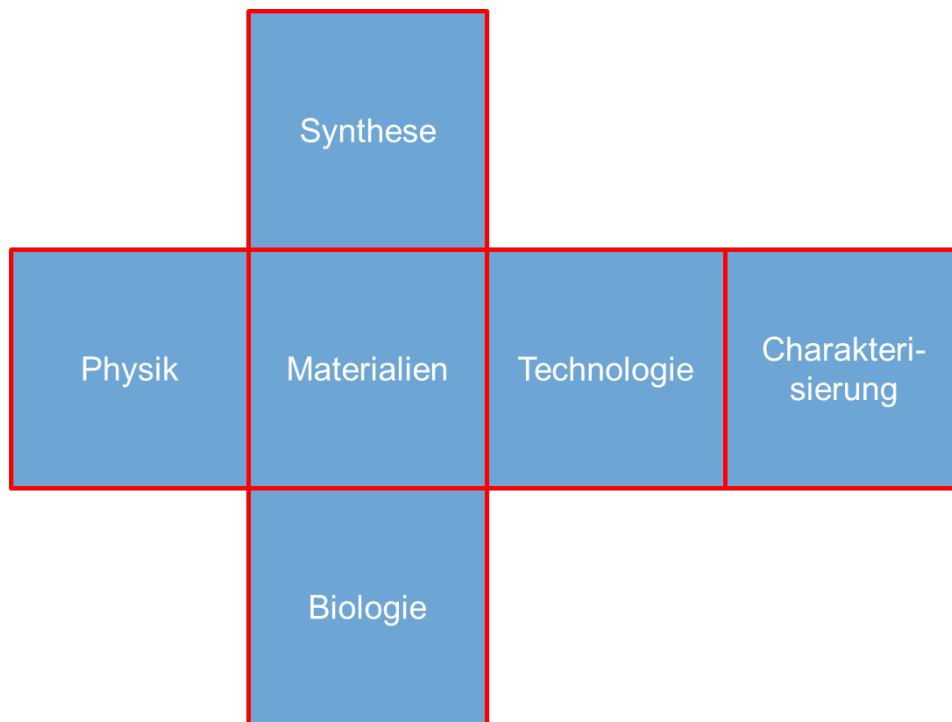
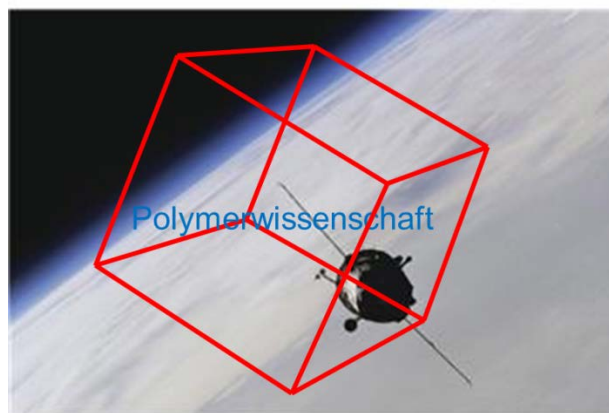


Rundgespräch „Polymerwissenschaft“, Frankfurt, 15.02.2013

Protokolle der Referenten der Kreativsession

Makromolekulare und Supramolekulare Chemie (Haag, Herges)	2
Polymerphysik, Soft Matter (Kremer)	4
Polymermaterialien (Schubert)	6
Von der Kunststoffverarbeitung zu komplexen Materialien (Heinrich)	8
Synthetische und biologische Makromoleküle - Polymere in der Biologie und Medizin (Hackenberger)	9
Aufklärung von Struktur und Dynamik: skalenübergreifend (Spiess, Saalwächter)	11



Makromolekulare und Supramolekulare Chemie (Haag)

- Komplexe Katalysatorsysteme durch supramolekulare Organisation und umgekehrt
- Schöne in relevante Polymere überführen durch Reduktion der Komplexität und schöne Moleküle in Polymere mit Erhalt der Funktion
- Verständnis Abbaubarkeit „Plastic Planet“
- Kontrollierter Abbau von Polymeren zu verwertbaren Einheiten (reversible Netzwerke)
- Kombination von verschiedene Verfahren (top down und bottom up) zu größeren Längenskalen von 1D bis 3D
- CO₂ als Rohstoff und Lösungsmittel
- Selbstorganisation in wässriger Umgebung, Übertragung von Organisationsprinzipien
- Ideale Polymere und Netzwerke
- Neue modulare supramolekulare Bauelemente, z.B. Schalter und Systemintegration
- Konjugierte Systeme als Chance für die Selbstorganisation
- Polymere für die gerichtete Bewegung
- Additive mit neuen Eigenschaften
- Neue Synthesen für perfekte Polymerarchitekturen und Morphologiekontrolle
- Als Überbegriff innerhalb der Fachgruppe Chemie schlage ich folgendes vor: **„Polymerforschung und organische Materialsysteme“** mit einem neuen Unterthema: **„Makromolekulare Biowissenschaften“**.

Beitrag von Herrn Herges:

Ich denke eine der wichtigsten Herausforderungen der makromolekularen Chemie ist die Kontrolle der Eigenschaften der Targetverbindungen bzw. komplexerer Targetsysteme. Diese Eigenschaften werden wiederum durch die Chemie der Monomere und der Polymerisation und durch die Prozessierung bestimmt. Als Organiker möchte ich mich in der folgenden Aufzählung auf die Chemie beschränken:

Single component Systeme:

- Kontrollierter Aufbau der Sequenz von Makromolekülen zum kontrollierten Design von dreidimensionalen Strukturen. Solche definierten Strukturen werden als Bausteine zum Aufbau von komplexeren Funktionseinheiten benötigt.

- Dynamische Funktionen von Polymeren durch kontrollierten Aufbau und Einbau funktioneller Einheiten. Existierende Beispiele: flüssigkristalline Azopolymere (Ikeda) zu steuerbaren, gerichteten Bewegung, Foldamere, temperaturresponsive Polymere zur steuerbaren Zelladhäsion u. andere responsive Polymere...

- Makromoleküle auf Oberflächen: Perfekt planare Oberflächen als Modellsysteme oder Template, z.B. Herstellung von freistehenden Nanomembranen durch zweidimensionale Polymerisation auf Oberflächen (z.B. Gölzhäuser, Bielefeld). Funktionelle Nanopartikel, z.B.

steuerbare Aggregation von Nanopartikel (Klajn, Weizmann), funktionelle Nanopartikel für Imaging und delivery.

Multi component Systeme:

Besonders interessant und zukunftsweisend sind vermutlich funktionelle Aggregate von Makromolekülen. Ähnlich wie sich die supramolekulare Chemie mit der nichtkovalenten Assoziation von Molekülen beschäftigt, könnte eine supramakromolekulare Chemie völlig neue Anwendungsbereiche von Makromolekülen und Polymeren erschließen. Um die Selbstassoziation von Makromolekülen zu kontrollieren und um sie zu höheren Funktionseinheiten zusammenzuführen, sind einige der unter "single component" Systeme aufgeführten Voraussetzungen notwendig. Als SPP würde sich ein solches Thema sicher auch eignen. Es gibt bereits einige Arbeitsgruppen, die erste Erfolge auf diesem Gebiet vorzuweisen haben, wie z.B. Andreas Stein (Minnesota).

Hier zwei konkrete (zugegebenermaßen ambitionierte) Ziele, die man mit solchen komplexen Systemen verwirklichen könnte:

"Crossbar-Schalter" durch self-assembly von leitfähigen Polymeren auf Oberflächen. Dadurch würden Speichereinheiten, Displays und Schaltungen z.B. zur Mustererkennung, Bildaufnahme (CCDs), Bildverarbeitung usw. durch bottom up Technologien zugänglich.

"Molekulare Assembler"; darunter versteht man molekulare Maschinen, die in der Lage sind Moleküle aus Einzelkomponenten gezielt zusammenzusetzen. Die bekanntesten Systeme in der Natur sind die Chaperone, die ATP-Synthase und die Ribosomen. Der supramakromolekulare "Assembler" bindet im ersten Schritt die Reaktanden, bringt sie in kontrollierter Orientierung zusammen, katalysiert die Bindungsbildung und setzt das Produkt unter Aufnahme von Energie frei. Dazu muss der Assembler an externe Energiequellen gekoppelt werden.

Grundsätzlich wäre es interessant, endergonische Prozesse an exergonische Prozesse zu koppeln, um Systeme weg vom thermodynamischen Gleichgewicht zu treiben. Das Problem ist meiner Meinung nach besonders elegant mit supramakromolekularer Chemie zu lösen.

Die Liste der Ideen ließe sich problemlos weiter fortsetzen. Es gibt auch bereits Arbeitsgruppen, die sich mit den obigen Zielstellungen beschäftigen. Ob sich die Polymerchemie die entsprechenden Erfolge auf die Fahnen schreiben wird, hängt davon ab, wie weit sie bereit ist sich in diese Richtung zu öffnen.

Polymerphysik, Soft Matter (Kremer)

Die angesprochenen Fragen waren z.T. den Themen meines Kurzvortrages sehr ähnlich und gingen z.T. darüber hinaus. Für mich überraschend war der große Bedarf, klassische Polymerthemen mit neuen und verbesserten Methoden wieder aufzugreifen. Dabei wurde sowohl von der Seite der Physikkollegen (Theorie und Experiment) als auch von den Chemikern der (skalenübergreifenden) Computersimulation für die Zukunft eine entscheidende Rolle zugeschrieben. Erstaunlicherweise wurde trotz Nachfrage wenig zu neuen experimentellen Methoden gesagt. Das hat wahrscheinlich zwei Ursachen: es gab den „Tisch Charakterisierung“ und ich bin von den meisten als Theoretiker angesprochen worden. Trotzdem gibt es viele neue Methodenentwicklungen, die wir nutzen sollten. Ein Bereich sind neue Röntgenabbildungsmethoden, die im Zusammenhang mit dem XFEL in Hamburg kommen werden. Eine weitere wäre neue IR Spektroskopien mit gleichzeitig hoher räumlicher Auflösung, um nur zwei zu nennen. Die Themen Struktur-Funktionsentwicklung, Hierarchien in der Strukturbildung und Biomimetik (z.B. SPP 1420), bei denen Polymere eine zentrale Rolle spielen, wurden kaum genannt. Offensichtlich werden diese Themen z.Zt. schon zentral beforscht wird. Die von M. Möller wiederholt genannte Öffnung zu den Biopolymeren als Polymermaterialien spielte in den Diskussionen (leider) nur eine untergeordnete Rolle.

Einzelne Themen (werden z.T. natürlich schon bearbeitet):

- Morphologieentwicklung: Dieses an sich alte Thema wurde von vielen Seiten angesprochen. Die Physik sollte dazu einen „bottom up approach“ verfolgen und Simulation/Theorie mit zeitaufgelöster Strukturanalyse verbinden. Damit sollte der gesamte Bereich der Strukturbildung im Nichtgleichgewicht untersucht werden. Themen, die hier besonders diskutiert wurden, waren vielkomponentige Polymer-Additiv System (besonders industriell interessant), Rolle der nichtgebundenen Wechselwirkungen, Ober- und Grenzflächen, Defekte, Heterogenität vs. Homogenität, Bruchverhalten, kann man eine inverse Modellierung machen (math. Inverses Problem) und die präzise Simulation vom Kristallwachstum in teilkristallinen Polymeren. Welche Experimente der Strukturaufklärung gibt es, die bei sehr schwachem Kontrast brauchbar sind? Obwohl überhaupt nicht mehr modern, scheint es noch ganz erhebliche Verständnisprobleme zu geben, deren Untersuchung auch zu ganz neuen Materialien führen kann.
- Glasübergang unter Berücksichtigung neuer, komplementärer Modellvorstellungen (das Jamming-Diagramm von Liu und Nagel zeigt ja durchaus gewisse Verwandtschaft zu dem Bild des Payne-Effekts bei Elastomeren). Bieten Polymere hier die Option für grundlegende neue Erkenntnisse?
- Polyelektrolyte: Hier sind Untersuchungen, die über das Bisherige, hauptsächlich auf Lichtstreuung und Skalentheorien, bzw. Simulation einfacher Modelle hinausgehen, dringend erforderlich. Wie bei der Morphologieentwicklung müssen spezifische Aspekte der Chemie einbezogen werden, z.B. dass +/- nicht einfach austauschbar sind usw. (lokal vs. global, Solvation Shells, Lokale Fluktuationen der dielektrischen

Konstante usw.). Das gilt dann auch für (schaltbare) Hydrogele usw. Experimentell sollte Spektroskopie und Strukturaufklärung zusammen mit Simulationen zu wichtigen neuen Ergebnissen führen.

- Netzwerke allgemein: Bisher haben die Effekte von Inhomogenitäten und Additiven (z.B. Füller) nicht genügend Aufmerksamkeit gefunden.
- Nichtgebundene Wechselwirkungen sind eine Großbaustelle der Theorie, bei der ganz neue Denkansätze erforderlich sind (kleine Energieunterschiede summieren sich und resultieren bei Makromolekülen in großen treibenden Kräften; das gilt in allen Bereichen der Polymerphysik.)
- Polymerelektronik: Die gesamte wissenschaftliche Wertschöpfungskette vom niedermolekularen Ausgangsmolekül über das Makromolekül, das Material und den Eigenschaften eines Devices ist noch stark unterentwickelt. Die polymerspezifischen Aspekte werden noch nur sehr wenig beleuchtet. Hier ist eine koordinierte Anstrengung von allen Seiten erforderlich. Der Link zwischen dem festkörperphysikalischen Experiment, der Strukturaufklärung und der Strukturentwicklung ist so gut wie unerforscht.
- Die Chemie und die Industrie verlangen von der Physik die Erklärung von Phänomenen und die Entwicklung von Konzepten. Das konkrete chemische System bleibt ein Einzelfall. Wir können nicht alles physikalisch untersuchen, was aus dem Chemielabor kommt. Daher erwartet die Chemie eine bessere Kommunikation und Wechselwirkung um zu Modellsystemen zu kommen, die Modellexperimente ermöglichen. Diesen Punkt, von der Chemie vorgebracht(!), halte ich für sehr wichtig.
- Polymere, allgemein Soft Matter hat das Potential, DAS Schlüsselsystem zur besseren Erforschung von Nichtgleichgewicht zu sein. Das liegt an den charakteristischen Zeit- und Längenskalen, die experimentell viel leichter zugänglich sind als z.B. in „Hard Matter“. Hier erwarte ich eine rasante Entwicklung.
- Eine spezielle Frage, die sich auch mir schon gestellt hat, die ich aber nie so scharf formuliert habe: Warum sind in der Biologie die Moleküle so groß wie sie sind. Diese Frage wird in der Biophysik nie gestellt. Der Lichtsammelkomplex in den Blättern ist riesig. Das katalytische Zentrum eines Proteins ist meist klein gegenüber dem gesamten Protein. Wofür ist der Rest gut? Kann man das auch ohne den Rest machen und damit ganz neue Technologien andenken?

Das sind die Beispiele die in der Diskussion in den kleinen Gruppen aufkamen. Es gibt generell zwei Sichtweisen auf die Physik. Einerseits wird erwartet, durch geeignete Experimente gegebene Materialien und System besser zu verstehen. Das ist eine wichtige Funktion, aber eher Sinne einer Unterstützung bei der Herstellung von Materialien. Andererseits muss die Physik Zusammenhänge erklären, neue Phänomene beschreiben und allgemeine Konzepte entwickeln. Hier hat die Physik als Wissenschaft von Polymeren einen klaren „Selbstzweck“ (Bsp. von oben: Nichtgleichgewicht, Wechselwirkungen, warum sind Biomoleküle groß? usw.). Ohne diesen Selbstzweckaspekt wird sich die Polymerphysik kaum im Wettbewerb mit anderen modernen Feldern (z.B. Quantenoptik) als starkes Feld behaupten können.

Polymermaterialien (Schubert)

[in Blau: Evtl. Kandidat für ein Schwerpunktprogramm]

1. Gruppe (Schmachtenberg, Kressler, Förster, Lienkamp, ...)

- Thema Alterungsvorhersage
- Frage Lieferanten für Medizin/Biologie oder Treiber
- Interaktion Biomaterialien mit lebenden Zellen als zentrales Zukunftsthema (neue Systeme)
- Funktionale Intelligente Beschichtungen (Benetzbarkeit, ...)
- Gezielte Polymersynthesen
- Intelligente Verarbeitungsmethoden nötig
- Werkstoffkunde der Polymere gut vertreten?
- Zu viele koordinierte Programme?

2. Gruppe (Richtering, HWS, MM,...)

- Chain of knowledge (Synthese, Charakterisierung, Verarbeitung, ...)
- Neue Fertigungstechnologien für komplexe Materialien
- Hierarchical Manufacturing, Additive Fertigung, 3D Druck
- **Polymere Materialien für digitale Fertigungsverfahren von der nm bis zu m Skala (Steuerung Selbstorganisation & Reaktivität, Verarbeitungsverfahren, ...)**
- **Neues Programm: „Vom (Makro)Molekül über das Material zum System unter relevanten Bedingungen“**
- Langfristige Programme (wie Biochemiker/Mediziner)

3. Gruppe (Greiner, Staubitz, F. Schmid, Frühling, ...)

- Biomimetische Konstruktionsmaterialien (Kollagen), Aktivelemente
- Schließen von Stoffkreisläufen, Recycling, Design von Materialien zur Auflösung (Duroplaste)
- Polymerchemie ist konservativ → Einbringung neuer Einheiten in die Hauptkette (Anorganische Einheiten)
- Unterscheidung von relevanten und schönen Polymeren
- Funktionsfähiges Blatt ist nicht herstellbar (komplexer Aufbau)
- QSPR von Blends/Formulierungen
- **Additivierung**
- Verarbeitungsverfahren
- Selbstdiagnostik

4. Gruppe (Voit, Ludwigs, Reiter, Spiess, Herges...)

- Anpassungsfähige Materialien/adaptive Materialien (zerlegbare Materialien),
- Hybrid-Materialien
- Material schaltet Hydrophob/Hydrophil z.B. bei Regen (Beschichtung auf Textilien)
- Membranen Brennstoffzellen
- Polymere als Aktuatoren
- Adaptive Materialien für technische Anwendungen
- Polymere für bionische Materialien
- Nachwachsende Rohstoffmischungen (nicht Konkurrenz zu Lebensmitteln)

5. Gruppe (Spange, Rühle, Thurn-Albrecht, Gehde, Rieger...)

- Umwandlung von Thermoplast in Duroplast in Elastomer durch äußeren Trigger/Additive/Katalysatoren
- „Metamaterialien“ im weiteren Sinne (Materialien die schwitzen können, Haare haben, ...); Kombination von Struktur/Topographie und bestimmten Materialeigenschaften neue Funktionen, gedruckte Strukturen
- Polymermaterialien mit speziellen bzw. einstellbaren Reibungseigenschaften (Tribologie)
- Weiterentwicklung von Standard-Polymeren für hochwertigere Anwendungen (bislang unterbewertet)
- Druckinduzierte Kristallisation
- Kürzere Polymerisationsführungen für bestehende Prozesse
- Bioinspirierte Polymermaterialien mit speziellen Eigenschaften
- Skalierbare Materialien
- Materialien für die Medizin

6. Gruppe (Oenbrink, Wagner, Jens Rieger, Lendlein...)

- Rapid Prototyping (Ersatz Spitzguss)
- Neue Polymermaterialien für individualisierte industrielle Fertigungsverfahren (supramolekulare Chemie, Gradienten)
- Leichtbaufertigungsverfahren (Polymerchemie, Fertigungstechnologie, ...), hohe Stückzahlen,
- Recycling
- Struktur-Wirkungsbeziehungen, Retro-Design (Werkstoffe, funktionale Polymere)
- Wirklich adaptive evolutionäre Materialien
- Zerlegung auf Demand (Faserverbund-Materialien)
- Integrierte Prozesse für Polymermaterialien (geschlossene Lebenszyklen)

Von der Kunststoffverarbeitung zu komplexen Materialien (Heinrich)

1. Verbesserte Kommunikation zw. Forschung an Modellsystemen und an anwendungsnahen Systemen.
2. Verbesserte Interaktion Wissenschaft und Industrie.
„Retrosdesign“.
3. Neue Materialgesetze für Polymerwerkstoffe (Kunststoffe, Elastomere, TPE) – physikbasiert!
 - Welche Eigenschaften brauchen wir heute?
 - Anorganische Polymere, Ormocere, Polyphosphate
4. Multikomponentenmatrices.
Bedeutung der Rolle der Heterogenitäten wächst. Polymere Werkstoffe sind HETEROGENE Systeme → Multidisziplinarität bei den Werkstoffwissenschaften.
Rolle des Emergenzgedankens bei der Erforschung von Struktur-Eigenschafts-Beziehungen.
Rolle der Grenzflächen.
Einsatz von „smart additives“.
Grenzen der klassischen Bewertungsverfahren ausloten.
Bewusstsein stärken, das Fach „Polymere“ einem Wandel unterlegen hat.
5. „Disziplin“ des up-scaling (z.B. Miniextruder ↔ Produktionsextruder).
Adressierbare *in situ* Charakterisierung im *bulk*.
Gradientenwerkstoffe wie Metall & Polymer.
Biofunktionale Werkstoffverarbeitung → neue Herausforderungen (steril, inert,..)
Integrative Prozesse.
Kombination Drucktechnik & Spritzgießen.
Mikrosystemtechnische Strukturen.
Einsatz von systemtheoretischen Ansätzen.
Engere Interaktion mit Disziplinen wie Entrepreneurship, Technisches Design.
Phase-Change Materials.
Intelligente Materialien.
6. Neudefinition der Polymertechnologie notwendig.
Advanced Materials: hoher Funktionsanspruch.
Neue Verarbeitungstechnologien dafür.
Rheologie hochkomplexer multifunktionaler Systeme.
Digitale Fertigungsmaschinen.
7. Herstellungsverfahren (*on demand*) für funktionelle Polymere.
→ Optik, Fluidik, medizinische Anwendungen.
Technologien zur Herstellung von Metamaterialien.
Prozessgeführte Strukturbildung.
Photolithographie.

Synthetische und biologische Makromoleküle - Polymere in der Biologie und Medizin (Hackenberger)

Fragestellung: Was sind künftige wissenschaftliche Herausforderungen in der Polymerforschung? Was sind neue zukunftssträchtige Ideen?

In den Diskussionen wurden drei Bereiche identifiziert, neue Materialien, neue Analytik und neue Anwendungen. Des Weiteren gab es interessante Impulse bzgl. neuer Herangehensweisen für die Forschung der Polymerwissenschaften.

Neue Materialien sollten auf folgende Bereiche fokussieren:

- Entwicklung neuer Oberfläche/Biointerface
- Materialien auf Basis natürlicher (nachwachsender) Rohstoffe (z.B. Lignin, Polysaccharide)
- Neue Ansätze für Drug Delivery, dabei insbesondere
 - o Multiple funktionalisierbare Materialien für Drug Delivery (siehe SFB Mainz) mit unterschiedlichen Liganden: Immunogene Stimulantien, Antikörper für Targeting, Visualisierung, nicht Toxizität
 - o Steuerung der Beladung
- Dynamische (stimulierte) Steuerung der Polymerkonformationen (räumliche Anordnung)
- Interdisziplinäre Werkstoffentwicklung für medizinische Anwendungen, dabei insbesondere Zusammenführung verschiedener Materialansätze, z.B.:
 - o Bioanalytische Devices: Minimierung von Proteinadsorption, neue Membranen
 - o Medizinische Implantate, hohe Biokompatibilität und Verträglichkeit, Kopplung mit Eigenschaftsprofilen
- Abbaubarkeiten von Materialien für medizinische Anwendungen sollte gewährleistet werden, zu berücksichtigen ist aber auch Umweltproblematik
- Spektrum vom Polyelektrolyten zu Protein ausloten: Was gibt es dazwischen, gibt es Hybridansätze?
- Anwendung von Selbstoptimierung und gerichtete Evolutionsstrategien (vgl. enzymatische Katalysatoren, Forschung von Prof. Manfred Reetz) in der Polymersynthese als neues synthetischer Ansatz
- Stabilisierung von metastabilen Zuständen durch äußere Einflüsse => Anwendung auf Polymermaterialien

Neue Analytik sollte beinhalten:

- Analyse von komplexen Makromolekülen (Medical Grade Analytik) für medizinische Anwendungen sowie genauere Abbauprodukten

Neue Anwendungen sollten sich richten auf:

- Anwendungen von Erkenntnissen zur Strukturuntersuchung aus dem Bereich der Polymerwissenschaften auf biologische Systeme (Beispiel Amyloide, unstrukturierte Proteine)

- Gibt es etwas, was Proteine nicht können? Können wir alternative medizinische Konzepte entwickeln, die nicht auf der Wirkungsweise von Proteinen beruhen?
- Können neue Imaging Verfahren auf Basis von Polymeren für die medizinische Diagnostik entwickelt werden?
- Neue Immobilisierungsverfahren („Lab on the Chip“, neue Diagnostische Verfahren)

Intensiv diskutiert wurden auch unterschiedliche neue **Herangehensweisen** für Fragestellungen in der Forschung:

- Stärkere Kommunikation zwischen Anwendung und Entwicklung, zugängliche Testsysteme
- Lassen sich aus dem Erkenntnisgewinn Rückschlüsse auf den Entstehungsprozess von neuen Materialien machen? Beispiel: Stabilisierung von metastabilen Zuständen durch äußere Einflüsse (unterkühlte Schmelzen); wie lassen sich daraus neue Polymermaterialien machen?
- „Lernen aus dem, was zugelassen ist“ anstelle alles neu zu machen! => Wie sind bestehende (polymere) Systeme auf andere Fragestellungen anwendbar
- Wie weit kommt man mit universellen Ansätzen? Was sind geeignete Modellsysteme? Beispiel: Irrelevanz der eingesetzten „biologischen“ Systeme, z.B. Lysozym oder BSA.

Es wurde Stuart Schreiber erwähnt, der es geschafft hat, den Begriff „Chemische Biologie“ zu prägen (als Totalsynthetiker, der aus einem der traditionellsten Gebiete der Organischen Chemie kommt). Ich selbst habe einmal vor einigen Jahren eine sehr unfruchtbare Namensdiskussion bei einer Gordon Conference über den Titel der Konferenz „Bioorganic Chemistry“ erlebt, bei der zum Schluss das Hauptargument für die Beibehaltung des Begriffes „Bioorganic Chemistry“ war (ich zitiere frei): „We rather prefer to be a noun...“ Ich denke, Herr Schreiber hat sich solche Sorgen nicht gemacht...

Wie dem auch sei, meiner Meinung nach könnte man darüber nachdenken, die Begriffe „Polymere“ oder „Makromolekulare“ entsprechenden Disziplinen für „Materialwissenschaft“ oder „Biologie“ voranzustellen. Damit würden entsprechende Untergruppen in den Fachkollegien geschaffen, die wichtige Tätigkeitsfelder in der Forschung vieler Teilnehmer gestern (jedenfalls in meiner Wahrnehmung) abdecken.

Aufklärung von Struktur und Dynamik: skalenübergreifend (Spiess, Saalwächter)

Strukturelle/strategische Herausforderungen ("wie?")

Durch neue komplexe Materialien (z.B. leitfähige Polymere und Devicestrukturen, funktionelle biologisch wirksame Polymerstrukturen) ergeben sich neue Herausforderungen für die Analytik, sowohl bzgl. der polymeren Bausteine (Konstitution, MW, Konformation ...) als auch bzgl. des Verständnisses der funktionalen Eigenschaften. Letztere sind u.U. im Multikomponentensystem, idealerweise unter Bedingungen der späteren Anwendungen und ggf. sogar in einzelnen Prozessschritten, zu erfassen. Zentrale Rollen spielen die intrinsische Unordnung, ggf. niedrig populierte Defekte, sowie Inhomogenitäten über große Zeit- und Längenskalen.

Für ein umfassendes und prädiktives, also für ein Materialdesign relevantes Verständnis ("integrierte Materialentwicklung") wird nur eine kompetente Kombination von strukturellen und dynamischen Methoden als zielführend erachtet, da keine Methode alleine alle relevanten Informationen liefern kann. Dabei müssen moderne, trennscharfe Methoden von Spezialisten angewandt werden, die eine intrinsische Motivation zum Austausch über das wissenschaftliche Ziel besitzen; nur aus deren Zusammenarbeit kann ein vollständiges Bild erwachsen.

Eine solche Motivation zum Austausch besteht häufig in außeruniversitären Forschungsinstituten mit entsprechend kompetent und personell gut besetzten methodischen Gruppen oder auch Serviceeinheiten. An Universitäten ist dies durch Serviceeinheiten mit Routinecharakter, oder wenn Doktoranden für bestimmte Methoden/Geräte verantwortlich zeichnen, nicht immer gewährleistet. Oft fehlt gegenseitiges Wissen und Austausch über das Potential einer Methode, über ggf. nicht-triviale Probenpräparation, etc. Es wird generell als Vorteil angesehen, wenn sich ein Standort methodisch orientierte Professuren leisten kann, bei denen Methodenentwicklung und -anwendung Hand in Hand gehen. Auch ist es gut, synthetisch orientierte Mitarbeiter (Doktoranden) direkt in den Messprozess einzubinden.

Als Kern einer erfolgreichen integrierten Materialentwicklung werden eine sorgfältige Vorausplanung und eine funktionierende wissenschaftliche Kommunikation zwischen Synthetikern und verschiedenen Methodikern angesehen. Klarheit über die übergeordneten wissenschaftlichen Ziele und die Relevanz/den Neuheitswert der Fragestellung sorgt für die entsprechende intrinsische Motivation aller Beteiligten. Dies schafft auch Verständnis für Eigenheiten der Beteiligten, z.B. eine gewisse Vielfalt- und Durchsatz-Fixiertheit präparativer Gruppen oder die langsame und als zu tiefgründig empfundene Betrachtungsweise von Physikern. Eine räumliche Trennung wird eher als problematisch, kurze Wege und die Möglichkeit spontanen Austauschs als wichtig empfunden.

Insbesondere für Universitäten werden die koordinierten Finanzierungsinstrumente der DFG als wichtige Motoren einer solchen Vorgehensweise angesehen. Während Schwerpunktprogramme aufgrund der Delokalisierung in diesem Zusammenhang weniger zweckdienlich erscheinen, kommt Sonderforschungsbereichen und Forschergruppen eine

große Bedeutung zu. Es wird vorgeschlagen, das Instrument des "Paketantrags" wiederzubeleben und zu stärken, indem vor allem ein Begutachtungsmodus gefunden wird, der dem interdisziplinären Charakter, also den verschiedenen Fachkulturen, Rechnung trägt (z.B. mündliche Begutachtung im Rahmen einer Klausur). Auch die "Analytikzentren" der DFG wurden als sehr effektive methodische Vernetzungsstellen gelobt, allerdings nur, wenn kompetentes und motiviertes wissenschaftliches Personal gewonnen werden kann, das entsprechend integrativ und als Ideengeber wirkt.

Ein Erfahrungsbericht aus der Industrie unterstützt den integrierten Ansatz. Hier gab es in der Kette Produktion-Prüfung-Produkt ebenfalls durch die "Servicementalität" verschiedener Beteiligter oft Verzögerungen und Rückschritte durch Kommunikationsprobleme. Die Lösung war, das Thema in den Mittelpunkt zu rücken und die Prozesskette mit allen Beteiligten gemeinsam zu planen.

Methodische Herausforderungen ("was?")

folgende Einzelpunkte wurden genannt:

- Studium der Wechselwirkung von Polymeren mit Oberflächen von kristallisierenden Substanzen: Verständnis der Biomineralisation
- Analyse komplexer Polymere bzgl. Konstitution, MW, ... : neue Chemie, Verzweigungen, Polymere an Oberflächen (hier auch Nanopartikel: Quantitative Analyse der Belegungsdichte etc.)
- höhere laterale Auflösung an Grenzflächen (GISAXS integriert lateral):
z.B. Visualisierung von lipid rafts
- schnellere in-situ-Verfahren der Strukturentstehung und -umwandlung: Röntgen (Synchrotron), Elektronenmikroskopie ("SEM-Video") => wichtig für die spez. Themen unten

spezielle Herausforderungen in der organischen Elektronik:

- Bulkverhalten vs. Rolle innerer Grenzflächen und lokaler Defekte, also meist von Minoritätskomponenten
- Analytik von Grenzflächen zwischen p- und n-Leitern (UHV-Physik vs. "dirty soft matter"), andere versteckte Grenzflächen (amorph-kristallin, ...)
- möglicher Ansatz: Anwendung/Übertragung von UHV-Techniken anhand von atomar kontrollierbaren Modellgrenzflächen
- Fokus auf sensitive und v.a. lokale Techniken: Mikrosonden (STM, AFM), konfokale Spektroskopie, Nahfeldoptik (neu beleben?), STED

Herausforderungen aus den Ingenieurwissenschaften (direkte nutzbringende Umsetzung durch verbesserte Modellbildung!):

- online-Analytik in der Extrusion (Schmelzen, Mischungen, Composite): Struktur, Orientierung (konfokal Raman? Röntgen?), Dynamik, z.B. mehrachsige Dehnströme (Beispielanwendungen von Neutronenstreuung oder NMR bisher nicht praxisrelevant implementierbar)
- Zerstörungsfreie Bauteilprüfung, Detektion lokaler und subtiler Defekte (debonding), Kombination lokal/chemischer Information und Detektion größerer Längenskalen
- wichtig für Materialeigenschaften und Versagensverhalten: supramolekulare Anordnung/Orientierung/Packung in ungeordneten Systemen (z.B. Elastomere, Duroplaste) jenseits des nächsten Nachbarn (nm-Skala): methodische Lücke!

- neue Messprinzipien: Nanopartikeldoping, lokale thermische oder mechanische Störungen (Mikrorheologie)
- Variation von Struktur/Orientierung/molare Anordnung auf sub-mm-Skalen, v.a. in Oberflächennähe (Oberflächenbeschaffenheit bestimmt Bauteileigenschaften)
- atomares Verständnis der Haftung an der Grenzfläche unterschiedlicher Materialien

In den letzten Problembereichen und generell wird die gezielte und aufwändige Darstellung und die Untersuchung von Modellmaterialien als notwendig angesehen, um vorhandene Methoden in ihrer Anwendbarkeit auf komplexe Systeme zu optimieren, oder um Teilaspekte eines komplexem Materials zu verstehen. Dies erfordert, wie die integrierte Materialentwicklung selbst (deren Teil das Studium von Modellen ist), intensive Kommunikation zwischen Synthetikern und Methodikern.

spezifisches Thema für Charakterisierung und die Polymerphysik im Allgemeinen:
"unerwünschte Komplexität"

Neue effektive gerichtete Synthesen (z.B. "click"-Chemie) bringen häufig die Bildung spezifischer struktureller Einheiten (z.B. Triazol-Ring) als Verbindungsgruppen mit sich. Diese Gruppen können selbst ein wichtiges oder gar dominierendes strukturbildendes Element in der supramolekularen Anordnung bilden. Dies sollte besser erforscht und immer mitgedacht werden.