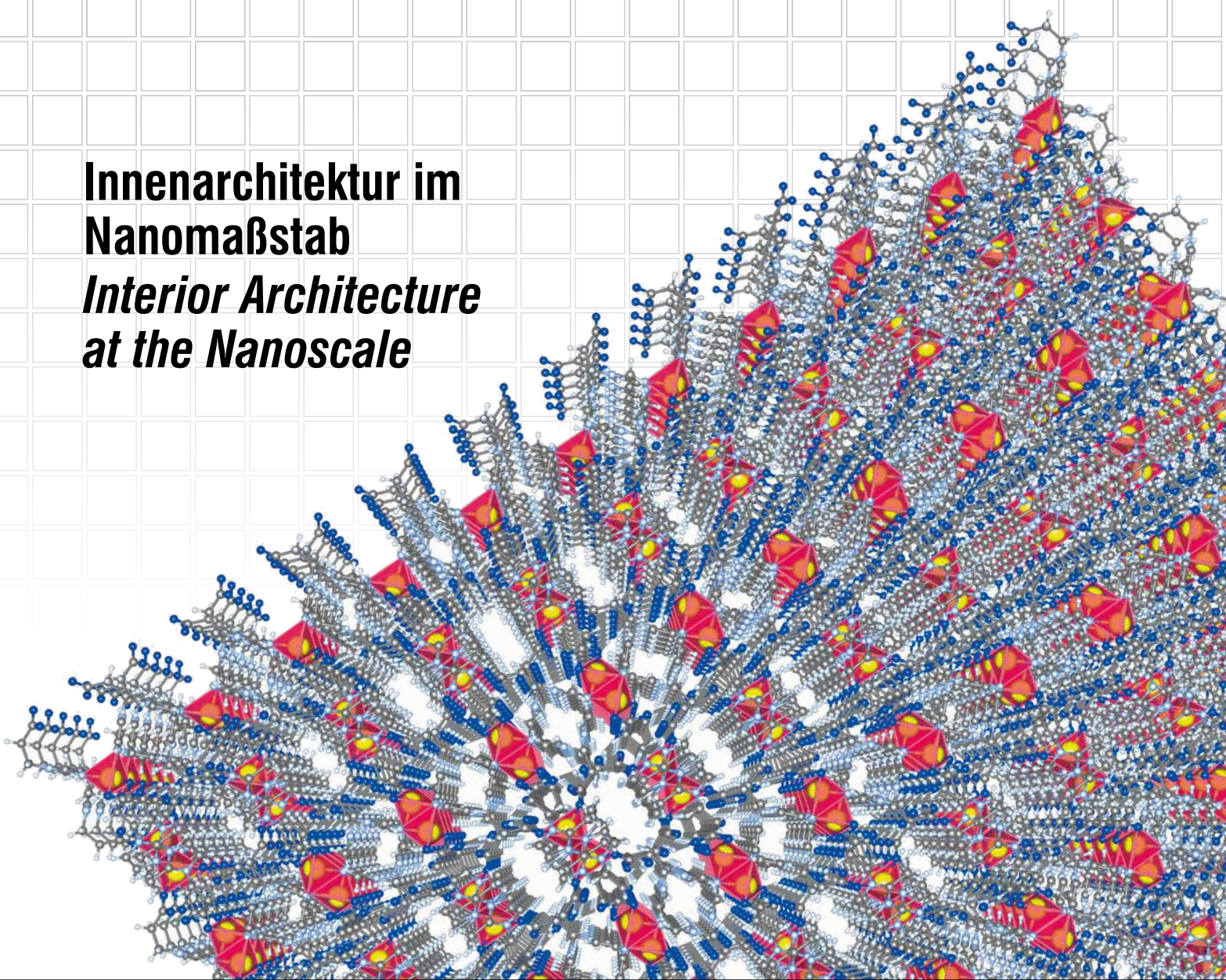


TU GRZresearch

Innenarchitektur im Nanomaßstab *Interior Architecture at the Nanoscale*



Christian Doppler Labor für Design von Hochleistungslegierungen durch thermomechanisches Processing ■ „Liebling, ich habe das Labor geschrumpft“ ■ Effiziente Dimensionsreduktion durch dynamische funktionale Hauptkomponenten ■ Die Abgasgesetzgebung Euro 6d für Dieselmotoren ■ Innovative Wärmepumpensysteme zur hocheffizienten Bereitstellung von Wärme

Christian Doppler Laboratory for Design of High-performance Alloys by Thermomechanical Processing ■ “Honey, I shrank the lab” ■ Efficient Dimension Reduction using Dynamic Functional Principal Components ■ Emission Standard Euro 6d for Diesel Engines ■ Innovative Heat Pumping Systems for High-Efficiency Heat Supply



Innenarchitektur im Nanomaßstab *Interior Architecture at the Nanoscale*

So winzig mikroporöse Kristalle sind, so enorm ist ihr Potenzial. Um dieses zu erkunden und auszuschöpfen, wurde an der TU Graz das interdisziplinäre Leadprojekt „Porous Materials@Work“ ins Leben gerufen. Durch die Verbindung von Grundlagenforschung und Anwendungswissen sollen poröse Materialien für völlig neue Einsatzbereiche etwa in der Sensorik, der Mikroelektronik, der Energiespeicherung oder der Medikamentenproduktion entstehen.

Wir leben in und mit Hohlräumen. Sind doch Zimmer nichts anderes als die Hohlräume von Gebäuden. Und auch diese selbst bestehen aus Materialien voller Hohlräume. Poröses Material umgibt uns praktisch immer und überall – in der Natur genauso wie in der Technik. Selbst die Karosserie unserer Autos wird immer poröser, um Gewicht und damit Treibstoff zu sparen. Hohlräume sind unglaublich wirkmächtig, denn sie prägen und verändern den Charakter von Stoffen. Macht man ein Material wie Glas durch Einbringen von Luft porös, kann dieses zum Waschmittel mutieren und den Schmutz in seinen Hohlräumen fangen. „In Hinblick auf die chemische Zusam-

Although microporous crystals are tiny, their potential is enormous. To exploit this, TU Graz has initiated the interdisciplinary lead project Porous Materials@Work. It will combine scientific knowledge and technological expertise to realize porous materials for novel applications in the areas of sensors, microelectronics, energy storage, and production of pharmaceuticals.

Our life occurs in voids; for example, rooms in buildings are nothing but voids and these rooms and the furniture in them consist of materials full of voids. Porous materials are omnipresent – both in nature and in technology. Even the bodies of our cars become increasingly porous – in this case to reduce weight and to save fuel. Voids are extremely powerful, determining and changing the character of substances. Making a material porous by inflating it with air can change it into a detergent, trapping dirt in its voids. “The chemical composition of a material does not change by making it porous. Its modified architecture, however, completely changes its properties and, thus, its fields of application,” attests Christian Slugovc from the Institute for Chem-



© C. Slugovc – ICTM – TU Graz

Abbildung 1:
Wenn Kristalle bereits im Reaktionsgefäß kristallisieren, bricht meist Freude im Labor aus.

Figure 1:
When crystals start to grow in the reaction vessel, joy breaks out in the lab.

mensetzung ändert sich durch die Schaffung von Hohlräumen zwar nichts, durch die veränderte Architektur des Materials verwandeln sich jedoch die Eigenschaften und damit auch die Einsatzbereiche“, erklärt Christian Slugovc vom Institut für Chemische Technologie von Materialien die enorme Bedeutung von Hohlräumen. Manche Anwendungen funktionieren überhaupt nur über die Porosität eines Stoffes. Wie etwa der Auto-Katalysator, der aus einem mit Katalysatorstoffen befüllten hochporösen Keramikkörper besteht.

Winzige Poren, riesige Speicher

An der TU Graz beschäftigt sich ein multidisziplinäres Konsortium von 14 Forscherinnen und Forschern aus den Bereichen Materialwissenschaften, Chemie, Physik, Elektrotechnik und Biotechnologie mit einer speziellen Form der Porosität, nämlich mit Poren im Nanomaßstab. Eine wichtige Rolle spielen dabei mikroporöse Kristalle, in denen Metallionen durch organische Brücken verbunden sind – man spricht hier von sogenannten Metal-organic frameworks (MOFs). Diese verfügen wegen ihrer hohen Porosität über extrem große „innere Oberflächen“ und bergen deshalb beachtliche Potenziale in sich. So besitzen ein paar Kubikzentimeter dieser metallorganischen Gerüste in etwa die Oberfläche eines Fußballfeldes. In den unzähligen winzigen Poren kann sich alles Mögliche einnisten – Schadstoffe ebenso wie Medikamente.

Im mit 1,5 Millionen Euro geförderten fachübergreifenden Großprojekt wollen sich die Forscherinnen und Forscher aber nicht nur auf MOFs konzentrieren, sondern beispielsweise auch nanoporöse Metalle oder das Porennetzwerk von Papier untersuchen. „Uns geht es vor allem darum, die Eigenschaften der Poren gezielt zu gestalten – also ihre Größe, ihre Verteilung oder ihr Verhältnis zum dichten Material“, betont Paolo Falcaro, der >

istry and Technology of Materials, stressing the enormous relevance of voids. Many applications rely entirely on the porosity of a material. This applies, for example, to catalytic converters, which are mostly based on highly porous ceramics filled with catalysts.

Tiny pores, huge reservoir

At TU Graz, a multidisciplinary consortium consisting of 14 scientists from the areas of materials science, chemistry, physics, electrical engineering and biotechnology is concerned with a special type of porosity relying on pore sizes in the nanometer range. An important role in this context is played by microporous crystals, in which metal ions are connected by organic linkers (so-called metal-organic frameworks or MOFs). Due to their high porosity they make up a huge internal surface area providing them with an enormous potential for a variety of applications. A few cubic centimeters of these metal-organic scaffolds, for example, contain the surface area of a soccer field. The tiny pores can accommodate a variety of substances ranging from dirt to medicines. Using funding to the amount of 1.5m euros from the interdisciplinary large-scale project, the scientists don't want to focus solely >



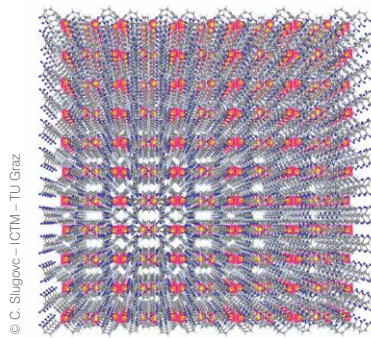
© C. Slugovc – ICTM – TU Graz

Abbildung 2:
Kristalle von GUT-2. Die Namensgebung von Metal-organic frameworks basiert meist auf dem Akronym der Institution, an der diese erstmals hergestellt worden sind (Graz University of Technology eignet sich da ja besonders) und einer fortlaufenden Nummer.

Figure 2:
Crystals of GUT-2. For the choice of the name of a metal-organic framework, in many cases the acronym of the research institution is chosen followed by a consecutive number.

Abbildung 3:
Darstellung des molekularen
Aufbaus von GUT-2.

Figure 3:
Depiction of the molecular
structure of GUT-2.



gemeinsam mit Christian Slugovc und Egbert Zojer vom Institut für Festkörperphysik das Projekt leitet. „Denn die Eigenschaften der Porosität beeinflussen die Qualität eines Materials ganz entscheidend.“ Kann man also das Wachstum von MOFs kontrollieren, lassen sich Materialien für die unterschiedlichsten Anwendungsbereiche „designen“. „Ein und dasselbe Material kann durch eine unterschiedliche Anordnung und Ausrichtung der Kristalle ganz verschiedene Eigenschaften bekommen“, so der Professor für Bio-based Materials Technology an der TU Graz.

Gebündelte TU Graz-Expertise

Seit Jahren beschäftigt sich eine Reihe von Forscherinnen und Forschern an der TU Graz mit verschiedenen Aspekten von porösen Materialien, weil diese in vielen Bereichen für unterschiedlichste Anwendungen gebraucht werden. Diese verstreute Expertise soll im Leadprojekt nun gebündelt werden. Mit Paolo Falcaro, der seit zwei Jahren an der Fakultät für Technische Chemie, Verfahrenstechnik und Biotechnologie forscht und lehrt, konnte zudem ein international anerkannter Experte und wissenschaftlicher Vorreiter im Bereich der porösen Materialien an die TU Graz geholt werden. Für seine Forschung an mikroporösen Materialien erhielt er kürzlich einen mit rund zwei Millionen Euro dotierten Consolidator Grant des European Research Council (ERC).

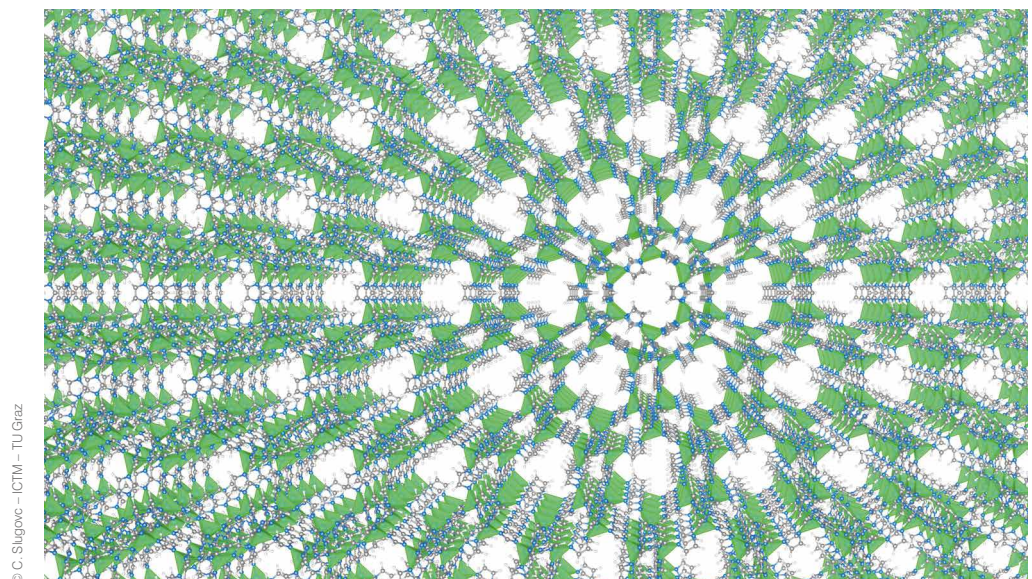
on MOFs, but also other important porous materials, such as nanoporous metals and paper. “Our goal is to control the properties of the pores in a precise manner, manipulating their size, distribution and also the ratio between pores and dense material,” stresses Paolo Falcaro who, together with Christian Slugovc and Egbert Zojer of the Institute of Solid State Physics, leads the Porous Materials@Work project. “These characteristics of porosity have a decisive impact on the quality of a material.” As soon as one can control the growth of MOFs, materials for a variety of applications can be “designed”. “Depending on the arrangement and texture of the crystals the same material can exhibit different properties,” stresses the Professor for Biobased Materials Technology at TU Graz.

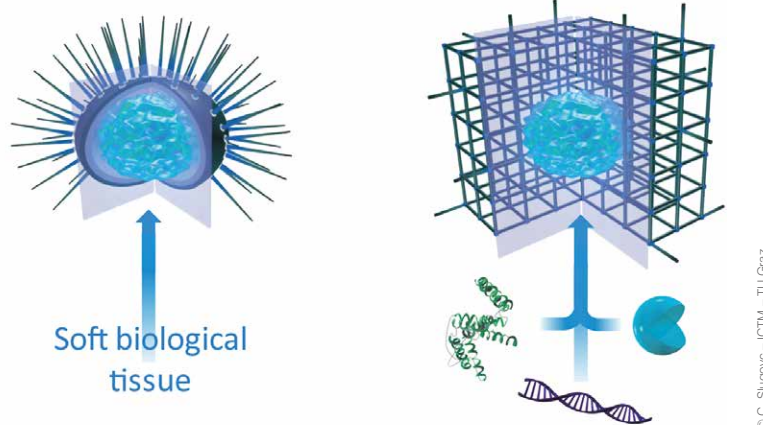
Focused TU Graz expertise

For years, a number of scientists at TU Graz have been concerned with a variety of aspects of porous materials, as they are needed in many areas for numerous applications. A goal of the lead project is to focus this scattered expertise. Moreover, by hiring Paolo Falcaro at the Faculty of Technical Chemistry, Chemical and Process Engineering, Biotechnology two years ago, an internationally established expert and scientific pioneer in the area of porous materials, TU Graz has significantly strengthened its knowledge base and reputation in this seminal field. For his research on microporous materials, he has recently been awarded approx. 2m euros of funding through a Consolidator Grant from the European Research Council (ERC). So far, apart from TU Graz there is no other institution in Austria that explicitly focuses its research on porous materials. Even worldwide, there are only few centers concentrating on this crucial interdisciplinary topic. The ambitious goal of the TU Graz scientists is to “eventually become one of the top three research centers for porous materials”, as Paolo Falcaro has

Abbildung 4:
Darstellung des molekularen Aufbaus
von ZIF-8. ZIF-8 wird in einigen
Teilprojekten eingesetzt.

Figure 4:
Depiction of the molecular structure
of ZIF-8, a workhorse in some
of the subprojects.





© C. Slugovc – ICTM – TU Graz

Abbildung 5:
Biomimetischer Zugang zur Einkapselung von Proteinen, Enzymen oder DNA in Metal-organic frameworks.

Figure 5:
Biomimetic approach towards the encapsulation of proteins, enzymes or DNA in metal-organic frameworks.

Bislang gibt es in Österreich neben der TU Graz keine einzige Einrichtung, die explizit an porösen Materialien forscht. Insgesamt existieren weltweit nur wenige Zentren, die sich dieser für so viele Bereiche wichtigen Querschnittsmaterie widmen. Ambitioniertes Ziel der Grazer Projektgruppe: „Wir wollen mittelfristig eines der drei besten Forschungszentren für poröse Materialien werden“, erklärt Paolo Falcaro selbstbewusst. Immerhin müsse man an der TU Graz nicht erst bei null beginnen. Vielmehr gehe es darum, das vorhandene Know-how zusammenzubringen und durch die Verknüpfung unterschiedlicher Sichtweisen zu neuen Erkenntnissen und einem umfassenden Verständnis von porösen Materialien zu gelangen. „Interdisziplinarität ist ein zentraler Schlüssel zum Erfolg“, so Falcaro. „Deshalb arbeiten an diesem Projekt jetzt schon Forschende aus vier Fakultäten mit.“ Die Grazer Expertise im Feld der porösen Materialien geht aber weit über die hier zusammengefassten Arbeitsgruppen hinaus: „Unser erklärtes Ziel ist deshalb, weitere Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler ins Boot zu holen und so den Grundstein für eine nachhaltige Entwicklung zu legen“, betont der Festkörperphysiker Egbert Zojer. „Neue Grundlagenkenntnisse werden es uns letztlich erlauben, poröse Materialien so weit zu optimieren, dass verbesserte und völlig neue Anwendungen möglich werden“, ist der Wissenschaftler überzeugt. „An der TU Graz sind wir jedenfalls bestens gerüstet, in dieses unerforschte Terrain vorzudringen.“

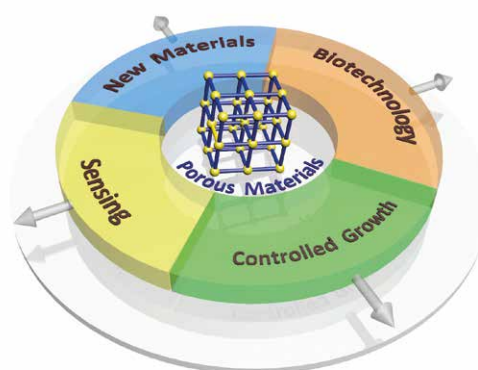
Gut geschützte Medikamente

Die konsequente Verbindung von Grundlagenforschung und Anwendungswissen wird unter anderem im Bereich der nachhaltigen Energietechnik für Innovationen sorgen, beispielsweise bei der Herstellung von Photovoltaikanlagen oder bei der Energiespeicherung. Auch in der Medizin bzw. Medizintechnik oder der Pharmazie dürfte sich durch die Grazer Forschungsaktivitäten künftig einiges bewegen. So müssen heute etwa viele Medikamente bei tiefen Temperaturen >

stated. A big advantage in this context is that at TU Graz it is not necessary to start from scratch, rather the focus has to be on joining existing know-how and combining different views to generate new insights and a comprehensive understanding of porous materials. “Interdisciplinarity will be the key to success,” states Paolo Falcaro. “Therefore, even at this stage the project comprises scientists from four faculties.” The expertise on porous materials at TU Graz, however, reaches out far beyond the people already involved in the lead project: “For this reason it is one of our key goals to attract an even greater pool of scientists in this way laying the foundation for a sustainable development,” stresses solid-state physicist Egbert Zojer, one of the co-initiators of the project. The scientists are unanimously convinced that “fundamental discoveries will allow us to optimize porous materials to a degree that will make possible not only improved but also entirely new applications. At TU Graz we are definitely ready to enter into yet unexplored terrain.”

Well-protected drugs

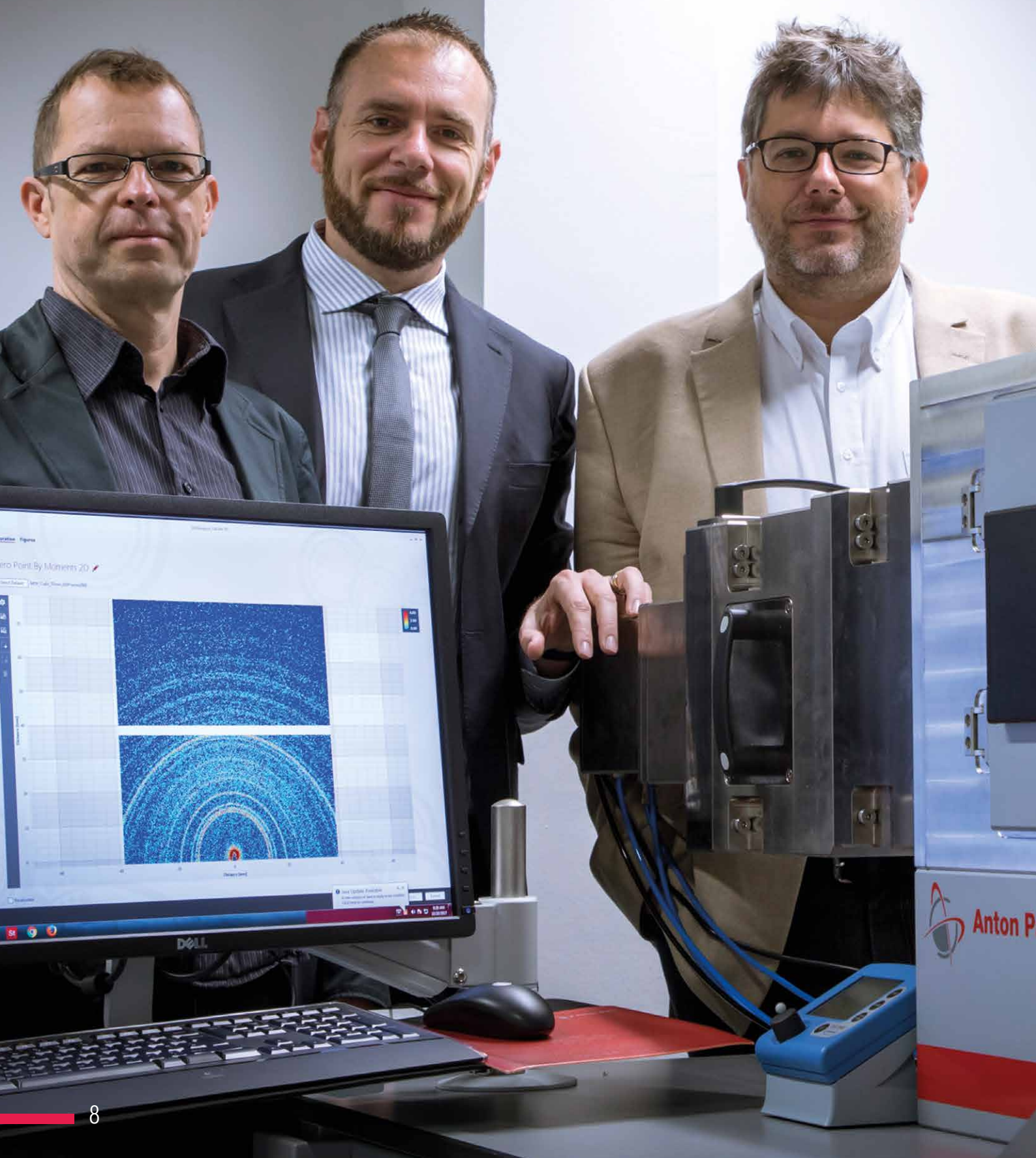
The intensive link between basic research and experience in applications will trigger innovations, for example, in the area of environmental engineering and the fabrication of photovoltaic cells or >



© P. Falcaro – IPC – TU Graz

Abbildung 6:
Forschungsfelder des Lead-Projekts „Porous Materials@Work“.

Figure 6:
Research areas of the lead-project Porous Materials@Work.





gelagert werden, was zum einen hohe Lagerkosten verursacht, zum anderen den Transport sehr kompliziert macht. Hat man aber ein entsprechend behandeltes poröses „Verpackungsmaterial“ zur Verfügung, lassen sich diese Probleme vermeiden. „Wir versuchen, Enzyme, Proteine oder auch DNA in den Poren der MOFs einzukapseln und sie so gegen Temperaturschwankungen zu immunisieren“, erklärt Paolo Falcaro. „Die kristalline Struktur rund um den „Gast“ in der Pore schützt diesen sozusagen wie ein robuster Mantel.“

Strenge Ordnung

Während in der Natur die innere Architektur poröser Materialien meist etwas chaotisch ausfällt, bemüht man sich in der Forschung um rigide Ordnung in Hinblick auf Größe, Ausrichtung und Anordnung der Poren. „In der Praxis bringt die Porosität mitunter gar nichts, wenn die Poren sehr ungeordnet sind“, begründet Christian Slugovc das ausgeprägte Ordnungsstreben der Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler. „Am besten erfüllen die Poren ihre Aufgaben, wenn sie wie Soldat/innen ausgerichtet sind.“ Wie geordnet oder ungeordnet sie sich entwickeln, lässt sich über die Art des Kristallwachstums beeinflussen. „Durch Paolo Falcaro haben wir diesbezüglich einen großen Know-how-Vorsprung gegenüber anderen Forschungszentren“, freut sich der Chemiker. So beabsichtigt man etwa, ein Material zu entwickeln, in dem die Poren exakt übereinander angeordnet sind. Auf diese Weise könnte man nicht nur elektrische Leitfähigkeit erreichen, sondern auch – wenn man die Poren mit Elektrolyt füllt – eine Ionenleitung. Diese Materialeigenschaften sind in vielen Einsatzbereichen gefragt, etwa bei Batterien, in organischen Leuchtdioden oder Solarzellen. „Mit der gezielten Kristallherstellung hat man einen völlig neuen Zugang zur Entwicklung solcher Materialien“, erläutert Christian Slugovc. Ein großer Vorteil des interdisziplinären Konsortiums sei es auch, dass man Ideen aus der Grundlagenforschung in unterschiedlichsten Anwendungen testen und mögliche neue Einsatzfelder entdecken kann. Es dürfte also noch ziemlich spannend werden auf dieser Entdeckungsreise in die winzigen Hohlräume der Materie.

Text: Doris Griesser ■

the realization of energy storage applications. Also in the areas of medical and pharmaceutical engineering, the envisioned research activities will have a profound impact. For example, many drugs currently need to be stored at low temperatures, which increases costs and complicates their transport. These problems can be avoided, provided that a porous “packing material” becomes available. “We are working on the encapsulation of enzymes, proteins and DNA in the pores of MOFs to make them insensitive to temperature variations,” Paolo Falcaro explains. “The crystalline structure around the “guest” in the pore protects it like a tough coat.”

Strict order

In nature the internal architecture of porous materials is often quite chaotic. In contrast, in artificial materials the quest is usually for strict order regarding size, orientation and arrangement of the pores. “In many technical applications porosity only creates real benefits when pores are not strongly disordered,” explains Christian Slugovc, as a motivation for the scientists’ search for perfect order. “Typically, pores fulfill their tasks best, when they are strictly aligned like soldiers.” The degree of order can be controlled by crystal growth. “With Paolo Falcaro we have a clear competitive edge in this context,” the chemist states enthusiastically. Another goal of the research in Porous Materials@Work is the realization of material with a perfect horizontal arrangement of the pores to bring about high electrical conductivities. Combined with ionic conductivity achieved by filling the pores with an electrolyte, such materials will be highly attractive for many applications, including batteries, light-emitting devices and solar cells. “The controlled fabrication of crystals will boost our possibilities for developing such materials,” Christian Slugovc explains. A further advantage of the interdisciplinary consortium is also that it will allow ideas developed in basic research to be tested and transferred to a broad field of applications. There will be many exciting possibilities ahead on this voyage of discovery into the smallest voids of matter.

Text: Doris Griesser ■

Abbildung 7:
Das Leitungsteam des Leadprojekts:
Christian Slugovc, Paolo Falcaro
und Egbert Zojer.

Figure 7:
Heading the lead project:
Christian Slugovc, Paolo Falcaro
and Egbert Zojer.