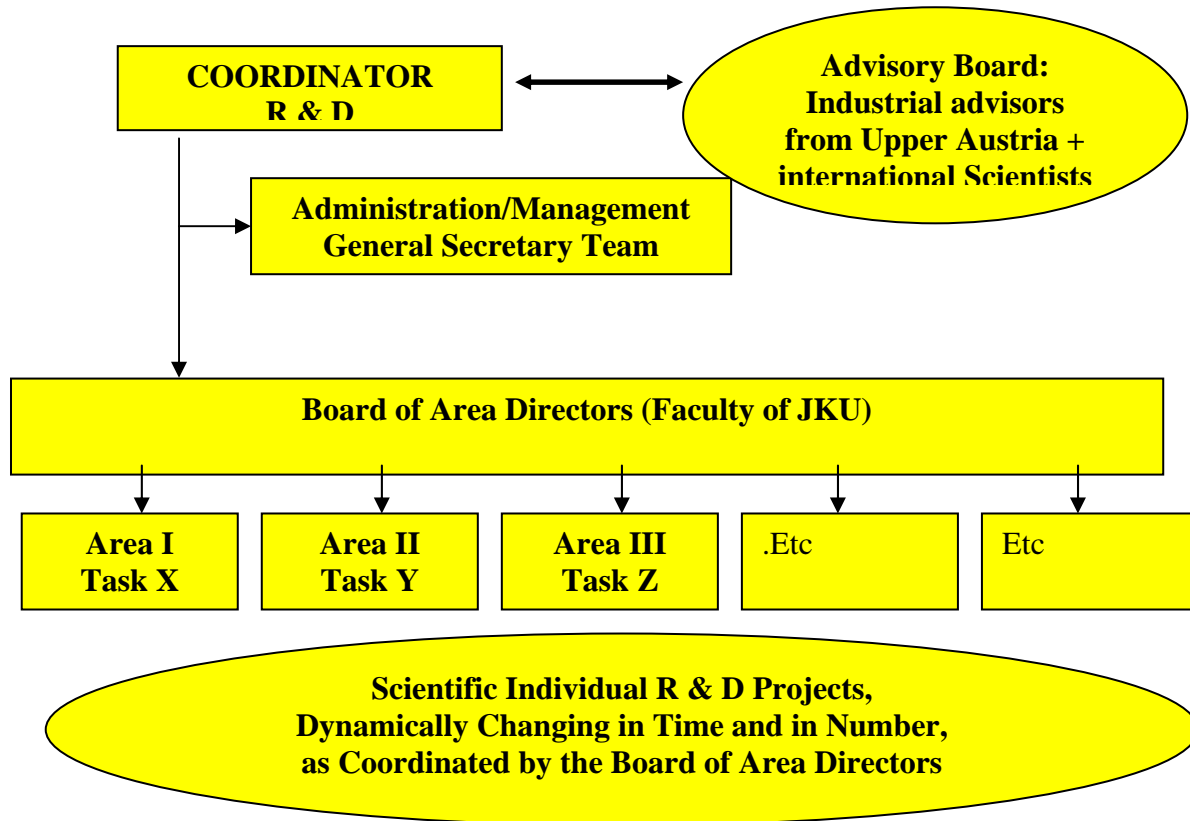
- d.) Synthese von funktionellen Polymeren (Nachfolge Prof. Sobczak): In diesem Feld fehlt uns jegliche Kompetenz und sollte dringend aufgebaut werden. Funktionelle Polymere werden in Zukunft großen Einsatz in der medizinischen Biotechnologie sowie in der Polymerelektronik finden. Um solche Anwendungen gezielt als Funktion anzugehen, bedarf es eine(n) synthetischen PolymerchemikerIn mit Schwerpunkten in diesen Gebieten. Direkte Zusammenarbeit mit der physikalischen Chemie (Polastiksolarzellen) sowie mit der Mechatronik und angewandte Physik (Plastikelektronik) sind zu erwarten. Dieselben funktionellen Polymeren können auch in der Biosensorik eingebracht werden und eine weitere Brücke zu Biosa schaffen.
- e.) Analyse sowie Charakterisierung der Funktionen und Strukturen (Prof. Sariciftci, Prof. Samhaber, Prof. Buchberger): In der physikalischen und analytischen Chemie sowie in allen Spezialgruppen werden solche „functional materials“ entworfen, geschaffen, getestet und mit den synthetischen Gruppen in Rückkopplung optimiert und Anwendungspotenziale diskutiert. Dazu bedarf es einer Redefinition der Rolle von Analyse und physikalischen/chemischen Charakterisierung: Es werden nicht nur vorhandene Materialien getestet und die Ergebnisse analysiert, sondern es sollen insbesondere *neue* Funktionen und *neue* Materialkombinationen für diese neuen Funktionen erdacht und generiert werden. Diese erweiterte Rolle der neu ausgerichteten chemischen Institute ist eine weitere wichtige Brücke zu den anderen Schwerpunkten wie Nano und Biosa der JKU. Somit können ganz neue Wege vorgeschlagen und neue Anwendungsmöglichkeiten verfolgt werden.

Mit diesem Soll-Zustand soll erreicht werden, dass für die Nachfrage einer konkreten Anwendungsfunktion sowie Anwendungsmöglichkeit an der Johannes Kepler Universität Linz das nötige Know-How vorhanden sein wird, um solche Strukturen zu realisieren. Da die Wahl solcher ausgewählter Funktionen und Fokussierungen sich mit der Zeit und mit dem national- internationalen Umfeld ändern kann, wird die Kompetenz, solche neue Strukturen interdisziplinär zu realisieren immer wichtig sein und ein wertvolles Know-How darstellen.

## **5. Management Struktur**

Dieser Exzellenzschwerpunkt soll auch in einer effektiven Struktur organisiert werden. Um Mittel zielgerecht einsetzen zu können, sowie um einen gemeinsamen Auftritt nach aussen hin

verwirklichen zu können, werden folgende Management- und Organisationsstruktur vorgeschlagen:



„Coordinator“ hat die Gesamtverantwortung über die erfolgreiche Einsetzung der wissenschaftlichen Ziele und Instrumente. Er koordiniert die verschiedenen Funktionen, die in Zusammenarbeit mit dem „International Advisory Board“ entschieden wurden und nimmt die wissenschaftliche Realisierung der erwünschten Strukturen innerhalb und ausserhalb dieses Exzellenzschwerpunktes wahr.

Die Aufgabe eines „General secretary“ soll ein(e) junger WissenschaftlerIn mit Repräsentationsfähigkeiten wahrnehmen und den Exzellenzschwerpunkt nach aussen mit Öffentlichkeitsarbeit sowie durch gezielte Industrie- und Politikkontakte vertreten.

Das „Board of Directors“ wird von den verantwortlichen WissenschaftlerInnen gebildet. Jeder von ihnen soll eine Gruppe leiten und einer thematischen Struktur zugeordnet sein. Es können durchaus WissenschaftlerInnen von anderen Exzellenzschwerpunkten und Aufbauscherpunkten als einzelne Mitglieder betrachtet werden; die Gruppe soll keinesfalls auf Fachbereich Chemie beschränkt bleiben.

## **6. Finanzplan:**

Im Allgemeinen wird von einer Finanzierung durch einen 50:50 „fund matching“ Modus ausgegangen. Das heisst: die notwendigen Mittel für Projekte werden durch eine 50% Kofinanzierung der Universität und Industrie aufgebracht.

Zu den Finanzierungsobligationen der Universität gehören:

- a.) Berufungs- und Berufungsabwehrfinanzierungen der Professuren sowie deren Grundausrüstung (Finanzbedarf für die nächsten fünf Jahre ca. 3 Mio €)
- b.) Die Errichtung der notwendigen Organisationsinfrastrukturen des beschriebenen Exzellenzschwerpunktes (Finanzbedarf für die nächsten fünf Jahre ca. 500.000,- €)
- c.) Ko-finanzierung der Projekte im Durchschnitt von 50% als „Fund Matching“ für den erworbenen Drittmittel. Dafür kann die Universität die „Overhead“ Ausgaben einer projekt-anteiligen Vollkostenrechnung entgegenrechnen (dieser Finanzbedarf ist schwer zu schätzen, aber bei einem Drittmittelvolumen von ca 1 Mio €pro Jahr, Tendenz steigend, ist diese Kofinanzierung der Universität mit ca 5 Mio €für die nächsten fünf Jahre abzüglich der anteiligen Overhead Ausgaben zu errechnen).

Die Sparten a, b sind als Grundfinanzierung zu betrachten, Sparte c gilt als Leistungsvereinbarung.

Beteiligungen der Universität an verschiedenen wirtschaftlichen Folgeerträgen der Projekte sollen getrennt und fachübergreifend im Einzelnen geregelt werden. Der Exzellenzschwerpunkt hat nicht die Absicht, ein Kompetenzzentrum oder Ähnliches mit eigener Jurisdiktion zu werden. Die verschiedenen Mitglieder dieses Schwerpunktes können ihrerseits an Kompetenzzentren und an Spin-off Unternehmen unabhängig voneinander teilnehmen.

Dieser Exzellenzschwerpunkt hat die erklärte Absicht und das Ziel die wissenschaftliche Forschung der Johannes Kepler Universität unter dem Begriff „Functional Materials“ zu stärken und zu fokussieren und durch Innovationstransfer in die Anwendung zu führen.