

Design, Synthese und Analyse hochentwickelter Materialien

Impressum

Herausgeber

Universität Innsbruck
FSP Functional Materials Science (FunMat)
Innrain 52c, A-6020 Innsbruck
www.uibk.ac.at/de/funmat

Für den Inhalt verantwortlich

FSP Functional Materials Science (FunMat)

Gesamtprojektleitung

assoz. Prof. Mag. Dr. Thomas Lörting, Dr. Petra Engele
FSP Functional Materials Science (FunMat)

Grafische Gestaltung

Melanie Staffner
Büro für Öffentlichkeitsarbeit

Bildquellen

Titelbild Umschlag: © Bild von Gerd Altman auf Pixabay
Inhalt: © Universität Innsbruck, S. 12 © Land Tirol / Emanuel Kaser,
S. 13 © Patrick Saringer, S. 7 und S. 17 © Bild von Gerd Altman auf Pixabay

Druck

www.druckvorteil.at

Inhalt

Vorworte	asoz. Prof. Mag. Dr. Thomas Lörting, FSP FunMat Univ.-Prof. Mag. Dr. Gregor Weihs, Vizerektorat für Forschung Anton Mattle, Land Tirol Barbara Thaler, Wirtschaftskammer Tirol DI (FH) Mag. Michael Mairhofer & Dr. Albert Rössler, Industriellenvereinigung Tirol Dr. Marcus Hofer, Standortagentur Tirol	8 10 12 13 14 15	Materialtechnologie Univ.-Prof. DI Dr. Roman Lackner	46
	Wirtschaftsbeziehungen des Forschungsschwerpunkts Funktionelle Materialwissenschaften (FunMat)	16	Theoretische Chemie Univ.-Prof. DDr. Klaus R. Liedl	48
Arbeitsgruppen	Drug Delivery Univ.-Prof. Mag. Dr. Andreas Bernkop-Schnürch	18	Kryochemie von Wasser asoz. Prof. Mag. Dr. Thomas Lörting	50
	Chemische Physik Univ.-Prof. Dr. Martin K. Beyer	20	Oberflächenchemie Ass.-Prof. Dr. Laerte Patera	52
	CD-Labor für Innovative Crystal Engineering Strategien in der Arzneimittelentwicklung Ass.-Prof. Priv.-Doz. Dr. Doris E. Braun	22	Bodenschätze und Erzgeologie Ass.-Prof. Dr. Clifford Patten	54
	Materialwissenschaft in der Denkmalpflege Dipl.-Ing. Dr. Anja Diekamp	24	Nanostrukturierte Modellkatalysatoren Priv.-Doz. Dr. Simon Penner asoz. Prof. Dr. Bernhard Klötzer	56
	Anorganische Molekülchemie Univ.-Prof. Dr. Fabian Dielmann	26	Textilchemie und Textilphysik Univ.-Prof. Dr. Tung Pham Dr. Noemi Aguiló-Aguayo asoz. Prof. Dr. Avinash P. Manian	58
	Präformulierung und Polymorphie ao. Univ.-Prof. Mag. Dr. Ulrich Grieser	28	Batterietechnologien Priv.-Doz. Dipl.-Ing. Dr. Engelbert Portenkirchner	60
	Festkörperchemie, AG Heymann asoz. Prof. Dr. Gunter Heymann	30	NanoBio Physik Univ.- Prof. Dr. Paul Scheier Dr. Elisabeth Gruber	62
	Fortgeschrittene Quantenchemie und theoretische Materialwissenschaften asoz. Prof. Dr. Thomas Hofer	32	Photoaktive Hybridsysteme Ass.-Prof. Dr. Heidi Annemarie Schwartz	64
	Nachhaltige Chemie im gesamten Periodensystem asoz. Prof. Dr. Stephan Hohloch	34	Mineralogie - Petrologie Univ.-Prof. Dr. Roland Stalder ao. Univ.-Prof. Dr. Jürgen Konzett Ass.-Prof. Dr. Bastian Joachim-Mrosko	66
	Analytische Chemie Univ.-Prof. Mag. Dr. Christian Huck	36	Chemieingenieurwesen & Materialprozesstechnik Univ.-Prof. Dr. Oliver I. Strube	68
	Festkörperchemie, AG Huppertz Univ.-Prof. Dr. Hubert Huppertz	38	NMR-Spektroskopie asoz. Prof. Dr. Martin Tollinger	70
	Angewandte Mineralogie und Kristallographie Univ.-Prof. Dr. Volker Kahlenberg	40	Biobasierte Materialien Dipl.-Ing. Valentine Troi	72
	Werkstoffwissenschaften mit Schwerpunkt Mechatronik Ass.-Prof. Dr. Lukas Kaserer	42	Dünnschichttechnologie Dr. Nikolaus Weinberger	74
	Material- und Elektrochemie Univ.-Prof. Dr. Julia Kunze-Liebhäuser	44	Molekulare Systeme Univ.-Prof. Dr. Roland Wester	76

Vorworte

Vorwort

Sprecher Funktionelle Materialwissenschaften

assoz. Prof. Mag. Dr. Thomas Lörting



assoz. Prof. Mag. Dr. Thomas Lörting
Sprecher Funktionelle Materialwissenschaften,
Institut für Physikalische Chemie



Im Jahr 2002 haben sich unter der Koordination von Univ.-Prof. Dr. Erminald Bertel mehrere Forschungsgruppen mit besonderen Kompetenzen im Bereich der Materialwissenschaften zu einer gemeinsamen Forschungsinitiative zusammengeschlossen. Dieser Verbund trug den Namen „Material- und Nanowissenschaften (Advanced Materials)“, brachte Forscher:innen interdisziplinär zusammen und wurde bald als Forschungsplattform ins Schwerpunktsystem der Universität Innsbruck aufgenommen. Über die letzten zwei Jahrzehnte ist die Forschungsplattform, die ich seit 2012 als Sprecher vertreten darf, bezogen auf die Zahl der Arbeitsgruppen deutlich gewachsen. Im Jahr 2024 wurden wir nach mehrmaliger Evaluierung zu einem Forschungsschwerpunkt der Universität Innsbruck erhoben und haben uns in gemeinsamer Abstimmung auch namentlich an die eigenen Stärkefelder angepasst. Ich freue mich daher außerordentlich, mit dieser Broschüre den neuen Forschungsschwerpunkt „Funktionelle Materialwissenschaften (FunMat)“ und seine Forschungsgruppen vorstellen zu dürfen. Dabei zeigt das Wort „funktionell“ unseren Anspruch über ein mikroskopisches Verständnis der Materialeigenschaften bestimmte Leistungsmerkmale des Materials gezielt zu beeinflussen, etwa bezogen auf Reißfestigkeit von Fasern oder Wasseraufnahmefähigkeit von Wirkstoffen.

FunMat agiert im sehr spannenden Feld von Grundlagenforschung, angewandter Forschung und Industrieforschung. Über 30 Arbeitsgruppen aus 4 Fakultäten (Pharmazie/Chemie, Mathematik/Informatik/Physik, Geo- und Atmosphärenwissenschaften, Technische Wissenschaften) betreuen etwa 200 Studierende, die an ihrem Master oder Doktorat arbeiten. Im Bereich der Grundlagenforschung besteht ein gemeinsames Interesse an der Bewältigung der größten Herausforderung, die die Menschheit gegenübersteht: der rasanten, globalen Klimaerwärmung, ausgelöst durch den rapiden Verbrauch von fossilen Brennstoffen, die über Jahrtausende entstanden sind. Diese Herausforderung muss auf vielen Ebenen gleichzeitig angegangen werden, wobei riesiger Forschungsbedarf speziell im Bereich der Energiewende besteht. Aktuell entstehen viele neue kollaborative Projekte, wie etwa der Exzellenzcluster MECS mit dem Thema der Entwicklung von Materialien zur Energiespeicherung und -umwandlung oder das Christian-Doppler Labor für Innovative Crystal Engineering Strategien in der Arzneimittelentwicklung, um gemeinsam große Herausforderungen für die Menschheit anzugehen. Im Bereich der Wasser- und Eisforschung wurde die Universität Innsbruck als eine der wenigen Universitäten außerhalb Deutschlands eingeladen, leitend an der Gründung des „Centers for Molecular Water Sciences“ (CMWS) in Hamburg zu wirken. Dieses wissenschaftliche Großprojekt schafft neue Möglichkeiten für zukünftige

Generationen an Wasserforscher:innen. In diesem Bereich geht es nicht nur um Klimaneutralität, sondern auch um eine Erklärung zur Frage, warum ausgerechnet Wasser die Substanz ist, ohne die kein uns bekanntes Leben möglich ist.

Nicht zuletzt wollen wir unsere Expertise zeigen und für die Öffentlichkeit sowie für Wirtschaft und Industrie zugänglich machen. Wir verstehen uns als Einheit der Grundlagenforschung und tragen die uns zugänglichen Erkenntnisse nach außen, insbesondere in Form der grundlagengestützten Lehre, durch wissenschaftliche Publikationen und in Form von Kollaborationen mit verschiedenen Organisationen und Betrieben. Schon die Broschüre zur Gründung der Forschungsplattform vor gut 20 Jahren war an die Industriellenvereinigung, die Wirtschaftskammer Tirol und den Landeshauptmann gerichtet, um Sichtbarkeit zu erzeugen und die Möglichkeiten in Forschungsfragen darzustellen. Als Forschungsschwerpunkt wollen wir der Gesellschaft und insbesondere der Tiroler Wirtschaft zeigen, welche exzellenten Möglichkeiten zur Bearbeitung von Forschungsfragen offenstehen und welchen Beitrag die materialwissenschaftliche Forschung für das tägliche Leben leistet.

Der Forschungsschwerpunkt umfasst eine große Anzahl von Messinstrumenten und Forschungsgeräten, die für Wissenschaftsfragen aus der Bevölkerung und Industrie oder für Auftragsmessungen zur Verfügung stehen. Die aktuelle Sammlung an Geräten ist auf unserer Homepage www.uibk.ac.at/de/funmat unter dem Punkt „Infrastruktur“ zu finden. Als aktuelles Beispiel sei hier die Anschaffung eines weltweit einzigartigen Gerätes durch Kofinanzierung von FFG und Land Tirol erwähnt, dessen Akronym NAP-XPS wir liebevoll in „Schnappi“ umgetauft haben. Genau gesagt handelt es sich dabei um ein Röntgenphotoelektronenspektrometer, das für ein viel weiteres Spektrum von Fragestellungen herangezogen werden kann als alle anderen Geräte weltweit. Als einziges vermisst es Oberflächeneigenschaften nicht nur im Ultrahochvakuum, sondern nahe Umgebungsdruck. Außerdem haben wir das System mit Manipulatoren ausgestattet, die sowohl extreme Kälte, wie im Weltall, als auch Hitze, wie im Hochofen, erreichen. Dazu lässt sich dieses Gerät für elektrochemische Fragestellungen, wie sie in der Energiewende wichtig sind, einsetzen. Dieses Alleinstellungsmerkmal erlaubt uns, zu vielen Fragestellungen wissenschaftliches Neuland zu betreten und damit Forschung an der Weltspitze zu betreiben.

In diesem Sinne darf ich Ihnen viel Freude bei der Lektüre der Broschüre wünschen und würde mich über einen persönlichen Kontakt bei der administrativen Koordinatorin Dr. Petra Engele (petra.engele@uibk.ac.at) oder mir selbst (thomas.loerting@uibk.ac.at) freuen!

Ihr
assoz. Prof. Mag. Dr. Thomas Lörting
Sprecher Forschungsschwerpunkt Funktionelle Materialwissenschaften

Vorwort

Vizerektor für Forschung

Univ.-Prof. Mag. Dr. Gregor Weihs



Der Forschungsschwerpunkt „Funktionelle Materialwissenschaften“ präsentiert in der vorliegenden Broschüre einen beeindruckenden Umfang an Forschungsaktivitäten. Hervorgegangen aus der Forschungsplattform „Material- und Nanowissenschaften“ hat sich der interdisziplinäre Verbund von Forscher:innen der Universität Innsbruck in den letzten Jahren stetig weiterentwickelt und forscht heute auf internationalem Niveau zu höchst aktuelen Fragestellungen. Von der Energiespeicherung und Katalyse, zur Photovoltaik bis hin zur Denkmalpflege wird hier in fast dreißig Themenbereichen geforscht.

Die Forschungsaktivitäten betrachten dabei sowohl grundlegende Fragestellungen, als auch anwendungsorientierte. Damit zeigt FunMat die Stärken des Forschungsschwerpunktsystems der Universität Innsbruck beispielgebend auf: lokale Vernetzung über Instituts- und Fakultätsgrenzen hinweg, erhöhte internationale Sichtbarkeit, gemeinsam betriebene und genutzte Forschungsinfrastruktur, synergetische Forschung, intensive Betreuung und breite Vernetzung von Nachwuchsforscher:innen sowie die Verwertung von gewonnenen Erkenntnissen durch die Entwicklung neuer Technologien und Anwendungen. Mit diesen Faktoren fördert das Forschungsschwerpunktsystem der Universität Innsbruck wissenschaftliche Exzellenz und Innovation.

Ein sichtbares Zeichen dieser Exzellenz ist die Beteiligung am Cluster of Excellence „Materialien für Energiekonversion und Speicherung“ (MECS), gefördert vom österreichischen Wissenschaftsfonds FWF und den beteiligten Forschungsstätten. Die an MECS beteiligten Forscher:innen der Universität Innsbruck konzentrieren sich dabei auf die Entwicklung, Charakterisierung und Anwendung neuer Materialien für elektrochemische Energieumwandlungs- und -speicherprozesse sowie auf die Aufklärung von komplexen Reaktionswegen und -mechanismen. Unsere Forscher:innen leisten damit einen wichtigen Beitrag zur dringend nötigen Energiewende.

Noch etwas näher an der Anwendung arbeitet das neue Christian-Doppler Labor für „Innovative Crystal Engineering Strategien in der Arzneimitteldentwicklung“. Es zielt auf die Erforschung kritischer Stoffeigenschaften von pharmazeutischen Hilfs- und Wirkstoffen ab, die für die Herstellung, Qualität und Sicherheit von hochwertigen Medikamenten entscheidend sind. Eine Optimierung dieser Eigenschaften erlaubt es, Herstellungsprozesse zu beschleunigen und letztlich die Kosten von essenziellen Arzneimittelprodukten zu senken.

Dies sind zwei prototypische Beispiele, an denen man sehen kann, dass die Funktionalität von Materialien häufig eine Schlüsselfrage für verschiedenste Anwendungen sein kann. Dabei kann man sich nicht auf Zufallsfunde verlassen. Die Gründe, warum ein Elektrodenmaterial einen Akku schneller laden lässt und gleichzeitig dessen Lebensdauer verlängert, müssen verstanden werden, damit die Entwicklung weitergetrieben oder auch großtechnisch bzw. in eine Serienfertigung umgesetzt werden kann.

Funktionale Materialien ermöglichen inzwischen viele Annehmlichkeiten unseres Alltagslebens, wie die beiden Beispiele zeigen. Die Universität Innsbruck ist mit ihrem Forschungsschwerpunkt Funktionale Materialwissenschaften an der Spitze dieser Forschung und Entwicklungen. Das Rektorat wünscht dem Forschungsschwerpunkt viele weitere Erfolge und Durchbrüche, in der Grundlagenforschung und in Anwendungen, zum Wohle der Gesellschaft.

A handwritten signature in blue ink, appearing to read "gregor Weihs".

Ihr
Univ.-Prof. Mag. Dr. Gregor Weihs
Vizerektor für Forschung der Universität Innsbruck

Vorwort Landeshauptmann von Tirol

Anton Mattle



Spitzenforschung aus und für Tirol, die bei uns im Alltag ankommt

Tirol hat keine Rohstoffe wie Öl, Gold oder Diamanten. Wir haben Bildung! Denn das Wissen und Können der Menschen, die bei uns leben, arbeiten und wirken sind unsere wertvollste Ressource. Es ist mir ein besonderes Anliegen, dass das Bundesland Tirol als Bildungs- und Forschungsland wahrgenommen wird und wir gute Rahmenbedingungen für Forschende bieten können.

Auf den ersten Blick erschließt sich uns die enorme Tragweite des Begriffs „Functional Materials Science“ für unseren Alltag gar nicht so leicht. Gleichzeitig ist noch zu wenig bekannt, dass gerade an der Universität Innsbruck der vom Land Tirol geförderte Forschungsschwerpunkt der funktionellen Materialwissenschaften eingerichtet wurde: Materialien aller Art können unter echten Einsatzbedingungen auf mikroskopischer Ebene mittels Röntgen- und UV-Photoelektronenspektroskopie analysiert und optimiert werden. Eine europaweit einzigartige Laborinfrastruktur ermöglicht diese international sichtbare Spitzenforschung.

Unterschiedlichste chemische, physikalische und auch biologische Faktoren legen fest, welche Eigenschaften ein Material hat – transparent oder reflektierend, schwer oder leicht, langlebig oder zerstetbar, Strom leitend oder isolierend. Aber gerade diese Eigenschaften haben Einfluss auf die Verarbeitung und den konkreten Einsatz im Alltag. Der interdisziplinäre, vier Fakultäten umfassende Forschungsschwerpunkt der Universität Innsbruck bedeutet somit auch wirksame Unterstützung der Tiroler Unternehmen, die der Innovationskraft unseres Wirtschaftsstandortes zugutekommt.

In dieser Broschüre lernen Sie jene engagierten Menschen kennen, die diese praxisorientierte Spitzenforschung aus und für Tirol möglich machen!



Ihr
Anton Mattle
Landeshauptmann von Tirol

Anton Mattle
Landeshauptmann von Tirol

Vorwort Wirtschaftskammer Tirol

Barbara Thaler



Mehr als die Summe der Teile

Innovationen und wirtschaftlicher Fortschritt gehen Hand in Hand. Der neu gegründete Forschungsschwerpunkt „Funktionelle Materialwissenschaften“ an der Universität Innsbruck leistet einen bedeutenden Beitrag dazu, Tirol als innovativen und zukunftsfähigen Wirtschaftsstandort zu stärken. Die Verbindung von Spitzenforschung und wirtschaftlichem Nutzen ist essenziell, um Arbeitsplätze in der Region zu sichern, unsere Unternehmen wettbewerbsfähig zu halten und die nachhaltige Entwicklung voranzutreiben.

Die wissenschaftliche Arbeit vor Ort ist von unschätzbarem Wert: Sie verringert die Abhängigkeit von internationalen Wirtschaftsräumen und bietet die Grundlage, Europa wieder zu einem starken Produktionsstandort zu machen. Forschung und Technologie in Tirol sind unverzichtbare Werkzeuge, um der laufenden Deindustrialisierung entgegenzuwirken. Unsere Betriebe verkaufen nicht über den Preis, sondern über die Qualität. Die Erforschung neuer Materialien eröffnet innovative Möglichkeiten für ressourcenschonende Produktion, neue Technologien und hochwertige Produkte – alles Faktoren, die für die wirtschaftliche Zukunft Tirols entscheidend sind.

Das breite Kompetenzspektrum des Schwerpunkts zeigt, dass das Ganze immer mehr ist als die Summe seiner Teile. Auch in der Wirtschaft erweitern Kooperationen die Angebotspalette und führen zu Lösungen, die alleine nicht erreichbar wären. Speziell in technischen Branchen gehören gemeinsame Projekte zum unternehmerischen Alltag. Auch die Verbindung von Forschung und Wirtschaft schafft Synergien, die beiden Seiten zugutekommen und letztlich die Wettbewerbsfähigkeit Tirols stärken.

Als Wirtschaftskammer Tirol fördern wir seit Jahren aktiv die Zusammenarbeit zwischen Wissenschaft und Unternehmen. Beispiele wie der Tiroler Forschungspreis, der Innovationspreis und zahlreiche weitere Initiativen zeigen, wie entscheidend dieses Zusammenspiel für den Standort ist. Der Forschungsschwerpunkt „Funktionelle Materialwissenschaften“ ist eine wichtige Ergänzung dieser Bestrebungen und ein Beweis dafür, dass Tirol ein Ort ist, an dem akademische Exzellenz und Unternehmergeist erfolgreich zusammenfinden. Ich gratuliere der Universität Innsbruck herzlich zu dieser Initiative und wünsche allen beteiligten Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern sowie den Kooperationspartnern aus der Wirtschaft viel Erfolg. Lassen Sie uns gemeinsam daran arbeiten, Tirol als Vorreiter für Innovation und nachhaltige Wirtschaftsentwicklung weiter zu stärken.



Ihre
Barbara Thaler
Präsidentin der Wirtschaftskammer Tirol

Barbara Thaler
Präsidentin der Wirtschaftskammer Tirol

Vorwort Industriellenvereinigung Tirol

DI (FH) Mag. Michael Mairhofer

Dr. Albert Rössler



DI (FH) Mag. Michael Mairhofer
Geschäftsführer Industriellenvereinigung Tirol

Die Gründung des Forschungsschwerpunkts Funktionelle Materialwissenschaften an der Universität Innsbruck ist ein bedeutender Schritt, um den Wissenschaftsstandort Tirol enger mit der heimischen Industrie zu verbinden. Über 50 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus unterschiedlichen Disziplinen bündeln hier ihr Fachwissen, um praxisorientierte Lösungen zu entwickeln, die unseren Industriebetrieben direkt zugutekommen. Diese Zusammenarbeit ermöglicht es, innovative Produkte und Verfahren zu schaffen, die sowohl regional als auch international Maßstäbe setzen. Durch den gezielten Austausch von Know-how entstehen Synergien, die den technologischen Fortschritt vorantreiben und die Position Tirols als führender Industriestandort in Europa weiter festigen. Der Forschungsschwerpunkt stärkt nicht nur die Innovationskraft und erhöht die Wertschöpfung, sondern ist auch der Schlüssel, um die Wettbewerbsfähigkeit des Industriestandorts Tirol nachhaltig zu sichern und langfristig auszubauen. Dieses Projekt verdeutlicht eindrucksvoll, wie erfolgreich die Verbindung von Forschung und Wirtschaft sein kann.

Ihr
DI (FH) Mag. Michael Mairhofer
Geschäftsführer Industriellenvereinigung Tirol

Materialtechnologie hat in der Tiroler Wirtschaft eine große Tradition, ist wesentliche Grundlage unserer modernen Industriegesellschaft und Voraussetzung für Fortschritt in vielen Schlüsseltechnologien wie z.B. der Medizin, der Informations-, Energie- oder Quantentechnologie. Welche exzellenten und leistungsfähigen Materialien dabei in Zukunft unser Leben bestimmen ist offen. Die Universität Innsbruck leistet jedenfalls in vielen ganz unterschiedlichen Forschungsprojekten bereits heute wichtige Pionierarbeit auf der Suche nach den Materialien von morgen. Ein Forschungsschwerpunkt funktionelle Materialien ist dabei die optimale Rahmenbedingung, da Materialwissenschaft ein interdisziplinäres Gebiet darstellt und Zusammenarbeit über Grenzen hinweg erfordert. Innovationen sind Basis für die technologische Souveränität des Forschungs- und Industriestandorts. Wir freuen uns darauf das Kooperations- und Synergiepotential auch bezgl. Forschungsinfrastruktur als anwendungsorientierte Unternehmen wertschöpfend zu nutzen. So wird die angewandte Forschung weiter gestärkt, und innovative Ideen können noch schneller auf den Markt.

Ihr
Dr. Albert Rössler
Geschäftsleitung F & E, Adler-Werk Lackfabrik GmbH & Co KG und Sprecher der F&E Plattform der Industriellenvereinigung Tirol

Vorwort Standortagentur Tirol GmbH

Dr. Marcus Hofer



Im Namen der Standortagentur Tirol möchte ich Ihnen herzlich zum neu gegründeten Forschungsschwerpunkt an der Universität Innsbruck im Bereich der Funktionellen Materialwissenschaften gratulieren. Diese Initiative ist ein wichtiger Meilenstein, um Tirol als innovationsorientierten Wirtschafts- und Wissenschaftsstandort weiterzuentwickeln.

Die funktionellen Materialwissenschaften spielen eine entscheidende Rolle in der modernen Forschung und Entwicklung. Die in diesem Bereich tätigen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus verschiedenen Fakultäten der Universität Innsbruck arbeiten an der Schnittstelle von Chemie, Pharmazie, Physik, Technische Wissenschaften sowie Geo- und Atmosphärenwissenschaften, um die Synergien zwischen diesen Bereichen voll auszuschöpfen. Ihre interdisziplinäre Herangehensweise ermöglicht es, neuartige Materialien und Methoden zu etablieren und bestehende zu optimieren. Diese Entwicklungen sind nicht nur für die Wissenschaft von Bedeutung, sondern haben auch enorme wirtschaftliche Potenziale.

Die Analysemethoden, die im Rahmen des Forschungsschwerpunkts zur Verfügung stehen, bieten zahlreiche Anknüpfungspunkte für Kooperationen mit Tiroler Unternehmen. Hier sehen wir große Chancen für einen Wissensaustausch, der sowohl der Tiroler Wirtschaft als auch der Wissenschaft zugutekommt. Unternehmen können von den neuesten Forschungsergebnissen profitieren, innovative Lösungen entwickeln und somit ihre Wettbewerbsfähigkeit steigern. Gleichzeitig eröffnen sich für Forscherinnen und Forscher wertvolle Möglichkeiten, Einblicke in aktuelle Bedürfnisse und Herausforderungen der Industrie zu erhalten.

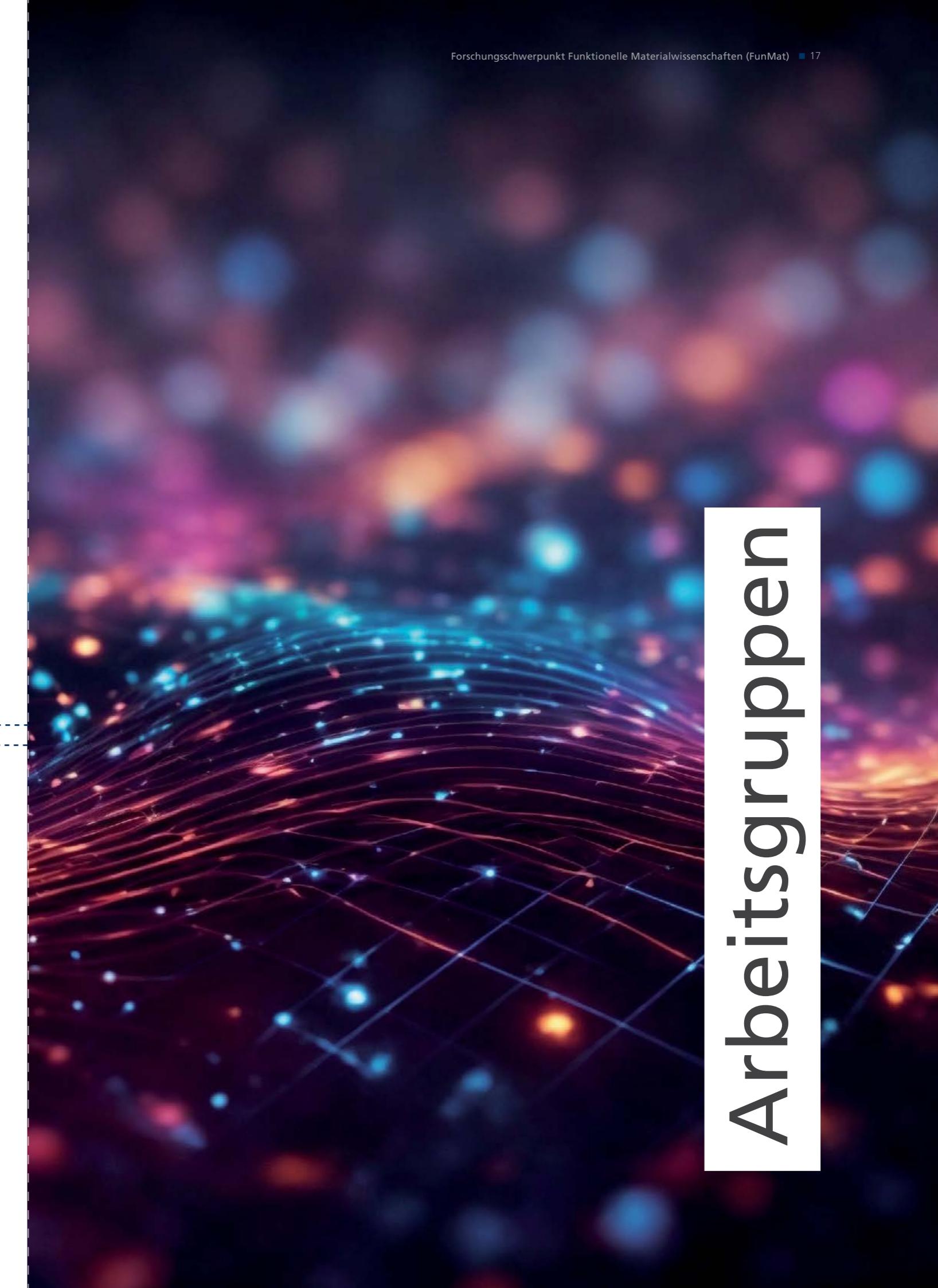
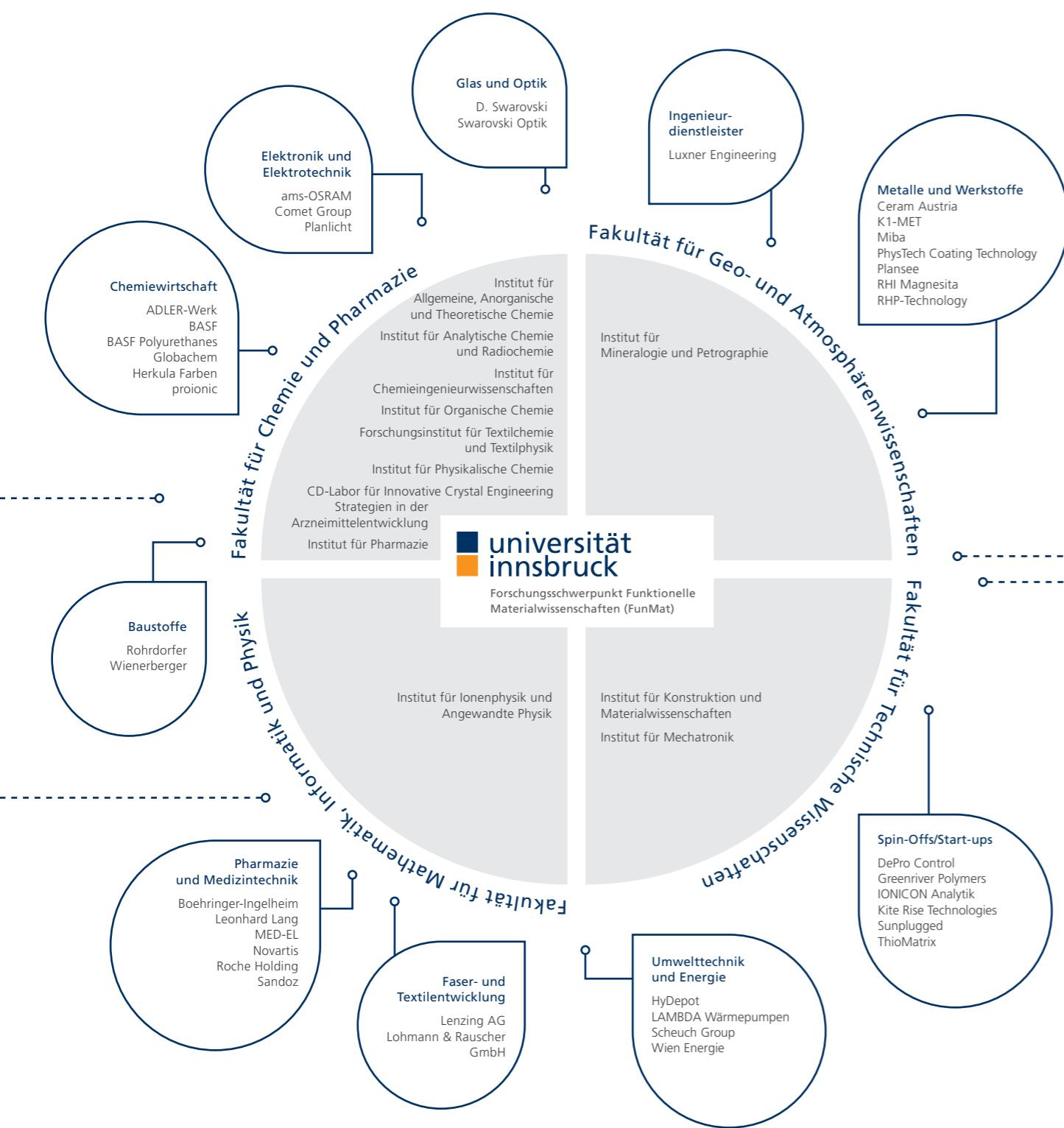
Gemeinsam können wir Verbindungen zwischen Wissenschaft und Wirtschaft stärken und das enorme Potenzial der Materialwissenschaften ausschöpfen.

Ich wünsche viel Erfolg bei der Etablierung dieses Forschungsschwerpunkts und freue mich darauf, hier gemeinsame Aktivitäten zu entwickeln und umzusetzen.

Ihr
Dr. Marcus Hofer
Geschäftsführer Standortagentur Tirol GmbH

Dr. Marcus Hofer
Geschäftsführer Standortagentur Tirol GmbH

Wirtschaftsbeziehungen des Forschungsschwerpunkts Funktionelle Materialwissenschaften (FunMat)



Arbeitsgruppen

Drug Delivery

Univ.-Prof. Mag. Dr.

Andreas Bernkop-Schnürch

**Pharmazeutische Technologie
Institut für Pharmazie**

Innrain 80 – 82/IV
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-58600
E-Mail: andreas.bernkop@uibk.ac.at

[www.uibk.ac.at/pharmazie/
phtech/drugdelivery](http://www.uibk.ac.at/pharmazie/phtech/drugdelivery)



Univ.-Prof. Mag. Dr. Andreas Bernkop-Schnürch

Die Arbeit unserer Forschungsgruppe fokussiert auf neuartige, innovative Arzneimittelverabreichungssysteme, die Wirkstoffe zum Zielort transportieren und so eine nachhaltige Wirkstofffreisetzung sowie eine verbesserte Absorption ermöglichen. Diese vielseitigen Systeme umfassen Oligomere, Polymere, Mizellen oder Lipidnanopartikel.

Viele Arzneimittel müssen unangenehmerweise parenteral verabreicht werden aufgrund ungenügender Verweilzeit am Anwendungsplatz mit einer folglich nicht ausreichend resorbierter Wirkstoffmenge für eine lokale oder systemische Wirkung. Unsere Systeme mit kationischen oder Thiol-Funktionalitäten haften an den Schleimhautschichten der Atemwege, des Magen-Darm-Trakts oder des Fortpflanzungstrakts und immobilisieren das Arzneimittel länger in der Nähe des Wirkorts. Auf zellulärer Ebene zeigen unsere Systeme eine verbesserte zelluläre Aufnahme und eine geringere Ausstoßung der Wirkstoffe aus den Zellen. Mit einer etwas komplexeren Methode, bei der kationische Funktionalitäten mit anionischen Ladungen maskiert werden, können wir die zu frühe Haftung unserer Systeme an den Adhäsionsmembranen verhindern und so stärkere Wechselwirkungen und eine höhere Arzneimittelkonzentration am Zielgewebe.

Die angewandten Arzneimittelverabreichungssysteme könnten neue Wege bei der nichtparenteralen Arzneimittelverabreichung eröffnen, etwa bei der okulären, oralen, bukkalen und nasalen Applikation mit reduzierter Anwendungsmenge und -häufigkeit.

Mukoadhesive Oligomere, Polymere und Nanopartikel

Die nichtparenterale Verabreichung von Medikamenten bietet gegenüber der parenteralen Verabreichung mehrere Vorteile, wie eine einfache und bequeme Anwendung für die Patienten und eine starke lokale Wirkung. Besonders vorteilhaft sind mukoadhesive Applikationssysteme, die engen Kontakt mit der Schleimhaut herstellen und die Verweilzeit der Medikamente verlängern. Ionische Kräfte, Wasserstoffbrücken und die Bildung von Disulfidbrücken zwischen thiolisierten Trägern und cysteinreichen Subdomänen von Schleimglykoproteinen können die Mukoadhäsion fördern und so die Wirksamkeit dieser Systeme steigern. In diesem Projekt konzentrieren wir uns auf die Synthese und Anwendung von kationischen und thiolisierten Nanopartikeln, sowie Oligo- und Polymeren als mukoadhesive Applikationssysteme. Unsere bisherigen Ergebnisse zeigen ein hervorragendes Anwendungspotenzial für diese Systeme bei der nichtparenteralen Verabreichung von Medikamenten, mit verlängerter Verweilzeit in der Schleimhaut und anhaltender Wirkstofffreisetzung.

Oligomere, Polymere und Nanopartikel für verbesserte zelluläre Aufnahme

Ein wichtiger Faktor für eine erfolgreiche Arzneimittelapplikation ist die Internalisierung der Trägersysteme in die Zielzellen. Aufgrund des anionischen Charakters der Zellmembran und oberflächlicher Proteine mit mehreren Thiol-Funktionalitäten, führt die Einführung kationischer oder thiolisierter Einheiten auf Arzneimittelträgern zu einer stärkeren Zellmembranassoziation, und folglich zu einer verbesserten Zellaufnahme. Wir haben bereits mehrere Oligo- und Polymersysteme sowie Nanopartikel mit zahlreichen kationischen und/oder Thiol-Einheiten synthetisiert und auf verschiedenen Zelllinien untersucht. Unsere Experimente zeigen, dass diese modifizierten Trägersysteme in größerem Umfang in die Zellen eindringen können als die nicht modifizierten Analoga. Des Weiteren wirkt die Efflux-Aktivität von Zellmembran-Glykoproteinen der verstärkten Akkumulation von Wirkstoffen in den Zellen entgegen, senkt deren Konzentration am Zielort und führt zu verringerten therapeutischen Ergebnissen und potenzieller Arzneimittelresistenz. Thiolisierte Oligomere zeigten ein hohes Potenzial zur Hemmung eines solchen Effluxes und könnten somit die Bioverfügbarkeit verschiedener Therapeutika verbessern.

Oberflächenladungskonvertierende Nanopartikel

Die polykationische Oberfläche von Nanopartikeln (NPs) zeigt starke Wechselwirkungen mit negativ geladener Schleimhaut und Zellmembranen. Folglich können diese Nanoträger nicht durch die Schleimschicht diffundieren, um die Absorptionsmembran zu erreichen und interagieren zudem unselektiv mit allen Zellen. Im Gegensatz dazu können negativ geladene Nanopartikel in eine tiefe Schleimschicht nahe der Absorptionsmembran eindringen, können jedoch wegen der fehlenden Wechselwirkung aufgrund ihres anionischen Charakters keine Zelluläre Aufnahme auslösen. Ladungsumkehrbare NPs haben aufgrund ihrer dynamischen Oberflächenladung erhebliches Interesse geweckt. Kationische NPs, die mit anionischen Oligo- und Polyphosphaten bedeckt sind, dringen in die tiefe Schleimschicht ein, wo der enzymatische Abbau der Phosphatbeschichtung zu kationischen NPs führt, die eine Schleimhautadhäsion nahe der Absorptionsmembran auslösen. Mit solchen adaptiven mehrschichtigen NPs, die einen Stealth-Effekt, eine geringere Immunogenität und längere Zirkulationszeiten aufweisen, kann außerdem eine selektive und verbesserte zelluläre Aufnahme erreicht werden.

Forschungsprojekte

- Sirnacide: a novel RNAi-based oomicide against *Pviticola*; EUREGIO-Wissenschaftsfond
- CANTREAT Grundlagenforschung – Lokale Tumorbehandlung; Tiroler Innovationsförderung

Publikationen

- Kali et al. (2023). Per-thiolated cyclodextrins: Nanosized drug carriers providing a prolonged gastrointestinal residence time. *Carbohydrate Polymers*, 300, 120275. <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2022.120275>
- Kaplan et al. (2023). Thiolated α -cyclodextrin: The likely smallest drug carrier providing enhanced cellular uptake and endosomal escape. *Carbohydrate Polymers*, 316, 121070. <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2023.121070>
- Knoll et al. (2023). Lipid-based nanoparticles: Enhanced cellular uptake via surface thiolation. *International Journal of Pharmaceutics*, 635, 122753. <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2023.122753>
- Le et al. (2022). Charge-Converting Nanoeulsions as Promising Retinal Drug and Gene Delivery Systems. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 14(39), 44981–44991. <https://doi.org/10.1021/acsami.2c11649>
- Veider et al. (2023). Charge-Reversible Nanoparticles: Advanced Delivery Systems for Therapy and Diagnosis. *Small*, 20(3), e2304713. <https://doi.org/10.1002/smll.202304713>

Instrumente

- Gel-Permeations-Chromatograph (Shimadzu)
- Rheometer (HAAKE Mars)
- HPLC (Hitachi)
- LC-MS (Hitachi)
- Zetasizer (Malvern Instruments)
- Zelllabor

Kooperationen

- Thiomatrix Forschungs- und Beratungs GmbH
- Green River Polymers Forschungs und Entwicklungs GmbH

Chemische Physik

Univ.-Prof. Dr.
Martin K. Beyer

Institut für Ionenphysik und Angewandte Physik

Technikerstraße 25
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-52680
E-Mail: martin.beyer@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/ionen-angewandte-physik/chemphys

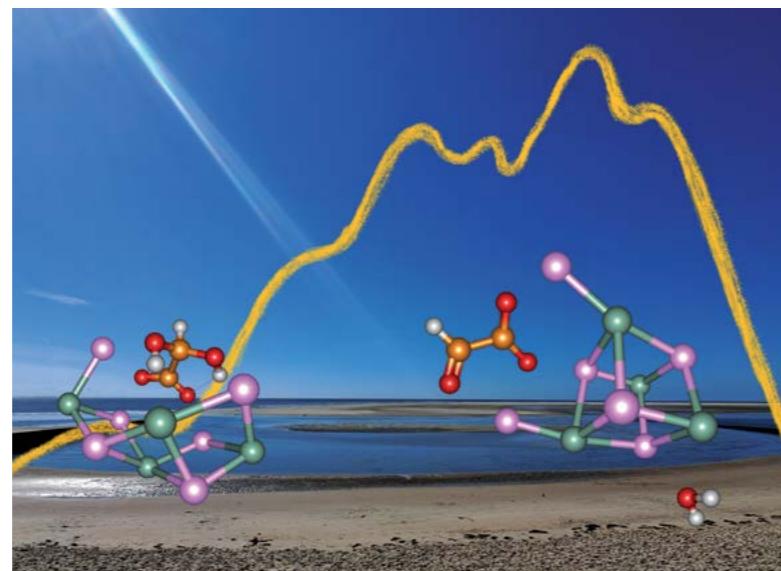


Univ.-Prof. Dr. Martin K. Beyer

Die Arbeitsgruppe Chemische Physik am Institut für Ionenphysik und Angewandte Physik erforscht Mechanismen chemischer Reaktionen unter idealisierten Bedingungen. Für die Experimente verwenden wir hochauflösende Massenspektrometer, um unter Ultrahochvakuumbedingungen isolierte Cluster zu untersuchen. Für die Spektroskopie und Photochemie kommen die Laser der Innsbruck Laser Core Facility zum Einsatz. Mit einem Rasterkraftmikroskop werden chemische Reaktionen in einzelnen Polymermolekülen mechanisch erzwungen. Quantenmechanische Berechnungen erklären die experimentellen Beobachtungen. Mit diesen Methoden untersuchen wir die Natur chemischer Bindungen und erklären vielfältige Phänomene, von der photochemischen Alterung von Seesalzaerosolen in der Atmosphäre über molekulare Katalysatoren und eisenhaltige Moleküle im Weltall bis hin zu polymeren Funktionsmaterialien.

Reaktivität und Photochemie von Clustern

In der Ionenfalle im Ultrahochvakuum eines Massenspektrometers laufen chemische Reaktionen in Zeitlupe ab, weil pro Sekunde nur ca. ein Stoß eines Clusters mit einem Molekül eines Reaktionsgases stattfindet. Dadurch können wir den Ablauf der Reaktion genau verfolgen. Weiters verwenden wir durchstimmbare Laser, um photochemische Reaktionen einzuleiten und um die Struktur der Cluster und ihrer Reaktionsprodukte aufzuklären. Mit diesen Methoden untersuchen wir das Verhalten von Seesalzaerosolen in der Atmosphäre genauso wie die Wasserstoffentwicklung an Metallionen, die in einem Wassercluster gelöst sind, und erhalten Einblick in die fundamentalen Eigenschaften von chemischen Bindungen.



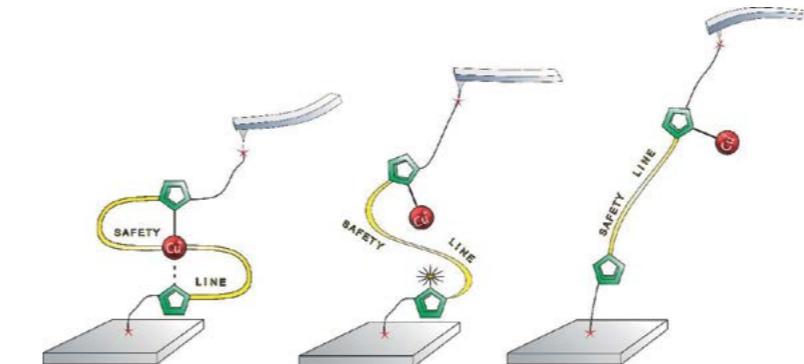
Mit Glyoxylat dotierte Natriumchloridcluster dienen als Modellsystem für Seesalzaerosole in der Erdatmosphäre.

Spektroskopie und Reaktivität von Metallkomplexen in der Astrochemie

Die Chemie des Eisens in interstellaren Wolken hält trotz Jahrzehntelanger Forschung mehr Fragen als Antworten bereit. Im Massenspektrometer können wir die Vakuumbedingungen wie im Weltall simulieren. Wir verdampfen Eisen mit einem kurzen Laserpuls und mischen den Eisendampf in der Ionenquelle mit Gas, um ähnlich wie im Weltall geladene, reaktive Eisenverbindungen herzustellen. Diese schießen wir ins Massenspektrometer ein und untersuchen sie weiter mit Lasern und weiteren Reaktionspartnern. Damit erhalten wir Daten, die man mit astronomischen Beobachtungen vergleichen kann, um im Idealfall Eisenkomplexe in interstellaren Wolken zu identifizieren.

Einzelmolekülkraftspektroskopie von Mechanophoren

Polymere Funktionsmaterialien auf der Basis von Mechanophoren versprechen neuartige Werkstoffeigenschaften, z.B. die Selbstheilung von Bindungsbrüchen oder das Anzeigen einer mechanischen Überlastung durch eine Farbänderung. Wir untersuchen die mechanischen Kräfte, die diese Funktionen auslösen, am einzelnen Molekül. Mit dem Rasterkraftmikroskop wird ein einzelnes Molekül zwischen einer Oberfläche und einer mikroskopisch kleinen Spalte verankert und mechanisch gespannt. Dabei messen wir die Kraft, mit der eine chemische Reaktion, z.B. der Bruch einer chemischen Bindung oder die Aktivierung eines latenten Katalysators, erzwungen wird.



Ein latenter Katalysator wird mechanisch aktiviert: Durch die mechanische Belastung wird eine Bindungsstelle am Kupferion freigelegt. Diese ist Voraussetzung für eine katalytische Reaktion.

Forschungsprojekte

- Reaktivität und Photochemie von dotierten Salzclustern; FWF Projektnummer P35407
- Stabilität, Struktur und Photochemie von Wasserclustern; FWF-Projektnummer PAT3834224

Publikationen

- Jank et al. (2024). Multiconfigurational Character of Repulsive $A^3\Sigma^+$ State Leaves Strong Signature in the Photodissociation Spectrum of Zn_2^+ . *Journal of the American Chemical Society*, 146(24), 16385–16388. <https://doi.org/10.1021/jacs.4c05620>
- Hartmann et al. (2024). Magic Cluster Sizes of Cationic and Anionic Sodium Chloride Clusters Explained by Statistical Modeling of the Complete Phase Space. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 26(14), 10904–10918. <https://doi.org/10.1039/d4cp00357h>
- Juanes et al. (2024). Iron Complexes as Potential Carriers of Diffuse Interstellar Bands: The Photodissociation Spectrum of $Fe^+(H_2O)$ at Optical Wavelengths. *The Journal of Physical Chemistry A*, 128(7), 1306–1312. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.4c00148>
- Ončák et al. (2023). Thermally Activated vs. Photochemical Hydrogen Evolution Reactions—A Tale of Three Metals. *Chemistry – A European Journal*, 29(26), e202203590. <https://doi.org/10.1002/chem.202203590>
- Sammon et al. (2021). Activation of a Copper Biscarbene Mechano-Catalyst Using Single-Molecule Force Spectroscopy Supported by Quantum Chemical Calculations. *Chemistry – A European Journal*, 27(34), 8723–8729. <https://doi.org/10.1002/chem.202100555>

Instrumente

- FT-ICR Massenspektrometer
- Rasterkraftmikroskop
- durchstimmbare Lasersysteme

Kooperationen

- IONICON Analytik GmbH

CD-Labor für Innovative Crystal Engineering

Strategien in der Arzneimittelentwicklung

Ass.-Prof. Priv.-Doz. Dr.
Doris E. Braun

Pharmazeutische Technologie Institut für Pharmazie

Innrain 52c
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-58653
E-Mail: doris.braun@uibk.ac.at

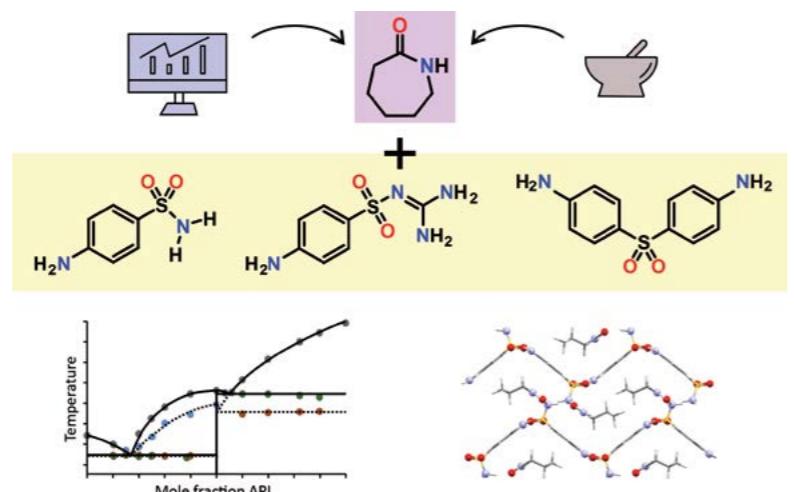
[www.uibk.ac.at/pharmazie/
phtech/polymorphism](http://www.uibk.ac.at/pharmazie/phtech/polymorphism)



Ass.-Prof. Priv.-Doz. Dr. Doris E. Braun



Christian Doppler
Forschungsgesellschaft



Integration virtueller Kokristall-Screening-Methoden in experimentelles Festform-Screening und die Ermittlung physikochemischer Eigenschaften.

Das CD-Labor zielt auf die Erforschung kritischer Stoffeigenschaften von pharmazeutischen Hilfs- und Wirkstoffen ab, die für die Herstellung, Qualität und Sicherheit von hochwertigen Medikamenten entscheidend sind. Eine Optimierung dieser Eigenschaften erlaubt es Herstellungsprozesse zu beschleunigen und letztlich die Kosten von essentiellen Arzneimittelprodukten zu senken.

Die meisten pharmazeutischen Wirkstoffe bestehen aus kleinen Molekülen, die aufgrund ihrer chemischen Stabilität meist in kristalliner Form zu Tabletten verarbeitet werden. Die zunehmende Komplexität moderner Arzneistoffe führt dabei oft zu einer Verschlechterung der Wasserlöslichkeit. Materialwissenschaftliche Ansätze, wie das „Crystal Engineering“, ermöglichen jedoch die Herstellung verschiedener Festformen mit unterschiedlichen pharmazeutisch relevanten Eigenschaften. Ziel ist es, die optimale(n) Form(en) biologisch aktiver Moleküle in Bezug auf Stabilität, Löslichkeit und Verarbeitbarkeit zu finden, um diese zu hochwertigen und marktfähigen Medikamenten zu entwickeln.

Verbesserung der Vorhersagbarkeit von Kokristallen

Virtuelle Screening Methoden können den experimentellen Aufwand und die Entdeckung neuer Feststoffformen erheblich beschleunigen. „Crystal Structure Prediction (CSP)“ gilt zwar als Goldstandard zur Vorhersage von Kristallstrukturen, ist jedoch insbesondere bei Mehrkomponenten-Systemen, wie Kokristallen, sehr zeit- und rechenaufwendig. Daher werden häufig vereinfachte Ansätze eingesetzt, etwa die Analyse molekularer Komplementarität, Wasserstoffbrückenbindungen oder die Berechnung elektrostatischer Potenziale. Diese Methoden bieten jedoch nur begrenzte Vorhersagekraft. Ziel dieses Forschungsschwerpunkts ist es die Ansätze gezielt zu kombinieren und durch einen iterativen Prozess aus *in silico* Vorhersagen, Data Mining und Experimenten die virtuellen Screening Methoden weiterzuentwickeln.

Stabilisierung metastabiler Festformen

Metastabile Festformen spielen eine entscheidende Rolle bei der Verbesserung der Löslichkeit schlecht wasserlöslicher Arzneistoffe. Amorphe feste Dispersionsen haben sich als vielversprechende Methode zur Stabilisierung amorpher Formen etabliert. Durch die Einbettung in eine Matrix und die Kombination mit speziell ausgewählten Additiven wird die Kristallisation verhindert. Darüber hinaus können Partikelbeschichtungen oder Verkapselungen angewendet werden, um die Oberflächen kristalliner metastabiler Festformen zu schützen und Phasenumwandlungen zu vermeiden. Auf diese Weise können metastabile Festformen effektiv in Arzneimitteln genutzt werden.

Vorhersage mechanischer Eigenschaften aus Kristallstrukturen

Die mechanischen Eigenschaften von Festformen sind entscheidend für die Verarbeitung und Formulierung von Wirkstoffen. Ein vertieftes Verständnis der zugrunde liegenden molekularen Wechselwirkungen ermöglicht es, das Verhalten der Festform unter Druck, beim Mahlen oder während der Tablettierung besser zu verstehen. Ziel ist es, den Zusammenhang zwischen mechanischen Eigenschaften, die durch Kompaktierungsanalysen ermittelt werden, und strukturellen Merkmalen zu untersuchen, um letztlich aus strukturellen Daten wichtige mechanische Eigenschaften vorhersagen zu können.

Forschungsprojekte

- Christian Doppler Labor für Innovative Crystal Engineering Strategien in der Arzneimittelentwicklung
<https://www.cdg.ac.at/forschungseinheiten/labor/innovative-crystal-engineering-strategien-in-der-arzneimittelentwicklung>
- Bringing Experiment and Simulation Together in Crystal Structure Prediction (BEST-CSP) COST Action
<https://best-csp.eu/>

Publikationen

- Firaha et al. (2023). Predicting crystal form stability under real-world conditions. *Nature*, 623, 324–328.
<https://doi.org/10.1038/s41586-023-06587-3>
- Braun et al. (2024). Structural Diversity and Stability of Hexamorphic Mavacamten: Experimental and Computational Insights. *Crystal Growth & Design*, 24(20), 8381–8396.
<https://doi.org/10.1021/acs.cgd.4c00889>
- Sudgen et al. (2022). Efficient Screening of Coformers for Active Pharmaceutical Ingredient Cocrystallization. *Crystal Growth & Design*, 22(7), 4513–4527.
<https://doi.org/10.1021/acs.cgd.2c00433>
- Dyba et al. (2023). Metronidazole cocrystal polymorphs with gallic and gentisic acid accessed through slurry, atomization techniques and thermal methods. *Crystal Growth & Design*, 23(11), 8241–8260.
<https://doi.org/10.1021/acs.cgd.3c00951>
- Petrick et al. (2024). Flavone Cocrystals: A Comprehensive Approach Integrating Experimental and Virtual Methods. *Crystal Growth & Design*, 24(10), 4195–4212.
<https://doi.org/10.1021/acs.cgd.4c00293>

Kooperationen

- Sandoz GmbH

Materialwissenschaft in der Denkmalpflege

Dipl.-Ing. Dr.

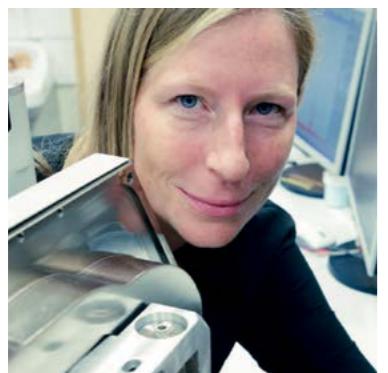
Anja Diekamp

Institut für Konstruktion und Materialwissenschaften

Technikerstraße 13
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-63505
E-Mail: anja.diekamp@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/mti/forschung/ag-denkmalpflege



Dipl.-Ing. Dr. Anja Diekamp

Unsere Aufgabe ist die grundlagenorientierte, materialwissenschaftliche Bearbeitung von Fragestellungen zum Erhalt des materiellen kulturellen Erbes, um auf praxisorientierte Problematiken aus der denkmalpflegerischen Praxis Antworten zu finden. Als AnsprechpartnerInnen und VermittlerInnen für die in der Denkmalpflege arbeitenden Institutionen, RestauratorInnen und HandwerkerInnen ist die Arbeitsgruppe Teil eines transdisziplinären und unübergreifenden Netzwerkes. Eine wesentliche Kernkompetenz ist die analytische Charakterisierung mineralischer Baustoffe und deren Schadensproblematiken, die in aktuellen Forschungsprojekten zu den Themen Dolomitkalk, Stuck, Hochbrandgips, natürlich hydraulische Kalke und frühe Betone ausgebaut wird. Neben der Begleitung von Restaurierungen von Ruinenmauerwerk über Wandmalereien bis hin zu Kachelöfen werden die Themen Dauerhaftigkeit und Analytik von Werkstoffen Studierenden vermittelt.

Materialien des gebauten kulturellen Erbes

Wir arbeiten an der Grundcharakterisierung und der Erforschung von Dauerhaftigkeit und Schadensproblematiken von Materialien des gebauten kulturellen Erbes. Unsere Schwerpunkte sind insbesondere Themen zu (historischen) mineralischen Bindemitteln (natürlich hydraulischer Kalk, Dolomitkalk, Romanzement, Gips, früher Beton), aber auch zu organischen Zugaben in mineralischen Baustoffen, zu Farbpigmenten sowie Lack- und Farbschichten. In einer über 20-jährigen Forschungstätigkeit zur Charakterisierung von Bindemitteln historischer Bauwerke in Tirol und Südtirol wurden die verwendeten Materialien charakterisiert: statt – wie vielfach angenommen reiner Kalkmörtel – finden sich an den Objekten überwiegend natürlich hydraulische Kalke und (z. T. hydraulische) Dolomitkalke als Bindemittel. Der Forschungsschwerpunkt liegt auf dem „Verstehen“ der Rahmenbedingungen für die Herstellung (Rohmaterial, Verarbeitung/Werktechnik), Abbindeprozesse, Interaktion mit Umweltbedingungen und daraus resultierende Vorzüge und/oder Problematiken in Hinblick auf die Dauerhaftigkeit.

Entwicklung von Baustoffen für die Anwendung im denkmalpflegerischen Bereich (NHL-Baukastensystem)



In Kooperation mit RestauratorInnen und der Baustoffindustrie: Entwicklung eines Baukastensystems für Putz und Mauermörtel auf Basis natürlicher hydraulischer Kalke. Anwendung an prominenten Objekten in Tirol (links: Sockelputz Köpflhaus in Höfen, rechts: Kompressenputz und Neuverputz Trautsonhaus in der Innsbrucker Altstadt.)

In Kooperation mit lokalen RestauratorInnen und Baustoffherstellern wurde ein auf natürlich hydraulischem Kalk (NHL) basierendes Baukastensystem für die Restaurierung von Natursteinmauerwerk entwickelt. Eine Grundrezeptur kann für alle wesentlichen Anwendungen (Mauermörtel, Verfugmörtel, Kompressenputz, Putz) durch leichte Abwandlung der Rezeptur angepasst werden. Es wird laufend an den wissenschaftlichen Grundlagen des Systems NHL weitergeforscht.

Schadensproblematiken durch Sulfatbelastungen an Wandmalerei und Stuck

Das Gestein Dolomit fand im Alpenraum eine regional bedeutsame Verwendung in historischen Mörteln und Putzen für Wandmalereien und Stuckdekorationen. In Kombination mit umweltbedingten Sulfatbelastungen und/oder Gips sowie Feuchtigkeit entstehen durch die Bildung von Sulfatsalzen massive Schadensproblematiken durch die Bildung von Sulfatsalzen, die den Bestand des Kulturerbes gefährden. Mit modernen materialanalytischen Methoden im Labor und praxisorientierten Untersuchungen an repräsentativen Objekten werden Schadensphänomene grundlegend erforscht und Empfehlungen für die Konservierungs- und Restaurierungspraxis erarbeitet.



Schäden an Stuck (links: Helblinghaus in der Innsbrucker Altstadt) und Wandmalereien (rechts: Rasterelektronenmikroskopanalyse eines Farbfragments der Malereien am Gasthaus Stern in Oetz) durch Bildung von Gips und Magnesiumsulfat, bedingt durch Umweltbelastungen und/oder ungünstige Materialkombination

Forschungsprojekte

- Strategien der Charakterisierung und Erhaltung des gebauten Kulturerbes im Alpenraum – SaltAR, Interreg VI-A Italia-Österreich 2021–2027: Projekt ITAT-11-027
- Kooperation mit den Tiroler Landesmuseen zur Pigmentcharakterisierung von Gemälden Niederländischer Meister

Publikationen

- Ruegenberg et al. (2022). Assessing the effect of a white Portland cement admixture on the early frost-thaw resistance of NHL-based masonry mortar. *Materials and Structures*, 55(10). <https://doi.org/10.1617/s11527-021-01848-x>
- Diekamp (2021). Dolomit- und natürlich hydraulische Kalkmörtel: Verstehen historischer Bindemittelsysteme und deren Einfluss auf Restaurierungen. *IFS-Berichte*, 62, 81–96.
- Ruegenberg et al. (2021). NHL-based mortars in restoration: Frost-thaw and salt resistance testing methods towards a field related application. *Case Studies in Construction Materials*, 14, e00531. <https://doi.org/10.1016/j.cscm.2021.e00531>
- Bader et al. (2020): DOLOMIA: A survey on the historic and present-day use of dolomite rock as building material in Tyrol, Austria. Siegesmund, S.; Middendorf, B.: *Monument Future. Decay and Conservation of Stone. Proceedings of the 14th International Congress on Deterioration and Conservation of Stone*. Halle: Mitteldeutscher Verlag (mdv), ISBN 978-3-96311-172-3, 1071–1076.
- Diekamp (Hrsg.) (2007): Naturwissenschaft und Denkmalpflege. *innsbruck university press (iup)* ISBN: 978-3-902571-04-5; 296 Seiten, ca. 300 Farabbildungen.

Instrumente

- Geräte des NanoLab Innsbruck (Mikroskopie, Analytik und mechanischen Werkstoffprüfung)
- Details: www.uibk.ac.at/mti/laboratorien/nanolab

Kooperationen

- Bundesdenkmalamt
- Tiroler Landesmuseen
- Lokale RestauratorInnen und Baustoffhersteller

Anorganische Molekülchemie

Univ.-Prof. Dr.

Fabian Dielmann

Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie

Innrain 80 – 82
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-57006
E-Mail: esther.hrobart@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/aatc/ag-dielmann

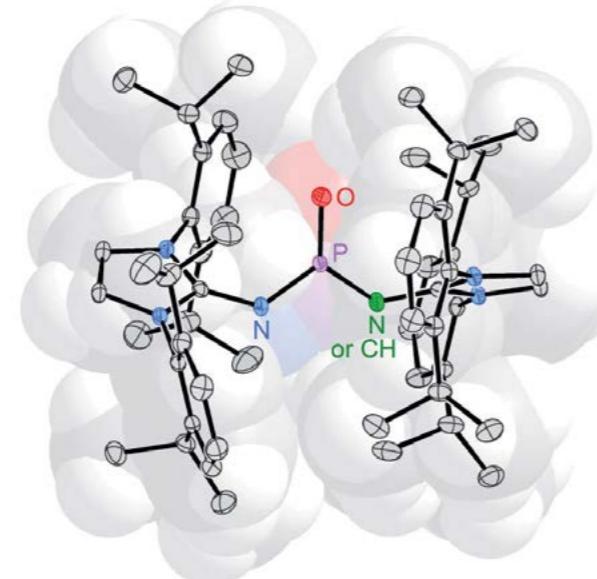
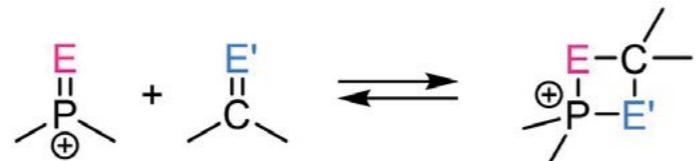


Univ.-Prof. Dr. Fabian Dielmann

Die Forschung in der Arbeitsgruppe Dielmann umfasst verschiedene Themen auf dem Gebiet der anorganischen Molekülchemie und der homogenen Katalyse. Ein übergeordnetes Ziel ist die Entwicklung neuer katalytischer Verfahren zur Umwandlung von besonders reaktionsträgen kleinen Molekülen wie den Treibhausgasen Kohlenstoffdioxid (CO_2) und Schwefelhexafluorid (SF_6) in höherwertige Verbindungen. Für die energieeffiziente und selektive Umwandlung dieser Moleküle entwickeln wir innovative Methoden zur Bindungsaktivierung, synthetisieren reaktive Verbindungen und untersuchen die zugrunde liegenden Mechanismen mit einer Kombination aus experimentellen, spektroskopischen und computerbasierten Methoden.

Hauptgruppenchemie: Von extrem elektronenreichen Phosphanen zu niedrigkoordinierten Ambiphilen

Edelmetallkatalysatoren spielen in zahlreichen chemischen Prozessen eine zentrale Rolle. Ihr Einsatz ist jedoch vor dem Hintergrund der Nachhaltigkeitsbemühungen kritisch zu sehen, da diese Elemente extrem selten sind und mit hohem technischen Aufwand gewonnen werden. Wir entwickeln Katalysatoren auf der Basis von Hauptgruppenelementen, die aufgrund ihres reichlichen Vorkommens in der Erdkruste eine nachhaltige Alternative zu Edelmetallkatalysatoren darstellen. Bei der Entwicklung unserer Katalysatoren nutzen wir gezielt starke Substituenteneffekte zur Steuerung der molekularen Eigenschaften. Zu den aktuellen Projekten gehört die Entwicklung neuer elektronenreicher Phosphane, niedrig koordinierter Phosphorverbindungen und ambiphiler Verbindungen wie Carbene, Nitrene oder geometrisch gespannte Systeme.

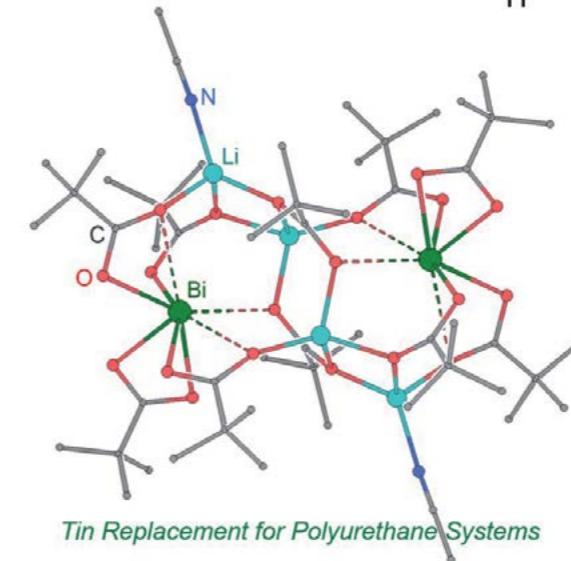


Aktivierung und Valorisierung von Treibhausgasen

Angesichts der Anreicherung von Treibhausgasen in der Atmosphäre ist die Entwicklung neuer Ansätze für ihre effiziente chemische Nutzung von enormer Bedeutung. Unser Forschungsinteresse gilt der Entwicklung einfacher anwendbarer Methoden zur chemischen Aktivierung der Treibhausgase Kohlenstoffdioxid (CO_2) und Schwefelhexafluorid (SF_6) mit dem Ziel, neue katalytische Prozesse für deren Umwandlung in wertvolle Chemikalien und Materialien zu erreichen. Aktuelle Projekte beinhalten die Erforschung von Strategien zur energieeffizienten Aktivierung von CO_2 , darunter die Bildung reversibler Lewis-Basen-Addukte, lichtgetriebener Systeme zur CO_2 -Fixierung und die katalytische Deoxygenierung von CO_2 zu CO . Die Derivatisierung von SF_6 bildet einen weiteren Forschungsschwerpunkt.

Homogene Katalyse: Metallorganische Katalyse, Photokatalyse, Organokatalyse

Die Entwicklung von Katalysatoren zur Steuerung chemischer Reaktionen ist seit jeher von zentraler Bedeutung, wenn es darum geht, auf nachhaltige Weise nützliche Materialien mit wünschenswerten Eigenschaften herzustellen. Das Ligandendesign ist dabei ein wichtiges Instrument, um die Aktivität, Produktivität und Selektivität homogener Katalysatoren zu optimieren. Auf der Grundlage eines innovativen Ligandendesigns entwickeln wir neue Katalysatoren bestehend aus reichlich vorhandenen Metallen mit dem Ziel, bestehende Edelmetallkatalysatoren zu ersetzen. Dabei kommen verschiedene moderne Strategien zum Einsatz wie die Metall-Ligand- und Metall-Metall-Kooperation, sowie redoxaktive und stimuliert gesteuerte Ligandsysteme.



Tin Replacement for Polyurethane Systems

Forschungsprojekte

- Aktivierung und Valorisierung von Schwefelhexafluorid
- Metathesereaktionen mit trigonalen Phosphorkationen

Publikationen

- Mehlmann et al. (2019). Isolation, characterization and reactivity of three-coordinate phosphorus dicitrations isoelectronic to alanes and silylum cations. *Nature Chemistry*, 11(12), 1139–1143. <https://doi.org/10.1038/s41557-019-0348-0>
- Wilm et al. (2021). Photoswitchable Nitrogen Superbases: Using Light for Reversible Carbon Dioxide Capture. *Angewandte Chemie International Edition*, 61(3), e202112344. <https://doi.org/10.1002/anie.202112344>
- Eder et al. (2022). Oxidative Fluorination of Selenium and Tellurium Compounds using a Thermally Stable Phosphonium SF_6 -Salt Accessible from SF_6 . *Angewandte Chemie International Edition*, 61(42), e202209067. <https://doi.org/10.1002/anie.202209067>
- Löwe et al. (2020). Oxaphosphonium-alkyne cycloaddition reactions: reversible formation of 1,2-oxaphosphoranes and six-membered phosphorus heterocycles. *Journal of the American Chemical Society*, 142(21), 9818–9826. <https://doi.org/10.1021/jacs.0c03494>
- Buß et al. (2018). Nucleophilic Activation of Sulfur Hexafluoride: Metal-Free, Selective Degradation by Phosphines. *Angewandte Chemie International Edition*, 57(18), 4951–4955. <https://doi.org/10.1002/anie.201713206>

Kooperationen

- BASF SE
- BASF Polyurethanes GmbH

Präformulierung und Polymorphie

ao. Univ.-Prof. Mag. Dr.
Ulrich Griesser

**Pharmazeutische Technologie
Institut für Pharmazie**

Innrain 52c
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-58650
E-Mail: ulrich.griesser@uibk.ac.at

[www.uibk.ac.at/pharmazie/
phtech/polymorphism](http://www.uibk.ac.at/pharmazie/phtech/polymorphism)



ao. Univ.-Prof. Mag. Dr. Ulrich Griesser

Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit materialwissenschaftlichen Aspekten von Arznei- und Hilfsstoffen und deren Auswirkungen auf die Herstellung und Qualität von Darreichungsformen. Diese unter dem Begriff Präformulierung zusammengefassten Forschungs- und Entwicklungsschritte bilden die Basis der modernen Arzneimittelerstellung und ermöglichen einerseits die rationelle Planung von Herstellungsprozessen von Medikamenten und andererseits eine Optimierung von Wirkstoffeigenschaften hinsichtlich ihrer Stabilität, Sicherheit und Wirksamkeit. Im Vordergrund steht dabei die Erfassung fundierter wissenschaftlicher Informationen von kleinen Wirkstoffmolekülen, die den Großteil aller Arzneiprodukte ausmachen und im festen, meist kristallinen Zustand verarbeitet werden. Dazu sind eine Reihe von Untersuchungen des Wirkstoffs notwendig um die physikalisch-chemischen sowie strukturellen Eigenschaften des Wirkstoffs zu verstehen und deren Einfluss auf die spätere Darreichungsform vorherzusagen.

Auffindung und Charakterisierung von Festkörperperformen von Arznei- und Hilfsstoffen – Polymorphie, Solvate und Kokristalle

Die umfassende experimentelle Charakterisierung von Festkörpereigenschaften und -phänomenen bildet die Grundlage für innovative Optimierungsstrategien und neue Erkenntnisse, die für den gesamten Prozess der Medikamentenentwicklung entscheidend sind. Hierzu sind umfassende systematische Untersuchungen und eine geeignete Analysenmethodik erforderlich. Im Vordergrund stehen dabei Kristallisationsexperimente aus Lösungsmitteln, der Schmelze oder der Gasphase, wobei bei nahezu allen Wirkstoffen neue polymorphe Formen mit gleicher Zusammensetzung, aber unterschiedlicher Kristallstruktur oder Addukte mit Lösungsmitteln entdeckt werden. Die Auswahl der für eine Weiterentwicklung geeigneten Festform oder die Planung von Strategien zur Verbesserung der Löslichkeit und Stabilität sowie von Verarbeitungseigenschaften basiert auf den experimentellen Daten und werden durch computerunterstützte Methoden ergänzt. Eine erfolgreiche Strategie dabei ist auch die Herstellung von Kokristallen, wobei der Wirkstoff mit einem biologisch inaktiven Hilfsstoff zu einer neuen Kristallform mit beispielweise besseren Lösungseigenschaften vereint wird.



Feuchteinteraktionen und Hydratbildung von Arznei- und Hilfsstoffen

Viele Arzneistoffe bilden Hydrate, das heißt, sie können Wasser in ihre Kristallstruktur einbauen, wobei dieses mehr oder weniger stark gebunden sein kann. Wird das Wasser durch Trocknungsprozesse entfernt, verändern sich die physikalischen Eigenschaften (z. B. die Wasserlöslichkeit) und häufig auch die chemische Stabilität des Wirkstoffs. Daher ist die Charakterisierung und Kontrolle der Hydratbildung heute ein wesentlicher Bestandteil der pharmazeutischen Produktentwicklung. Die Arbeitsgruppe hat sich hier insbesondere auf die Methodenentwicklung zur Untersuchung von Wasser-Feststoffwechselwirkungen spezialisiert sowie der Aufklärung von strukturellen und thermodynamischen Grundlagen der Hydratbildung.

Entwicklung von schnell konsolidierenden Hilfsstoffen als neuartiges Konzept für die Herstellung fester Arzneiformen

Die meisten Arzneistoffe werden durch Anwendung von Druck zu Tabletten verarbeitet. In den letzten Jahrzehnten stehen jedoch zunehmend 3D-Drucktechnologien als potenzielle Alternative zur Tablettenherstellung im Fokus der Forschung. Ein Beitrag unserer Arbeitsgruppe ist die Entwicklung pharmazeutischer Hilfsstoffe, die sich ohne Druck allein durch Zugabe weniger Tropfen Wasser verfestigen. Diese Art „wasserlöslichen Gipses“ ermöglicht sowohl eine deutlich schnellere Herstellung von Tabletten mittels 3D-Pulverdruck als auch die drucklose Produktion von Arzneiformlingen direkt in Blisterpackungen.

Forschungsprojekte

- Individualised, Multiple-Unit Based Polypill, VASCAge COMET-Zentrum
- Crystal Engineering and Formulation Studies of Agrochemical Agents

Publikationen

- Gelbrich et al. (2023). Cocrystal of Codeine and Cyclopentobarbital. *Molbank*, 3, M1722. <https://doi.org/10.3390/M1722>
- Griesser et al. (2020). Fast consolidating compounds. US Patent App. 17/640,707.
- Schinke et al. (2022) Crystal structure, PIXEL calculations of intermolecular interaction energies and solid-state characterization of the herbicide isoxafluole. *Acta Crystallographica Section E Crystallographic Communications*, 78(10), 979–983. <https://doi.org/10.1107/S2056989022008647>
- Braun et al. (2021). Expanding the Solid Form Landscape of Bipyridines. *Crystal Growth & Design*, 21(12), 7201–7217. <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.1c01045>
- Edkins et al. (2019.) Extensive Sequential Polymorphic Interconversion in the Solid State: Two Hydrates and Ten Anhydrous Phases of Hexamidine Diisethionate. *Crystal Growth & Design*, 19(12), 7280–7289. <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.9b01170>

Kooperationen

- Sandoz GmbH
- Globachem

Instrumente

- Digital Microscope, VHX-7000 (Keyence)
- SPS11-10 μ – Feuchtesorptionsprüfgerät (ProUmid)
- X'PertPro Pulverröntgendiffraktometer (Panalytical) für Transmissionsmessungen (X-Y Stage mit Wellplate oder Feuchtestage)

Festkörperchemie, AG Heymann

assoz. Prof. Dr.

Gunter Heymann

Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie

Innrain 80 – 82
6020 Innsbruck

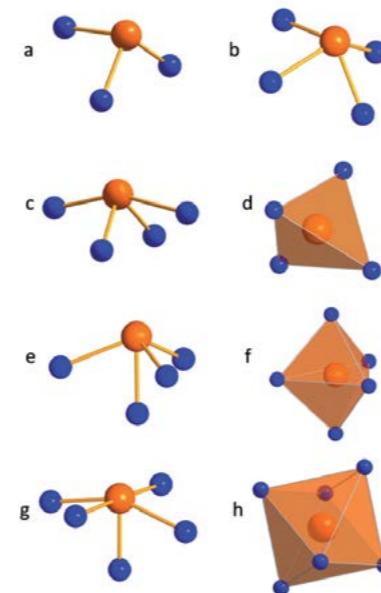
Telefon: +43 512 507-57003
E-Mail: gunter.heymann@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/aatc/ag-heymann



assoz. Prof. Dr. Gunter Heymann

In meiner Forschungsgruppe beschäftigen wir uns mit der Synthese von Tellurat-Materialien. Dabei handelt es sich um Salze der Tellursäure H_6TeO_6 oder der Tellurigen Säure H_2TeO_3 . Das Telluratom hat in diesen Verbindungen entweder die Oxidationsstufe +VI oder +IV. Darüber hinaus weist das Telluratom eine hohe Flexibilität in seiner Koordinationsumgebung auf, was diese Verbindungen strukturell äußerst interessant macht. Wie die Grafik zeigt, kann Tellur in verschiedenster Art und Weise von Sauerstoffatomen umgeben sein. Uns interessieren dann strukturelle Veränderungen und damit verbundene Änderungen der physikalischen Eigenschaften, die mittels Variation des zusätzlichen Syntheseparameters Druck erreicht werden können.



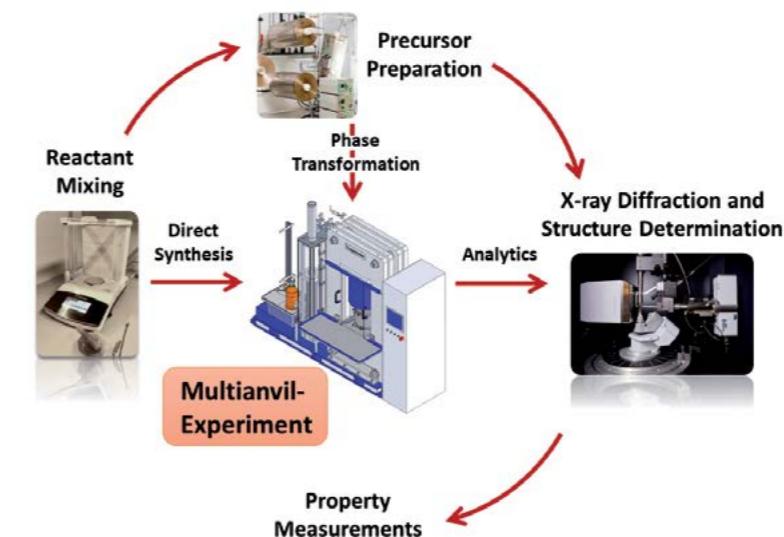
Der Fokus liegt dabei auf der speziellen Synthesemethode, der Multianvil-Hochdruck-Hochtemperatursynthese, der Aufklärung der Kristallstruktur mit Röntgenmethoden und insbesondere der Eigenschaften, die diese neuen Materialien zeigen. Übergangsmetalltellurate zeigen oft multiferroische Phänomene, d. h. mehrere gleichzeitig auftretende Ordnungszustände wie Ferromagnetismus zusätzlich zu Ferroelektrizität oder Piezoelektrizität, die durch Änderungen des magnetischen oder elektrischen Feldes beeinflusst werden können. Andere Materialien sind hochinteressant im Hinblick auf ihre nichtlinearen optischen Eigenschaften. Auf dem Gebiet der Alkalimetalltellurate sind die Lithium- oder Natriumionen Leitfähigkeiten für uns von besonderem Interesse.



Hochdrucklabor

Multianvil Hochdruck-/Hochtemperatursynthese von neuen Tellurat Materialien

Im Rahmen des FWF Projektes „Innovative Synthesestrategien für die Entwicklung neuer Hochdruck-Oxotelluratverbindungen“ sind wir vernetzt mit Arbeitsgruppen aus Deutschland und Österreich, mit Hilfe derer wir Eigenschaftsuntersuchungen an potentiell interessanten Telluratmaterialien durchführen.



Forschungsprojekte

- Innovative neue Hochdruck Oxotellurat-Verbindungen; FWF Projektnummer: P 35602

Publikationen

- Ziegler et al. (2024). Single-crystal structure and theoretical calculations of the second ternary tellurium borate $Te_2B_2O_7$. *Journal Of Solid State Chemistry*, 330, 124458. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2023.124458>
- Ziegler et al. (2023). First ternary tungsten tellurate(iv) WTe_2O_7 with unique crystal structure type. *Dalton Transactions*, 52(8), 2243–2254. <https://doi.org/10.1039/d2dt03419k>
- Selb et al. (2021). Multianvil high-pressure/high-temperature synthesis and characterization of magnetoelectric HP- Co_3TeO_6 . *Journal Of Materials Chemistry C*, 9(16), 5486–5496. <https://doi.org/10.1039/d0tc05210h>
- Ziegler et al. (2021). Single-Crystal Structure of HP- Sc_2TeO_6 Prepared by High-Pressure/High-Temperature Synthesis. *Crystals*, 11(12), 1554. <https://doi.org/10.3390/cryst11121554>

Fortgeschrittene Quantenchemie und theoretische Materialwissenschaften

assoz. Prof. Dr.

Thomas Hofer

Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie

Innrain 80 – 82
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-57111
E-Mail: t.hofer@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/aatc/ag-hofer



assoz. Prof. Dr. Thomas Hofer

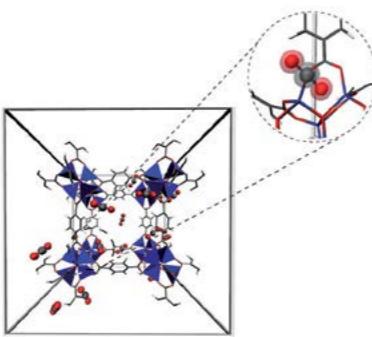
Computergestützte Methoden sind unverzichtbare Werkzeuge in der modernen Chemie und Materialforschung, da sie eine Reihe von Vorteilen im Forschungsalltag bieten. Die computergestützte Chemie ermöglicht die Simulation komplexer chemischer Prozesse und des Verhaltens molekularer Systeme, die experimentell oft nur schwer oder gar nicht zu untersuchen sind. Quantenchemische Methoden liefern darüber hinaus detaillierte Informationen über die elektronische Struktur und die Eigenschaften von Molekülen und Materialien auf atomarer Ebene. Mit Hilfe dieser Verfahren lässt sich eine große Anzahl chemischer Verbindungen und Materialien effektiv und zeitsparend untersuchen, wodurch in vielen Fällen teure und zeitaufwändige experimentelle Versuche vermieden werden können. Die vielversprechendsten Kandidaten können dann von den experimentellen Arbeitsgruppen im Labor weiter untersucht werden.

Computerunterstützte Materialwissenschaften

Die Entwicklung neuartiger, computergestützter Methoden in den Materialwissenschaften ist ein aktives Forschungsthema der Arbeitsgruppe. Schlüsseltechniken wie die Dichtefunktionaltheorie (DFT) und die Molekulardynamik (MD) bilden die Grundlage für diesen Bereich. DFT ermöglicht die quantenmechanische Modellierung elektronischer Eigenschaften, während MD-Simulationen Einblicke in die physikalischen Bewegungen von Atomen und Molekülen liefern. Die Kombination dieser beiden Methoden ermöglicht detaillierte Computersimulationen von Molekülen und Festkörpern, die Informationen über strukturelle, dynamische und thermodynamische Eigenschaften liefern.

Struktur, Dynamik und Thermodynamik von Funktionsmaterialien

Metallorganische Gerüsteverbindungen und andere Funktionsmaterialien haben einzigartige physikalische und chemische Eigenschaften, die ihnen besondere Fähigkeiten verleihen. Diese Materialien kombinieren die geordnete Struktur eines Kristalls mit der Flexibilität und Bewegung einer Flüssigkeit. Sie können molekulare Schalter und Maschinen enthalten, die es dem Material ermöglichen, auf äußere Reize zu reagieren. Das Verständnis der Beziehungen zwischen der Struktur, der Dynamik und der Thermodynamik dieser Materialien ist der Schlüssel zur Entwicklung neuer funktioneller Materialien für Anwendungen. Die Erforschung dieser komplexen Verbindungen erfordert einen

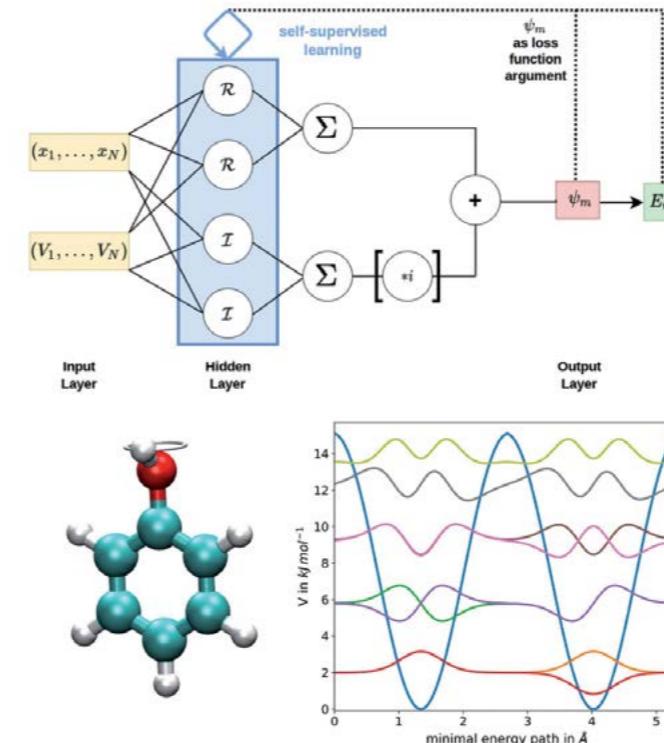


Speicherung des klimaschädigenden Gases Kohlendioxid (CO_2) in der metall-organischen Gerüstebindung MOF-5. Die Interaktion zwischen den CO_2 -Gastmolekülen und dem Speichermaterial kann effizient und genau mit Hilfe computergestützter Methoden modelliert werden (Quelle: R. V. Listyarini et al. *J. Phys. Chem. B* 127 (2023) 9378 – 9389 doi: 10.1021/acs.jpcb.3c04155; CC-BY 4.0)

interdisziplinären Ansatz, der Chemie, Physik, Materialwissenschaft und Computermodellierung miteinander verbindet. Mit den Fortschritten auf diesem Gebiet werden neue funktionelle Materialien mit innovativen Eigenschaften und Verwendungen möglich.

Maschinelles Lernen in Quantenchemie und Materialwissenschaften

Maschinelles Lernen (ML) ist ein modernes und leistungsfähiges Werkzeug, das die Quantenchemie und die Materialwissenschaften revolutioniert. Durch die Entwicklung von Algorithmen auf Grundlage großer Datensets können Materialeigenschaften effizient und mit hoher Geschwindigkeit vorhergesagt werden. Mit den Modellen des maschinellen Lernens kann beispielsweise die Energie von Molekülen errechnet werden, was wesentlich zum Verständnis chemischer Reaktionen beiträgt. Die Integration des maschinellen Lernens mit traditionellen Berechnungsmethoden wie der Quantenmechanik ermöglicht einen synergetischen Ansatz, der die Stärken beider Techniken kombiniert. Da ML-basierte Algorithmen ständig verbessert werden, ist bereits in der nahen Zukunft mit Durchbrüchen beim Design und der Entwicklung neuer funktionaler Materialien zu rechnen.



Aufbau eines physik-informierten neuronalen Netzwerks (PINN) zur Lösung der Schrödinger-Gleichung (oben). Beschreibung eines quantenmechanischen Tunneleffekts am Beispiel der OH-Torsionsmode im Phenolmolekül (unten). (Quelle: J. Gamper, F. Klubenschedl et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 24 (2022) 25191 – 25202 doi: 10.1039/D2CP03921D; CC BY 3.0.)

Forschungsprojekte

- Fortgeschrittene Simulationsverfahren für Gas@Host; FWF-Projektnummer: P35427
- Mechanismen des unkatalysierten SiC Mikrofaserwachstums (Co-Antragsteller); FWF-Projektnummer: P34233
- DYSPHOM – Methods for the Dynamic & Structural analysis of Photoswitches@MOF (Co-Antragsteller); FWF Projektnummer I6735

Publikationen

- Neue Wege in der Materialentwicklung. *zukunft forschung*, 01/23, 16–17
<https://www.yumpu.com/de/document/read/68246645/zukunft-forschung-01-2023>
- Hofer et al. (2023). Beyond the Status Quo: Density Functional Tight Binding and Neural Network Potentials as a Versatile Simulation Strategy to Characterize Host–Guest Interactions in Metal- and Covalent Organic Frameworks. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 14(26), 6018–6027.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.3c00941>
- Kriesche et al. (2023). Storage and diffusion of CO_2 in covalent organic frameworks – A neural network-based molecular dynamics simulation approach. *Frontiers in Chemistry*, 11.
<https://doi.org/10.3389/fchem.2023.1100210>
- Gamper et al. (2022). From vibrational spectroscopy and quantum tunnelling to periodic band structures – a self-supervised, all-purpose neural network approach to general quantum problems. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 24(41), 25191–25202.
<https://doi.org/10.1039/d2cp03921d>
- Gamper et al. (2024). A General Strategy for Improving the Performance of PINNs – Analytical Gradients and Advanced Optimizers in the NeuralSchrödinger Framework. *Artificial Intelligence in Chemistry*, 2(1), 100047.
<https://doi.org/10.1016/j.aichem.2024.100047>

Nachhaltige Chemie im gesamten Periodensystem

assoz. Prof. Dr.

Stephan Hohloch

Institut für Allgemeine,
Anorganische und
Theoretische Chemie

Innrain 80 – 82
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-57035
E-Mail: Stephan.Hohloch@uibk.ac.at

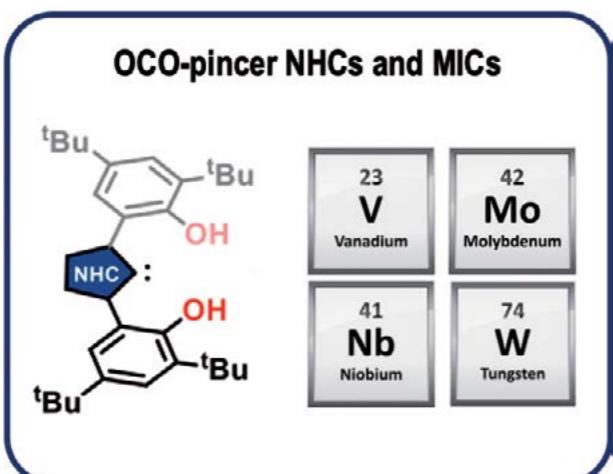
www.uibk.ac.at/aatc/ag-hohloch



assoz. Prof. Dr. Stephan Hohloch

Die Hohloch-Gruppe konzentriert sich auf die Verwendung von frühen Übergangs- und f-Block-Metallen in nachhaltigen und umweltfreundlichen Anwendungen. Diese reichen von der Verwendung dieser Elemente in molekularem Magnetismus, nachhaltiger Katalyse oder der Aktivierung von ansonsten inerten kleinen Molekülen wie N_2 , CO_2 und H_2 . Ein weiterer Schwerpunkt der Gruppe ist die Erforschung der allgemeinen Reaktivität von schweren Cyanaten der allgemeinen Formel $[ChCPn]^-$ (Ch = Chalcogen, O, S, Se und Pn = Pnictogen, N, P, As). Das übergeordnete Ziel der Forschung ist es, neue Methoden und Wege zu finden, um diese Bausteine für die Synthese von Grundstoffen für die chemische Industrie sowie von Spezialchemikalien mit potenziellen medizinischen Anwendungen zu nutzen/verfügbar zu machen.

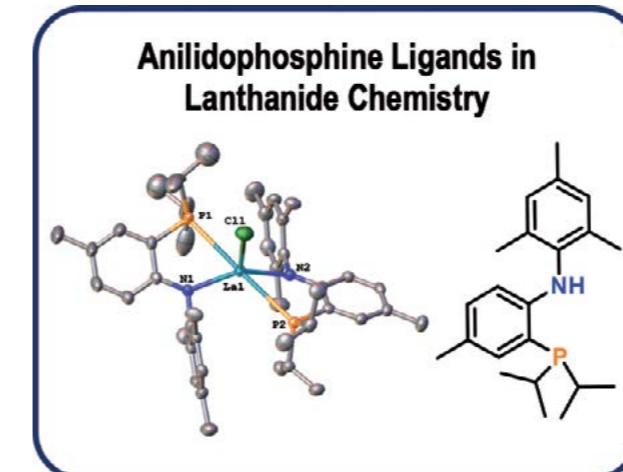
Katalyse der frühen Übergangsmetalle



Frühe Übergangsmetallchemie auf der Grundlage von chelatbildenden OCO-Pincer-NHC- und MIC-Liganden.

Das Projekt zielt auf den Einsatz früher Übergangsmetalle in chemischen Prozessen und in der Katalyse ab. Forschungsschwerpunkte sind die Verringerung der Katalysatorladung in katalytischen Reaktionen sowie die Entdeckung neuer Reaktivitätsmodi unter Verwendung umweltfreundlicher Metalle, insbesondere der Gruppe VI, Molybdän und Wolfram sowie der Gruppe V, Vanadium, Niob und Tantal. Um diese Ziele zu erreichen, entwickeln wir neue N-heterozyklische und mesoionische Carbenliganden mit einzigartigen elektronischen und sterischen Eigenschaften mit anionischen Ankern, die eine flexible und dennoch stabile Koordination des Carbens mit dem frühen Übergangsmetallzentrum erlauben.

Lanthanid-Anilidophosphin-Komplexe



Typischer zweizähniger, monoanionischer PN-Ligand und sein Lanthankomplex.

Obwohl die Chemie der Lanthanoide seit Jahrzehnten erforscht wird, konzentrieren sich die meisten Studien immer noch auf die Verwendung des allgegenwärtigen Cyclopentadien-Liganden (C_5R_5), während andere Ligandenklassen bisher eher vernachlässigt wurden. So wurden z.B. chelatisierende PN(P) Anilidophosphane, welche im restlichen Periodensystem bereits ubiquitär und sehr erfolgreich angewendet werden, in der Chemie der f-Elemente jedoch nur spärlich untersucht.

Unser Ziel ist es, neue, robuste Lanthanoidkomplexe mit diesen Liganden zu entwickeln und ihre Reaktivität sowie ihre elektrochemischen und spektroskopischen Eigenschaften zu untersuchen. Jüngste Höhepunkte waren die Entdeckung einer lichtinduzierten Bildung von P-P-Bindungen oder die Synthese eines verbrückenden Lanthan-Phosphiniden-Komplexes.

Chemie der schweren Cyanate

Während die Chemie der Cyanate seit fast zwei Jahrhunderten bekannt ist, ist die Verwendung schwerer Cyanate über das Phosphaethynolat-Anion ($[OCP^-]$) hinaus praktisch unerforscht. Um diese Lücke zu schließen, konzentrieren wir uns insbesondere auf die Koordinationschemie schwerer Cyanate mit der allgemeinen Formel $[PnCCh]^-$ (Pn = Pnictogen Atom (P and As) und Ch = Chalcogen Atom (O, S und Se)). Wir studieren die Koordinationschemie dieser schweren Cyanate im gesamten Periodensystem, um neue Reaktivitätsmuster zur Synthes neuer Heterozyklen, oder (organischer) Bausteine zu finden. Zu den jüngsten Höhepunkten gehören die Isolierung eines schweren Fulminat-Anions $[SPC^-]$ und die selektive $[3+2]$ -Cycloadditionsreaktion solcher Cyanate. Letztere liefert neue und bisher synthetisch unzugängliche Heterocyclen mit faszinierenden Eigenschaften für die Koordinationschemie und für mögliche medizinische Anwendungen.

Forschungsprojekte

- NHC-Komplexe der Gruppe VI mit Oxo- und Nitridliganden (SixMICs); FWF-Projektnummer P 34626

Publikationen

- Wittwer et al. (2024). A bridging Bis-Phosphinidene complex of lanthanum supported by a sterically encumbering PN ligand. *Chemical Communications*, 60(57), 7299–7302. <https://doi.org/10.1039/d4cc02244k>
- Wittwer et al. (2022). A mesoionic carbene complex of manganese in five oxidation states. *Chemical Communications*, 58(41), 6096–6099. <https://doi.org/10.1039/d2cc00097k>
- Neururer et al. (2021). Mesoionic carbenes in low- to High-Valent vanadium chemistry. *Inorganic Chemistry*, 60(20), 15421–15434. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.1c02087>
- Watt et al. (2021). η^3 -Coordination and functionalization of the 2-Phosphaethynoliate anion at Lanthanum(III). *Angewandte Chemie*, 60(17), 9534–9539. <https://doi.org/10.1002/anie.202100559>
- Pinter et al. (2021). Bright luminescent lithium and magnesium carbene complexes. *Chemical Science*, 12(21), 7401–7410. <https://doi.org/10.1039/d1sc00846c>

Instrumente

- UV-Vis-NIR Spektrometer (350 – 1700 nm) mit CMOS Detektor (Avantes)
- EPR Spektrometer (Magnettech 5000)

Analytische Chemie

Univ.-Prof. Mag. Dr.
Christian Huck

Institut für Analytische Chemie und Radiochemie

Innrain 80 – 82
6020 Innsbruck

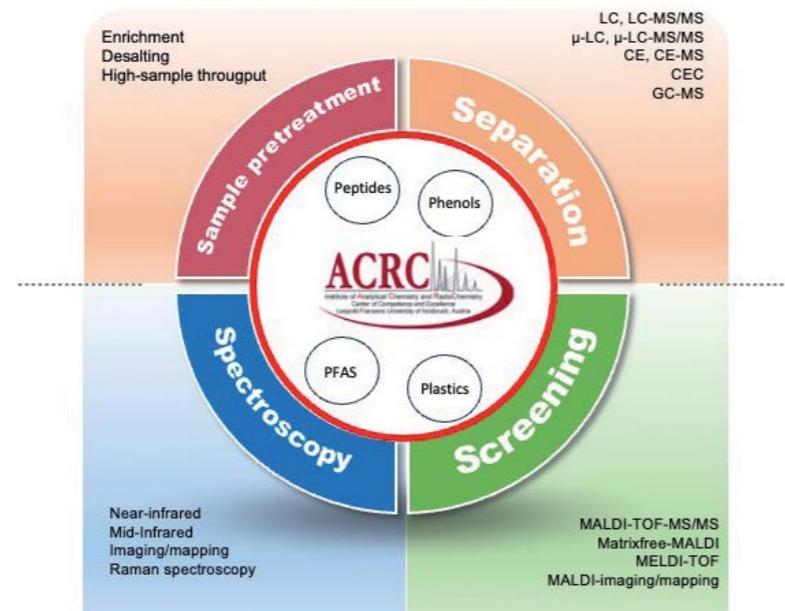
Telefon: +43 512 507-57300
E-Mail: christian.w.huck@uibk.ac.at

[www.uibk.ac.at/acrc/
mitarbeiterinnen/huck/](http://www.uibk.ac.at/acrc/mitarbeiterinnen/huck/)



Univ.-Prof. Mag. Dr. Christian Huck

Synthese und analytische Charakterisierung von innovativen Materialien: Zusätzlich zur Entwicklung von neuen Materialien für verschiedenste Bereiche zählt die Entwicklung von neuen Methoden zur Bestimmung der physikalischen und chemischen Eigenschaften zu unserem Forschungsgebiet. Der Schwerpunkt wird dabei auf nicht-invasive Messtechniken gelegt, welche eine sehr schnelle und simultane Bestimmung einer Vielzahl an Parametern erlaubt. Die Methodenentwicklung kann für die Routine im Sinne eines adäquaten Kalibrier- und Validierverfahrens leistungsstark angepasst werden. Dadurch kann in vielen Fällen eine aufwendige Routineanalytik durch neuartige leistungsstärkere Ansätze ersetzt werden.



Entwicklung von neuen Materialien

Ziel ist die Entwicklung von neuen Materialien zur selektiven Probenaufbereitung und -Trennung. Dabei werden zum einen neue Festphasenmaterialien (SPE) für die selektive und sensitive Aufkonzentrierung, zum anderen für die Fraktionierung von Proben und deren Inhaltsstoffe aus einer komplexen Matrix hergestellt.

Charakterisierung mithilfe neuer Analysenmethoden

Ziel ist die Entwicklung von neuen Analysenverfahren, welche eine schnelle, nicht-invasive und simultane Bestimmung von physiko-chemischen Materialeigenschaften erlauben. Besonderes Augenmerk wird auf die Anwendbarkeit der Methoden für die Routine gelegt, so zum Beispiel durch die Etablierung von portablen Messsystemen.

Die Schwingungsspektroskopie, insbesondere die Infrarot- (IR), Nah-Infrarot- (NIR) und Raman-Spektroskopie, ist eine zentrale Methode zur Charakterisierung chemischer und physikalischer Materialeigenschaften. Diese Techniken liefern molekulare Fingerabdrücke und ermöglichen die Analyse von Zusammensetzung, Struktur und Wechselwirkungen in Materialien. Die Anwendung reicht von der Grundlagenforschung bis zur industriellen Qualitätskontrolle und bietet detaillierte Einblicke in die Struktur und Funktion von Materialien.

Die Vorteile der Schwingungsspektroskopie sind zerstörungsfreie Messung (Erhaltung der Materialstruktur und -eigenschaften), Schnelligkeit (schnelle Analyse ohne aufwändige Probenvorbereitung), Flexibilität (Untersuchung von Feststoffen, Flüssigkeiten und Gasen) und die Möglichkeit zur Kombination mit anderen Methoden (Integration in Mikroskopie, Raman-Mikroskopie oder Thermoanalyse).

Beispiele aus der Praxis sind die chemische (Monomerzusammensetzung und Vernetzungsgrad) und physikalische (Kristallinität und Phasenseparation) Untersuchung von Polymeren, Halbleitern (chemischer Nachweis von Dotierungselementen; physikalische Analyse von Gitterspannungen und Defekten) und Biomaterialien (chemische Bestimmung von Proteinen, Lipiden und Kohlenhydraten; physikalisch: Feuchtigkeitsgehalt und Materialstruktur).

Implementierung von neuen Materialien für spezifische Anwendungen

Neu entwickelte und charakterisierte Materialien werden einer gezielten Anwendung zugeführt. So zum Beispiel können diese für das selektive Herausfischen von PFAS (perfluorierte aromatische Systeme) im Umweltbereich erfolgreich eingesetzt werden.

Forschungsprojekte

- Mikroplastik und Nanoplastik in der Alpenregion: Repräsentative und zuverlässige Analyse als Basis für Risikobewertung und Vermeidungsstrategien
- Near infrared spectroscopy: A new frontier

Publikationen

- Kappacher et al. (2024). Unveiling the synergy of NIRS and enrichment technologies: A comprehensive review of in-sorbent-based detection and quantification strategies. *Spectrochimica Acta. Part A, Molecular And Biomolecular Spectroscopy*, 310, 123955. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2024.123955>
- Moll et al. (2022). Investigation of Water Interaction with Polymer Matrices by Near-Infrared (NIR) Spectroscopy. *Molecules*, 27(18), 5882. <https://doi.org/10.3390/molecules27185882>
- Ozaki et al. (2021). Advances, challenges and perspectives of quantum chemical approaches in molecular spectroscopy of the condensed phase. *Chemical Society Reviews*, 50(19), 10917–10954. <https://doi.org/10.1039/d0cs01602k>
- Beć et al (2021). Spectra-structure correlations in NIR region of polymers from quantum chemical calculations. The cases of aromatic ring, C=O, C≡N and C-Cl functionalities. *Spectrochimica Acta. Part A, Molecular And Biomolecular Spectroscopy*, 262, 120085. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.120085>
- Beć et al. (2020). Principles and Applications of Miniaturized Near-Infrared (NIR) Spectrometers. *Chemistry*, 27(5), 1514–1532. <https://doi.org/10.1002/chem.202002838>

Instrumente

- NIR Spektrometer (Benchtop, portable, Imaging)
- Raman Spektrometer (Imaging, portabel)
- LC-TSQ-MS
- Maldi-Tof-MS
- GC-MS
- LIBS (Laser Induced Breakdown)

Festkörperchemie, AG Huppertz

Univ.-Prof. Dr.

Hubert Huppertz

Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie

Innrain 80 – 82
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-57000
E-Mail: hubert.huppertz@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/aatc/ag-huppertz



Univ.-Prof. Dr. Hubert Huppertz

Die Forschungsinteressen der Abteilung Festkörperchemie liegen in der explorativen synthetischen Entdeckung neuer Verbindungen in den Substanzklassen der Borate, Fluorid-Borate, Bor-Germanate, Bor-Gallate, Gallate, Borat-Nitrate, Gallium-Oxonitride, Seltenerd-Molybdate, intermetallischen Verbindungen und Boride. Hochentwickelte Syntheseverfahren werden unter Umgebungs- und Hochdruckbedingungen eingesetzt, z.B. unter Verwendung eines Hochfrequenzofens oder einer Multianvil-Hochdruckanlage. Zusätzlich zur klassischen Festkörpersynthese werden molekulare Vorstufen eingesetzt, um neue Verbindungen zu erzeugen. In erster Linie interessiert uns die Strukturaufklärung der unbekannten Verbindungen. Darüber hinaus stehen die Weiterentwicklung und Anwendung dieser neuartigen Materialien im Mittelpunkt unserer Arbeit, einschließlich Aspekten wie Ionenleitfähigkeit, optische Eigenschaften, nichtlineares optisches Verhalten, Lumineszenz, mechanische Eigenschaften, thermische Stabilität und Magnetismus.

Festkörperchemie

Die Festkörperchemie am Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie konzentriert sich auf die Synthese, Charakterisierung und Anwendung fester Materialien mit einer großen Bandbreite an chemischen Zusammensetzungen und Strukturen. Struktur-Eigenschafts-Beziehungen helfen zu verstehen, wie die atomare oder molekulare Struktur eines Materials seine physikalischen und chemischen Eigenschaften beeinflusst. Dies wiederum hilft bei der Vorhersage des Verhaltens von Materialien und bei der Entwicklung spezifischer Materialien mit gewünschten Eigenschaften. Insgesamt zielt die Festkörperchemie darauf ab, unser Verständnis fester Materialien zu verbessern und neue Materialien mit verbesserten oder neuartigen Eigenschaften für ein breites Spektrum wissenschaftlicher, industrieller und technologischer Anwendungen zu entwickeln.



Hochfrequenzofen für die Festkörpersynthese (links). Multianvil-Presse zur Hochdrucksynthese (rechts).

Hochdruckchemie

In den letzten 80 Jahren hat die Einführung des Parameters Druck in die Festkörperchemie zu einer bemerkenswerten Erweiterung der synthetischen Möglichkeiten geführt. Allerdings ist dieses von Festkörperchemikern untersuchte Gebiet mit seinem Spektrum an Verbindungen und Reaktionen bisher noch sehr klein und steht erst am Anfang. Im Vergleich zu den recht einfach zu handhabenden thermodynamischen Parametern Temperatur und Zusammensetzung sind die Hochdruckbedingungen technisch sehr viel anspruchsvoller. Die technische Entwicklung anspruchsvoller Hochdruckzellen, insbesondere im Multianvil-Bereich, hat die Synthesemöglichkeiten in der Materialchemie (Hartstoffe) und im Maschinenbau verbessert. Der Schwerpunkt unserer Forschung liegt in der Entdeckung neuer Materialien unter extremen Druck- und Temperaturbedingungen.

Leuchtstoffe für LEDs

Leuchtstoffe für den ständig wachsenden LED-Beleuchtungssektor sind ein sehr wichtiger Teil der aktuellen Forschung der Festkörperchemie. Innerhalb dieser Materialklasse haben sich Europium-aktivierte Phasen als vielversprechende Substanzklasse für anorganische Leuchtstoffe herauskristallisiert. Einige von ihnen, wie β -SiAlON, $RE_2Si_5N_8:Eu^{2+}$ ($RE = Ca, Sr, Ba$) und $CaAlSiN_3:Eu^{2+}$, sind zu Standardleuchtstoffen in der Industrie geworden. Jüngste Entwicklungen wie die Entdeckung von SLA und SALON haben gezeigt, dass in dieser Substanzklasse noch viel Potenzial steckt und die Zahl der Eu^{2+} -basierten Leuchtstoffe weiter zunimmt. Unser Forschungsschwerpunkt liegt daher auf der Entdeckung und Charakterisierung neuer Leuchtstoffe für eine mögliche Anwendung in LEDs.



Typische anorganische Leuchtstoffe für LEDs

Forschungsprojekte

- Neue Seltenerd-dotierte Leuchtstoffe
- Reduktion von Metalloxiden

Publikationen

- Widmann et al. (2024). Real Competitors to Ruby: The Triel Oxonitridoborates AlB_4O_6N , $Al_{0.97}Cr_{0.03}B_4O_6N$, and $Al_{0.83}Cr_{0.17}B_4O_6N$. *Advanced Functional Materials*, 34(28), 2400054. <https://doi.org/10.1002/adfm.202400054>
- Träger et al. (2023). Photoluminescence of Mn^{2+} in the Borosulfate $Zn[B_4(SO_4)_4]:Mn^{2+}$ – A Tool to Detect Weak Coordination Behavior of Ligands. *Angewandte Chemie*, 62(45), e202309212. <https://doi.org/10.1002/anie.202309212>

- Rüeggenberg et al. (2023). Mixed Microscopic Eu^{2+} Occupancies in the Next-Generation Red LED Phosphor $Sr[Li_2Al_2O_2N_2]:Eu^{2+}$ (SALON:Eu²⁺). *Advanced Optical Materials*, 11(9), 2202732. <https://doi.org/10.1002/adom.202202732>

- Fuchs et al. (2021). The First High-Pressure Chromium Oxonitridoborate CrB_4O_6 – an Unexpected Link to Nitridosilicate Chemistry. *Angewandte Chemie*, 60(40), 21801–21806. <https://doi.org/10.1002/anie.2021110582>

- Hoerder et al. (2019). $Sr[Li_2Al_2O_2N_2]:Eu^{2+}$ – A high performance red phosphor to brighten the future. *Nature Communications*, 10, 1824. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-109632-w>

Kooperationen

- ams-OSRAM International GmbH
- Plansee

Instrumente

- Geräte des Institutes für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie; Details: www.uibk.ac.at/aatc/service

Angewandte Mineralogie und Kristallographie

Univ.-Prof. Dr.

Volker Kahlenberg

Institut für Mineralogie und Petrographie

Innrain 52
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-54603
E-Mail: volker.kahlenberg@uibk.ac.at

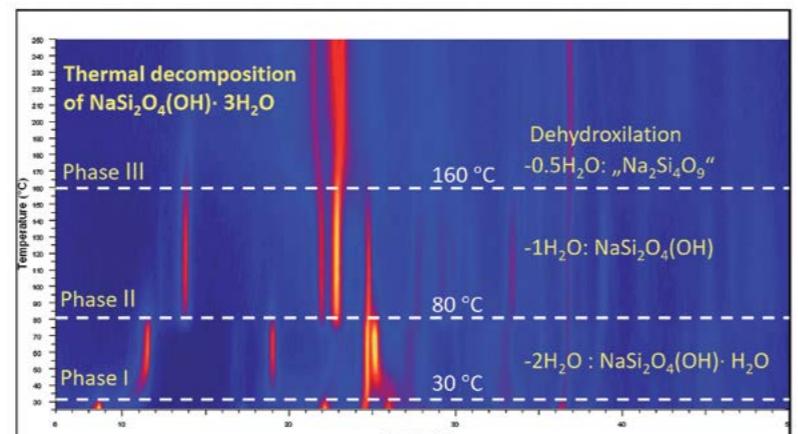
www.uibk.ac.at/mineralogie



Univ.-Prof. Dr. Volker Kahlenberg

Die Aktivitäten der Arbeitsgruppe sind an der Schnittstelle zwischen angewandter und grundlagenorientierter Forschung angesiedelt. Im Fokus steht die Materialentwicklung und Charakterisierung von Feststoffen, die im Bereich von industriellen Hochtemperaturprozessen auftauchen. Hierzu zählen zum Beispiel Produkte der Stahl-, Keramik-, Glas- und Bindemittel-, sowie der Feuerfestindustrie, die neben high-tech Anwendungen auch für viele Bereiche des täglichen Lebens direkt oder indirekt eine wichtige Rolle spielen (Ziegel, Sanitärkeramik, Fliesen und vieles mehr). Ein besonderer Schwerpunkt unserer Forschung liegt dabei bei sogenannten *in-situ* Messungen mittels verschiedenster Röntgenbeugungsverfahren, bei denen die Herstellung und der Einsatz von kristallinen Festkörpern unter möglichst prozessnahen Bedingungen bis zu 1500 °C untersucht wird. Ferner können Einflüsse des kristallinen Aufbaus auf die Änderungen der Eigenschaften direkt verfolgt werden.

Verhalten von oxidischen Werkstoffen unter „non-ambient“ Bedingungen



In-situ Pulverdiffraktionsuntersuchung zum Hochtemperaturverhalten des silikatischen Ionentauschers $\text{Na}[\text{Si}_2\text{O}_4(\text{OH})] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$

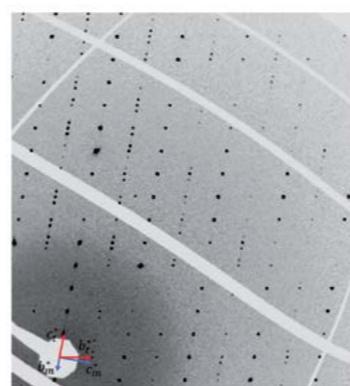
Das von der Arbeitsgruppe über viele Jahre hinweg aufgebaute Diffraktionszentrum West und die dort vorhandenen Geräte stellen einen für Österreich einzigartigen Pool zur Untersuchung von Einkristallen sowie von polykristallinen Proben dar, um Informationen über deren Kristallstrukturen mittels Röntgendiffraktion zu erhalten. Der Schwerpunkt liegt hierbei auf oxydischen Verbindungen, die für unsere eigene Forschungsrichtung von besonderer Bedeutung sind. Verschiedenste Probenumgebungen erlauben dabei Untersuchung des Verhaltens von Werkstoffen unter hohen oder tiefen Temperaturen, unter hohen Drücken, sowie unter Verwendung von variablen Luftfeuchten oder dem Einsatz reaktiver Gasatmosphären. Die unterschiedlichen Geräte sind jeweils für bestimmte Applikationen optimiert und können ein sehr großes Anwendungsspektrum abdecken, das von vielen Kooperationspartnern inner- und außerhalb der LFU intensiv genutzt wird.

Phasenanalyse und Thermodynamik von multinären Oidsystemen

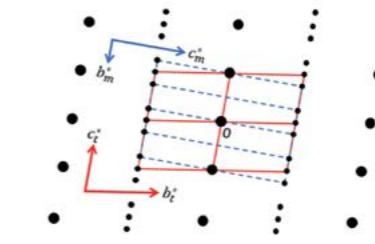
Die Interpretation des Hochtemperaturverhaltens von silikatischen Werkstoffen basiert ganz wesentlich auf der genauen Kenntnis der jeweiligen Phasendiagramme. Überraschenderweise fehlen diese Daten jedoch für eine Vielzahl von „einfachen“ Dreistoff- oder Vierstoffsystemen. Im Rahmen unserer Untersuchungen wurden in den letzten Jahren eine ganze Reihe von Systemen neu oder erstmals bearbeitet, die Existenz neuer Phasen nachgewiesen sowie die Ergebnisse älterer Arbeiten korrigiert. Neben der Durchführung von Synthesen in den zahlreichen Ofenlagen – auch unter Einbeziehung thermoanalytischer Verfahren (DTA-TG-MS, DSC) – können die experimentellen Ergebnisse mit thermodynamischen Modellierungsrechnungen unter Verwendung des Softwarepaketes wie z.B. FactSage abgeglichen werden.

Kristallstrukturanalysen komplexer anorganischer Verbindungen

Die Kenntnis der Kristallstruktur trägt ganz wesentlich zum Verständnis vieler physikochemischer Eigenschaften kristalliner Festkörper bei. Unsere langjährige Erfahrung hat gezeigt, dass es gerade auch in industrierelevanten Systemen durch die schnellen Reaktionsprozesse häufig zur Ausbildung von besonders herausfordernden strukturellen Phänomenen wie z.B. Polytypie, Polysomatie, Zwillingsbildungen oder modulierte Strukturen kommen kann. Die erfolgreiche Beschreibung solch komplexer Systeme erfordert ein hohes Maß an kristallographischem Spezialwissen, welches in der Arbeitsgruppe zur Verfügung steht und uns zu einem gern geschätzten Kooperationspartner auf nationaler und internationaler Ebene macht.



Experimentelles (links) und theoretisch vorgesagtes (rechts) Einkristallbeugungsbild der Sintereisenerzphase SFCA-III. Es liegt eine orientierte Verwachsung von zwei verschiedenen Polytypen vor.



Forschungsprojekte

- SulfROX – Schwefeloxidresistente Niedertemperatur-Oxidationskatalyse zum Wärmeverschub in Realabgasen; FFG Bridge-Projekt (Kooperation mit Ceram Austria und Montanuniversität Leoben)
- Nachhaltige Produktion von feuerfesten Materialien (Kooperation mit RHI Magnesita)

Publikationen

- Kahlenberg, V. et al. (2021). SFCA-II type $\text{Ca}_{2.46}^{+}\text{Fe}^{3+}_{0.857}\text{Fe}^{2+}_{0.52}\text{Al}_{5.45}^{+}\text{O}_{24}$ – an improved structural model for an iron-ore sinter phase. *Mineralogy And Petrology*, 115(1), 137–147. <https://doi.org/10.1007/s00710-020-00730-y>
- Kahlenberg et al. (2021). Structural systematics of SFCA-I type solid-solutions in the system $\text{CaO}-\text{Fe}_2\text{O}_3-\text{FeO}-\text{Al}_2\text{O}_3$. *Physics And Chemistry Of Minerals*, 48, 25. <https://doi.org/10.1007/s00269-021-01148-4>
- Kahlenberg et al. (2022). $\text{Na}_2\text{Ca}_3\text{Si}_2\text{O}_8$ or $\text{Na}_2\text{Ca}_6\text{Si}_4\text{O}_{15}$? A hybrid approach combining 3D single-crystal electron and powder X-ray diffraction. *Journal Of The American Ceramic Society*, 105(11), 6976–6988. <https://doi.org/10.1111/jace.18650>
- Hildebrandt et al. (2023). Structural and computational studies on a quenchable high-temperature polymorph of magnesium tungstate (MgWO_4 -II). *Journal Of Solid State Chemistry*, 327, 124269. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2023.124269>
- Liu et al. (2024). $\text{K}_8\text{CaSi}_{10}\text{O}_{25}$ – Synthesis, in-situ high-temperature single-crystal diffraction and heat capacity. *Journal Of Solid State Chemistry*, 334, 124668. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2024.124668>

Kooperationen

- RHI Magnesita
- Ceram Austria GmbH
- K1-met GmbH
- Wienerberger AG

Instrumente

- Zahlreiche Geräte unter anderem im Bereich der Röntgenbeugung, Röntgenfluoreszenz und Spektroskopie; Details: www.uibk.ac.at/en/mineralogy/facilities

Werkstoffwissenschaften mit Schwerpunkt Mechatronik

Ass.-Prof. Dr.
Lukas Kaserer

Institut für Mechatronik

Technikerstraße 13
Bauingenieurgebäude CT TE013
7. Stock
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-62771
bzw. -63401
E-Mail: Werkstoffwissenschaften-Mechatronik@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/mechatronik/werkstoffwissenschaften



Ass.-Prof. Dr. Lukas Kaserer

Unsere Arbeitsgruppe forscht an Materialien und Prozessabläufen für die pulverbettbasierte additive Fertigung – auch als 3D Druck bekannt – von metallischen Werkstoffen. Bei diesen Fertigungsverfahren wird Metallpulver durch einen Laser- oder Elektronenstrahl in einem schichtweisen Aufbauprozess selektiv verschmolzen. Dies ermöglicht die ressourceneffiziente Herstellung individuell angepasster Bauteile mit komplexen, hochfunktionalen Geometrien. Zusätzlich ist es möglich, die außergewöhnlichen Prozessbedingungen zu nutzen, um neue Werkstoffe mit einzigartiger Mikrostruktur und verbesserten mechanischen Eigenschaften herzustellen.

Unsere Forschungsschwerpunkte sind die Legierungsentwicklung, also die Entwicklung neuer, angepasster Werkstoffe auf Basis thermodynamischer Berechnungen, und die simulationsgestützte Prozessentwicklung, also die Entwicklung von Prozessstrategien um neue Werkstoffe defektfrei verarbeiten zu können. Wir beschäftigen uns mit hochschmelzenden Werkstoffen wie Molybdän und Wolfram, mit Titan- und Aluminiumlegierungen sowie mit Stählen. Für unsere anwendungsnahen Forschungsprojekte arbeiten wir eng mit Partnern aus Wissenschaft und Industrie zusammen.

Legierungsentwicklung

Die pulverbettbasierte additive Fertigung ist eine Technologie, bei der metallische Werkstoffe unter extremen Temperaturgradienten und hohen Abkühlgeschwindigkeiten erstarrten. Während des Aufbauprozesses findet zudem eine Wiedererwärmung des bereits erstarrten Materials statt, was dort zu sehr komplexen Temperaturverläufen führt. Werkstoffe, die ursprünglich für die Anforderungen konventioneller Fertigungsverfahren entwickelt wurden, lassen sich additiv oft nur schwer verarbeiten. Eine Weiter- und Neuentwicklung von Legierungen für die pulverbettbasierte additive Fertigung ist daher unabdingbar, um eine vereinfachte Verarbeitbarkeit und eine Verbesserung der Werkstoffeigenschaften zu erreichen.



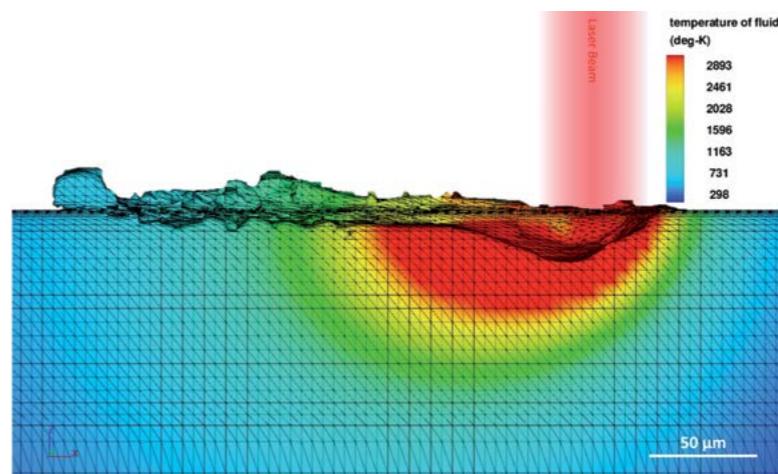
Blick in eine Laser Powder Bed Fusion Anlage am Ende des Fertigungsprozesses. In dieser Anlage wird Metallpulver mit Hilfe eines Hochleistungslasers in einem schichtweisen Aufbauprozess zu Bauteilen verschmolzen.

Prozessentwicklung

Bei der Prozessentwicklung für die pulverbettbasierte additive Fertigung neuer, aber auch bekannter Werkstoffe ist es das Ziel, das werkstoffspezifische Zusammenspiel von Prozessparametern, Prozessbedingungen und Werkstoffeigenschaften zu verstehen und zu beherrschen. Die Prozessentwicklung erfolgt simulationsgestützt sowohl auf Basis von Sensordaten von Prozessüberwachungswerkzeugen wie einem Inline-Pyrometer oder einer Hochgeschwindigkeitskamera, als auch auf Basis von Ergebnissen aus mikrostrukturellen und mechanischen Bauteilanalysen.

Modellierung und Simulation

Die Modellierung und FEM- und VOF-Simulation der additiven Fertigung hat das Ziel, das Verständnis der Wechselwirkungen zwischen den zahlreichen Fertigungsparametern und den Prozess- und Materialeigenschaften in diesem dynamischen und physikalisch hochkomplexen Prozess zu verbessern. Beispielsweise untersuchen wir die Einflussgrößen auf die Dynamik im sogenannten Schmelzbad oder die Rolle der Prozessatmosphäre und der Pulverqualität, um die Entstehung von Defekten wie Poren zu minimieren. Zudem befassen wir uns mit den Erstarrungsbedingungen sowie mit der Temperaturhistorie, um die mikrostrukturellen und mechanischen Eigenschaften unserer Werkstoffe gezielt zu kontrollieren und zu optimieren.



Ergebnis einer VOF-Simulation des Laser Powder Bed Fusion Prozesses.

Forschungsprojekte

- M³AMTec – Generierung einer wissenschaftlichen und prozesstechnischen Grundlage zur Verarbeitung von Refraktärmetallen und deren Legierungen mittels LPBF-Verfahren; FFG-Förderung
- ReBi – Ressourceneffiziente Bauteilinnovation durch additive Fertigungsverfahren im bayerischen und österreichischen Grenzraum; Interreg Bayern – Österreich, Kofinanziert von der Europäischen Union

Publikationen

- Goettgens et al. (2024). Microstructure and Mechanical Properties of Ti-6Al-4V In Situ Alloyed with 3 wt% Cr by Laser Powder Bed Fusion. *Metals*, 14(6), 715. <https://doi.org/10.3390/met14060715>
- Schimbäck et al. (2024). Advancements in metal additive manufacturing: In-situ heat treatment of aluminium alloys during the laser powder bed fusion process. *Materials Science and Engineering: A*, 905, 146102. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2024.146102>
- Bergmueller et al. (2023). Systematic approach to process parameter optimization for laser powder bed fusion of low-alloy steel based on melting modes. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 126(9–10), 4385–4398. <https://doi.org/10.1007/s00170-023-11377-2>
- Kaserer et al. (2023). Solute-induced grain refinement and defect suppression in boron-modified molybdenum manufactured via laser powder-bed fusion. *International Journal of Refractory and Hard Metals*, 117, 106384. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2023.106384>
- Braun et al. (2022). Grain refinement mechanisms of alloying molybdenum with carbon manufactured by laser powder bed fusion. *Materials & Design*, 215, 110507. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2022.110507>

Instrumente

- Laser Powder Bed Fusion Anlage AconityMIDI;
- Elektronenstrahlschmelz-Anlage Arcam Q10+;
- Keyence VHX7000
- Vakuum- und Schutzgas- Rohrofen: Carb 3 HT

Material- und Elektrochemie

Univ.-Prof. Dr.

Julia Kunze-Liebhäuser

Institut für Physikalische Chemie

Innrain 52c
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-58013
E-Mail: julia.kunze@uibk.ac.at

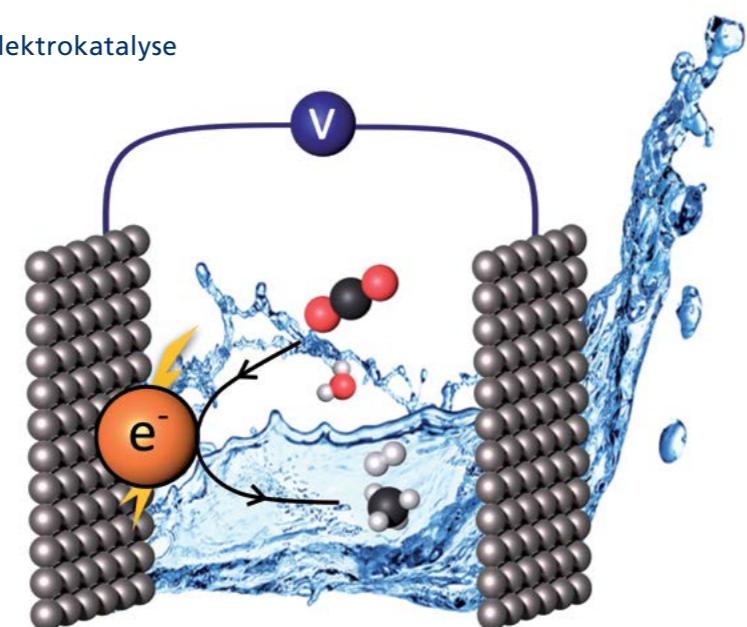
www.uibk.ac.at/physchem/forschung/electrochem



Univ.-Prof. Dr. Julia Kunze-Liebhäuser

Wir untersuchen Grenzflächenprozesse, um die Reaktionswege und -mechanismen aufzuklären, die an der fest/flüssig-Grenzfläche während elektrochemischer Energieumwandlungs- und -Speicherprozesse ablaufen. Der Forschungsansatz der Gruppe basiert auf der Entwicklung und Anwendung von in-situ- und ex-situ-Analysetechniken, die auf Systeme mit zunehmender Komplexität angewendet werden. Diese reichen von einkristallinen Modelllektroden, die unter idealisierten Bedingungen untersucht werden, bis hin zu komplexeren, aber gut definierten nanostrukturierten Materialien, die in realen Brennstoff- und Elektrolysezellen oder Batterieumgebungen eingesetzt werden könnten.

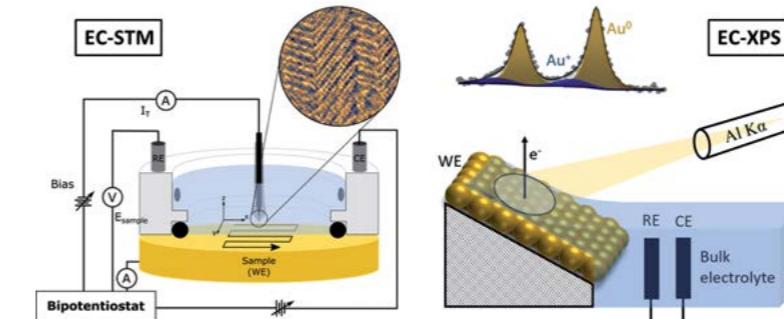
Elektrokatalyse



Wir betreiben Grundlagenforschung im Bereich der Elektrokatalyse, die darauf abzielt, das Verständnis der katalytischen Mechanismen auf atomarer und molekularer Ebene zu vertiefen. Dies umfasst die Untersuchung der Wechselwirkungen zwischen Katalysatormaterialien und Reaktanten, die Optimierung der Materialeigenschaften zur Erhöhung der Effizienz und Stabilität, sowie die Entwicklung neuer Katalysatorkonzepte. Im Speziellen liegt der Fokus auf Prozessen wie der Wasserelektrolyse und der CO₂-Reduktion, um deren Effizienz und Selektivität zu verbessern und nachhaltige Energieumwandlungs- und -Speichertechnologien voranzutreiben.

In-situ Grenzflächen- und Produktanalytik

Die in-situ Grenzflächenanalytik ermöglicht uns die Untersuchung der strukturellen und chemischen Eigenschaften von fest/flüssig-Grenzflächen unter realistischen Bedingungen, also bei Raumtemperatur und häufig unter Einwirkung eines angelegten Potentials sowie Ladungstransfer. Unsere Methoden sind etwa die elektrochemische Rastersondenmikroskopie und Röntgen Photoelektronenspektroskopie. Zudem geben die entsprechenden Produktanalytik Methoden, wie die Differentielle Elektrochemische Massenspektrometrie, die Gaschromatographie und die elektrochemische Infrarotspektroskopie, direkten Auskunft über Reaktionsprodukte und -Intermediate. So können Reaktionsmechanismen ganzheitlich aufgeklärt werden.



Direkter Blick auf die Fest-Flüssig-Grenzfläche: In-situ Analyse elektrochemischer Prozesse mittels elektrochemischer Rastertunnelmikroskopie (EC-STM, links) und Röntgen Photoelektronenspektroskopie (XPS, rechts).

Forschungsprojekte

- Exzellenzcluster: „Materials for Energy Conversion and Storage (MECS)“
- Direct Carbon Capture and Electrolysis (Direct CCE); FFG-Projekt

Publikationen

- Winkler et al. (2024). The Relevance of the Interfacial Water Reactivity for Electrochemical CO Reduction on Copper Single Crystals. *ACS Catalysis*, 14(2), 1098–1106. <https://doi.org/10.1021/acscatal.3c02700>
- Mairegger et al. (2023). Electrocatalysis of CO₂ in a Non-aqueous Electrolyte – The Generic Role of Acetonitrile. *ACS Catalysis*, 13(9), 5780–5786. <https://doi.org/10.1021/acscatal.3c00236>
- Auer et al. (2021). Interfacial Water Structure as a Descriptor for Its Electro-Reduction on Ni(OH)₂-Modified Cu(111). *ACS Catalysis*, 11(16), 10324–10332. <https://doi.org/10.1021/acscatal.1c02673>
- Griesser et al. (2021). True Nature of the Transition-Metal Carbide/Liquid Interface Determines Its Reactivity. *ACS Catalysis*, 11(8), 4920–4928. <https://doi.org/10.1021/acscatal.1c00415>
- Auer et al. (2020). Self-activation of copper electrodes during CO electro-oxidation in alkaline electrolyte. *Nature Catalysis*, 3(10), 797–803. <https://doi.org/10.1038/s41929-020-00505-w>

Kooperationen

- Rohrdorfer
- Wien Energie
- Scheuch

Materialtechnologie

Univ.-Prof. DI Dr.

Roman Lackner

Institut für Konstruktion und Materialwissenschaften

Technikerstraße 13
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-63500
E-Mail: roman.lackner@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/mti/forschung/ag-materialtechnologie

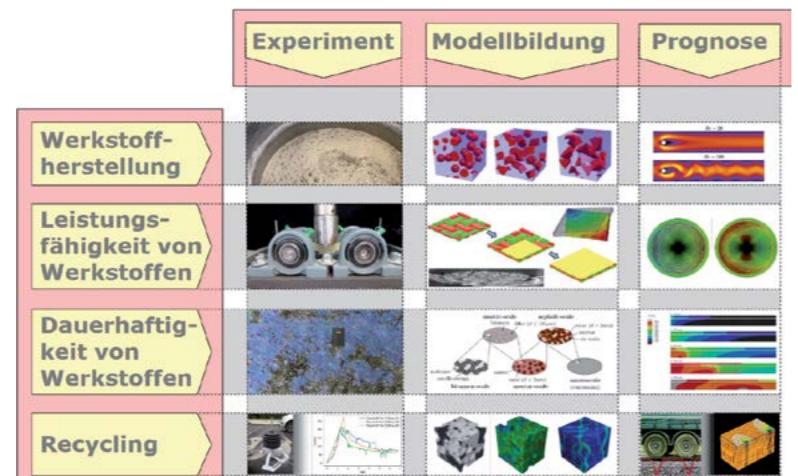


Univ.-Prof. DI Dr. Roman Lackner

Die AG Materialtechnologie beschäftigt sich mit dem gesamten Lebensweg von Materialien, beginnend mit der Herstellung, über die Optimierung der technischen Eigenschaften sowie Aspekte der Dauerhaftigkeit bis zur möglichen Rezyklierbarkeit. Die Grundlage der Forschungsarbeiten liefert eine umfassende Charakterisierung der Materialeigenschaften auf – falls erforderlich – verschiedenen Längenskalen am NanoLab der Universität Innsbruck. Der methodische Ansatz dieser Mehrskalenbetrachtung ist nicht auf ausgewählte Materialien und technische Eigenschaften beschränkt – dementsprechend weitgestreut sind die Möglichkeiten und potentiellen Anwendungen. So werden Aspekte der Optimierung technischer Eigenschaften, der Dauerhaftigkeit und Nachhaltigkeit von Materialien, die Auswirkung von Schwankungen/Aspekte der Qualitätssicherung im Produktionsprozess sowie bauchemische Fragestellungen/Schadensfälle behandelt.

Optimierung und Dauerhaftigkeit (Prof. Roman Lackner)

Die stetig verbesserten Methoden der experimentellen Charakterisierung – auch auf sehr kleinen Längenmaßstäben – bilden die Basis für die sogenannte Mehrskalenmodellierung. Die modellbasierte Berücksichtigung der vorhandenen Materialphasen, deren Zusammensetzung und räumlichen Verteilung (Morphologie) sowie etwaiger Veränderung im Zuge der Materialherstellung und -verwendung (Stichwort: Dauerhaftigkeit) ermöglicht die Untersuchung der Auswirkung von Unsicherheiten/Schwankungen im Produktionsprozess, die Identifikation der maßgebenden Parameter (Sensibilitätsanalyse) und schlussendlich die zielorientierte Optimierung von technischen Eigenschaften von Materialien.



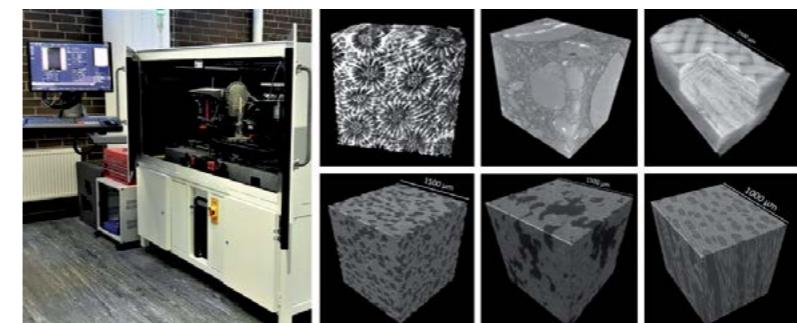
Spektrum materialtechnologischer Fragestellungen und deren Bearbeitung von der experimentellen Charakterisierung über die Modellierung des Materialverhaltens bis hin zur Prognose

Materialcharakterisierung (Dr. Lukas Perfler)

Das NanoLab der Universität Innsbruck ermöglicht eine umfassende experimentelle Charakterisierung von sowohl anorganischen Bau- und Werkstoffen, wie zum Beispiel Zement/Beton, Keramiken, Glas, und Metallen, als auch organischen Materialien (wie z.B. Polymere, Holz- und Verbundwerkstoffe, Bitumen/Asphalt). Mit Hilfe verschiedenster spektroskopischer, mikroskopischer und röntgenanalytischer Methoden können neben der atomaren und molekularen Struktur auch die Oberflächeneigenschaften sowie die mineralogische/chemische Zusammensetzung bestimmt werden. Ein weiterer Schwerpunkt liegt zudem in der Analyse der technischen Eigenschaften sowie in der zerstörungsfreien Charakterisierung der dreidimensionalen Mikro- und Porenstruktur von Materialien mittels Röntgenmikroskopie.

Bauchemie und Schadenanalyse (Dr. Seraphin Unterberger)

Das Forschungsthema Bauchemie wird seit mehreren Jahrzehnten am Arbeitsbereich betrieben. Hierbei standen früher mineralische Bindemittel und die Entwicklung von Rezepturen im Beton- und Mörtelbereich im Vordergrund. Dieser Bereich wurde in den letzten Jahren durch Aktivitäten in verschiedenen Bereichen erweitert und umfasst heute die Interaktion und Wechselwirkung von unterschiedlichen Materialien und Schadensmechanismen. Hier sind Kunststoffe, Kunststoffbindemittel, Abdichtungen und Korrosionsbeschichtungen als Beispiel zu nennen. Durch häufige Schadensanalysen konnte in diesem Segment ein breites Wissen aufgebaut werden und dient sohin als Grundlage für zukünftige Entwicklungen und Forschungsvorhaben.



Mikrostrukturaufnahmen von Materialien mittels Röntgenmikroskopie

Forschungsprojekte

- Thermochemomechanische SPH Simulation von Zementverpressung; FWF-Projektnummer P32531
- EcoRoad – Innovative Methoden für die Herstellung qualitativ hochwertiger Recyclingbaustoffe gemeinsam mit den Firmen Bodner und Nievelt; KRegio Projekt der Standortagentur Tirol

Publikationen

- Bader et al. (2019). On the performance of film formers versus penetrants as water-repellent treatment of High-Performance Concrete (HPC) surfaces. *Construction and Building Materials*, 203, 481–490. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2019.01.089>
- Wieser et al. (2021). On the Effect of Recycled Polyolefins on the Thermorheological Performance of Polymer-Modified Bitumen Used for Roofing-Applications. *Sustainability*, 13(6), 3284. <https://doi.org/10.3390/su13063284>
- Perfler et al. (2022). Pore space of steatite ceramics triggered by the allowance of natural fibers: High-resolution X-ray microscopy analysis and related thermo-mechanical properties. *Materials & Design*, 218, 110704. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2022.110704>
- Hofer et al. (2020). Multiscale modeling of the viscoelastic response of braid-reinforced polymers: model formulation and experimental assessment considering different rheological models. *Composites Part B: Engineering*, 182, 107398. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2019.107398>
- Rohm et al. (2017). Wear of ski waxes: Effect of temperature, molecule chain length and position on the ski base. *Wear*, 384–385, 43–49. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2017.05.004>

Instrumente

- Geräte des NanoLab Innsbruck (Mikroskopie, Analytik und mechanischen Werkstoffprüfung, Sonderbereiche Dünnschichttechnologie und Brandschutz) Details: www.uibk.ac.at/mti/laboratorien/nanolab

Theoretische Chemie

Univ.-Prof. DDr.

Klaus R. Liedl

Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie

Innrain 80 – 82
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-57100
E-Mail: klaus.liedl@uibk.ac.at

www.liedllab.org

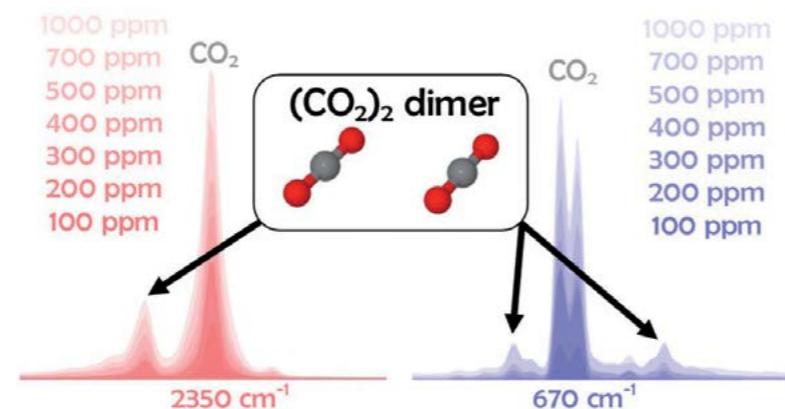


Univ.-Prof. DDr. Klaus R. Liedl

Elektronenstrukturmethoden wie Coupled Cluster (CC) erlauben die präzise quantenmechanische Modellierung elektronischer Eigenschaften von Molekülen und bilden die Basis für weiterführende Methoden wie vibrational configuration interaction (VCI), welche eine akkurate Lösung der Kernschrödinger-Gleichung finden und dadurch eine präzise Beschreibung der anharmonischen, gekoppelten Schwingungsbewegung von kleinen atmosphärisch relevanten Molekülen ermöglicht. Auf der anderen Seite des Größenspektrums erlauben Molekularmodellierung und Molekulardynamik (MM/MD) Techniken die Be- trachtung von Proteinen und den Interaktionen, welche sie mit den Liganden in ihrer Bindetasche eingehen.

Beschreibung der Infrarot Aktivität von atmosphärisch relevanten Molekülen

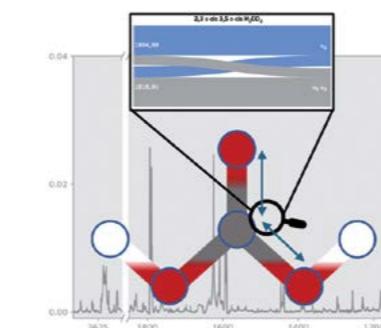
Trifft ein Photon mit geeigneter Energie auf ein Molekül, so können durch Absorption des Photons in diesem verschiedene elektronische, Rotations- und Vibrationsübergänge angeregt werden. Diese Eigenschaft von Molekülen stellt den Grund für den allgegenwärtigen Treibhaus-Effekt dar. Die Strahlung der Sonne passiert größtenteils unsere Atmosphäre, die Rückstrahlung der Erde, welche sich im IR-Bereich befindet, wechselwirkt jedoch mit den Molekülen in unserer Atmosphäre. In den gegenwärtigen Klimamodellen wird unsere Atmosphäre stark vereinfacht. Sie betrachten lediglich Monomere, welche nicht untereinander wechselwirken. Aufgrund von sehr hohen lokalen Wasser- anteilen in der Atmosphäre kommt es aber unweigerlich zur Clusterformation. Eben jene Cluster zeigen eine andere IR-Aktivität als die jeweiligen Monomere, wodurch es zu einer Veränderung der aufgenommenen Rückstrahlung kommt. Ein Teil unserer Forschung zielt darauf ab solche Effekte mit theoretischen Methoden zu modellieren und im Anschluss experimentell zu bestätigen.



Matrix Isolation IR Spektrum von CO₂ in Neon. Theoretische Methoden ermöglichen eine akkurate Vorhersage der relativen Intensität, sowie Wellenzahl bei welcher die Bande auftritt. (Quelle: D. F. Dinu et al. J. Phys. Chem. A 126 (2022) 2855-3056, doi: 10.1021/acs.jpca.2c00857)

Identifikation von Molekülen im interstellaren Raum

Die Identifikation von Molekülen außerhalb unseres Planeten stellt ein sehr aufwendiges Unterfangen dar. Um ein Untergrundrauschen der erdeigenen Atmosphäre zu verhindern, müssen Teleskope, wie das James Webb Space Telescope, bis zu 1,5 Millionen Kilometer zum Lagrange-Punkt L2 in den Weltraum gebracht werden. Doch das allein reicht nicht aus, die erhaltene Flut an Daten ist weiterhin stark verrauscht und das Zielsignal macht oft nur einen winzigen Bruchteil der Gesamtintensität aus. Eine korrekte Identifikation ist daher nur mit hochgenauen Referenzdaten möglich. Ein Teil unserer Arbeit fokussiert sich daher auf die Bereitstellung von hochgenauen IR-Referenzdaten, welche zumeist eine Kombination aus hochgenau berechneten Spektren und experimentellen Schwingungsspektren darstellen. Dabei ist das Ziel, durch ein Verständnis der theoretischen Daten eine ganzheitliche Zuordnung, sowie eine kohärente Notation des Schwingungsspektrums des Zielmoleküls zu erlangen.



Schematische Darstellung der Komplexität des Matrix-Isolierten IR Spektrums der Kohlensäure. (Quelle: Schlagin et al. CPC (2024), doi:10.1002/cphc.202400274)

Thermodynamische Eigenschaften der Solvation von Proteinen

Nahezu alle biochemischen Reaktionen finden in wässriger Lösung statt. Um Eigenschaften wie Stabilität und Wechselwirkungen in der Bindetasche eines Proteins zu verstehen, ist es unabdingbar eine akkurate Beschreibung der Thermodynamik des Solvationsprozesses zu finden. Dieses Wissen ermöglicht eine Identifikation von Bindungsstellen und eine Vorhersage von Bindungsaffinitäten eines Proteins und kann die ersten Schritte in der Medikamentenentwicklung drastisch beschleunigen. Daher fokussiert sich ein Teil unserer Forschung auf die aktive Weiterentwicklung von Grid Inhomogeneous Solvation Theory (GIST), eine computergestützte Methode welche die statistischen Lösemitteleigenschaften von Gitterpunkten eines Gitters berechnet, welches um das zu untersuchende Molekül gespannt wird.

Forschungsprojekte

- Antikörper Paratopzustände in Lösung; FWF Projektnummer P34518
- CaVX – Calcium Channels in Excitable Cells, FWF doc.funds Projekt DOC 178

Publikationen

- Dinu et al. (2022). Increase of Radiative Forcing through Midinfrared Absorption by Stable CO₂ Dimers? *The Journal of Physical Chemistry A*, 126, 2966-2975. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.2c00857>
- Oenen et al. (2024). Determining internal coordinate set for optimal representation of molecular vibration. *The Journal of Chemical Physics*, 160, 014104. <https://doi.org/10.1063/5.0180657>
- Schlagin et al. (2024). Solving the puzzle of the carbonic acid vibrational spectrum – An anharmonic story. *Chemistry Physical Chemistry*, 25, e202400274. <https://doi.org/10.1002/cphc.202400274>
- Kraml et al. (2019). Solvation Free Energy as a Measure of Hydrophobicity: Application to Serine Protease Binding Interfaces. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 15, 5872–5882. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.9b00742>
- Waibl et al. (2022). Grid inhomogeneous solvation theory for cross validation in rigid solvent. *The Journal of Chemical Physics*, 156, 204101. <https://doi.org/10.1063/5.0087549>

Kooperationen

- Roche
- Boehringer Ingelheim

Kryochemie von Wasser

assoz. Prof. Mag. Dr.

Thomas Lörting

Institut für Physikalische Chemie

Innrain 52c
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-58019
E-Mail: thomas.loerting@uibk.ac.at

www.loerting.at

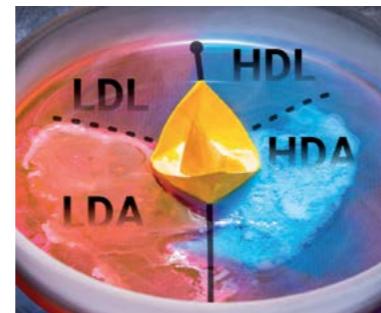


assoz. Prof. Mag. Dr. Thomas Lörting

Unsere Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit Wasser und wässrigen Lösungen unterhalb des Gefrierpunktes, insbesondere mit kristallinem Eis, amorphem Eis, tief unterkühltem flüssigen Wasser sowie Clathrat-Hydraten. Highlights in der Grundlagenforschung umfassen die Entdeckung von einem dritten amorphen Eis („VHDA“) sowie von einer kristallinen Eisform („Eis XIX“). In der angewandten Forschung erarbeiten wir Referenzdaten für die spektroskopische Entdeckung von zwanzig verschiedenen Eisformen im Weltall und beschäftigen uns an der Schnittstelle von Wissenschaft und Spitzensport mit der Reibung von Rodelkufen auf Eis.

Die Anomalien von Wasser: Zweiflüssigkeitsmodell

Auf der Ebene der Grundlagenforschung beschäftigen wir uns damit die Eigenschaften zu verstehen, die Wasser so einzigartig und zum Molekül machen, ohne das Leben nicht möglich ist. Im Zentrum des Interesses steht dabei die Idee, dass flüssiges Wasser wie wir es kennen eigentlich eine Mischung aus zwei verschiedenen Flüssigkeiten ist (HDL und LDL). Bei sehr tiefen Temperaturen und unter Druck sind wir in der Lage diese beiden zu trennen und isolieren. Uns interessiert dabei, welche physikalischen und chemischen Eigenschaften HDL und LDL einzeln haben, etwa Dichte und Wärmekapazität oder wie sie sich in Bezug auf Lösevermögen oder chemische Reaktivität unterscheiden.



Clathrat-Hydrate

Clathrat-Hydrate sind eisartige Einschlusverbindungen, die sich durch das Einschließen von meist apolaren Molekülen in Eiskäfigen auszeichnen. Methan-Clathrate gibt es in riesigen Mengen im Permafrost und am küstennahen Ozeanboden. Sie sind energierelevant, etwa für den Transport von Methan/Erdgas in Pipelines oder für die Wasserstoffspeicherung. Zusätzlich sind sie auch klimarelevant – da der plötzliche Zerfall von Methanclathraten einen Klimakipppunkt darstellt, durch den eine massive globale Erwärmung ausgelöst würde („Clathrate Gun“). Wir beschäftigen uns mit den verschiedenen Käfigen und Kristallstrukturen, sowie den Faktoren, die die Bildung, die Stabilität und den Zerfall von Clathrat-Hydraten steuern, insbesondere mit der Aufklärung des Phänomens der anomalen Selbsterhaltung.

Gefrierkonzentrierte Lösungen

Auf der Ebene der angewandten Forschung beschäftigen wir uns mit dem Gefrieren und Auftauen von wässrigen Lösungen. Durch Gefrierkonzentration und unkontrollierte Kristallisation beim Auftauen werden z.B. Zellen oder Wirkstoffe geschädigt. Dabei klären wir, welche chemischen Prozesse beim Einfrieren und Auftauen von statten gehen und welche Phänomene zu Gefrierschäden führen. Dazu zählen das Verglasen, die Clathratbildung, die Bildung eines Netzwerkes von Venen mit gefrierkonzentrierter Lösung, Kristallisation beim Einfrieren sowie die Kaltkristallisation beim Auftauen. Diese Prozesse verändern pH-Werte der Lösung oder führen zu Aggregation von Proteinen und stellen ein großes Problem in der Pharmaindustrie dar, um Wirk- oder Impfstoffe einzufrieren, um die Welt zu transportieren und ohne Schäden wieder aufzutauen.

Eis im Weltall



Dazu beschäftigen wir uns mit den verschiedenen Erscheinungsformen von gefrorenem Wasser, wie z.B. im Inneren der Erde, im Inneren von Eismonden, auf den Saturnringen oder am interstellaren Staub. Mittlerweile sind 20 verschiedene kristalline Formen von Eis bekannt, dazu drei verschiedene nicht-kristalline, amorphe Formen von Eis. Zwei davon, Eis XIX und VHDA, wurden in unserer Arbeitsgruppe entdeckt. Einige davon, wie etwa LDA oder Eis Ih, sind im Weltall weit verbreitet. Eis VI und Eis VII kennen wir von Diamanteinschlüssen aus dem Inneren der Erde. Andere Formen sind in der Natur noch unentdeckt – Temperatur und Druckverhältnisse lassen aber vermuten, dass etwa auf Eismonden des Jupiters oder Saturns einige der anderen vorhanden sein könnten. Wir unterstützen daher Weltraum-Missionen wie JUICE oder Weltraumteleskope wie das JWST mit dem Bereitstellen von Referenzdaten, etwa im Bereich der Infrarot und Raman-Spektroskopie.

Forschungsprojekte

- Understanding Ice as a cryocatalyst, CMWS Early Science Program in collaboration with DESY
- Klärung der anomalen Erhaltung von Clathrat Hydraten; FWF-Projektnummer: P36634
- Polymorphie vom H/D-Untergitter in Eis; FWF-Projektnummer PAT2619124

Publikationen

- Tonauer et al. (2024). Near-infrared spectroscopy for remote sensing of porosity, density and cubicity of crystalline and amorphous H₂O ices in astrophysical environment. *The Astrophysical Journal*, 970, 82. <https://doi.org/10.3847/1538-4357/ad4f82>
- Fidler et al. (2024). The Impact of Alcohol and Ammonium Fluoride on Pressure-Induced Amorphization of Cubic Structure I Clathrate Hydrates. *Journal of Chemical Physics*, 160, 194504. <https://doi.org/10.1063/5.0203916>
- Giebelmann et al. (2024). Isocompositional liquid-liquid transition in dilute aqueous LiCl solutions. *Physical Review Research*, 6, 023108. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.6.023108>
- Yamashita & Lörting (2024). Thermodynamically Stable Intermediate in the Course of Hydrogen Ordering from Ice V to Ice XIII. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 15(4), 1181–1187. <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.3c03411>
- Gasser et al. (2021). Structural characterization of ice XIX as the second polymorph related to ice VI. *Nature Communications*, 12, 1128. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-21161-z>

Kooperationen

- Sandoz
- Novartis
- Leonhard Lang

Instrumente

- Kryo-Pulver-Röntgendiffraktometrie (Kryo-XRD)
- Kryo-Kalorimetrie (Kryo-DSC)
- Kryo-Spektroskopie (IR, Raman, UV/VIS)
- Kryo-Mikroskopie
- Hochdruck-Druckstempelzellen Experimente

Oberflächenchemie

Ass.-Prof. Dr.

Laerte Patera

Institut für Physikalische Chemie

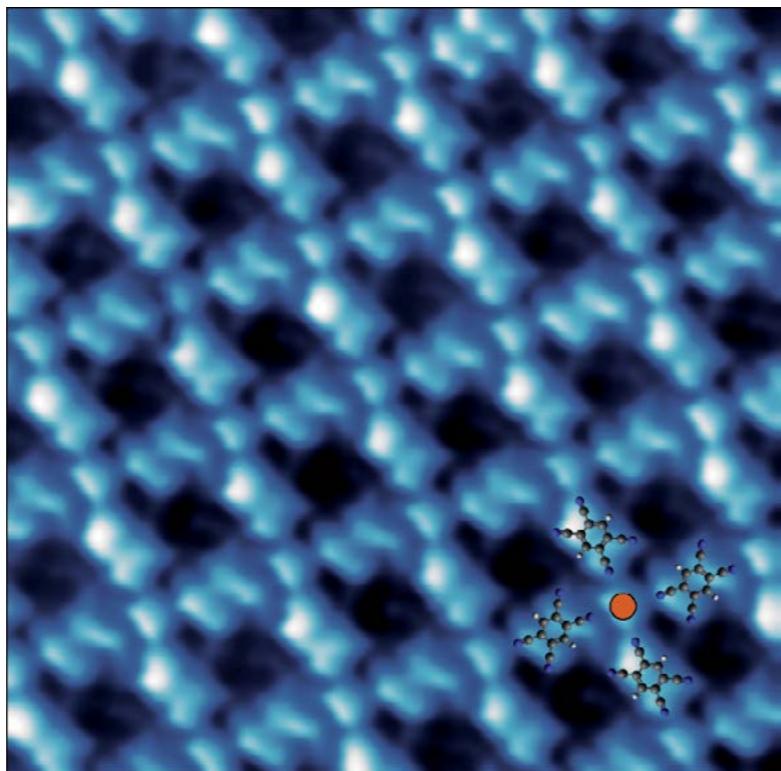
Innrain 52c
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-58100
E-Mail: laerte.patera@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/physchem/research/surface-chemistry



Ass.-Prof. Dr. Laerte Patera



Rastertunnelmikroskopie-Bild eines zweidimensionalen metallorganischen Gerüsts.

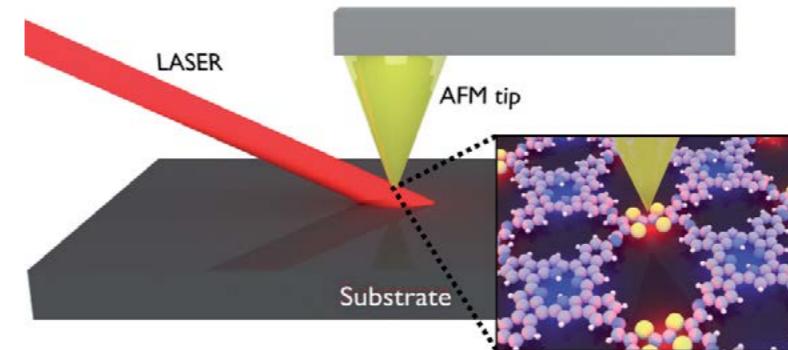
Synthese von zweidimensionalen organischen Gerüsten

Kovalente organische Gerüste (Covalent organic frameworks, COFs) sind Materialien, die durch die Verknüpfung von organischen Bausteinen zu periodischen Strukturen entstehen. Dies ermöglicht die Konstruktion maßgeschneiderter Systeme für Anwendungen in der (Photo-)Katalyse und Optoelektronik.

Das Ziel unserer Forschung ist es, ein mechanistisches Verständnis von chemischen Prozessen auf atomarer Ebene zu erlangen, die an Oberflächen ablaufen. Aktuelle Forschungsschwerpunkte sind die Synthese und Abbildung von zweidimensionalen organischen Gerüststrukturen für die Energieumwandlung. Wir nutzen Bildgebungstechniken, die auf hochauflösender Rastersondenmikroskopie basieren, um molekulare Nanostrukturen mit atomarer Auflösung darzustellen. Ein besonderer Schwerpunkt liegt auf der Entwicklung neuer Verfahren zur Messung photoangeregter Zustände in lichtsammelnden Funktionsmaterialien. Das Verständnis dieser lichtinduzierten Prozesse ermöglicht das Design photoaktiver Materialien mit verbessertem Energieumwandlungsprozess.

Die Bildung ausgedehnter COFs wird durch die sogenannte „On-Surface“-Synthese erreicht, bei der atomar flache Oberflächen als Unterlagen verwendet werden, um Polymerisationsreaktionen auf zwei Dimensionen zu begrenzen. Die COFs werden auf atomarer Ebene durch hochauflösende Rastertunnelmikroskopie (STM) sowie durch „near-ambient pressure“ Röntgen-Photoelektronenspektroskopie (NAP-XPS) charakterisiert. Dies ermöglicht interessante Einblicke in die Reaktionswege, die zum COF-Wachstum führen.

Abbildung von Exzitonen in photoaktiven Gerüsten



Skizze des Versuchsaufbaus zur Untersuchung von photoangeregten Zuständen in zweidimensionalen organischen Gerüsten.

Exzitonen sind grundlegende lichtinduzierte Anregungen, die aus gebundenen Elektron-Loch-Paaren bestehen. Sie sind das Herzstück der Photochemie, doch ihre Kurzlebigkeit macht ihre experimentelle Untersuchung zu einer echten Herausforderung. Im Rahmen des kürzlich bewilligten ERC Starting Grant „WEPOF“ arbeiten wir an neuartigen bildgebenden Verfahren, die auf fortschrittlicher Rasterkraftmikroskopie basieren, um photoangeregte Zustände in organischen Gerüsten aufzulösen.

Forschungsprojekte

- ERC Starting Grant „WEPOF“ – Watching Excitons in Photoactive Organic Frameworks, Grant Agreement ID: 101039746

Publikationen

- Leidinger et al. (2023). Probing dynamic covalent chemistry in a 2D boroxine framework by *in situ* near-ambient pressure X-ray photoelectron spectroscopy. *Nanoscale*, 15(3), 1068–1075. <https://doi.org/10.1039/d2nr04949j>
- Liu et al. (2021). Exploiting Cooperative Catalysis for the On-Surface Synthesis of Linear Heteroaromatic Polymers via Selective C–H Activation. *Angewandte Chemie*, 61(5), e202112798. <https://doi.org/10.1002/anie.202112798>
- Patera et al. (2020). Imaging Charge Localization in a Conjugated Oligophenylenes. *Physical Review Letters*, 125(17), 176803. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.125.176803>
- Patera et al. (2019). Mapping orbital changes upon electron transfer with tunnelling microscopy on insulators. *Nature*, 566(7743), 245–248. <https://doi.org/10.1038/s41586-019-0910-3>
- Patera et al. (2018). Real-time imaging of adatom-promoted graphene growth on nickel. *Science*, 359(6381), 1243–1246. <https://doi.org/10.1126/science.aan8782>

Instrumente

- Tieftemperatur-Rastertunnel-/Rasterkraftmikroskope (Betrieb bei 5–77 K)

Bodenschätzungen und Erzgeologie

Ass.-Prof. Dr.

Clifford Patten

Institut für Mineralogie und Petrographie

Innrain 52
6020 Innsbruck

E-Mail: Clifford.Patten@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/mineralogie



Ass.-Prof. Dr. Clifford Patten

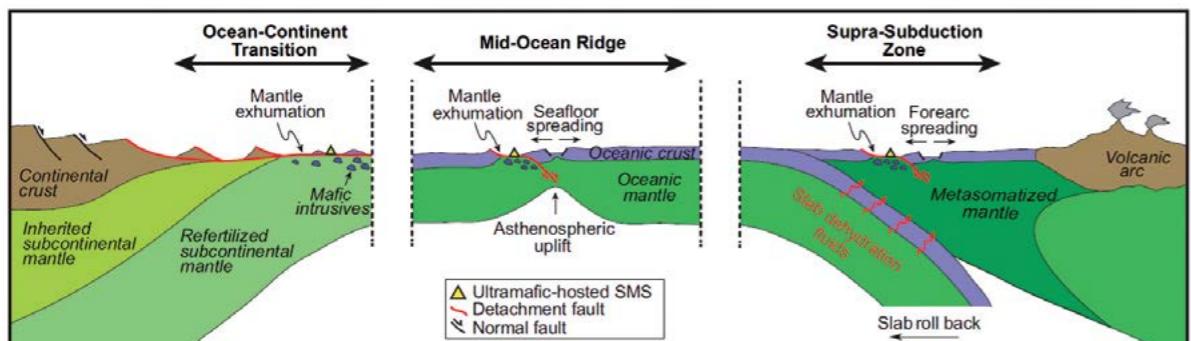
Mineralische Ressourcen sind für die Energiewende weg von fossilen Brennstoffen unerlässlich. Erzlagerstätten sind jedoch immer schwieriger zu finden, und neue Forschungsansätze sind nötig um ihre Entstehung zu verstehen. Unsere Forschung konzentriert sich auf die geologischen Prozesse, die zur Bildung von Erzlagerstätten führen. Wir betrachten die Mechanismen im Großen und Kleinen, indem wir verschiedene Bereiche der Geowissenschaften wie Tektonik, Strukturforschung, Petrographie, Mineralogie und Geochemie miteinander verbinden.

Der geochemische Kreislauf von Gold

Das Verständnis der Flüsse von Au und anderen Spurenmetallen (As, Sb, Ag, Cu, Co, Ni) während der barrowischen und blueschistischen Metamorphose ist für die Verbesserung der geologischen Modelle der orogenen Au-Lagerstätten von größter Bedeutung. Die Mobilisierung von Gold in bestimmten Terranen wie den Grünsteingürteln des Paläoproterozoikums und des Archaikums wird jedoch nach wie vor kaum verstanden. Noch weniger geklärt ist das Verhalten von Au während der blueschistischen Metamorphose. Die treibende Hypothese ist, dass Au und andere Elemente in Subduktionszonen während der Dehydrierung der Platte teilweise mobilisiert werden, was zu einer Anreicherung von Au im metasomatisierten Mantel führt und weitreichende Auswirkungen auf eine große Anzahl von Erzlagerstätten hat.

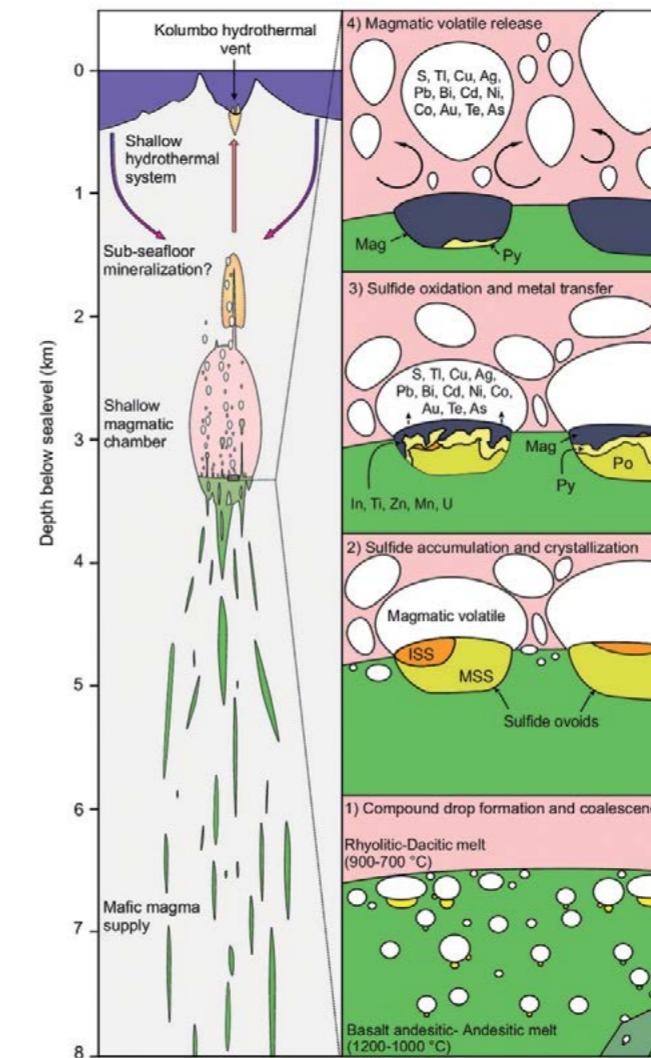
Metallmobilität in der ozeanischen Kruste

Vulkanogene Massivsulfid-Lagerstätten (VHMS) in unkonventionellen ozeanisch-tektonischen Umgebungen stellen potenzielle neue Ziele für Mineralressourcen wie Cu, Co, Ni, Zn, Au und Ag dar. Dazu gehören die so genannten ultramafischen VHMS-Lagerstätten, die sich entlang von Ablösungsfehlern mit geringem Winkel in einer Vielzahl von tektonischen Umgebungen wie dem Ozean-Kontinent-Übergang, dem mittelozeanischen Rücken und Suprasubduktions-Zonen bilden. Solche Lagerstätten haben ein großes Potenzial in den tethyschen Ophiolithen, insbesondere in den Alpen, aber ihre Entstehung wird nach wie vor schlecht verstanden.



Metallflüsse während des Inselbogenmagmatismus

Der aktive Vulkan Kolumbo in der Nähe von Santorin in Griechenland bildet sich auf einer dünnen kontinentalen Kruste und beherbergt eine epithermal ähnliche Zn-Pb-Ag-Au Mineralisierung. Der Kolumbo-Vulkan ist ein einzigartiger Ort, an dem sowohl Quell- als auch Senkenmechanismen gleichzeitig untersucht und verglichen werden können. Das enge Zusammenspiel zwischen Magmatismus und Hydrothermalismus ermöglicht ein besseres Verständnis der Metallflüsse während des Inselbogenmagmatismus, was wichtige Auswirkungen auf die Bildung von VHMS, epithermalen und porphyrischen Lagerstätten hat.



Forschungsprojekte

- UMAMI: UltraMafische Massensulfidlagerstätten am Meeresboden: ein Mineralsystemansatz
- MAuS: Mobilität von Au und verwandten Elementen in Subduktionszonen (MAuS): Erkenntnisse von den Kykladen-Inseln in Griechenland

Publikationen

- Patten et al. (2024). Transfer of sulfur and chalcophile metals via sulfide-volatile compound drops in the Christiana-Santorini-Kolumbo volcanic field. *Nature Communications*, 15, 4968. <https://doi.org/10.1038/s41467-024-48656-9>
- Hector et al. (2024). Magmatic evolution of the Kolumbo submarine volcano and its implication to seafloor massive sulfide formation. *Mineralium Deposita*, 59, 1229–1248. <https://doi.org/10.1007/s00126-024-01262-7>
- Coltart et al. (2023). Origin of Fe-Ca-Metasomatism in Exhumed Mantle Rocks at the MARK Area (23°N, ODP Leg 153) and Implications on the Formation of Ultramafic-Hosted Seafloor Massive Sulfide Deposits. *Geochemistry Geophysics Geosystems*, 24(9), e2023GC010894. <https://doi.org/10.1029/2023gc010894>
- Patten et al. (2022). Ultramafic-hosted volcanogenic massive sulfide deposits: an overlooked sub-class of VMS deposit forming in complex tectonic environments. *Earth-Science Reviews*, 224, 103891. <https://doi.org/10.1016/j.earscirev.2021.103891>
- Patten et al. (2023). Improved whole rock low detection limit gold analysis by LA-ICP-MS utilizing pressed-powder-pellets. *International Journal Of Mass Spectrometry*, 488, 117039. <https://doi.org/10.1016/j.ijms.2023.117039>

Nanostrukturierte Modellkatalysatoren

Priv.-Doz. Dr. Simon Penner

assoz. Prof. Dr. Bernhard Klötzer

Institut für Physikalische Chemie

Innrain 52c
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-58003
bzw. -58004
E-Mail: Simon.Penner@uibk.ac.at
Bernhard.Klotzer@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/physchem/research/nmci

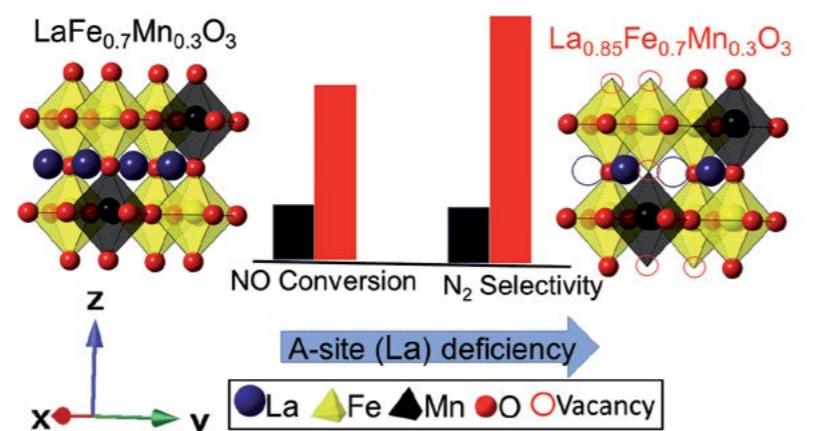


Priv.-Doz. Dr. Simon Penner
assoz. Prof. Dr. Bernhard Klötzer

Unsere Gruppe konzentriert sich auf das mechanistische Verständnis von Prozessen an der Grenzfläche zwischen Feststoff und Gas an Materialien, die für Reaktionen in der nachhaltigen Katalyse relevant sind, wie z. B. Methanoldampf- oder Methan-Trockenreformierung und die selektive katalytische Reduktion von Stickoxiden. Die Materialien reichen von Oxid- über Metallocid-Systemen bis hin zu intermetallischen Verbindungen und Legierungen. Durch die Kombination von Modellsystemen unter Ultrahochvakuum und (Pulver-)Materialien unter technologisch relevanten Bedingungen ist es unser Ziel, die „Druck“- und „Material“-Lücke in der Katalyse zu schließen. Unser Ansatz besteht ausschließlich darin, *in situ* und *operando* strukturelle und spektroskopische Techniken zu verwenden, um das Katalysatorverhalten unter nahezu realen Bedingungen zu untersuchen. Dieser interdisziplinäre Ansatz beinhaltet die Zusammenarbeit zwischen Forschern aus verschiedenen Bereichen, darunter Materialwissenschaften, Chemie, Physik und Ingenieurwesen.

Metall-Perovskit Grenzflächeneffekte in der Abgaskatalyse

Das Projekt nutzt gemischte Ionen- und Elektronenleiter einer neuen Klasse von hochgeordneten, chemisch und strukturell hochkomplexen Oxid-Materialien auf z. B. Lanthan-Kupfer-Mangan oder Lanthan-Eisen-Mangan Basis zur *in situ* Aktivierung via Ausfällung von Metall-Partikeln und der Ausbildung einer Metall-Perovskit Grenzfläche. Die physikalischen und chemischen Eigenschaften dieser Grenzflächen können gezielt durch die Synthese gesteuert werden und haben deshalb das Potential, bestehende edelmetall-basierte Materialien in energie- und umwelt-relevanten Reaktionen, wie der selektiven katalytischen Reduktion von NO mit CO, zu ersetzen. Das zentrale Thema hierbei ist die strukturelle Stabilität/Steuerung bzw. die Aufrechterhaltung katalytisch wichtiger Eigenschaften (z. B. Sauerstoffvakanzen-Verteilung, Oberflächenchemie, Redoxchemie) unter Reaktionsbedingungen. Durch die Möglichkeit die Veränderung der Eigenschaften live unter Verwendung sogenannter *in situ* Methoden, d.h. per Charakterisierung

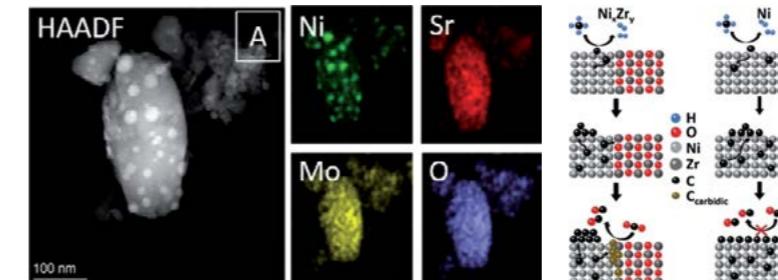


Unterstöchiometrie an der A-Seite in einem Lanthan-Eisen-Mangan Perovskit erhöht die Reaktivität und N_2 Selektivität in der selektiven katalytischen Reduktion von NO mit CO.

unter Reaktionsbedingungen, mitzuverfolgen, ergeben sich neue Einblicke in das strukturelle und chemische Verhalten dieser Materialien und eine direkte Verbindung von physikalischen und chemischen Eigenschaften mit der Reaktivität.

Trockenreformierung von Methan auf perovskit- und legierungs/intermetall-basierten Katalysatoren

Dieses Projekt befasst sich mit der Aktivierung von reaktivem Kohlenstoff während der Methantrockenreformierung. Zentrales Ziel ist ein verbessertes Design Kohlenstoff-resistenter Trockenreformierkatalysatoren auf der Basis von perovskit- und legierungs/intermetallbasierten Verbindungen mit erhöhter Langzeitaktivität und thermoochemischer Stabilität. Durch die Wahl verschiedener intermetallischer und oxidischer Vorstufen kann die chemische und strukturelle Form der Kohlenstoff-Zwischenstufen innerhalb des Reaktionsnetzwerks der Methantrockenreformierung direkt gesteuert werden. Zentrales methodisches Leitbild ist die Charakterisierung der Katalysatoren im Arbeitszustand, d. h. die *operando* Charakterisierung, die die Verknüpfung von katalytischen mit strukturellen Eigenschaften entscheidend erleichtert.



Ni Ausfällung aus einem Sr_2NiMoO_6 Doppelperovskit während der Trockenreformierung von Methan und Ausbildung einer Ni-Doppelperovskit Grenzfläche (links) und Bildung von reaktivem Zirkoncarbid in einer Kohlenstoffdioxid-Methan Mischung während dem *in situ* Zerfall einer Ni-Zr Legierung und der Bildung einer Ni-ZrO₂ Grenzfläche (rechts).

Hochtemperatur-Elektrolyse von CO_2 und H_2O

Festoxidzelltechnologien sind essentiell für die Speicherung erneuerbarer Energien und die Dekarbonisierung. Um diese Technologien voranzutreiben, ist das funktionale Verständnis elektrokatalytischer Materialien unter Hochtemperaturbedingungen unabdingbar. Operando-spektroskopische Untersuchungen, wie beispielsweise Röntgenphotoelektronenspektroskopie (NAP-XPS) nahe Umgebungsdruck, bieten Einblicke in die chemische Natur aktiver Arbeits-elektroden, einschließlich der dynamischen Reaktion von Redoxzuständen und der Adsorbatchemie auf sich ändernde elektrochemische Bedingungen. Dünnschicht-Modellzellen mit spektroskopisch zugänglichen TPB-Regionen zur Untersuchung von Grenzflächenzuständen und lokalen elektrochemischen Prozessen liefern Grundlagenwissen für die Weiterentwicklung erneuerbarer Energiespeichertechnologien.

Forschungsprojekte

- Reaktiver Kohlenstoff in der Methantrockenreformierung; FWF Projektnummer P36926
- Doppelperovskite als gemischte Ionen-Elektronenleiter; FWF Projektnummer P35770

Publikationen

- Mohammadi et al. (2024) How defects in lanthanum iron manganite perovskite structures promote the catalytic reduction of NO by CO. *Materials Today Chemistry*, 35, 101910. <https://doi.org/10.1016/j.mtchem.2024.101910>
- Thurner et al. (2023). When copper is not enough: Advantages and drawbacks of using copper in de-NOx reactions over lanthanum manganite perovskite structures. *Applied Catalysis B: Environmental*, 331, 122693. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2023.122693>
- Haug et al. (2022). Zirconium carbide mediates Coke-Resistant methane dry reforming on Nickel-Zirconium catalysts. *Angewandte Chemie International Edition*, 61(50), e202213249. <https://doi.org/10.1002/anie.202213249>
- Penner & Nezhad (2021). Steering the catalytic properties of intermetallic compounds and alloys in reforming reactions by controlled *in situ* decomposition and Self-Activation. *ACS Catalysis*, 11(9), 5271–5286. <https://doi.org/10.1021/acscatal.1c00718>
- Thurner et al. (2023). Preparation of Ni and NiCu/Yttria-Stabilized Zirconia Model Electrodes with Optimized Triple-Phase Boundary Geometry for Fundamental *Operando* Spectroscopic Studies. *Small Structures*, 5(4), 2300414. <https://doi.org/10.1002/sstr.202300414>

Kooperationen

- Comet AG
- Ceram Austria AG

Instrumente

- Near ambient Pressure X-ray Photoelectron Spectrometer, SPECS Berlin
- Vollständige Liste aller zur Verfügung stehender Geräte: www.uibk.ac.at/de/physchem/equipment

Textilchemie und Textilphysik

Univ.-Prof. Dr. Tung Pham

Dr. Noemi Aguiló-Aguayo

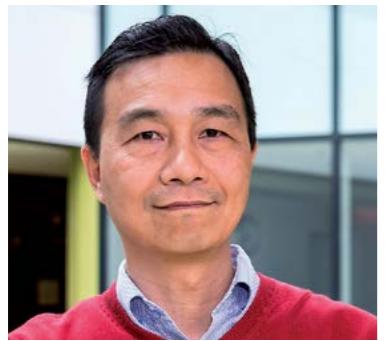
assoz. Prof. Dr. Avinash P. Manian

Forschungsinstitut für Textilchemie und Textilphysik

Höchsterstrasse 73
6850 Dornbirn

Telefon: +43 5572 28533
E-Mail: textilchemie@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/textilchemie



Univ.-Prof. Dr. Tung Pham

Dr. Noemi Aguiló-Aguayo

assoz. Prof. Dr. Avinash P. Manian

Die Forschungsaktivitäten des Forschungsinstituts für Textilchemie und Textilphysik konzentrieren sich auf Grundlagenforschung und Technologieentwicklung im Bereich Chemie der Fasern, Polymere, Farbstoffe und Advanced Materialien, einschließlich Modifizierung, Charakterisierung und Anwendung von Faser- und Textilmaterialien. Das Institut beheimatet das EU Key Enabling Technology Center und die Core Facility für Interface in Hybrid Systems.

Derzeitige Forschungsaktivitäten laufen in den Bereichen Hybridstrukturen und Grenzflächen, Energiespeicherung, Funktionstextilien, Biobasierte Materialien, Nachhaltigkeit und Zirkularität. Wir arbeiten eng mit nationalen und internationalen Unternehmen und Forschungseinrichtungen an neuen Technologien und Einsatzmöglichkeiten von Fasern und Textilien.

Hybridstrukturen und Grenzflächen

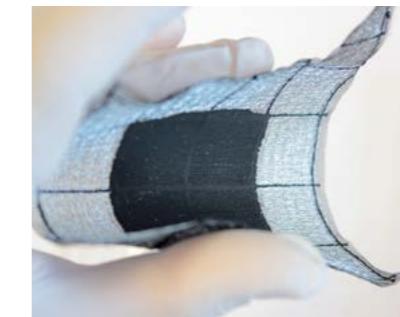


Grundlegendes Verständnis der Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Materialien in hybriden Systemen, technologische Konzepte zur Erzeugung effizienter textiler Hybridstrukturen.

Hier werden Technologien zur Faserfunktionalisierung und Oberflächenaktivierung entwickelt, die zur effizienten Grenzphasenhaftung führen. Reaktion, getriggerte Diffusion und Absorption an der Phasengrenze in heterogenen Systemen werden in Abhängigkeit der Oberflächenfunktionalisierung erforscht. Anwendungspotentiale sind z. B. salzfreie Färbung oder hoch quellende, hoch absorbierende Materialien.

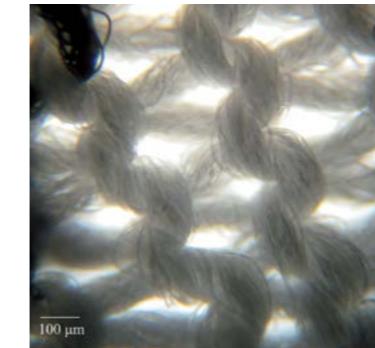
Funktionsmaterialien und Energie

Entwicklung effizienter 3-D-Textil-Elektroden und umweltfreundlicher Elektrolytssysteme für die Energiespeicherung, Integration von leitfähigen Strukturen und Sensoren in Textilmaterialien.



Einerseits werden leitende textilbasierte 3-D-Strukturen und ihre Aktivierung als Elektroden auf Effizienz in Energiespeicherung erforscht. Andererseits werden Technologien zur Bildung von leitfähigen Coatings auf Textilsubstrat entwickelt, z. B. durch stromlose Metallisierung und in-situ Polymerisation von leitfähigen Polymeren. Anwendungsbeispiele solcher leitfähigen Strukturen sind Sensoren in Medizin- und Pflegebereichen oder Personalschutzausrüstungen.

Biobasierte Materialien, Nachhaltigkeit und Zirkularität



Nachhaltige Lösungen in der Textilanwendung, biobasierte Fasermaterialien, Rückgewinnung und Wiedernutzung von Textilabfällen als sekundäre Rohstoffe.

Forschungsaktivitäten zielen z. B. auf die verstärkte Nutzung von nachwachsenden Materialien wie z. B. Fasern aus Hanf und Flachs durch gezielte Delignifizierung bzw. Erweiterung des Einsatzes von cellulosischen Fasern durch Derivatisierung auf. Ein weiterer Forschungsschwerpunkt ist die Technologieentwicklung zur Trennung und Rückgewinnung von Faserpolymeren aus Alttextilien, z. B. Separierung von elastischem Polyurethan (Elastan) aus Fasergemischen mit Polyamid bzw. Polyester. Dadurch können Alttextilien als wertvolle sekundäre Rohstoffe wieder in dem Faser-zu-Faser Kreislauf genutzt werden.

Kooperationen

- Lenzing AG
- Lohmann & Rauscher GmbH
- Fraunhofer-Institut für Chemische Technologie ICT

Forschungsprojekte

- Marie Skłodowska-Curie Doctoral Network Redox Flow Batteries (SPACER)
- Textile Competence Center Vorarlberg (TCCV), COMET – Competence Center for Excellent Technologies

Publikationen

- Vonbrül et al. (2024). Solvent blends for selective elastane dissolution and recovery from mixed polyamide fabrics. *Resources, Conservation And Recycling*, 200, 107302. <https://doi.org/10.1016/j.resconrec.2023.107302>
- Mayer et al. (2024). Enhancing the attraction of positively charged precursors of conductive polymer poly(3,4-ethylenedioxythiophene) by anchoring sulfonate groups in cellulose fibres. *Polymer*, 127122. <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2024.127122>
- Aguiló-Aguayo et al. (2024). Comparative Analysis of Thermal Activation on Felts and Continuous Carbon Filament Electrodes for Vanadium Redox Flow Batteries. *ChemElectroChem*, 11, e202400417. <https://doi.org/10.1002/celc.202400417>
- Gleissner et al. (2023). Modification of PA66 fibres with in-situ polymerisation of 2-hydroxyethylmethacrylate. *Surfaces And Interfaces*, 43, 103573. <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2023.103573>
- Wurm et al. (2025). Production of separation of knitted lyocell-cellulose acetate fabrics from crimped CA fibers. *Resources Conservation and Recycling*, 212, 107959. <https://doi.org/10.1016/j.resconrec.2024.107959>

Instrumente

- AFM gekoppelt mit nanoIR, nanoTA, nanoLCR
- GPC, HPLC, IR, SEM/EDX, elektrokinetischer Analysator
- Rheometrie und dynamisch-mechanische Thermoanalyse
- Potentiostaten, elektrochemische Impedanzspektroskopie
- Atmosphärische Plasmamodifikation
- Hochgeschwindigkeitszerreiß- und -durchstoßtest
- Klimakammer

Batterietechnologien

Priv.-Doz. Dipl.-Ing. Dr.
Engelbert Portenkirchner

Institut für Physikalische Chemie

Innrain 52c
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-58014
E-Mail: Engelbert.Portenkirchner@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/physchem/forschung/batterietechnologien



Priv.-Doz. Dipl.-Ing. Dr. Engelbert Portenkirchner

Die nachhaltige Energiespeicherung ist eine der großen Herausforderungen des einundzwanzigsten Jahrhunderts. Als Antwort auf die Bedürfnisse der modernen Gesellschaft und die aufkommenden Umweltbedenken ist eine verbesserte Energiespeicherung unerlässlich, um die Nutzung von mehr erneuerbaren Energien im Netz zu ermöglichen und den Übergang von benzinbetriebener zu kohlenstoffneutraler Mobilität zu schaffen. Daher sind neue chemische Prozesse, die von Natur aus ökoeffizient und umweltfreundlich sind, von entscheidender Bedeutung.

Meine Forschung widmet sich den Herausforderungen und Chancen neuerlicher, innovativer Konzepte, chemischer Verfahren und Architekturen für moderne Energiespeichersysteme. Mein Ziel ist es, die Grenzen für fortschrittliche Energiespeichersysteme zu erweitern, die kostengünstig und umweltfreundlich sind.

Auf dem Weg zur Bio-Batterie

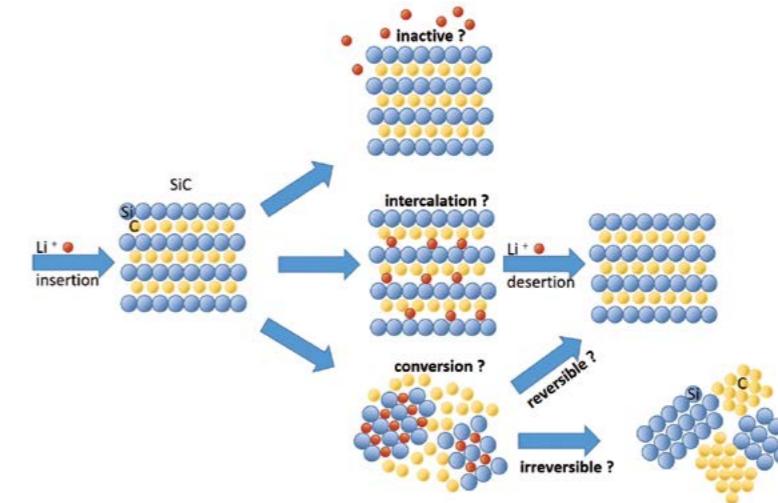
Eine kompostierbare Batterie, kostengünstig hergestellt und gleich leistungsfähig wie gängige Lithium-Ionen-Akkus: Was nach der eierlegenden Wollmilchsau klingt, könnte in einigen Jahren Wirklichkeit sein. Unsere Gruppe arbeitet daran, eine Batterie zu entwickeln, die auf organischen Materialien und Natrium-Ionen basiert. Dabei handelt es sich um Materialien, die eine hohe theoretische Kapazität besitzen, billig produziert werden können, nicht toxisch sowie biokompatibel sind, was wiederum den großen Vorteil bietet, dass die so hergestellten Batterien einfacher recycelt werden können.



Vorschlag für einen geschlossenen Prozess für nachhaltige organische Na-Ionen-Batterien auf der Grundlage von Elektrodenmaterialien aus polyaromatischen Kohlenwasserstoffen, die aus natürlichen Ressourcen gewonnen und wieder recycelt werden können.

Vielversprechende Alternative Materialien für die Batterieforschung

Batterien mit höherer Kapazität sind spätestens seit dem Vormarsch der Elektromobilität ein wesentliches Ziel in der Batterieforschung. Wir forschen an neuen Materialien, die dies möglich machen könnten. Als Grundlagenforscher wollen wir deshalb den allgemeinen Mechanismus der Lithium-Ionen-Speicherung in Materialien wie Siliziumkarbid (SiC) durch ein sorgfältiges, systematisches Design von Materialien identifizieren und charakterisieren.



Schematische Zusammenfassung der derzeit diskutierten Theorien über den Mechanismus der Li-Ionen-Speicherung in SiC: Inaktivität, Intercalation, reversible Umwandlung und irreversible Umwandlung.

Forschungsprojekte

- Vorhersage von thermischen und elektrischen Verlusten in Hochleistungs-Natrium-Ionen Speicher; FFG Projektnummer: 914795
- Lithium-Migration und -speicherung in Siliziumkarbid; FWF-Projektnummer: P35510

Publikationen

- Liebl et al. (2024). Perylenetetracarboxylic Diimide Composite Electrodes as Organic Cathode Materials for Rechargeable Sodium-Ion Batteries: A Joint Experimental and Theoretical Study. *ACS Omega*, 9(6), 6642–6657. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c07621>
- Stüwe et al. (2023). Enhanced Electrochemical Performance of NTP/C with Rutile TiO2 Coating, as Anode Material for Sodium-Ion Batteries. *Batteries & Supercaps*, 6(10), e202300228. <https://doi.org/10.1002/batt.202300228>
- Griesser et al. (2023). Lab-based electrochemical X-ray photoelectron spectroscopy for in-situ probing of redox processes at the electrified solid/liquid interface. *Electrochemical Science Advances*, 4(3), e2300007. <https://doi.org/10.1002/elsa.202300007>
- Winkler et al. (2022). What is limiting the potential window in aqueous sodium-ion batteries? Online study of the hydrogen-, oxygen- and CO2-evolution reactions at NaTi2(PO4)3 and Na0.44MnO2 electrodes. *Electrochemical Science Advances*, 3(6), e2200012. <https://doi.org/10.1002/elsa.202200012>
- Szabados et al. (2022). Sodium-Containing Surface Film Formation on Planar Metal-Oxide Electrodes with Potential Application for Sodium-Ion and Sodium-Oxygen Batteries. *Advanced Energy And Sustainability Research*, 3(12), 2200104. <https://doi.org/10.1002/aesr.202200104>

Kooperationen

- Kite Rise Technologies GmbH
- Sunplugged GmbH
- DePro Control GmbH
- LAMBDA Wärmepumpen GmbH
- V-Trion Textile Research GmbH

NanoBio Physik

Univ.- Prof. Dr. Paul Scheier

Dr. Elisabeth Gruber

Institut für Ionenphysik und Angewandte Physik

Technikerstraße 25
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-52660
bzw. -52670
E-Mail: paul.scheier@uibk.ac.at
e.gruber@uibk.ac.at

[www.uibk.ac.at/ionen-
angewandte-physik/nanobio](http://www.uibk.ac.at/ionen-angewandte-physik/nanobio)



Univ.- Prof. Dr. Paul Scheier
Dr. Elisabeth Gruber

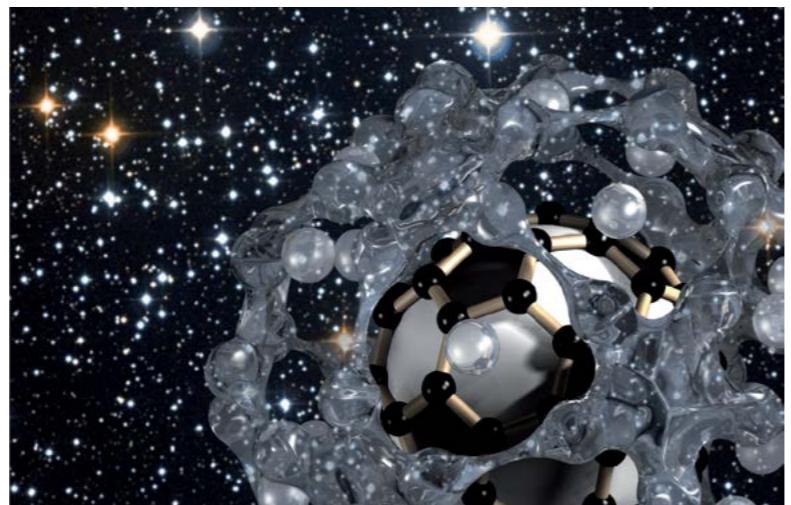
Pickup von Atomen und Molekülen in hochgeladene Heliumtröpfchen ermöglicht die effektive Erzeugung grösenselektierter Cluster und Nanoteilchen. Darüber hinaus können Ionen mit einigen Heliumatomen angeragt erzeugt werden, die ideale Voraussetzungen für Spektroskopie bieten.

Clusterphysik/Nanopartikel

Durch die Mehrfachionisierung von reinen Helium-Nanotröpfchen (HND) werden Ladungszentren in Konfigurationen mit minimaler Energie nahe der Oberfläche der Tröpfchen verteilt, wo sie einen 2D-Wigner-Kristall bilden. Die Dotierstoffe werden polarisiert und von diesen Ladungszentren angezogen, was zu einem homogenen Wachstum von einfach geladenen Clustern und Nanopartikeln mit einer bisher unerreichten engen Größenverteilung führt. Diese Dotierstoff-Cluster-Ionen können, noch gelöst mit bis zu einigen 100 He-Atomen, durch Abspritzen der HND bei Oberflächenkollisionen oder durch kontrolliertes Schrumpfen in einem Helium-Puffergas aus den großen Wirtströpfchen, entfernt werden.

Laborastrophysik

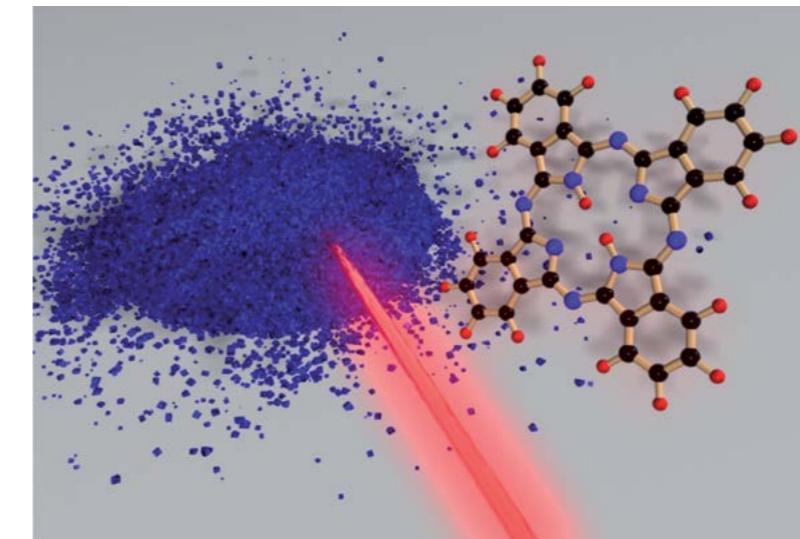
Derzeit sind mehr als 200 Moleküle im interstellaren Medium identifiziert worden. Darüber hinaus haben Astronomen mehr als 600 Absorptionsbanden in diffusen interstellaren Wolken aufgezeichnet, in denen UV-Licht schwere Elemente und die meisten Moleküle ionisieren dürfte. Unter Verwendung von He-Tags als Botenstoffe für die Photoabsorption ist es möglich, elektronische Übergänge von kalten Molekülionen und -clustern zu bestimmen und sie mit Absorptionslinien zu vergleichen, die von modernen astronomischen Teleskopen sowohl am Boden als auch im Weltraum aufgezeichnet werden.



He-markiertes C_{60}^+ vor einem Bild des Himmels (Foto: Alexander Ebenbichler). Die Laserspektroskopie solcher schwach gebundenen Komplexe ermöglicht die Bestimmung von Absorptionslinien kalter Kationen und Anionen vom UV bis zum IR bei Einzelphotonenabsorption. Diese Spektren werden mit Beobachtungsdaten verglichen, die mit boden- und weltraumgestützten Teleskopen gewonnen wurden.

Ionenspektroskopie

Die Laserspektroskopie kalter Ionen in Kombination mit quantenchemischen Berechnungen gibt Aufschluss über die Wechselwirkung von Molekülen mit nach Masse ausgewählten Metalclusterionen. Die Aktivierung ansonsten inerter Moleküle, wie CH_4 oder CO_2 , kann in Abhängigkeit von der Clustergröße gemessen werden, was als erster Schritt für eine katalytische Reaktion angesehen werden kann. Die niedrige Bindungsenergie von He-Tagganten ist von Vorteil, da die Absorption eines einzigen IR-Photons zu dessen Verlust führt und durch Massenspektrometrie aufgezeichnet werden kann.



Die Photoabsorption von kalten ionischen Komplexen kann mit Hilfe der He-Botspektroskopie gemessen werden. Das Bild zeigt einen roten Laser, der auf eine Phthalocyaninprobe trifft – die Struktur des Moleküls ist ebenfalls dargestellt. Mit dieser Technik lassen sich die Auswirkungen der Solvatation einschließlich der Hydratation von Biomolekülen in Abhängigkeit von der Anzahl der Lösungsmittelmoleküle untersuchen.

Forschungsprojekte

- Hochgeladene Heliumtröpfchen; FWF-Projektnummer P34563
- SupremeByNano; K-Regio Projekt

Publikationen

- Bergmeister et al. (2024). Gas-Phase Electronic Structure of Phthalocyanine Ions: A Study of Symmetry and Solvation Effects. *Advanced Science*, 11(12), 2307816. <https://doi.org/10.1002/advs.202307816>
- Reider et al. (2024). Experimental and theoretical assessment of the enhanced hydrogen adsorption on polycyclic aromatic hydrocarbons upon decoration with alkali metals. *International Journal Of Hydrogen Energy*, 58, 525–535. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.01.244>
- Zununegui-Bru et al. (2023). Observation of Multiple Ordered Solvation Shells in Doped Helium Droplets: The Case of $HeNCa^{2+}$. *The Journal Of Physical Chemistry Letters*, 14(13), 3126–3131. <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.3c00224>
- Martini et al. (2021). Splashing of Large Helium Nanodroplets upon Surface Collisions. *Physical Review Letters*, 127(26), 263401. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.127.263401>
- Laimer et al. (2019). Highly Charged Droplets of Superfluid Helium. *Physical Review Letters*, 123(16), 165301. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.123.165301>

Kooperationen

- Plansee
- Swarovski Optik
- PhysTech
- MedEl
- PlanLicht

Photoaktive Hybridsysteme

Ass.-Prof. Dr.

Heidi Annemarie Schwartz

Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie

Innrain 80 – 82
6020 Innsbruck

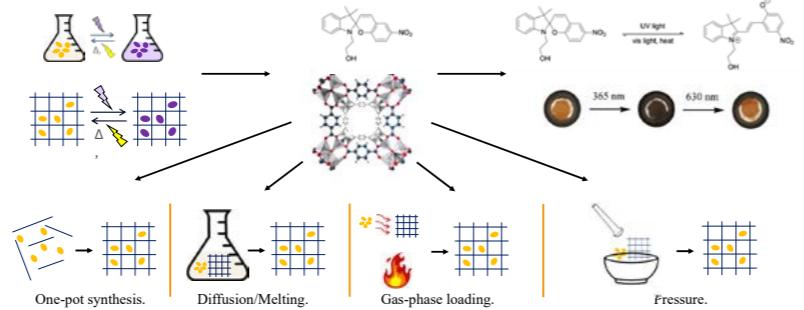
Telefon: +43 676 872557033
E-Mail: heidi.schwartz@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/aatc/ag-schwartz



Ass.-Prof. Dr. Heidi Annemarie Schwartz

Der Forschungsschwerpunkt der Arbeitsgruppe liegt auf der Entwicklung photoaktiver anorganisch-organischer Hybridmaterialien. Hybridmaterialien sind dabei Substanzen, die aus mindestens zwei Komponenten bestehen und im Zusammenspiel neue Eigenschaften aufweisen. So macht es die Kombination aus porösen Wirtsstrukturen mit photoaktiven Molekülen und Komplexen möglich, Photoschaltbarkeit (z.B. Änderung der Farbe durch Einstrahlung von Licht) und Leuchteigenschaften wie in Lösung oder sogar noch effizienter zu erreichen. Durch geeignete Wahl der Wirtsmatrix und des Gastes können diese Eigenschaften gezielt eingestellt werden. Das ist vor allem hinsichtlich Anwendungen in der Datenspeicherung, in Sensoren oder OLEDs interessant.



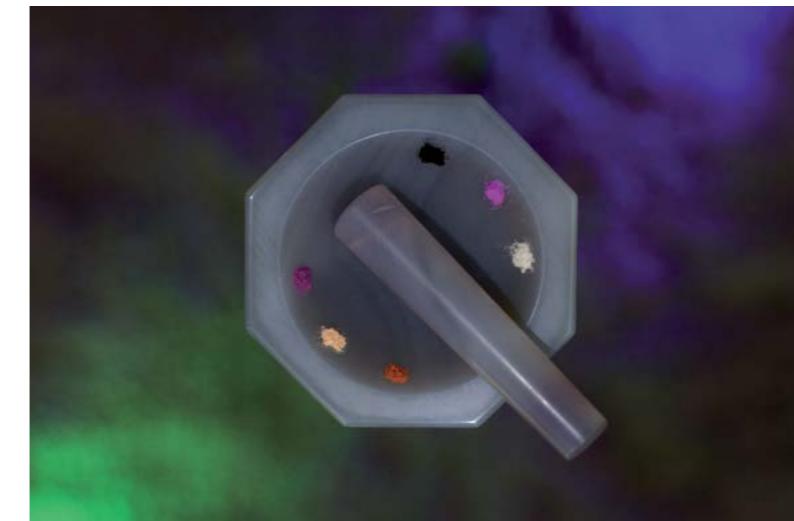
Photoaktive Hybridmaterialien

Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit photoaktiven Hybridmaterialien bestehend aus porösen Metall-Organischen Gerüstverbindungen (MOFs) und photochromen/lumineszenten (an)organischen Molekülen und Komplexen. Photoaktive Substanzen zeigen vornehmlich in Lösung ihre optischen Eigenschaften, die im Feststoff durch sterische Hinderung limitiert werden. Die Einbettung in die poröse Struktur von MOFs hat dabei den Vorteil, dass die betreffende Spezies voneinander separiert wird. Zum einen führt das dazu, dass lichtinduzierte Isomerisierungsprozesse auch im Feststoff möglich werden, zum anderen können Phänomene wie das Löschen von Lumineszenz durch Aggregation verhindert werden. Darüber hinaus können MOFs in ihren physikochemischen Eigenschaften durch gezielte Änderung der Grundbausteine variiert und somit gewünschte Eigenschaften eingestellt werden, die wiederum die optische Antwort des Gesamtmaterials moduliert.

Die Zwei- oder Mehrkomponentensysteme werden dabei über verschiedene Synthesewege dargestellt, die von "Eintopf"-Synthesen, über Diffusionsbeladung hin zu Gasphasenbeladung und Mechanochemie reichen. Die so erhaltenen Materialien werden dann über verschiedene diffraktometrische und spektroskopische Methoden hinsichtlich ihrer optischen Eigenschaften untersucht.

Strukturlösung teilamorpher Systeme mittels verschiedener diffraktometrischer und spektroskopischer Methoden

Um die resultierenden optischen Eigenschaften eines Hybridmaterials nachvollziehen und vor allem gezielt einstellen zu können, muss die Art der Wechselwirkung zwischen den Einzelkomponenten verstanden werden. Durch Kombination von verschiedenen analytischen Methoden (ssNMR, totale Röntgenstreuung gekoppelt an PDF, IR- und UV/Vis Spektroskopie) mit Modellierung sollen photoaktive Hybridsysteme vollständig charakterisiert und die Struktur-Eigenschafts-Beziehungen strukturell abgeleitet werden. Der so aufgestellte Charakterisierungs-Work-Flow kann dann auf andere (teil-)amorphe Systeme übertragen werden.



Forschungsprojekte

- DYSPHOM – Methods for the Dynamic & Structural analysis of Photoswitches@MOF, FWF Projektnummer I6735

Publikationen

- Schwartz et al. (2024). Polarity Profiling of Porous Architectures: Solvatochromic Dye Encapsulation in Metal-Organic Frameworks. *Journal Of Materials Chemistry C*, 12(24), 8759–8776. <https://doi.org/10.1039/d4tc01401d>
- Schwartz et al. (2024). Fluorinated Azobenzenes in UiO-66: Unveiling Unprecedented Photoswitching Stability and Efficiency in Azobenzene-Based Switch@MOF Systems. *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie*, 650(11-12), e202400018. <https://doi.org/10.1002/zaac.202400018>
- Küssner et al. (2023). Tuning Solid-State Switching of the First Dihydroazulene@MOF Hybrid Materials. *Chemistry Of Materials*, 35(17), 6953–6965. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.3c01224>
- Fischereder et al. (2023). From Blue Jeans to Luminescent Materials: Designing Thioindigo-Based Red-Fluorescent Hybrid Systems. *The Journal Of Physical Chemistry C*, 127(31), 15657–15668. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c04123>
- Greussing et al. (2023). Mechanochemical Loading: An Alternative Route to form Spiropyran@MOF Composite Materials. *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie*, 649(8), e202200273. <https://doi.org/10.1002/zaac.202200273>

Instrumente

- UV/Vis und IR Spektroskopie
- DSC/TGA Thermische Analyse
- Powder X-ray diffraction (PXRD)

Mineralogie - Petrologie

Univ.-Prof. Dr. Roland Stalder

ao. Univ.-Prof. Dr. Jürgen Konzett

Ass.-Prof. Dr. Bastian Joachim-Mrosko

Institut für Mineralogie und Petrographie

Innrain 52
6020 Innsbruck

E-Mail: roland.stalder@uibk.ac.at
juergen.konzett@uibk.ac.at
bastian.joachim@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/en/mineralogy/staff/stalder
www.uibk.ac.at/en/mineralogy/staff/konzett
www.uibk.ac.at/en/mineralogy/staff/joachim

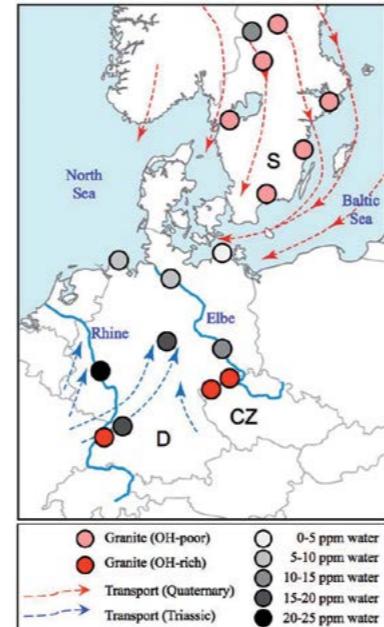


Im Arbeitsbereich Mineralogie – Petrologie untersuchen wir natürliches und synthetisches Material mit Hilfe von chemischer Mikro-Analytik hinsichtlich Haupt- und Spurenelemente (in Kooperation mit internationalen Forschungspartnern auch hinsichtlich isotopischer Zusammensetzung). Die gewonnenen Daten können direkt Auskunft über die Herkunft des Materials geben (Provenienz-Analyse) oder zur Berechnung von Verteilungskoeffizienten verwendet werden, die dann ihrerseits als geologische Thermometer oder Barometer oder zur Modellierung geologischer Kreisläufe verwendet werden können.

Das natürliche Material kommt aus fast allen erdenklichen Umgebungen, von alpinen Gesteinen über Fluss-Sedimenten bis hin zu vulkanischem Material aus dem tiefen Erdinnern und kosmischem Material wie Meteoriten. Mit Hilfe von Hochdruck- und Hochtemperatur-Experimenten sollen Rückschlüsse auf die Entstehungsbedingungen gezogen werden und eine Antwort auf die Frage gegeben werden, welche Bedingungen müssen geherrscht haben, um die in der Natur beobachteten Phasen und deren Elementverteilung zu erhalten. Die Kenntnis der Entstehungsbedingungen ermöglicht auch die gezielte Synthese von Material.

Spurenelemente in Quarz

Quarz ist das zweithäufigste Mineral in der Erdkruste und ein wichtiger Bestandteil vieler Gesteinsarten. Quarz kristallisiert vor allem in wasserführenden Granitsystemen, wo der nominell wasserfreie Quarz durch gekoppelte Austauschreaktionen Wasser als Defekte in das Kristallgitter einbaut. Defekt-Wasser-Gehalte in variszischen Graniten (0,3 Mrd. Jahre) sind um eine Größenordnung höher als in proterozoischen Graniten (0,9-1,8 Mrd. Jahre) aus Skandinavien. Der Wasser-Gehalt spiegelt sich in rezenten Sedimenten und postvariszischen Sedimentgesteinen wider und zeigt eine SW-NE-Gradation. Im 1,4 Mrd. Jahre alten Sandstein aus Dalarna/Schweden sind höhere OH-Gehalte erhalten (Stalder 2021).

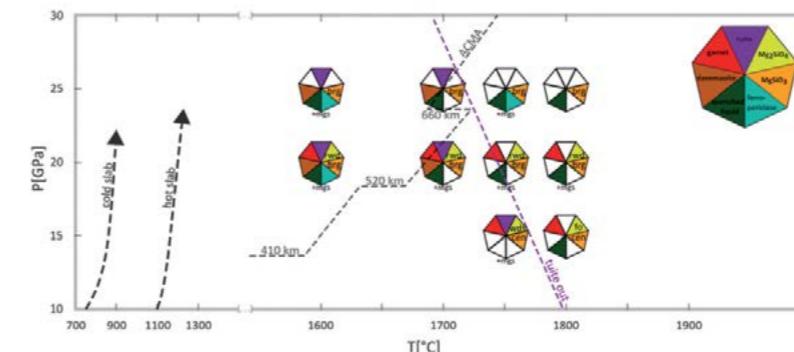


Mineralische Reaktionssäume

Mineralische Reaktionssäume enthalten eine Fülle von Informationen, die zur Entschlüsselung der Bedingungen während der Umwandlung verwendet werden können. Einer der wichtigsten Parameter für die Entwicklung von Saumkristalleinheiten ist die Anwesenheit von Wasser. Reaktionssäume haben das Potenzial, Schwankungen der Wassermenge an den Korngrenzen zu „bemerkern“, wodurch sie als empfindliche „Geohygrometer“ verwendet werden können. Darüber hinaus kann die Auswirkung von Wasser auf die relativen Schichtdicken es ermöglichen, zwischen wasseruntersättigten und wassergesättigten Bedingungen während der Umwandlung zu unterscheiden (Franke et al. 2023).

Phosphor-Kreislauf in der tiefen Erde

Calciumphosphate sind wichtige Träger für Phosphor, Halogene und inkompatible Spurenelemente in der Erdkruste und im Erdmantel. Die Hochdruckphase Tuit ist bis mindestens 25 GPa (und damit bis zu einer Tiefe von mindestens 700 km) und 1700 °C stabil. Jenseits der Stabilitätsgrenze von Majorit-Granat ist Tuit also der wichtigste kristalline Phosphorträger im oberen Bereich des unteren Erdmantels (Pausch et al. 2024).



Publikationen

- Stalder (2021): OH point defects in quartz – a review. *European Journal of Mineralogy*, 33, 145–163
<https://doi.org/10.5194/ejm-33-145-2021>
- Franke et al. (2023). Metamorphic reaction kinetics at anhydrous to water-saturated conditions in the binary MgO-SiO₂ system. *Contribution to Mineralogy and Petrology*, 178, 87
<https://doi.org/10.1007/s00410-023-02064-2>
- Pausch et al. (2024). The role of calcium phosphates and silicates in the storage and transport of phosphorus at the upper-to-lower mantle transition: An experimental study to 25 GPa in a model peridotitic bulk composition, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 374, 200–216.
<https://doi.org/10.1007/s00410-023-02064-2>

Instrumente

- Elektronenstrahl-Mikrosonde
www.uibk.ac.at/en/mineralogy/facilities/electron-probe
- Raman-Spektroskopie
www.uibk.ac.at/en/mineralogy/facilities/raman
- FTIR-Spektroskopie
www.uibk.ac.at/en/mineralogy/facilities/ft-ir-spectroscopy
- Hochdruck-Apparaturen
www.uibk.ac.at/en/mineralogy/facilities/high-pressure

Chemieingenieurwesen & Materialprozesstechnik

Univ.-Prof. Dr.
Oliver I. Strube

Institut für Chemie-ingenieurwissenschaften

Innrain 80 – 82
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-55300
E-Mail: oliver.strube@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/chemie/ingenieurwissenschaften/cme

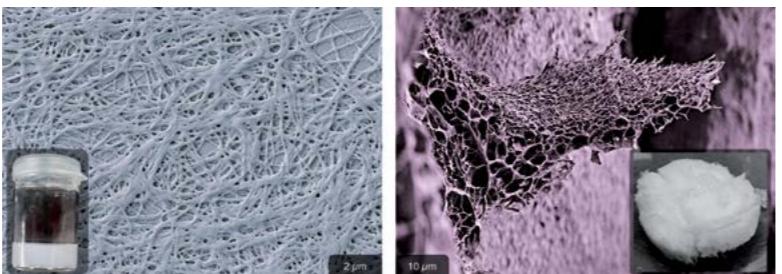


Univ.-Prof. Dr. Oliver I. Strube

Der gemeinsame Fokus unserer Forschungsprojekte ist die Verknüpfung von biologischen Motiven mit materialtechnischen Anwendungen und modernen verfahrenstechnischen Prozessen. So nutzen wir zur Darstellung innovativer Materialien oftmals vielfältige Rohstoffe, die uns die Natur zur Verfügung stellt. Viele unserer Projekte folgen zudem dem Prinzip der Biomimetik. Dabei werden Prozesse aus der Natur abstrahiert und auf eine technische Fragestellung angewendet. Dies führt beispielsweise zu Kalmar-inspirierten Glasfaser-verbunden und der Idee einer Schlangenhaut-inspirierten Kreislaufwirtschaft für lackierte Oberflächen. Neben industrieller Anwendbarkeit der Materialien legen wir großen Wert auf ein tiefgehendes Verständnis der zugrundeliegenden Prozesse und Strukturen. Dazu schauen wir z. B. mit hochauflösenden Mikroskopiemethoden tief in den Aufbau und die Chemie unserer Materialien.

Bioinspirierte Materialien

Dieser Schwerpunkt umfasst biobasierte Rohstoffe und biomimetische Strukturen. Die Herstellung von biogenen, funktionellen Materialien erfolgt bevorzugt aus Abfallstoffen wie Chitin oder Terpenen. Dabei legen wir stets großen Wert auf einen funktionellen Vorteil der biobasierten Systeme. Auch zahlreiche mikro- und nanoskalige Strukturelemente in unseren Materialien sind von der Natur inspiriert. Zusätzlich erforschen wir neue Materialien und Beschichtungsverfahren für Anwendungen im medizinischen Bereich. Konkrete Forschungsthemen sind enzymmodulierte Nanostrukturierung von Oberflächen, Materialien aus Melanin und enzymfreie Hydrogele aus dem Blutprotein Fibrinogen.



REM-Aufnahmen und Photographien von faserförmigen Fibrinogen-Hydrogele (links) und den daraus hergestellten gefriergetrockneten Aerogelen (rechts).

Beschichtungstechnologien

Ein Großteil unserer Forschung weist einen direkten Bezug zu Beschichtungen vielfältiger Art auf. Dabei betrachten wir das System „Lack“ ganzheitlich, das heißt mikroskopisch, makroskopisch und prozesstechnisch. Ziel ist dabei meist, eine spezielle Funktionalität zu integrieren. Auch die Erforschung innovativer Applikationsprozesse gehört zu unserer Expertise. Beispielsweise forschen wir an der Beschichtung von Verstärkungsfasern direkt im Spinnprozess, an feuchteadaptiven Beschichtungen für Innendämmssysteme und an Palladium-Beschichtungen für die selektive Abscheidung von Wasserstoff.

Kreislaufwirtschaft

Im Sinne einer vollumfänglichen Kreislaufwirtschaft befassen wir uns insbesondere mit der gezielten Enthaftung von Beschichtungen sowie der Auftrennung von flüssigen Restströmen der Lackindustrie. Dies sind aus wirtschaftlichen wie auch aus regulatorischen Gründen äußerst relevante Themen für die Lackindustrie. Hier entwickeln wir Verfahren und Prozesstechnologien, mit denen z. B. Beschichtungen nach ihrer Lebensdauer restlos wieder vom Untergrund abgelöst werden können. Außerdem entwickeln wir verfahrenstechnische Anlagen, mit denen Wasserlacke wieder in ihre Komponenten aufgetrennt werden können.



Ein gezielt von einem Holzsubstrat abgelöster Lackfilm. Mit den von uns entwickelten Lacksystemen ist ein rückstandsloses Ablösen der Beschichtung vom Untergrund jederzeit möglich.

mer DMA 8000

Kooperationen

- ADLER-Werk Lackfabrik – Johann Berghofer GmbH & Co. KG
- Leonhard Lang GmbH
- D. Swarovski KG
- Herkula Farben GmbH
- HyDepot GmbH
- Luxner Engineering ZT GmbH
- Miba Sinter Austria AG
- PhysTech Coating Technology GmbH
- Proionic GmbH

Instrumente

- Rasterkraftmikroskop (AFM) Bruker nanoIR 3 mit IR-Kopplung
- Rasterelektronenmikroskop (REM) Tescan Clara Ultra-High-Resolution mit STEM-, EDX- und EBSD-Detektor
- Rasterelektronenmikroskop (REM) Thermo Scientific Phenom XL mit EDX-Detektor
- Dynamische Lichtstreuung: Malvern ZetaSizer Ultra
- Thermogravimetrischer Analysator PerkinElmer TGA 8000
- Dynamisch-Mechanischer Analysator PerkinEl-

NMR-Spektroskopie

assoz. Prof. Dr.

Martin Tollinger

Institut für Organische
Chemie

Innrain 80 – 82
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-57730
E-Mail: martin.tollinger@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/organic/tollinger

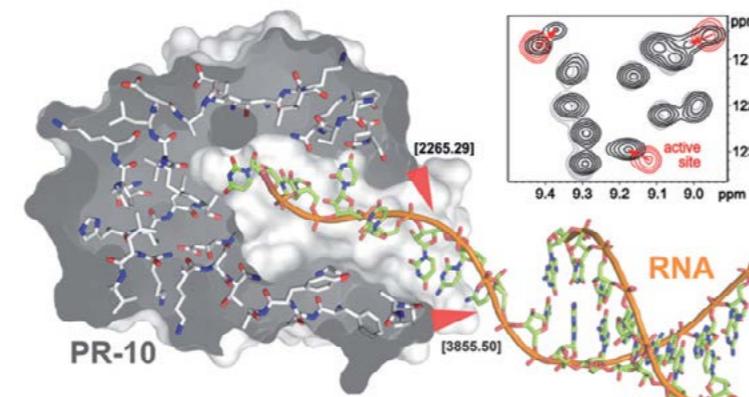


assoz. Prof. Dr. Martin Tollinger

Wir untersuchen zeitabhängige und dynamische Phänomene in komplexen Systemen. Hierbei setzen wir experimentell auf NMR-Spektroskopie (Kernspinresonanz-Spektroskopie), welche es uns ermöglicht, den zeitlichen Ablauf chemischer Reaktionen mit atomarer Auflösung zu beobachten und zu quantifizieren. Dies verschafft uns ein tiefgehendes Verständnis jener Faktoren, die die Effizienz chemischer Reaktionen bestimmen. Besonders interessieren uns dabei biologische Systeme, hauptsächlich Proteine und Proteinkomplexe. Diese Biomoleküle fungieren als hochspezialisierte und effiziente Katalysatoren verschiedenster chemischer Reaktionen. Zudem zeichnen sie sich durch ihre strukturelle Dynamik aus, eine für ihre Funktion wesentliche Eigenschaft, die NMR-spektroskopisch charakterisiert werden kann. Aufgrund ihrer Komplexität stellen Biomoleküle eine experimentelle Herausforderung dar, die den Einsatz von Hochfeld-NMR-Spektroskopie erfordert.

Biokatalyse

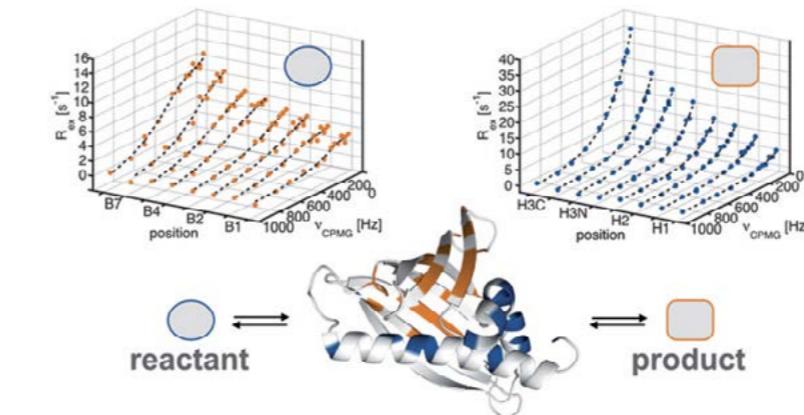
NMR-Spektroskopie bietet die Möglichkeit, die chemische Umsetzung von Verbindungen durch katalytisch aktive Proteine (Enzyme) zu charakterisieren. Hierbei ist es möglich, sowohl den Reaktionsverlauf selbst als auch strukturelle Änderungen des Enzyms während der katalytischen Reaktion zu beobachten. Aktuelle Beispiele aus unserer Arbeitsgruppe betreffen den Abbau von Ribonukleinsäuren durch PR-10 Proteine, eine in der Natur weit verbreitete Familie von Ribonukleasen. Für diese Proteininfamilie gelang es uns erstmals, den Mechanismus des RNA-Abbaus im Detail zu charakterisieren. Im ersten Schritt werden einzelsträngige RNA-Segmente in einen Hohlraum der PR-10-Proteine gebunden. Erst im zweiten Schritt wird die RNA-Kette an der Proteinoberfläche hydrolytisch in Fragmente geschnitten und freigesetzt.



Einzelsträngige RNA, gebunden an ein PR-10 Protein. NMR-spektroskopische Identifikation der katalytisch aktiven Zentren an der Proteinoberfläche.

Strukturelle Dynamik

Biomoleküle zeichnen sich durch ihre inhärente strukturelle Dynamik aus, die in funktionalem Zusammenhang mit ihrer Funktion steht. In unserer Forschung beschäftigen wir uns mit der strukturellen Dynamik von Proteinen im Milli- bis Mikrosekundenbereich. In diesem Zeitfenster finden lokale Umlagerungen der dreidimensionalen Struktur statt, welche die Bindung von bioaktiven Verbindungen (Liganden, Enzymsubstraten etc.) ermöglichen. NMR-Spektroskopie erlaubt die ortsaufgelöste und quantitative Beobachtung dieser strukturellen Dynamik. Durch die Kombination mit anderen biophysikalischen Methoden wird der Zusammenhang zwischen struktureller Dynamik und Bindungsaffinität experimentell zugänglich.



NMR-Relaxationsdispersionsmessungen zur Charakterisierung funktionaler struktureller Dynamik in der Biokatalyse.

NMR-Methodenentwicklung

Wir beschäftigen uns mit der Entwicklung und Optimierung NMR-spektroskopischer Methoden, insbesondere zur quantitativen Untersuchung dynamischer Phänomene. Unser Interesse gilt vor allem der Bindung von niedrigmolekularen Verbindungen (Liganden) an biologische Targets. Der dynamische Prozess von Assoziation und Dissoziation kann mit einer von uns entwickelten Methode durch Kernspin-Relaxationsmessungen am Ligandenmolekül untersucht werden. Die Quantifizierung des Assoziations- und Dissoziationsprozesses ermöglicht die Bestimmung der Verweilzeit des Liganden im Komplex, eine Kerngröße zur Optimierung der Effizienz von bioaktiven Verbindungen. Zudem können thermodynamische Daten zur Komplexbildung bestimmt werden.

Forschungsprojekte

- Mechanismus des RNA-Chaperons RocC; FWF-Projektnummer P33953
- NMR Spektroskopie der Methylierung ribosomaler RNA; FWF-Projektnummer P31054

Publikationen

- Röck et al. (2024). The PR-10 protein Pru p 1 is an endonuclease that preferentially cleaves single-stranded RNA. *ChemBioChem*, 25(12). <https://doi.org/10.1002/cbic.202400204>
- Rangadurai et al. (2024). Phase Separation Modulates the Thermodynamics and Kinetics of RNA Hybridization. *Journal Of The American Chemical Society*, 146, 19686–19689. <https://doi.org/10.1021/jacs.4c06530>
- Kim et al. (2022). Structural basis for recognition of transcriptional terminator structures by ProQ/FinO domain RNA chaperones. *Nature Communications*, 13(1). <https://doi.org/10.1038/s41467-022-34875-5>
- Führer et al. (2021). Inverse relation between structural flexibility and IgE reactivity of Cor a 1 hazelnut allergens. *Scientific Reports*, 11(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-021-83705-z>
- Eidelpes et al. (2020). NMR resonance assignments of the FinO-domain of the RNA chaperone RocC. *Biomolecular NMR Assignments*, 15(1), 61–64. <https://doi.org/10.1007/s12104-020-09983-2>

Instrumente

- 600 MHz NMR Spektrometer Bruker Avance NEO
- 700 MHz NMR Spektrometer Bruker Avance NEO

Biobasierte Materialien

Dipl.-Ing.

Valentine Troi

Institut für Konstruktion und Materialwissenschaften

Technikerstraße 13
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-63555
E-Mail: valentine.troi@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/mti/forschung/ag-biobasierte-materialien
www.grownlab.at



Dipl.-Ing. Valentine Troi

Klimakrise und Rohstoffknappheit forcieren ein Neudenken unseres heutigen Wirtschafts- und Energiesystems, das auf fossilen und mineralischen Rohstoffen aufbaut; innovative bioökonomische Konzepte ermöglichen eine Abkehr von fossilen Rohstoffen als Basis unserer Produkte hin zu nachwachsenden Rohstoffen und biobasierten Materialien, die nachhaltig genutzt und möglichst lange im Kreislauf geführt werden. Eine große Rolle spielt dabei die Ausrichtung auf die regionale und nachhaltige Bereitstellung der Rohstoffe (mit Fokus auf Land-, Forst- und Abfallwirtschaft); insbesondere zu berücksichtigen ist in diesem Kontext die stark variierende Qualität der Rohstoffe, die mit kaskadisch ausgelegten Wertschöpfungsketten aufgefangen werden soll. Die Entwicklung entsprechend angepasster materialtechnologischer Lösungen und die daraus resultierende Produktentwicklung für Industriezweige wie die Bauwirtschaft und Mobilität sind Kernaufgaben der interdisziplinär aufgebauten Arbeitsgruppe.

Biobasierte Kompositwerkstoffe (Dipl.-Ing. Valentine Troi)

Im Rahmen des Schwerpunkts wird sowohl die Substitution der fossilen und mineralischen Verstärkungsfasern wie Glas-, Basalt- und Kohlefasern durch Pflanzenfasern wie Hanf und Flachs, als auch die Erhöhung des pflanzlichen Anteils bei der Matrix thematisiert. Bei der pflanzlichen Faserverstärkung (Lang- und Kurzfaser, Regeneratfaser) werden diverse Halbzeugcharaktere (Nonwoven, Woven, UD Gelege) auf ihre Einsatzmöglichkeiten in Kombination mit industriellen Fertigungstechnologien (Pultrusion, Wickeltechnik, Heißpressen, Prepreg) geprüft. Im Bereich der Matrixentwicklung für die Kompositwerkstoffe werden pflanzenbasierte Duroplaste auf Basis von Pflanzenölen wie z.B. Leinöl aber auch Möglichkeiten mit alternativen, gewachsenen Bindern, z.B. basierend auf pflanzlicher oder bakterieller Zellulose und Myzelien untersucht.



Untersuchung der Eignung von Hanf als textile Verstärkung im Ski.

Holz und holzbasierte Werkstoffe (Dr. Roland Traxl)

Holz bzw. holzbasierte Werkstoffe weisen ein komplexes Materialverhalten auf, das sowohl zeit- als auch richtungsabhängig ist und durch Umwelteinflüsse (Temperatur, Feuchte) beeinflusst wird. Um die Anwendungsmöglichkeiten dieser Werkstoffe in Richtung neuer Verbindungsmitte und Konstruktionsbauweisen zu erweitern und zu optimieren, ist es entscheidend, die Gesetzmäßigkeiten dieser Materialeigenschaften zu erfassen und in Modellen abzubilden, um zuverlässige Prognosen für das Bauteilverhalten in der Praxis zu ermöglichen. Die Forschungsarbeiten in Zusammenarbeit mit dem Arbeitsbereich Holzbau umfassen sohin die Anwendung moderner experimenteller Methoden auf unterschiedlichen Längenskalen unter Vorgabe der Umweltbedingungen, begleitet und ergänzt durch numerische Simulationen sowohl der Mikrostruktur des Holzes, als auch von Bauteilen und Verbindungsmitteln.

Kaskadische Wertschöpfungsmodelle (Dipl.-Ing. Valentine Troi)

Nachwachsende Rohstoffe bedingen bei ihrem Einsatz eine ganzheitliche Betrachtungs- und Verwertungsweise; im optimalen Fall handelt es sich um Reststoffe aus der Landwirtschaft, sodass keine Konkurrenzsituation bezüglich Landverbrauch für die Lebensmittelproduktion entsteht. Mit diesen Agrar-Reststoffen können, je nach Art und Qualität Produktionsprozesse mit unterschiedlichem Grad an technischer Anforderung bedient werden. Hierbei führen wechselnde Anbau- und Erntebedingungen sowie klimatische Extreme zu erhöhten Schwankungen in der Qualität, sodass ähnlich zum Holz, als bereits etabliertem nachwachsendem Rohstoff, entsprechende Klassifizierungsmodelle erarbeitet werden, die eine effiziente, qualitätsorientierte und abgestimmte Weiterverarbeitung ermöglichen.



Herstellung und Bestimmung der mechanischen Belastbarkeit hanfbasierter Ziegel.

Forschungsprojekte

- RAW – Computation for a new age of Resource aware Architecture: waste sourced and fast growing bio-based materials; HORIZON EIC-Pathfinder Projekt
- Hanf Ski – Kreislauffähige Ski-Herstellung aus Hanf, Bioharz und Abfallströmen; FFG Projekt, FTI-Initiative Kreislaufwirtschaft

Publikationen

- Manian et al. (2021). Extraction of cellulose fibers from flax and hemp: a review. *Cellulose*, 28(13), 8275–8294.

<https://doi.org/10.1007/s10570-021-04051-x>

- Manian & Troi (2023). Single fibre analysis of hemp and flax fibres, with reference to place of cultivation, degree of roasting, process status (raw fibre, scutched fibre, combed fibre, UD laid fibre, spun fibre) Zenodo (CERN European Organization for Nuclear Research). <https://doi.org/10.5281/zenodo.10012218>

- Hofer et al. (2019). Lomnitz-type viscoelastic behavior of clear spruce wood as identified by creep and relaxation experiments: influence of moisture content and elevated temperatures up to 80 °C. *Wood Science And Technology*, 53(4), 765–783.

<https://doi.org/10.1007/s00226-019-01099-8>

- Murr & Lackner (2018). Analysis on the influence of grain size and grain layer thickness on the sorption kinetics of grained wood at low relative humidity with the use of water vapour sorption experiments. *Wood Science And Technology*, 52(3), 753–776.

<https://doi.org/10.1007/s00226-018-1003-4>

Instrumente

- Geräte des NanoLab Innsbruck (Mikroskopie, Analytik und mechanischen Werkstoffprüfung, Sonderbereiche Dünnenschichttechnologie und Brandschutz) Details: www.uibk.ac.at/mti/laboratorien/nanolab

Dünnschichttechnologie

Dr.

Nikolaus Weinberger

Institut für Konstruktion und Materialwissenschaften

Technikerstraße 13
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-63548
E-Mail: nikolaus.weinberger@uibk.ac.at

www.uibk.ac.at/mti/forschung/ag-duennschichttechnologie



Dr. Nikolaus Weinberger

Unsere Forschungsgruppe beschäftigt sich mit der Entwicklung neuer Photovoltaik Technologien, wobei unser Schwerpunkt auf der Dünnschicht-Technologie (eng. Thin-Film Photovoltaics) liegt. Dünnschichtsolarzellen sind dünner als ein menschliches Haar und etwa 100-mal dünner als herkömmliche (Silizium basierte) Solarzellen. Vorteile sind: geringer Materialverbrauch, geringer Energieverbrauch in der Herstellung, niedriges Gewicht, und Flexibilität. Die Fertigung auf Folie (flexibel) eröffnet eine breitere Anwendungs-palette und erleichtert die Integration von Photovoltaik, z.B. in Fahrzeugen, Gebäuden und Flugzeugen. Zudem können für die Herstellung sogenannte Rolle-zu-Rolle Verfahren eingesetzt werden. Unsere Forschungsgruppe führt umfassende Materialanalysen durch, um fundamentale Zusammenhänge zwischen Herstellung und Performance zu beschreiben. Neben der Entwicklung neuer Materialien und Herstellungsprozesse testen wir diese an unserem Photovoltaik Outdoorteststand.



Links: Flexible Dünnschichtsolarzelle Solarzellen, hergestellt im Zuge des Projektes NoFrontiers; Rechts: Elektronenmikroskop Aufnahme des Schichtaufbaus der Solarzelle (im Querschnitt).

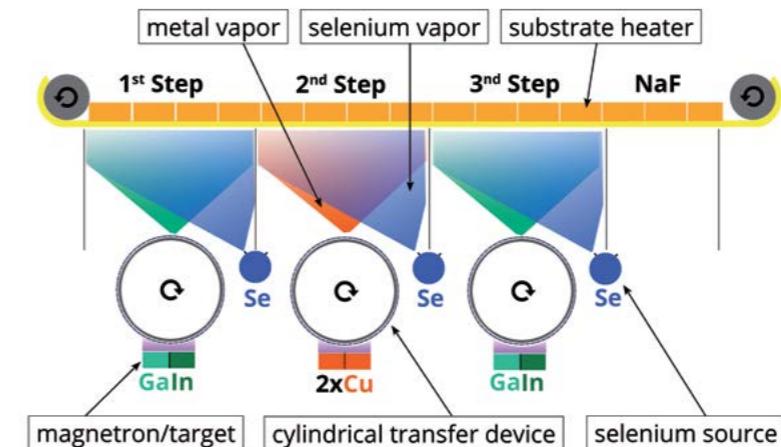
Material- und Device Analytik – Rasterelektronenmikroskopie basierte Methoden zur Untersuchung von Dünnschichtsolarzellen

Ein Spezialgebiet unserer Forschungsgruppe ist die Untersuchung der unterschiedlichen Schichten mittels Rasterelektronenmikroskopie (REM). Diese Technologie ermöglicht Aufnahmen mit enormer Vergrößerung (bis zu 1.000.000-fach), wodurch wir die teils nur Nanometer dicke Schichten abbilden können. Mithilfe von REM basierten Methoden wie Kathodolumineszenz (CL), Energiedispersiv-Röntgen-Spektroskopie (EDX) und Elektron-Beam-Induced-Current (EBIC) Messungen können wir die Bandübergänge, die elementare Zusammensetzung und die Stromsammlung in der Solarzelle mit einer lateralen Auflösung von weniger als 10 Nanometer untersuchen. Zusammen mit klassischen Analysemethoden lassen sich dadurch fundamentale Zusammenhänge beschreiben. Die Untersuchung von sogenannten Microcells mittels hochvakuumtauglichen Minirobotern ermöglicht es uns den Zusammenhang zwischen morphologischen Defekten und der Device Performance zu erforschen.

Entwicklung neuer Dünnschichtsysteme und Herstellungsprozesse

Im Allgemeinen beschäftigen wir uns mit dem Magnetron Sputtern von dotierten substöchiometrischen Metall-Oxid Schichten ($\text{Cu:NiO}_{x,y}$, $\text{Nb:TiO}_{2-x,y}$, $\text{Nb:Nb}_2\text{O}_{5-x,y}$...), aber auch mit rein metallischen und tribologische Schichten. Zusätzlich entwickeln wir neue Absorberschichten für Dünnschichtsolarzellen. Derzeit gibt es in der Photovoltaikforschung eine intensive Dynamik im Bereich der Tandemzellen. Dabei werden zwei Solarzellen mit angepassten Bandlücken kombiniert. Wir entwickeln hierfür eine Loch-selektive Schicht zwischen den Solarzellen auf Basis von Cu:NiO .

Entwicklung industrieller Rolle-zu-Rolle Herstellungsverfahren



Schematische Darstellung des industriellen Rolle-zu-Rolle Hybrid CIGS Prozess bei der Firma Sunplugged.

Wir beschäftigen uns mit der Prozessentwicklung von Rolle-zu-Rolle Verfahren, wobei der Fokus auf der Homogenität und der Bewältigung von Herausforderungen für ein industrielles Hochskalieren liegt. Die Thin-Film Technologie ermöglicht es, Solarzellen auf Folien abzuscheiden. In diesem Bereich kooperieren wir seit über 10 Jahren mit der Firma Sunplugged. Besonders bei der Herstellung von polykristallinen, mehrkomponentigen Absorberschichten im Rolle-zu-Rolle Verfahren ergeben sich komplexe Zusammenhänge zwischen Maschinenparametern und den resultierenden Schichtegenschaften bzw. der Performance der Solarzellen.

Forschungsprojekte

- SolMates – Scalable High-power Output and Low cost MAde-to-measure Tandem Solar Modules Enabling Specialized PV Applications; Horizon Europe, Grant agreement ID: 101122288
- FlexPECs – Flexible perovskite/CIGSe monolithic tandem solar cells; FFG-Projekt, SOLAR-ERA.NET

Publikationen

- Weinberger et al. (2021). Phase development in RbInSe_2 thin films – a temperature series. *Scripta Materialia*, 202, 113999. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2021.113999>
- Weinberger et al. (2021). Realizing Double Graded CIGSe Absorbers With the R2R Hybrid-CIGSe-Process. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 11(2), 337–344. <https://doi.org/10.1109/jphotov.2020.3045674>
- Weinberger et al. (2020). New approach for an industrial low-temperature roll-to-roll $\text{Cl}(\text{G})\text{Se}$ hybrid sputter coevaporation deposition process. *Journal Of Vacuum Science & Technology A*, 38(3), 033201. <https://doi.org/10.1116/1.5142830>
- Stock et al. (2023). Development of direct current magnetron sputtered TiO_{2-x} thin films as buffer layers for copper indium gallium diselenide based solar cells. *Thin Solid Films*, 786, 140115. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2023.140115>
- Angerer et al. (2019). In-situ high-temperature X-ray diffraction investigations of magnetron sputtered niobium oxide layers up to 900 °C. *Thin Solid Films*, 674, 33–38. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2019.02.002>

Kooperationen

- Sunplugged GmbH
- DePro Control GmbH
- RHP-Technology GmbH
- Helmholtz-Zentrum Berlin

Instrumente

- Geräte des NanoLab Innsbruck (Mikroskopie, Analytik und mechanischen Werkstoffprüfung, Sonderbereiche Dünnschichttechnologie und Brandschutz) Details: www.uibk.ac.at/mti/laboratorien/nanolab

Molekulare Systeme

Univ.-Prof. Dr.
Roland Wester

Institut für Ionenphysik und Angewandte Physik

Technikerstraße 25
6020 Innsbruck

Telefon: +43 512 507-52620
E-Mail: Roland.Wester@uibk.ac.at

[www.uibk.ac.at/ionen-
angewandte-physik/molsyst](http://www.uibk.ac.at/ionen-angewandte-physik/molsyst)

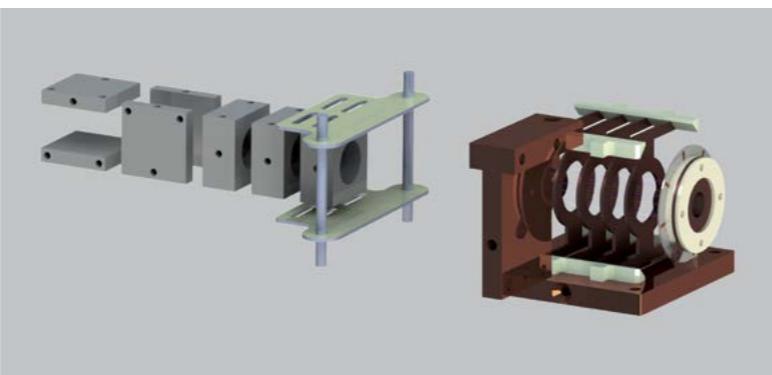


Univ.-Prof. Dr. Roland Wester

Unsere Gruppe untersucht die Physik und Chemie von Molekülen und deren Dynamik unter streng kontrollierten Bedingungen. Wir erforschen zum Beispiel die Reaktionsmechanismen von Ionen-Molekül-Reaktionen und sind besonders daran interessiert, die Bedeutung der Quantendynamik bei molekularen Kollisionen und chemischen Reaktionen zu erforschen. Außerdem entwickeln wir Methoden um molekulare Wechselwirkungen mit Hilfe von Lasern und Fallen zu kontrollieren und zu manipulieren.

Reaktive Streuung von langsamen Molekülen und Ionen

Mit Hilfe der von uns über mehrere Jahre hinweg entwickelten Technik der Molekularstrahl Geschwindigkeitskarten-Bildgebung (crossed-beam velocity map imaging) untersuchen wir die Dynamik prototypischer Ionen-Molekül-Reaktionen. Das Ziel dieser Forschung ist es, die multidimensionale Dynamik von Systemen mit mehreren Freiheitsgraden zu entschlüsseln. Wichtige Modellsysteme sind Ladungstransferreaktionen und nukleophile Substitutionsreaktionen. Im Mittelpunkt unserer Untersuchungen stehen Quantenstreuungsresonanzen in Wenig-Teilchen-Kollisionen und die Kopplung von Spektatorschwingungsmoden an die reaktiven Freiheitsgrade. Mit dieser Arbeit konnten wir mehrere unterschiedliche Reaktionsmechanismen in guter Übereinstimmung mit mehrdimensionalen Dynamik-Simulationen entschlüsseln. Im Rahmen des vom Europäischen Forschungsrat geförderten ERC-Projekts DoMInon konzentrieren wir uns insbesondere auf Quanteneffekte in Ionen-Molekül-Reaktionen und entwickeln ein neuartiges Instrument zur Erzielung einer höheren Auflösung der Molekularstrahlmethode.



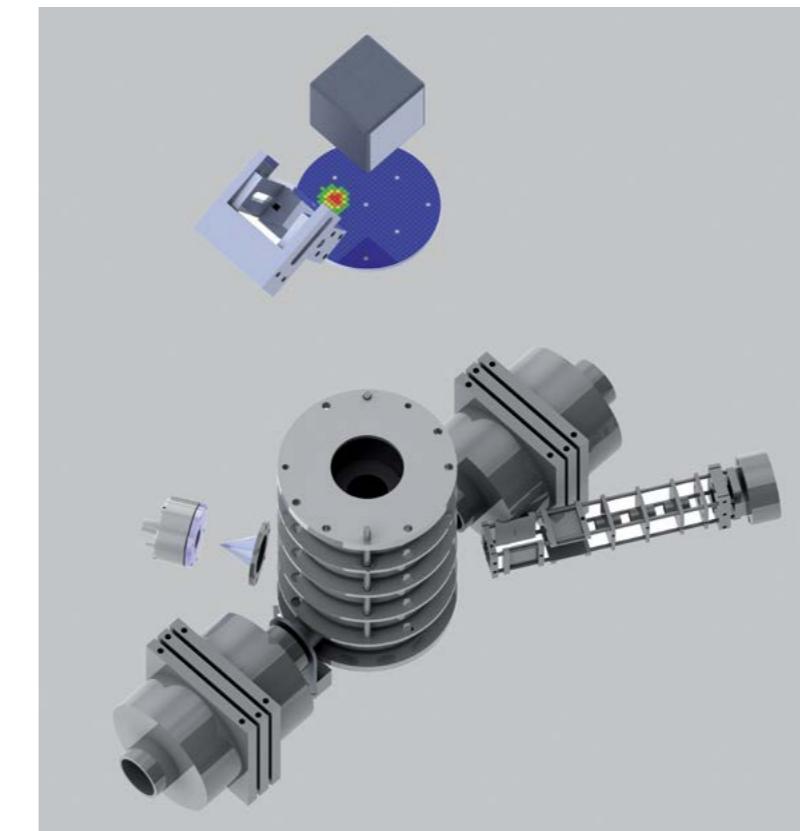
Reaktionen und zustandsaufgelöstes Photodetachment von kalten negativen Ionen

Zur Untersuchung kalter negativer Ionen fangen wir die Ionen bei variablen Temperaturen von 3 bis 300 K in einer Mehrpol-Ionenfalle hoher Ordnung. Seit vielen Jahren verwenden wir eine 22-polige Hochfrequenz-Ionenfalle, die sich durch ein großes feldfreies Fangvolumen mit steilen Wänden auszeichnet. Kürzlich haben wir eine 16-polige drahtbasierte Ionenfalle entwickelt, die einen

hervorragenden optischen Zugang zu den kalten Ionen aus allen Richtungen bietet. Mit Hilfe der Photodetachment-Spektroskopie nahe der Schwelle untersuchen wir den Einfluss von Rotations- und Vibrationsquantenzuständen bei unelastischen Kollisionen. Darüber hinaus suchen wir nach Tunneleffekten und untersuchen die Rolle von langreichweitigen Wechselwirkungen bei Anionen-Molekül-Reaktionen. Der Schwerpunkt unserer Arbeit liegt auf interstellaren negativen Ionen, wie dem ersten identifizierten interstellaren Anion C6H-. Sowohl Ionen-Molekül-Reaktionen als auch das Photodetachment dieser Systeme sind von großem Interesse, um die Rolle und die Häufigkeit negativer Ionen im interstellaren Medium zu verstehen.

Spektroskopie kalter, gefangener Molekül-Ionen

Für die Rotationsspektroskopie negativer Ionen im Terahertzbereich haben wir ein Protokoll entwickelt, das auf zustandsaufgelöstem Photodetachment als Aktionsspektroskopietechnik beruht. Kürzlich haben wir diesen Ansatz auf die elektronische Spektroskopie und die Untersuchung des Schwingungsniveaus des negativen C2-Ions erweitert. Mit einer zweiten 16-poligen drahtbasierten Ionenfalle führen wir Ionspektroskopie unter Verwendung der Helium-Tagging-Technik durch.



Forschungsprojekte

- DoMInon – Grant Dynamics of Molecular Interactions with Ions; ERC Advanced Grant, Grant Agreement ID: 885479
- Atoms, Light, and Molecules; FWF Doctoral Programme

Publikationen

- Nötzold et al. R. (2023). Vibrational Quenching of Optically Pumped Carbon Dimer Anions. *Physical Review Letters*, 131(18), 183002. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.131.183002>
- Lochmann et al. (2023). Three-Body Collisions Driving the Ion–Molecule Reaction C2- + H2 at Low Temperatures. *The Journal Of Physical Chemistry*, 127(23), 4919–4926. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.3c01402>
- Wild et al. (2023). Tunnelling measured in a very slow ion–molecule reaction. *Nature*, 615(7952), 425–429. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-05727-z>
- Wester, R. (2021). Fifty years of nucleophilic substitution in the gas phase. *Mass Spectrometry Reviews*, 41(4), 627–644. <https://doi.org/10.1002/mas.21705>
- Meyer et al. (2021). Atomistic dynamics of elimination and nucleophilic substitution disentangled for the F- + CH3CH2Cl reaction. *Nature Chemistry*, 13(10), 977–981. <https://doi.org/10.1038/s41557-021-00753-8>

