



Advanced Materials Science

Advanced Materials Science

Der interdisziplinäre und fakultätsübergreifende FoSP Advanced Materials Science (AMS) befasst sich schwerpunktmäßig mit neuartigen mikro- und nanoskaligen Materialien auf anorganischer und organischer Basis. In den wichtigsten Industriesparten im Hochtechnologiebereich stellt die Kontrolle der strukturellen und funktionellen Eigenschaften von neuen Materialien auf der Mikro- bzw. Nanometer-Skala die Basis dar für technologischen Fortschritt und für die Öffnung neuer Märkte. Daher zählt die Materialforschung im Bereich der Mikro- und insbesondere der Nanotechnologie zu den Schlüsselfeldern der kommenden Jahrzehnte. Zukunftsrelevante Technologieoptionen ergeben sich darüber hinaus in der Kombination von Materials Science und Life-Sciences.

Ein FoSP Advanced Materials Science mit den Kernthemen Mikro- und Nanoskalige Materialien entspricht in besonderer Weise den Empfehlungen des Rates für Forschungs- und Technologieentwicklung, der diesem Gebiet einen hohen Stellenwert für die Forschung und Technologie in Österreich beimisst. Für die Zukunft wird ein hoher Bedarf an hochqualifiziertem Fachpersonal in diesem Bereich diagnostiziert. Diesem Aspekt wird durch eine starke Verankerung des Forschungsschwerpunktes AMS in der Lehre sowie mit einem Universitätslehrgang zum Thema Nanotechnologie und Nanoanalytik Rechnung getragen. Die technologischen Umsetzungen dieses Forschungsschwerpunktes liegen in Elektronik, Optoelektronik, Sensorik, Energiespeicherung, Katalyse und im Bereich Bioengineering. Im Forschungsschwerpunkt werden neben den genannten Kernthemen auch weitere Fragestellungen aus dem Bereich Materials Science bearbeitet.

Der FoSP im Zukunftsfeld Advanced Materials Science kann an der TU Graz auf vorhandene umfangreiche Kompetenzen aufbauen. Arbeitsgruppen aus den unten genannten dreizehn Instituten und Forschungseinrichtungen [1-13], die bereits im Bereich Advanced Materials Science tätig sind, werden am FoSP teilnehmen. Hierdurch wird eine hinreichende kritische Größe sichergestellt. Die Leistungsfähigkeit dieses FoSPs wird dadurch dokumentiert, dass derzeit bereits mehr als 100 Mitarbeiter, die sich in den genannten Instituten mit Advanced Materials Science beschäftigen, über Drittmittel finanziert werden.

Unter Berücksichtigung der vorhandenen Kompetenzen konzentriert sich der FoSP AMS auf die vier Themen: 1) Grenzflächenbestimmte Materialien, 2) Advanced Materials Characterization and Modelling, 3) Elektroaktive Stoffe sowie 4) Biokomposite und bioaktive Materialien. Die Themenbereiche, die im folgenden näher vorgestellt werden, sind bezüglich Synthese, Charakterisierung, Herstellungs- und Verarbeitungstechnologie sowie Verwendung stark miteinander vernetzt. Inhaltlich besonders enge Verknüpfungen bestehen zwischen dem ersten und dritten Themenbereich. Das Projekt Elektroaktive Stoffe ist ein Beispiel für einen bereits erfolgreich laufenden, fachübergreifenden Forschungsverbund im Bereich Advanced Materials Science.

Grenzflächenbestimmte Materialien (Koordinator: R. Würschum, E. Kozeschnik)

Die Forschung und Entwicklung für vielfältige Technologiebereiche der Zukunft erfordert immer kleinere Strukturgrößen und immer komplexere Systeme aus unterschiedlichsten Materialien. Wenn die kleinsten Struktureinheiten Abmessungen von 100 nm (= 0,0001 mm) deutlich unterschreiten, werden die Materialeigenschaften in zunehmendem Maße durch die Grenzflächen zwischen diesen Struktureinheiten bestimmt. Hinzu kommen Effekte der reduzierten Dimensionalität dadurch, dass die Größen der Struktureinheiten charakteristische Wechselwirkungslängen im Festkörper unterschreiten und bei sehr kleinen Strukturgrößen zusätzlich auch Quantenphänomene (quantum confinement) auftreten können. Auf diese Weise ist es möglich, durch die Einführung einer hohen Zahl von Grenzflächen zu stark veränderten oder sogar völlig neuartigen (funktionalen) Materialeigenschaften zu gelangen. Dies setzt das Verständnis und die Beherrschung der Vorgänge auf der Nanometerskala voraus. Ziel dieses Teils des FoSPs AMS ist es, unter Nutzung und weiteren Stärkung der Kooperationen zwischen Physikern, Chemikern und Materialwissenschaftlern neuartige grenzflächenbestimmte Materialien herzustellen und im Hinblick auf anwendungsrelevante Eigenschaften zu untersuchen und zu optimieren. Technologien zur Herstellung nanoskaliger Materialien sind ebenso Forschungsthemen wie die Untersuchung der Grenzflächenphänomene und Oberflächenmodifizierungen.

Bereits laufende oder konkret geplante Forschungsvorhaben zum Thema Grenzflächenbestimmte Materialien befassen sich mit folgenden Materialklassen: Neuartige molekulare Materialien [8,9,11], Nanoteilchen und Cluster [2,3,6,10,11,13], nanokristalline Materialien [1,6,10], nanoporöse Materialien [2,6] und Zeolithe [7], Nanokomposite [1,4,6,7,10,11], Copolymere und Polymerblends [11], anorganisch-organische Hybridmaterialien [4,11] sowie dünne Funktionsschichten [4,10,11]. Für die Herstellung dieser Materialien wird in den verschiedenen

Arbeitsgruppen eine breite Palette spezifischer Methoden eingesetzt bzw. entwickelt (s. z.B. Abb. 1). Neuartige Möglichkeiten für die Nanostrukturierung von Metalloberflächen eröffnen sich darüber hinaus durch den Einsatz feinfokussierter Ionenstrahlen [13].

Die Untersuchungen der grenzflächenbestimmten Materialien sollen zu einem umfassenden Verständnis der Struktur-Eigenschaftsbeziehungen sowie der spezifischen Wechselwirkungen an den inneren und äußeren Grenzflächen beitragen. Ein besonderes Interesse im FoSP AMS gilt den optischen und elektronischen Eigenschaften sowie dem Materietransport. Darüber hinaus werden Effekte der Feinkaligkeit auch im Hinblick auf die Verbesserung mechanischer Materialeigenschaften untersucht.

Die Thematik Grenzflächenbestimmte Materialien im FoSP AMS profitiert in besonderer Weise davon, dass das Thema im Rahmen des gesamten FoSPs in einer großen Bandbreite von der Grundlagenforschung bis zur anwendungsorientierten Forschung abgedeckt wird. Grundlagenorientierte Fragen, beispielsweise der Physik nied-

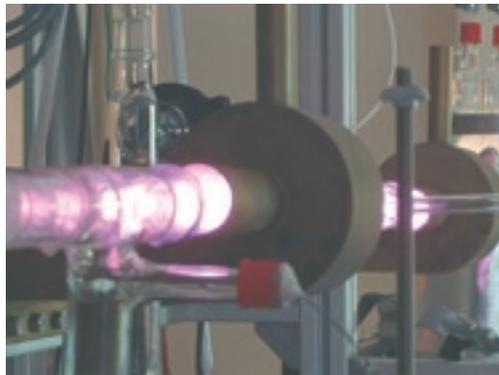


Abb. 1: Mikrowellen-Plasma Anlage mit zwei Reaktionskammern zur Herstellung und in-situ Beschichtung nanokristalliner Metalloxidteilchen. (Bildnachweis: Inst. f. Technische Physik, TU Graz)

rigdimensionaler Systeme oder suprafluider Nanotröpfchen [3], werden ebenso bearbeitet wie konkrete Anwendungsfragen, die zum Beispiel die kostengünstige Integration von gedruckten passiven und aktiven elektronischen Bauelementen betreffen [4].

Advanced Materials Characterization and Modelling (Koordinator: F. Hofer, F. Leisch)

Für ein besseres Verständnis der funktionellen Eigenschaften neuartiger Materialien müssen verbesserte Charakterisierungsmethoden bzw. Methodenverbunde entwickelt werden, die sowohl integrale als auch orts aufgelöste Information liefern können. Einige

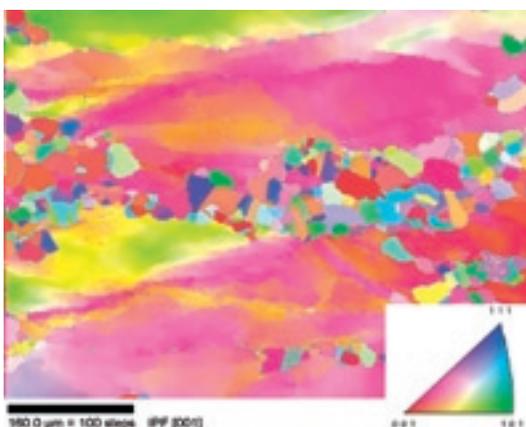


Abb. 2: Kristallorientierungsverteilung in rekristallisierter Nickelbasislegierung aufgenommen mit Rückstreuungselektronenbeugung; Kooperation FELMI mit Institut für Werkstoffkunde, Schweißtechnik und Spanlose Formgebungsverfahren. (Bildnachweis: FELMI, TU Graz)

Institute der TU Graz beschäftigen sich - oft in intensiver Zusammenarbeit mit Entwicklern wissenschaftlicher Messgeräte im In- und Ausland - schwerpunktmäßig mit der Entwicklung innovativer Charakterisierungsmethoden.

Unter den integralen Untersuchungstechniken nimmt die Röntgenbeugung eine zentrale Rolle ein. Ihre Anwendungsgebiete im

FoSP AMS reichen von ab-initio Kristallstrukturbestimmungen und Phasenanalysen bis hin zur Bestimmung von Kristallitgrößen und Mikroverzerrungen in nanokristallinen Materialien [4,6,9]. Daneben ist eine Vielzahl empfindlicher Spektroskopiemethoden zur Untersuchung spezifischer Materialeigenschaften verfügbar. Hierzu zählen u.a. die Elektronen- und Kernspinresonanz [9], die Schwingungs- und Elektronenspektroskopie [8,11], die Elektron-Positron-Annihilation [6] sowie ein Spektrum an optischen und magnetischen Methoden [4,9,11].

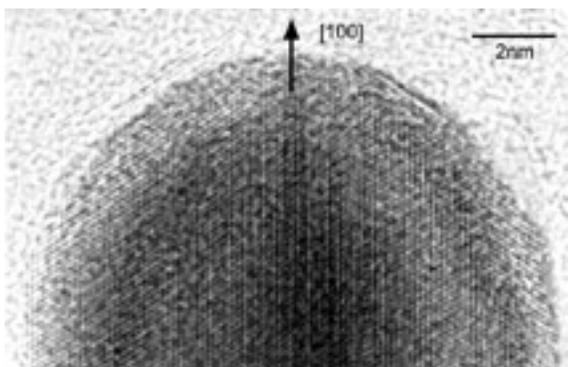


Abb. 3: Gold-Nanodraht. Transmissionselektronenmikroskopische Aufnahme in atomarer Auflösung. (Bildnachweis: FELMI, TU Graz)

- nicht nur aufgrund der Auflösung, die bis in den Bereich atomarer Dimensionen reichen kann, sondern auch weil die Bildinformation direkt mit der Kristallstruktur und der chemischen Zusammensetzung verknüpft werden kann (Abb. 2, 3). Insbesondere im Bereich der analytischen Elektronenmikroskopie nimmt die TU Graz hierbei

eine Spitzenstellung ein. Mit dem weltweit zweiten Monochromator-Transmissionselektronenmikroskop können chemische Bindungsverhältnisse in nanometerkleinen Probenbereichen erfasst werden (Abb. 4) [13]. Rasterelektronenmikroskopische Untersuchungen können seit kurzem unter dynamischen Bedingungen und zudem auch an feuchten Proben durchgeführt werden [13]. Weitere mikroskopische Methoden sind die Raman- und Infrarot-Mikroskopie, die insbesondere für die chemische Phasenanalyse von Polymeren und Biomaterialien eingesetzt werden [13].

Eine besonders umfangreiche Expertise ist im FoSP AMS im Bereich der oberflächenphysikalischen Charakterisierungsmethoden vorhanden. Die Auger- und Photoelektronen-Spektroskopie sowie Elektronenbeugung werden für das Studium der Wechselwirkung von einfachen anorganischen und organischen Molekülen mit metallischen Oberflächen eingesetzt [4]. Für oberflächenphysikalische Untersuchungen mit lateraler Auflösung stehen Rasterkraftmikroskope [7,10] und Rastertunnelmikroskope [4], analytische Feldionenmikroskopie [4] sowie die Raster-Helium-Atom-Mikroskopie [3] zur Verfügung.

Modellierungen von Materialeigenschaften werden sowohl auf atomistischer als auch auf mikroskopischer Skala durchgeführt. Quantensimulationen werden dazu herangezogen, um neuartige festkörperphysikalische Phänomene zu beschreiben, die auf starken elektronischen Korrelationen beruhen, wie beispielsweise der sog. Colossal Magneto-Resistance [5]. Ein weiterer Schwerpunkt liegt in der Computersimulation von mikrostrukturellen Vorgängen bei der Verformung und beim Schweißen [1].



Abb. 4: Analytisches Hochauflösungselektronenmikroskop Tecnai F20 des FELMI, ausgerüstet mit Feldemissionskathode, Monochromator und Energiefilter. (Bildnachweis: FELMI, TU Graz)

Elektroaktive Stoffe (Kordinator: F. Stelzer, E. List)

Der Themenbereich Elektroaktive Stoffe hat, verankert in einem

gleichnamigen Spezialforschungsbereich (Sprecher: J. Besenhard), eine langjährige Tradition in interdisziplinärer und interkultärer Zusammenarbeit. Fünf Institute der TU Graz [4, 9, 10, 11, 13] und je ein Institute der Montanuniversität Leoben und der Karl-Franzens Universität Graz widmen sich der Entwicklung von Materialien, die in lichtemittierenden Bauelementen (LEDs) (bestehend aus organischen und/oder anorganischen Halbleitern), in photovoltaischen Zellen sowie in Batterien und Brennstoffzellen eingesetzt werden. Die Bandbreite, der im Rahmen dieses Themenbereichs behandelten Materialien, reicht von Metallen über anorganische Nichtmetalle (Graphit, Ruß, Keramik) und Kunststoffe (organische Halbleiter, Polyionen, etc.) bis zu Hybridmaterialien, welche aus mehreren Komponenten der genannten Materialien bestehen können.

Neben der Synthese und Charakterisierung der Materialien wird im Rahmen der Forschungsarbeiten auch der Einsatz der Materialien in Bauelementen getestet. Dabei werden zur Erschließung neuer Anwendungsbereiche der entwickelten Materialien neue Technologien für die Herstellung der Bauteile ebenso entwickelt wie die bis in den Nano-Maßstab reichende Analysen- und Charakterisierungsmethodik.

Im Folgenden seien einige dieser Forschungsfelder beispielhaft herausgegriffen und beschrieben.

Organische Halbleiter [3, 4, 9, 11, 13], wie z.B. konjugierte Polymere finden ihren Einsatz in LEDs, Photovoltaischen Zellen, Transistoren und farbigen flexiblen Displays. Das Forschungsziel besteht hier u.a. in der Entwicklung neuer Materialien, der Qualitätsoptimierung (Lebenszeit, Farbe, Intensität, Leitfähigkeit, Thermochromie und Elektrochromie) und der Prozessoptimierung (Dünnschichttechnik, photochemische Strukturierung oder Drucktechniken, optische / magnetische Datenspeicherung), wobei hierfür die Methodik von der quantenmechanischen Modellierung bis hin zur Herstellung und Untersuchung von Prototypen reicht (Abb. 5, 6). Die behandelten Anwendungen umfassen auch Ansätze für „neues Bauen“ (selbstregulierende Fenster und Fassaden, Selbstreinigung, Design-Möglichkeiten).

Das Forschungsfeld Energiespeicherung [9, 10, 11, 13] umfasst die Forschung an Membranen für den Einsatz in Li-Ionen-Batterien und

Brennstoffzellen. Im Wesentlichen werden Arbeiten zur Optimierung von Material- und Herstellungstechnologien für Speicherzellen und

Brennstoffzellen mit erhöhter Kapazität, Lebensdauer und Leistungsabgabe sowie verbesserter Öko-Kompatibilität durchgeführt.

Organisch-Anorganische Hybridmaterialien [7, 8, 10, 11, 13] finden ihren Einsatz in optoelektronischen Bauelementen zur Datenübertragung und Datenspeicherung, in der Sensorik bzw. in optischen Anwendungen (anisotrope doppelbrechende Kunststoffe). Ein zukünftig besonders interessanter Anwendungsbereich dieser Materialklasse liegt im Bereich der molekularen Elektronik.

Keramische und metallische Materialien [2, 4, 9, 10, 13] werden für den Einsatz in modernen Hochleistungskeramiken bzw. zur Metallisierung unterschiedlicher, meist nicht oder nur schlecht leitender Materialien entwickelt.

Biokomposite und bioaktive Materialien (Kordinator: A. Hermetter, F. Stelzer)

Dieser Themenbereich lässt sich in drei weitere Unterthemen aufsplitten:

a) Materialien und Techniken zur Biokompatibilisierung oder -funktionalisierung von Oberflächen unterschiedlicher Art (Polymerfolien, dünne Gläser, Feinmaterialien als Wirkstoffträger): Unter anderem werden Methoden zur Herstellung von Biochips für die Analytik von Enzymen erarbeitet, die biomedizinisch oder

chemisch industriell interessant sind. Der Schwerpunkt liegt auf der Entwicklung von Chips für die Analytik lipolytischer Enzyme. Grundlage für die Chippräparation sind photo- oder katalytisch-chemisch aktivierte Materialien entweder auf Glas- oder Kunststoffbasis [11, 12]. Die primär aktivierten Supports werden (bio)chemisch weitermodifiziert, um letztendlich Mikroarrays biospezifischer Liganden in funktioneller Form auf einer biokompatiblen Oberfläche auszubilden.

b) Materialien für biomedizinische Anwendungen. Die Materialwissenschaft ist insbesondere im Bereich der Prothetik ein wesentlicher Bestandteil des medizinischen Erfolges. In diesem Bereich werden

Materialien für die Dentaltechnik und Ophthalmik entwickelt.

c) Biotechnologisch hergestellte bioabbaubare Polymere aus recenten oder nachwachsenden Rohstoffen. Biologisch abbaubare Materialien (Kunststoffe) sind in der Medizin (Nahtmaterialien, Wirkstoffträger, etc.) von großer Bedeutung. Auch in der Landwirtschaft ist die Abbaubarkeit von Hilfsmaterialien oft ein

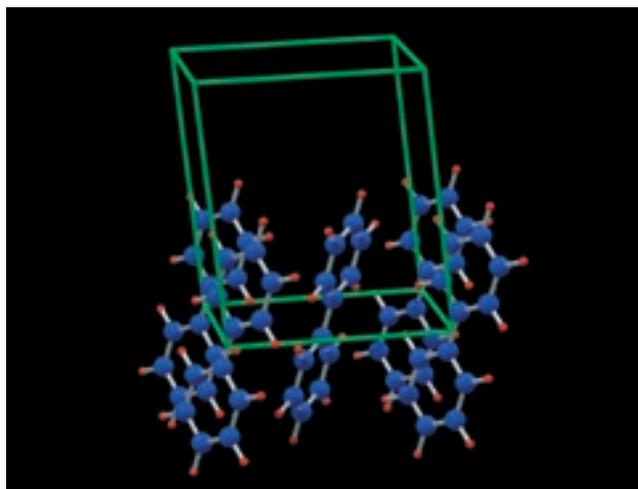


Abb. 5: Computersimulation der Kristallstruktur von organischem Moleküllkristall (Biphenyl). (Bildnachweis: Institut für Festkörperphysik, TU Graz)

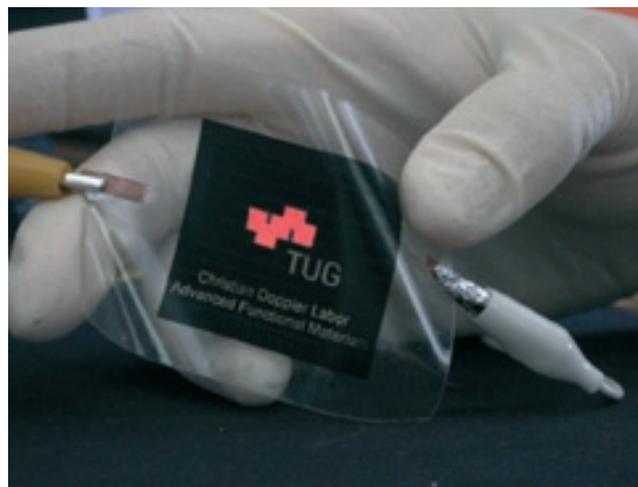


Abb. 6: Flexible organische Leuchtdiode (Bildnachweis: Institut für Festkörperphysik / Christian Doppler Labor – Advanced Functional Materials, TU Graz)

ökologisch wichtiges Thema (z. B. Mulchfolien, Düngerträger, Saatbänder etc.). In diesem Themenbereich werden in Zusammenarbeit mehrerer Institute [11, Institut für Biotechnologie, Institut für Ressourcenschonende und Nachhaltige Systeme] neue Wege zur Entsorgung von Abfallstoffen (z.B. Tiermehl) durch Umformung in Wertstoffe bearbeitet.

Liste der am FoSP Advanced Materials Science beteiligten Institute (IV: Institutsvorstand), Arbeitsgruppen (AG: Arbeitsgruppenleiter) und Wissenschaftler:

Fakultät für Maschinenbau:

- [1] Werkstoffkunde, Schweißtechnik und Spanlose Formgebungsverfahren: H.-H. Cerjak (IV), E. Kozeschnik (AG)
- [2] Apparatebau, Mechan. Verfahrenstechnik und Feuerungstechnik: G. Staudinger (IV), G. Krammer (AG)

Technisch Naturwissenschaftliche Fakultät:

- [3] Experimentalphysik: W. Ernst (IV), B. Holst, C. Callegari
- [4] Festkörperphysik: H. Kahlert (IV), E. List (AG), A. Winkler (AG), M. Leisch (AG), R. Resel (AG)
- [5] Theoretische Physik: W. v.d.Linden (IV), H.G. Evertz
- [6] Technische Physik: R. Würschum (IV), W. Puff (AG), U. Brossmann
- [7] Techn. Geologie und Angewandte Mineralogie: G. Riedmüller (IV), D. Klammer (AG)
- [8] Anorgan. Chemie: K. Hassler, F. Uhlig (IV), Ch. Marschner (AG), H. Stüger (AG)
- [9] Physikal. u. Theoret. Chemie: G. Grampp (IV), K. Gatterer (AG), F.-A. Mautner (AG), B. Koppelhuber-Bitschnau, S. Landgraf
- [10] Chem. Technologie anorgan. Stoffe: J. Besenhard (IV)
- [11] Chem. Technologie organ. Stoffe: F. Stelzer (IV), W. Kern (AG), R. Saf (AG), G. Trimmel, Ch. Slugovc, K. Wewerka
- [12] Biochemie: G. Daum (IV), A. Hermetter (AG)
- [13] Forschungsinstitut für Elektronenmikroskopie (FELMI): F. Hofer (IV), P. Pölt (AG), P. Wilhelm (AG)

Integrated Research Project: Advanced Materials Science

The interdisciplinary Integrated Research Project (Forschungsschwerpunkt, FoSP) on Advanced Materials Science (AMS) focuses on the investigation of novel inorganic- and organic-based micro- and nanoscaled materials. The control of the structural and functional properties of new materials on the micro- or nanometre scale represents the basis of technological progress and the opening of new markets for the major part of high-technology industries. Consequently, materials research in the fields of micro- and particularly nanotechnology represents a key area in the forthcoming decades. Future-relevant technology options may also emerge from a combination of materials science and life sciences.

Focusing on the key subjects of micro- and nanoscaled materials, the Integrated Research Project on Advanced Materials Science closely follows the guidelines set by the Council of Research and Technology Development, which attributes key importance to this area of research and development in Austria. In this sector, a strong demand for highly skilled personnel is predicted. This aspect is taken fully into consideration by a close integration of the research project Advanced Materials Science with the academic teaching and by the post-graduate university course on Nanotechnology and

Nano-analytics. The technological applications of this research program comprises the areas of micro- and opto-electronics, sensors, energy storage, and catalysts as well as the field of bioengineering. Apart from the key topics mentioned above, the joint research program will address other issues of materials science as well.

At Graz University of Technology, the Integrated Research Project on Advanced Materials Science can be established on a broad base of expertise. Groups from thirteen institutes listed above [1-13], which are already engaged in the field of materials science, will take part in the FoSP. In this way, the necessary "critical" size is assured. The scientific capability of the FoSP is manifested in the fact that at present more than 100 research fellows, working in the above mentioned institutes in the field of materials science, are fully supported by funds from third parties.

Taking into account the existing research expertise, the Integrated Research Project on Advanced Materials Science will focus on four topics: 1) Interface-controlled Materials, 2) Advanced Materials Characterization and Modelling, 3) Electroactive Materials, and 4) Bio-composites and Bioactive Materials. The topics are highly integrated with respect to synthesis, characterization, production and processing technologies, as well as applications. In particular, the first and third topic are closely linked regarding the scientific content. The project Electroactive Materials represents an example of an interdisciplinary research collaboration in the field of materials science which is already running successfully for several years.