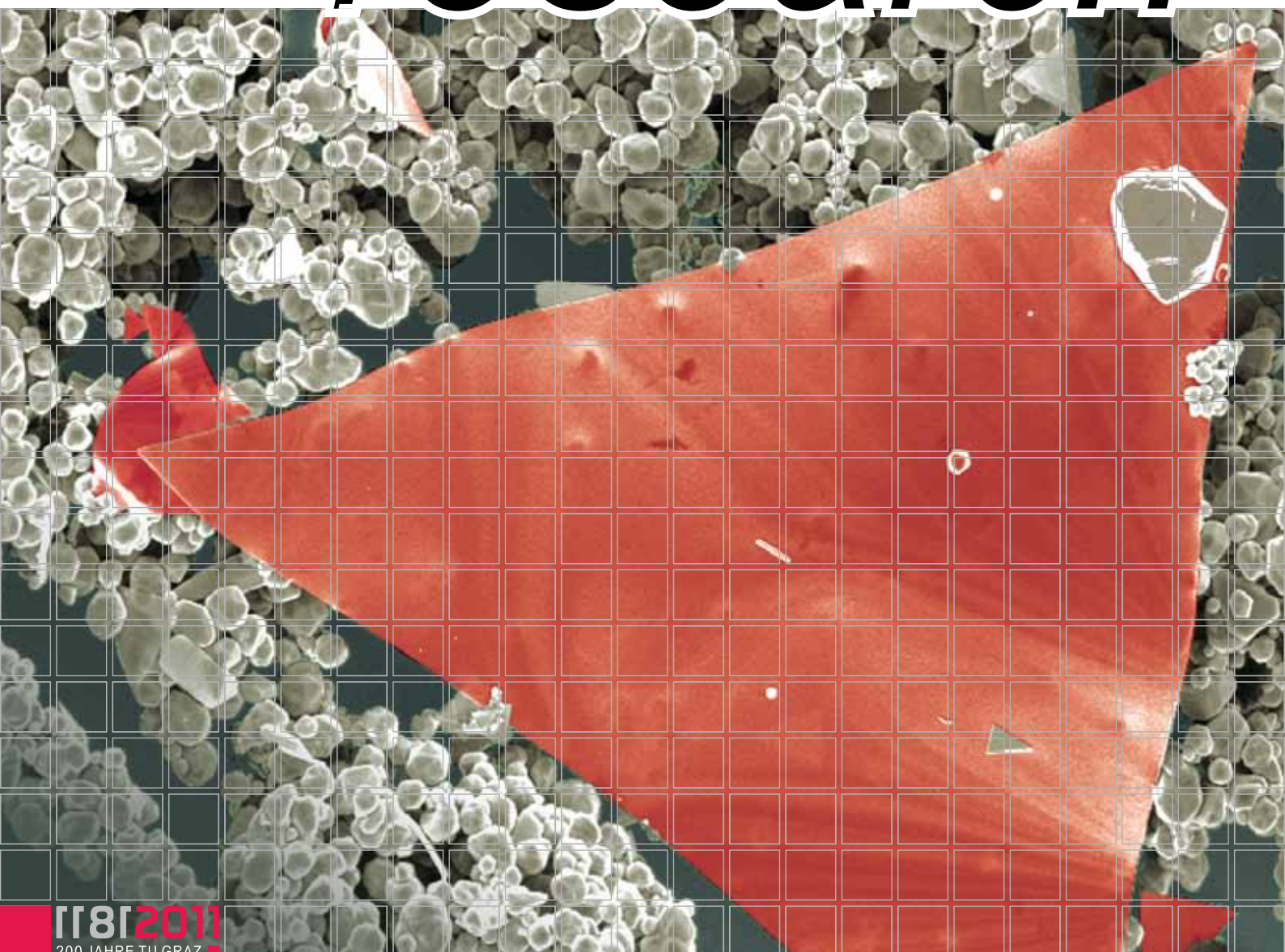


TU GRAZ *research*



11812011
200 JAHRE TU GRAZ

Unter die Lupe genommen –
Advanced Materials Science an der TU Graz

Spotlight on Advanced Materials Science
at Graz University of Technology

Content

Preface	p. 4
----------------	------

■ Face to Face

We ask well-known experts for a statement on our main topic

Searching for „Intelligent“ Materials	p. 6
An interview with Alexander Bouvier, member of the board of the international company Treibacher Industrie AG	

■ Focus: Advanced Materials Science

Organic Electronic Materials	p. 10
<i>Peter Hadley, Egbert Zojer</i>	
Development, Modelling and Structural Analysis of Modern Steels for Highly Efficient Thermal Power Plants	p. 13
<i>Peter Mayr, Christof Sommitsch, Gerald Kothleitner</i>	
Clusters as Building Blocks of New Materials: Low-Temperature Investigations of Quantum Mechanical Properties	p. 16
<i>Wolfgang E. Ernst, Markus Koch</i>	
Atomic Defects – Small in Size but Big in Effect	p. 19
<i>Wolfgang Sprengel, Werner Puff, Roland Würschum</i>	
Concrete Attack – Evidence from Stable Isotopes	p. 22
<i>Martin Dietzel, Dietmar Klammer, Florian Mittermayr</i>	
Polymer Biotechnology – Novel Approaches towards Bioresponsive Polymers and Functional Materials	p. 25
<i>Georg Gübitz</i>	
Monographic Series TU Graz – NEW Advanced Materials Science	p. 28

■ Life

Research and technology in everyday life – how results of research affect our life and can improve it

Antimicrobial Polymers or How to Get Rid of Microbes	p. 29
<i>Nadja Noormofidi</i>	

■ Cooperations

Conducting research & development together – how interdisciplinary co-operation between experts leads to success and further development

HYDROSYS: On-site Monitoring of Environmental Processes Using Mobile Augmented Reality	p. 33
<i>Ernst Kruijff</i>	

■ Innovation in teaching & research

What's new in teaching and research – how Graz University of Technology is proving and distinguishing itself as a hotbed of ideas

Gathering the Best Brains in Graz: The Discrete Mathematics FWF Doctoral Programme (DK-plus)	p. 37
<i>Wolfgang Woess</i>	

TU Graz research

Inhalt

Vorwort	S. 4
<hr/>	
■ Face to Face	
<i>Wir bitten namhafte Expertinnen und Experten um ein Statement zum Schwerpunktthema</i>	
Auf der Suche nach „intelligenten“ Materialien	S. 6
Ein Interview mit Alexander Bouvier, Mitglied des Vorstandes des internationalen Unternehmens Treibacher Industrie AG	
<hr/>	
■ Fokus: Advanced Materials Science	
Organische elektronische Materialien	S. 10
<i>Peter Hadley, Egbert Zojer</i>	
Entwicklung, Modellierung und Strukturanalyse von modernen Stählen für hocheffiziente Kraftwerke	S. 13
<i>Peter Mayr, Christof Sommitsch, Gerald Kothleitner</i>	
Cluster als neuartige Materialbausteine: Tieftemperaturuntersuchungen quantenmechanischer Eigenschaften	S. 16
<i>Wolfgang E. Ernst, Markus Koch</i>	
Atomare Defekte mit makroskopischer Wirkung	S. 19
<i>Wolfgang Sprengel, Werner Puff, Roland Würschum</i>	
Angriff von Beton – Nachweis über stabile Isotope	S. 22
<i>Martin Dietzel, Dietmar Klammer, Florian Mittermayr</i>	
Polymer Biotechnologie – Neue Strategien zur Entwicklung von bioresponsiven Polymeren und funktionellen Materialien	S. 25
<i>Georg Gübitz</i>	
Monographic Series TU Graz – NEU! Advanced Materials Science	S. 28
<hr/>	
■ Life	
<i>Forschung und Technik im Alltäglichen – wie Forschungsergebnisse auf unser Leben wirken und es verbessern können</i>	
Antimikrobielle Kunststoffe – oder wie werde ich Mikroben los?	S. 29
<i>Nadja Noormofidi</i>	
<hr/>	
■ Cooperations	
<i>Gemeinsam forschen und entwickeln – wie die interdisziplinäre Zusammenarbeit von Spezialisten in Erfolg und Weiterentwicklung resultiert</i>	
HYDROSYS: Vor-Ort-Beobachtung von Umweltprozessen unter Einsatz mobiler Augmented Reality	S. 33
<i>Ernst Kruijff</i>	
<hr/>	
■ Innovation in teaching & research	
<i>Neues aus dem Bereich Lehre und Forschung – wie sich die TU Graz als erfolgreiche „Ideenschmiede“ bewährt und auszeichnet</i>	
Die besten Köpfe in Graz versammelt: FWF Doktoratskolleg-plus „Discrete Mathematics“	S. 37
<i>Wolfgang Woess</i>	

Liebe Kolleginnen und Kollegen,
sehr geehrte Forschungspartner und
an unserer Forschung Interessierte!

Dear colleagues,
research partners and others
interested in our research,



*Franz Stelzer, Vizerektor für
Forschung und Technologie.*

*Franz Stelzer, Vice President
Research & Technology.*

Sie halten soeben die neueste Ausgabe unseres Forschungsjournal in Händen, das sich unserem Field of Expertise „Advanced Materials Science“ widmet. Moderne Materialwissenschaft ist ein breites Thema, das allerdings an den Grundfesten der Hochtechnologieentwicklung angesiedelt ist. Neue Materialien definieren die Qualität von Fahrzeugen (Formel 1 ...), die Bereitstellung neuester Massenbewegungsmittel (Airbus 380 ...), Methoden schnellster Kommunikation (Handys, Internet ...), Hilfsmittel zur optimalen Gesundheitsversorgung (Sensoren, Mikromechanik und -elektronik) usw. Beispiele für eine moderne Technologieentwicklung auf Basis neuer Hochleistungsmaterialien gibt es viele.

Dementsprechend sind für eine Technische Universität die Themen „Materialwissenschaft“ und „Materialentwicklung“ von größter Bedeutung, sowohl im Bereich der Lehre als auch insbesondere im Bereich der Forschung. Die TU Graz sieht in der Entwicklung neuer Hochleistungsmaterialien (Advanced Materials) eines ihrer Kernkompetenzfelder. Die Stärke der TU Graz innerhalb der Materialwissenschaften liegt an der sehr breiten, auf Hochleistung (High Performance) ausgerichteten Methoden- und Materialentwicklung. Diese Entwicklungen spielen fakultätsübergreifend in viele Entwicklungsfelder hinein. Diese Vielfalt zeigt sich sowohl in der Beteiligung an Kompetenzzentren des COMET-Programms (unter anderem K1: CEST, PCCL, MET; K2: MPPE (MCL), Mobility (Vif); K-Projekte: Holzforschung, MacroFun) als auch in vielen Forschungsbeteiligungen und einschlägigen Projekten. Die Themen reichen von der Entwicklung von organischen Funktionsmaterialien (z. B. für Photovoltaik, Organoelektronik, Brennstoffzellen, Biomaterialien für den Einsatz in der Biomedizin und Sensorik) bis hin zu neuartigen Verbundtechnologien (z. B. Reibschweißen)

You're holding the latest issue of our research journal in your hands, and this one is dedicated to the field of expertise of advanced materials science. Modern materials science is a broad subject which has been established on the foundations of advanced technology. It's new materials that define the quality of vehicles (e.g. Formula 1), the production of the latest mass transport aircraft (e.g. Airbus 380), methods of fast communication (mobile phones, internet, etc) appliances for optimum provision of health care (sensors, micromechanics and microelectronics) and so on. There is a plethora of examples of technological developments based on new high-performance materials.

As befitting a university of technology, the subjects of materials science and materials development are of great importance, both in the field of teaching and, of course, especially in the field of research. Graz University of Technology sees the development of new advanced materials as one of its core competences. The strength of Graz University of Technology in the materials sciences lies in its very broad high-performance oriented development of materials and methods. These developments play a role in many fields across all faculties. This variety is demonstrated both in the involvement in competence centres of the COMET Programme (among others, K1: CEST, PCCL, MET; K2: MPPE (MCL), Mobility (Vif); K projects: Holzforschung, MacroFun) as well as in many research participations and relevant projects. Subjects range from the development of organic functional materials (e.g. for photovoltaics, organoelectronics, fuel cells, biomaterials for use in medicine, and sensors) to novel composite technologies

sowie zur Entwicklung spezifischer Nanomaterialien (Helium-Cluster, Dünnschichttechnologien), Oberflächenveredlungen und Elektrodenmaterialien („Batterietechnologie“). Durch ausgewählte Beiträge aus unserer unmittelbaren Forschungswelt möchten wir Ihnen einen kleinen Einblick in diese unsere faszinierende Welt der Materialien bieten. Materialwissenschaft ist undenkbar ohne entsprechende Analytik und Materialcharakterisierung – und so haben wir mit dem „Institut für Elektronenmikroskopie und Feinstrukturforschung“ und dem daran angeschlossenen „Zentrum für Elektronenmikroskopie“ Top-Forschungsstätten auf diesem Gebiet, die auch weit über die europäischen Grenzen hinaus ihren Ruf verteidigen.

Doch was wäre eine Technische Universität ohne die unmittelbare Einbindung ihrer Forschungsergebnisse in die Ausbildung der Studierenden? Nur dadurch kann die für eine erfolgreiche wissenschaftliche Forschung notwendige Leidenschaft entfacht werden. So wird unser heutiger Themenkreis durch ein einschlägiges Lehrangebot abgerundet, in dem die Forschungsergebnisse unmittelbar in Lehrinhalte umgesetzt werden. Als Beispiel sei hier das fakultätsübergreifende Masterstudium „Advanced Materials Science“ genannt.

Ich hoffe, dass es uns wieder gelingen ist, für Sie einige spannende und interessante Neuigkeiten aus unserer „Forschungsküche“, gewürzt mit ein paar persönlichen Kommentaren und Zutaten aus anderen Kompetenzfeldern, zusammenzustellen und wünsche Ihnen entsprechend unserer Überzeugung mit „Wissen • Technik • Leidenschaft“ viel Freude und Begeisterung bei der Lektüre. Falls Sie etwas besonders interessiert, freuen wir uns auch sehr über einen direkten persönlichen Kontakt.

Ihr Franz Stelzer

(e.g. friction welding) and the development of specific nanomaterials (helium-clusters, thin-film technologies), surface plating and electrode materials (battery technology). By means of these selected contributions from our own research, we would like to grant you an insight into the fascinating world of materials. Materials science would be unthinkable without the appropriate analysis and materials characterisation, and in the form of the Institute of Electron Microscopy and Nanoanalysis and the attached Centre for Electron Microscopy and Nanoanalysis we have two top research institutes in the field whose reputations extend far beyond European borders.

But what would be a university of technology without the direct integration of its research results in the education of its students? Only in this way can the necessary passion be kindled for successful scientific research. In this spirit, our subject today is rounded off with a relevant range of courses, in which research results are implemented directly into the teaching content. An example here is the cross-faculty advanced materials science master's programme.

I hope we've once again managed to put together a few exciting and interesting novelties from our research facilities, spiced up with some personal comments and quotations from other fields of expertise. And in the spirit of “Science • Passion • Technology”, I wish you a satisfying and enthusiastic read. And if something should especially capture your interest, we would be very happy to hear from you personally.

Franz Stelzer

Auf der Suche nach „intelligenten“ Materialien

Searching for “Intelligent” Materials

Ines Hopfer

*Alexander Bouvier
dissertierte am Institut für
Thermische Verfahrenstechnik
der TU Graz. Nach Abschluss
des Doktoratsstudiums im
Bereich Forschung und Ent-
wicklung bei der Treibacher
Industrie AG tätig, danach
folgten die Betriebsleitung,
die Geschäftsführung einer
Tochtergesellschaft sowie die
Gesamtverantwortung für die
F&E-Aktivitäten des Gesamt-
unternehmens. 2006 Berufung
in den Vorstand der Treibacher
Industrie AG.*

*Alexander Bouvier
gained his doctorate at the
Institute of Thermal Process
Engineering at Graz University of
Technology. After completing his
doctoral programme, he was
involved in research and
development at Treibacher
Industrie AG, after which he
moved into general manage-
ment, then the management of a
subsidiary, and then took on
overall responsibility for R&D
activities of the enterprise as a
whole. In 2006 he joined the
board of Treibacher Industrie AG.*

Im Interview mit TU Graz research spricht Alexander Bouvier, Mitglied des Vorstandes des internationalen Unternehmens Treibacher Industrie AG, über die Herausforderungen und Probleme der Materialwissenschaft.

Innovative Forschung und Entwicklung kann letztendlich nur durch Multi-Disziplinarität und durch Kooperationen erfolgen, davon ist der TU Graz-Absolvent Bouvier überzeugt.

Sehr geehrter Herr Bouvier, Sie sind Mitglied des Vorstandes der Treibacher Industrie AG, Ihr Unternehmen ist weltweit führend auf dem Gebiet der Chemie und Metallurgie. Können Sie uns kurz den Aufgabenbereich Ihres Unternehmens schildern?

Die Treibacher Industrie AG ist auf mehreren Gebieten tätig. Einerseits beschäftigen wir uns mit der Herstellung maßgeschneiderter Pulver mit speziellen chemischen, physikalischen und funktionellen Eigenschaften. Diese werden in der Hartmetallindustrie, in der Hochleistungskeramik, in Katalysatoren, in der Glasindustrie, in der Pharmazie und vielen anderen Anwendungen eingesetzt. Andererseits stellen wir Ferrolegierungen für die Stahl- und Gießereindustrie, Wasserstoffspeicherlegierungen und Sonderlegierungen unter anderem für die Medizintechnik her.

Wo sehen Sie die größten Herausforderungen und Probleme für die Materialforschung?

Die Entwicklung unserer Gesellschaft hängt zukünftig immer stärker von der Verfügbarkeit von „intelligenten“ Materialien mit spezifischen physikalischen, chemischen und technischen Funktionen ab. Forschung und Entwicklung dazu muss multi-disziplinär und kooperativ erfolgen, weil neue Konzepte eine längerfristige Zusammenarbeit sowohl zwischen universitären Partnern als auch zwischen mehreren Unternehmen entlang der Wertschöpfungskette erfordern. Die Herausforderung dabei ist es, talentierten Forscherinnen

Alexander Bouvier, member of the board of the international company Treibacher Industrie AG, talks about the challenges and problems facing materials science in an interview with TU Graz research.

Graz University of Technology graduate Bouvier is convinced that innovative research and development can only be achieved ultimately by multidisciplinary and co-operation.

Mr. Bouvier, you're a member of the board of Treibacher Industrie AG, and your company is a world leader in the field of chemistry and metallurgy. Can you please briefly explain to us the scope of activity of your company?

Treibacher Industrie AG is active in several fields. On the one hand, we're in the business of manufacturing customized powders with special chemical, physical and functional characteristics. These are used in the cemented carbide industry, in high-performance ceramics, in catalysts, in the glass industry, in pharmacy and in many other applications. On the other hand, we make ferroalloys for the steel and foundry industry, hydrogen storage alloys and special alloys for medical technology, among other fields.

In your view, what are the biggest challenges and problems facing materials research?

Society's future development is increasingly dependent on the availability of "intelligent" materials with specific physical, chemical and technical uses. Research and development has to be carried out in a multidisciplinary and cooperative way because new concepts call for longer term development – both between university partners and the numerous companies along the value-added chain. The challenge here is about providing an infrastructure to talented researchers so that they can join the ranks of international specialists and bring about a broad integration of



© Marcel Ambrusch

und Forschern eine Infrastruktur zu bieten, damit sie zu internationalen Spezialistinnen und Spezialisten werden können, und eine breite Vernetzung dieser Personen in multi-disziplinären Teams zu erwirken.

Neben den reinen materialwissenschaftlichen Herausforderungen wird auch das Thema der Verfügbarkeit von Ausgangsrohstoffen für diese Materialien selbst, wie in unserem Fall z. B. die *Seltenen Erden*, und damit auch das Thema Wiederverwertbarkeit am Ende des Lebenszyklus eine wesentliche Rolle spielen.

In der Vergangenheit gab es zahlreiche Kooperationen zwischen TU Graz und Treibacher Industrie AG. Welche Rolle spielt in Ihrem Unternehmen die Zusammenarbeit mit einer Forschungsinstitution wie der TU Graz?

Aufgrund der geografischen Nähe und der Themenschwerpunkte Chemie, Technische Chemie und Verfahrenstechnik stellte die TU Graz immer einen der ersten Ansprechpartner für Kooperationen in neuen Projekten dar. Daraus ergaben sich in weiterer Folge interessante Arbeiten, welche auch dazu führten, dass daraus Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter für unser Unternehmen rekrutiert werden konnten.

Wo sehen Sie die Stärken unserer Universität?

Ich sehe die Ausbildung in den Ingenieurwissenschaften und den technischen Naturwissenschaften sowie die Forschung und Entwicklung auf

specialists in multidisciplinary teams. Apart from pure materials-science challenges, the availability of basic raw materials will play a significant role for these materials in particular, as in our case e.g. *rare earths*, and thus also for recyclability when lifecycles come to an end.

In the past there were a number of cooperations between Graz University of Technology and Treibacher Industrie AG. What role does cooperation with a research institution, like Graz University of Technology, play in your company?

Graz University of Technology is always one of the first contacts regarding cooperations in new projects due to its geographical vicinity and its main focuses on chemistry, technical chemistry and process engineering. This has subsequently resulted in interesting work, which in turn has led to staff being recruited for our company.

Where are the strengths of our university in your opinion?

From the point of view of Treibacher Industrie AG, I think the training in engineering and technical sciences as well as research and development in these fields has special importance, particularly in chemistry, technical chemistry and process engineering. This will be strengthened by the strategic cooperation in teaching with Graz University.

There is a big need for highly qualified skilled personnel in the field of materials research.



diesen Gebieten aus der Sicht der Treibacher Industrie AG, speziell in der Chemie, Technischen Chemie und der Verfahrenstechnik, als besonders wichtig an. Dies wird auch durch die strategische Kooperation in der Lehre mit der Universität Graz noch verstärkt.

Der Bedarf an hoch qualifiziertem Fachpersonal im Bereich der Materialforschung ist beträchtlich. Die TU Graz bietet daher seit 2008 das Masterstudium „Advanced Materials Science“ an, in dem Bachelorstudierende der Fachrichtungen Maschinenbau, Technische Chemie und Technische Physik zum Materialwissenschaftler/zur Materialwissenschaftlerin ausgebildet werden. Wie beurteilen Sie die Etablierung dieses neuen Studiums?

Wir sehen solche Entwicklungen prinzipiell sehr positiv, weil die Herausforderungen in den Entwicklungen neuer Materialien immer mehr übergreifendes Wissen aus den verschiedenen Disziplinen Chemie, Physik, Ingenieurwissenschaften und auch Wirtschaft verlangen. Aufbauend auf guten Basisstudien ist diese Ausbildung für Unternehmen und natürlich auch für Absolventinnen und Absolventen zukünftig sehr interessant. Im Rahmen von Synergiebemühungen in der österreichischen Universitätslandschaft und knappen Budgets wäre es gerade in der Steiermark, mit historisch starken Wurzeln in den Materialwissenschaften, sinnvoll, innerhalb der kurzen Distanz Graz – Leoben über einen Verbund auf dem Sektor der „Advanced Materials“ nachzudenken, um die Effizienz zu erhöhen.

Sie haben es bereits vorher angesprochen: Sie beschäftigen in Ihrem Unternehmen auch Absolventinnen und Absolventen der TU Graz. In welcher Funktion/Position sind diese tätig?

In unserem Unternehmen beschäftigen wir etliche Absolventinnen und Absolventen der TU Graz in den Bereichen Betriebsleitung, Technik

For this reason, Graz University of Technology has been offering an advanced materials science master's programme since 2008, in which graduates of mechanical engineering, technical chemistry and technical physics can be trained as materials scientists. How do you rate this new course of study?

We view such developments very positively in principle because the challenges in the developments of new materials demand increasingly overarching knowledge from the various disciplines of chemistry, physics, engineering sciences and economics. Based on good fundamental courses of study, this training course has great future potential for companies and, of course, also for graduates. In the framework of striving for synergies in the Austrian university community and in view of the current lean budgets, it would make sense, especially in Graz, with its historically strong roots in the materials sciences, to think about a connection in the advanced materials sector within the short distance between Graz and Leoben in order to increase efficiency.

You mentioned earlier that you employ Graz University of Technology graduates in your company. What positions do they occupy?

Our company employs a number of TU Graz graduates in general management, technology and investment planning, research and development, and including myself on the board. We are especially proud of the fact that our department of health, safety and environmental protection and our rare earths operation are headed by two very committed young graduates from the chemical engineering branch of studies.

From the point of view of your company, what are the current hot topics of materials research?

For Treibacher Industrie AG, the following areas represent the main focuses of research and development: functional ceramic materials (e.g. PV



und Investitionsplanung, Forschung und Entwicklung und durch meine Person auch im Vorstand. Besonders stolz sind wir darauf, dass unser Ressort Gesundheit, Sicherheit und Umweltschutz und unser Seltenerdbetrieb durch zwei sehr engagierte, junge Absolventinnen des Studienganges Chemieingenieurwesen geleitet werden.

Was sind derzeit die „Hot Topics“ der Materialforschung aus der Sicht Ihres Unternehmens?

Für die Treibacher Industrie AG stellen in Forschung und Entwicklung die Gebiete funktionskeramische Materialien (z. B. PV-Beschichtungen, Sputtertargets, SOFC-Elektrolyte), Dental- und Biokeramik, Materialien für den Einsatz im Automobilbereich (z. B. Katalysatoren, Thermoelektrik), Materialien für Schneidkeramiken und Cermetts, Werkstoffe für das Titanfeingießen (z. B. für Flugzeugbauteile) sowie Materialien für die Pharmaindustrie (z. B. MRI-Kontrastmittel) die Schwerpunkte dar.

Zurzeit beobachten wir enorme Preissteigerungen bei vielen Rohstoffen. Welche Auswirkungen erwarten Sie auf die Entwicklung neuer Materialien und Technologien?

Wir beobachten dies insofern mit Besorgnis, als die Abhängigkeit von China und die Unberechenbarkeit von wirtschaftlichen Entscheidungen immer unmittelbarer spürbar werden. Bei den *Seltenen Erden*, welche in vielen der schon angesprochenen Materialien unumgänglich sind, wird dies zu neuen Ansätzen wie z. B. dem teilweisen Ersatz und zu Konzepten der Wiederverwertbarkeit führen müssen. Auch in diesen Gebieten wird bei der Treibacher Industrie AG geforscht. Zusätzlich müssen Rohstoffprojekte außerhalb Chinas zeitnah hochgefahren werden.

coating, sputtering targets, SOFC electrolytes), dental and bioceramics, materials for use in automotive engineering (e.g. catalysts, thermoelectrics), materials for cutting ceramics and cermetts, materials for fine titanium casting (e.g. for aircraft components) as well as materials for the pharmaceuticals industry (e.g. MRI contrast media).

At the moment we are observing enormous price rises in many raw materials. What are the repercussions for the development of new materials and technologies?

We're watching this with concern because the dependence on China and the unpredictability of economic decisions is being felt increasingly directly. In the case of *rare earths*, whose use is unavoidable in many of the already mentioned materials, this will have to lead to new approaches, such as partial substitution and to concepts of recyclability. Treibacher Industrie AG is also conducting research in these areas. Additionally, raw-materials projects outside China must be started up as soon as possible.

Organische elektronische Materialien

Organic Electronic Materials

Peter Hadley, Egbert Zojer



Peter Hadley ist der Leiter des Instituts für Festkörperphysik. Sein Arbeitsgebiet umfasst die elektrischen Eigenschaften von Nanostrukturen.

Peter Hadley is the head of the Institute of Solid State Physics. His research interests are the electrical properties of nanostructures and assemblies of nanostructures.

Elektronische Schaltungen prägen in vielfacher Hinsicht unser Leben. Für zahlreiche Anwendungen werden dabei in den kommenden Jahren klassische Halbleitermaterialien durch organische Halbleiter abgelöst werden. Letztere stellen insbesondere für Displays, Beleuchtungselemente, Solarzellen, Sensoren oder auch großflächige Schaltungen vielversprechende Alternativen dar.

Dabei sind Kunststoffe zwar vielfach Isolatoren, ihre chemische Struktur lässt sich aber auch so modifizieren, dass sie als Leiter oder Halbleiter fungieren. Als „Chamäleons“ unter den Materialien können sie dabei transparent oder undurchsichtig, elastisch oder spröde, leitfähig oder isolierend wirken. Ihre Eigenschaften lassen sich auch durch geeignete chemische Syntheserouten vergleichsweise einfach optimieren. Daneben können sie durch preiswerte und energieeffiziente Verfahren wie Stanzen, Sprühen, Tauchen und Drucken verarbeitet werden.

Wichtige Pionierarbeiten im Bereich organischer Leiter und Halbleiter wurden schon vor mehr als 30 Jahren an der TU Graz von Hartmut Kahlert, Günther Leising und Franz Stelzer durchgeführt. Einer der größten Erfolge war die Produktion der ersten blauen organischen Leuchtdiode (OLED). Seit dieser Zeit hat sich die TU Graz zu einem international anerkannten Zentrum für organische Elektronik entwickelt. Die Forschung an organischen Halbleitern ist auch einer der erfolgreichsten wissenschaftlichen Bereiche der TU Graz und stellt mit mehr als zwanzig Prozent der 100 meistzitierten wissenschaftlichen Veröffentlichungen der TU Graz ein besonderes Stärkefeld der Universität dar.

In Graz werden neue Moleküle mit speziell gestalteten chemischen und photoreaktiven Eigenschaften synthetisiert. Es steht eine Vielzahl von

When we think about electronics, we often think about high-performance computing. Computers, mobile telephones, and microcontrollers affect almost every aspect of our lives. The dominant material in these applications is the semiconductor silicon and in high-performance computing applications, silicon has no real competition. There are, however, many applications outside the field of high-performance computing where other materials can outperform silicon.

These applications include displays, efficient lighting, solar cells, environmental sensors, and chemical sensors. While organic materials are best known as insulating plastics, they can be modified into conductors or semiconductors and used for electronics. Organics can be thought of as the chameleons of the materials. They can be hard or soft, transparent or opaque, elastic or brittle, conducting or insulating. They can be optimized for their photoreactivity, chemical reactivity, flexibility, or biocompatibility. Organic material can also be processed in inexpensive and energy-efficient ways like stamping, spraying, dip coating, and printing. Some of the pioneering work on organic conductors and semiconductors was performed more than 30 years ago at the Graz University of Technology by Hartmut Kahlert, Günther Leising, and Franz Stelzer. One of the early successes was the production of the first blue organic light emitting diode (OLED). Since that time, TU Graz has developed into an internationally recognized center for organic electronics. This one of the most successful scientific fields at Graz University of Technology with twenty percent of the university's 100 most highly cited papers published on this topic.

New molecules are being synthesized in Graz that have specific chemical or photoreactive prop-

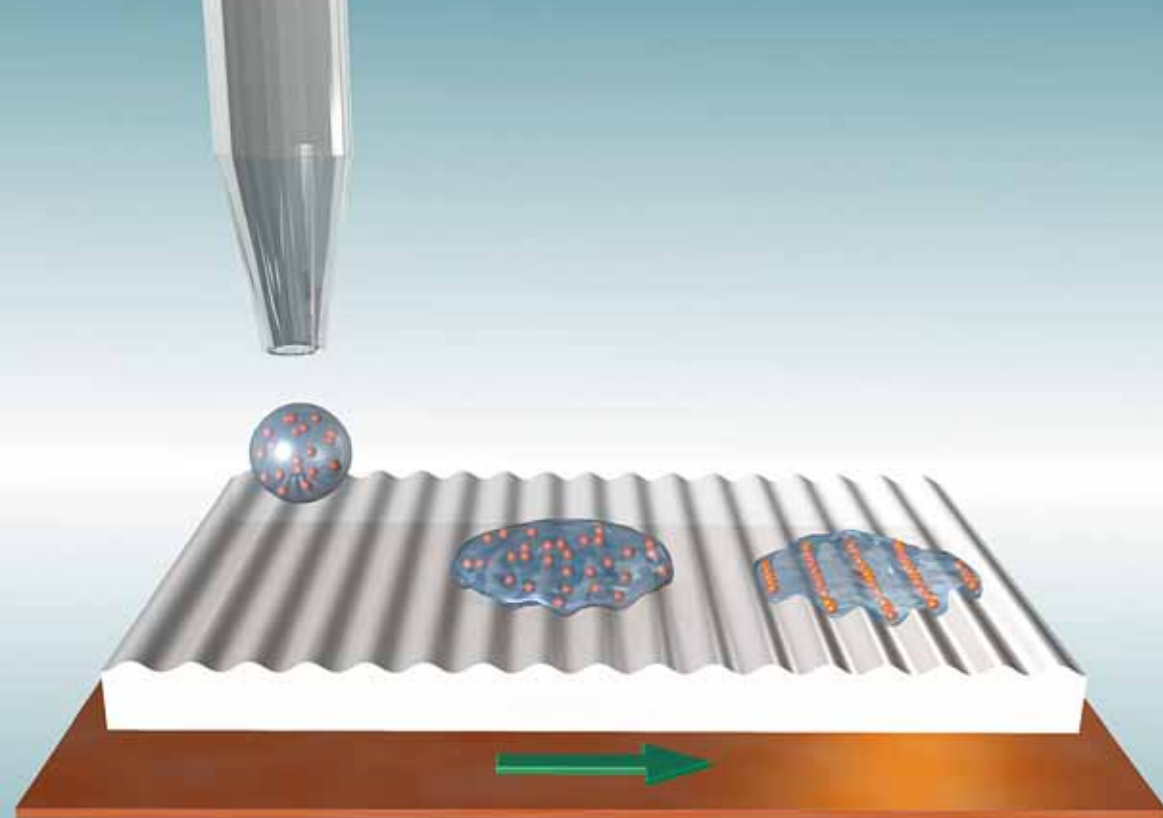


Abb. 1/ Fig. 1 © Evelin Fisslthaler, et al., Soft Matter, 2008, 4, 2448.

Analysetechniken zur Verfügung, um diese Materialien zu charakterisieren. Diese umfassen unter anderem Elektronenmikroskopie, Rasterkraftmikroskopie, optische Spektroskopie und Röntgenbeugung. Daneben werden auch Computersimulationen intensiv genutzt, um das Verhalten der Materialien vorherzusagen oder zu erklären. Aktuelle Ergebnisse dieser Studien sind jüngst in höchst angesehenen Zeitschriften wie Science, Nature, Nature Photonics, Nature Nanotechnology, Nano Letters, Advanced Materials und Physical Review Letters erschienen.

Die Organische Elektronik ist auch einer der Bereiche, in denen die TU Graz die meisten Patente hält. Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter der TU Graz waren bei der Gründung des „Instituts für Nanostrukturierte Materialien und Photonik“ von Joanneum Research und des „NanoTecCenter Weiz GmbH“ maßgeblich beteiligt, um die anwendungsnahe Umsetzung der Forschungsergebnisse voranzutreiben. Die Forschungsgebiete dieser Institute umfassen die Entwicklung von Druck-, Präge- und Strukturierungsprozessen, um integrierte (opto)elektronische Schaltungen aus organischen Halbleitern und hybriden Werkstoffen zu realisieren.

Beispiele für an der TU Graz untersuchte Anwendungen reichen von chemischen Sensoren, die z. B. die Frische von Fleischprodukten messen können, bis zu OLEDs, die verschiedene Farben

emittieren. These molecules will often assemble themselves on a surface into an ordered layer one molecule thick. Typically the best electrical performance is found when the molecules arrange in such an ordered pattern. An extensive set of analysis techniques is used to characterize the materials that includes electron microscopy, atomic force microscopy, optical spectroscopy, and x-ray diffraction. To model the behavior of the materials, computer simulations are used intensively. Recent results of these studies on the structural, electrical and optical properties of these materials have appeared in journals such as Science, Nature, Nanoletters, and Advanced Materials.

Organic electronics is one of the areas where Graz University of Technology holds the most patents. To further develop these discoveries, faculty members of the university have been involved in founding the Joanneum Research Institute on Nanostructured Materials and Photonics as well as the NanoTecCenter Weiz GmbH (a jointly owned non-profit R&D company of Graz University of Technology and Joanneum Research). The R&D activities of these institutes include printing, imprinting and structuring processes and technologies to fabricate transistors, solar cells, OLEDs and integrated sensor devices from organic semiconductors and hybrid materials.

Abb. 1: Eine wässrige Dispersion von halbleitenden Polymernanokugeln wird durch Tintenstrahl-druck auf eine strukturierte Polymeroberfläche aufgebracht.

Fig 1: An aqueous dispersion of semiconducting polymer nanospheres (SPNs) was deposited by inkjet printing onto a polymer surface patterned by soft embossing.



Egbert Zojer leitet eine Arbeitsgruppe am Institut für Festkörperphysik. Diese befasst sich mit der Erforschung fundamentaler Eigenschaften organischer Halbleiter und daraus aufgebauter elektronischer Schaltungen, wobei sowohl quantenmechanische Simulationen durchgeführt als auch neuartige Bauelemente hergestellt und untersucht werden.

Egbert Zojer is an associate professor at the Institute of Solid State Physics. His group focuses on the investigation of fundamental properties of organic semiconductors, applying quantum-mechanical simulations as well as fabricating and testing novel device structures.

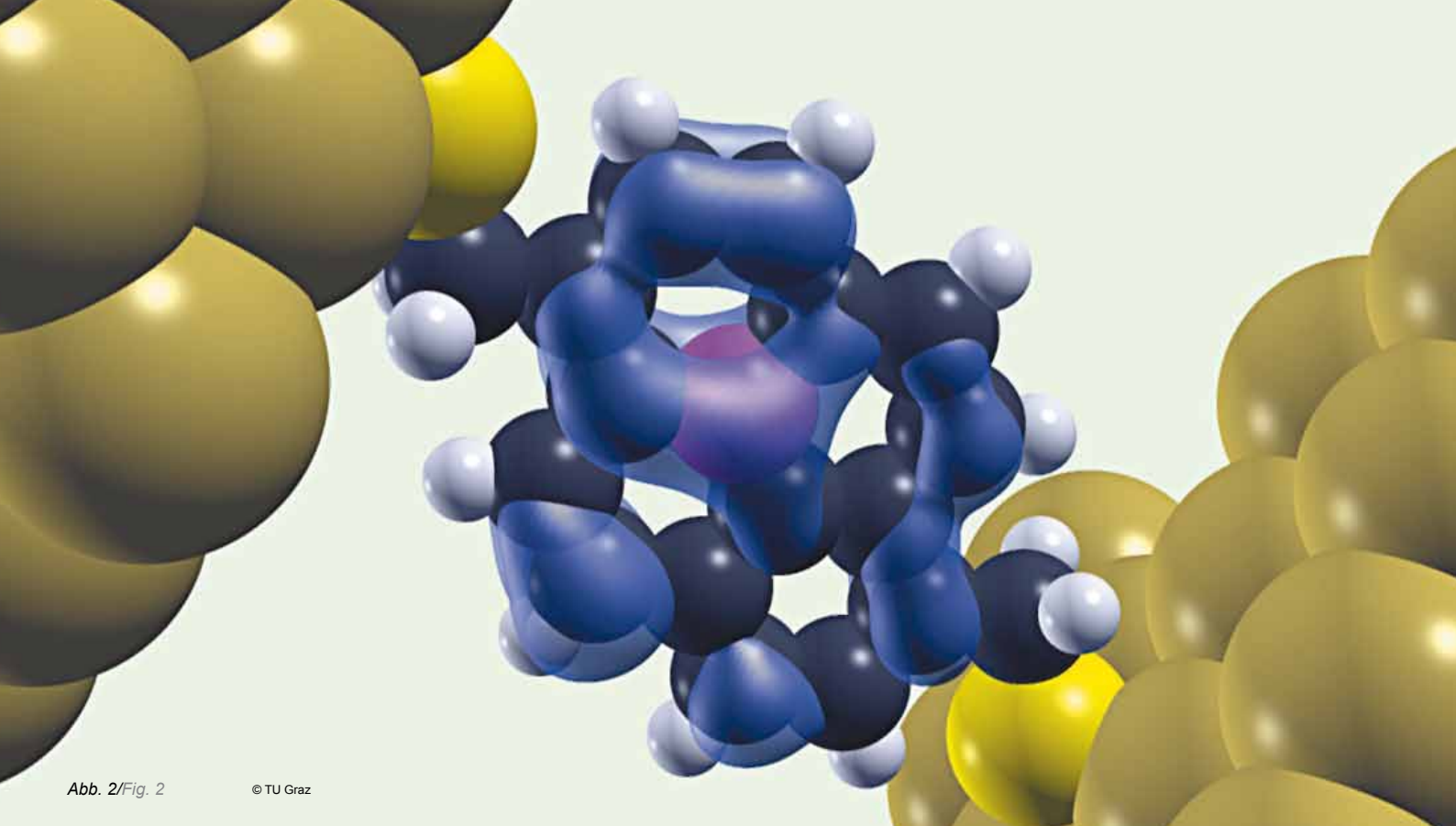


Abb. 2/ Fig. 2

© TU Graz

Abb. 2: Um die ultimative Miniaturisierung der Elektronik zu erreichen, müssten einzelne Moleküle als elektronische Bauteile verwendet werden. In einem kürzlich in *Nano Letters* erschienenen Artikel erklärt ein Team aus Wissenschaftern des MIT, der HU Berlin, der Montanuniversität Leoben, des Georgia Tech und der TU Graz, wie die elektrische Leitfähigkeit einzelner Moleküle um Größenordnungen erhöht werden kann: Georg Heimel, et al., *Nano Lett.* 2009, 9 (7), S. 2559–2564.

Fig 2: The ultimate miniaturization of electronics would be to use single molecules as electronic components. In a recent *Nanoletters* article, a team from M.I.T., Humbolt University, Montan Universität, Georgia Tech, and Graz University of Technology, explain how the electrical conductivity of the molecule can be increased. Georg Heimel, et al., *Nano Lett.*, 2009, 9 (7), pp 2559–2564.

und weißes Licht emittieren. In Partnerschaft mit dem größten Leiterplattenhersteller Europas, Austria Technologie & Systemtechnik AG (AT&S), wurden im Rahmen eines Christian Doppler Labors gedruckte Widerstände und Kondensatoren untersucht, und gemeinsam mit dem Elektronikonzern Philips wurden einige der bisher komplexesten aus einer nur monomolekularen Schicht bestehenden Schaltungen realisiert. Außerdem wurden verschiedene neuartige Laserkonzepte und zusammen mit AustriaMicrosystems organische elektrochrome Displays entwickelt. In einem weiteren Christian Doppler Labor werden organische Polymere mit anorganischen Nanopartikeln kombiniert, um flexible Nanokomposit-Solarzellen herzustellen. Letztere Arbeiten finden dabei in Kooperation mit dem NanoTecCenter Weiz GmbH und Isovoltaic GmbH statt.

In den kommenden Jahren werden organische elektronische Materialien weiter unsere wissenschaftliche Neugierde stimulieren und dabei gleichzeitig Wege aufzeigen, um einige der brennenden technologischen Probleme unserer Gesellschaft zu lösen.

The applications of organic electronics range from chemical sensors that can measure when packaged meat in the supermarket has gone bad to OLEDs that emit various colors including white light. In partnership with the largest printed circuit board company in Europe, Austria Technologie & Systemtechnik AG (AT&S), resistors and capacitors were produced by inkjet printing in a CD Laboratory for Advanced Functional Materials. Together with the electronics company Philips, some of the most complicated circuits ever made from single layers of organic molecules were fabricated. Lasers have been made of an elastic material where the color could be changed by stretching the material. Lasers have also been formed by stamping a pattern into a polymer. Organic electrochromatic displays have been developed with AustriaMicrosystems. In a CD Laboratory for Nanocomposite Solar Cells, organic polymers are mixed with inorganic nanoparticles are used to make flexible solar cells. The industrial partners in this venture are NanoTecCenter Weiz GmbH, and Isovoltaic GmbH.

In the coming years, organic electronic materials will continue to surprise and engage our scientific curiosity while providing technical solutions to some of the problems facing society.

Entwicklung, Modellierung und Strukturanalyse von modernen Stählen für hocheffiziente Kraftwerke

Development, Modelling and Structural Analysis of Modern Steels for Highly Efficient Thermal Power Plants

Peter Mayr, Christof Sommitsch, Gerald Kothleitner

Der weltweit ständig wachsende Strombedarf und der Mangel an einsatzbereiten Alternativen zu thermischen Kraftwerken zur Deckung des Grundstrombedarfs sind die Motoren der Werkstoffentwicklung für hocheffiziente thermische Kraftwerke. Kraftwerkskomponenten sind im Betrieb hohen Temperaturen, hohen Drücken und oft aggressiven Atmosphären ausgesetzt und dies über die gesamte Nutzungsdauer von mehreren Jahrzehnten. Ziel dieser Forschungsarbeit ist es, aus Untersuchungen an langzeitbelasteten Komponenten zu lernen und dieses Wissen in die Entwicklung neuer Werkstoffe mit Unterstützung computergestützter Methoden einfließen zu lassen.

In Österreich gilt es als selbstverständlich, dass Strom zu jeder Tages- und Nachtzeit in unbegrenztem Ausmaß zur Verfügung steht. Wer selbst einmal bei einem Blackout im stecken gebliebenen Aufzug wartete, hat am eigenen Leibe verspürt, wie abhängig wir von Elektrizität sind und wie verletzlich unsere Gesellschaft in diesem Bereich ist. Thermische Kraftwerke (Kohle, Öl, Gas) sind meist als Grundlastkraftwerke eingesetzt und speisen fast ununterbrochen Strom, oft mit relativ niedrigen Stromerzeugungskosten, in das Netz ein. Soll der Wirkungsgrad von thermischen Kraftwerken angehoben werden, so ist dies unter anderem über ein Anheben von Frischdampfdruck und -temperatur möglich, was aber auch mit einer erheblichen Mehrbelastung der Werkstoffe verbunden ist.

Strukturanalyse und Entwicklung

Die hier beschriebenen Forschungsaktivitäten beschäftigen sich mit der Entwicklung von 9 bis 12 % Chromstählen für dickwandige Kraftwerkskomponenten wie zum Beispiel Turbinengehäusen. Ein ganzheitliches Forschungskonzept berücksichtigt

The world's constantly increasing demand for electricity and the lack of alternatives to thermal power plants to supply base-load electric energy is driving materials development for highly efficient thermal power plants. During operation times of up to several decades, power plant components are exposed to high temperatures, high loads and often aggressive atmospheres. The main target of the work performed at Graz University of Technology is to learn from investigations of long-term exposed power plant components and to apply this knowledge supported by computer-aided methods in the development of new materials.

In Austria, people take it for granted that they can access unlimited electricity night and day. If you have been stuck in an elevator waiting for help during a power outage, you have personally experienced how dependent we are on electricity supply and how vulnerable our society is in this regard. Thermal power plants (coal, oil and gas) are often operated as base-load plants, providing continuously and relatively cheap electricity to the grid. One way to increase the efficiency of thermal power plants is to increase steam temperature and pressure. This increase in steam parameters is connected with increased loads on the materials.

Structural analysis and steel development

The presented research activities cover the development of high-temperature 9-12% chromium steels for thick-walled power plant components, such as steam pipes and turbine casings. A holistic research concept targets all relevant processes from steel production to component manufacturing to in-service behaviour of components during long-term high-temperature operation. As the steel microstructure changes during produc-



Peter Mayr ist Universitätsassistent am Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik. Nach Forschungsaufenthalten an der University of Tokyo und dem Massachusetts Institute of Technology leitet er am IWS die Arbeitsgruppe Werkstoffentwicklung.

Peter Mayr is assistant professor at the Institute for Materials Science and Welding. After research stays at the University of Tokyo and Massachusetts Institute of Technology he currently heads the Materials Development Group at IWS, Graz University of Technology.



© voestalpine
Gießerei Linz



Christof Sommitsch ist Vorstand des Instituts für Werkstoffkunde und Schweißtechnik und wissenschaftlicher Leiter des COMET K-Projekts Kompetenznetzwerk für Fügetechnik JOIN 4+. Seit 2006 leitet er das Christian Doppler Laboratorium für Werkstoffmodellierung und Simulation.

Christof Sommitsch is director of the Institute for Materials Science and Welding and scientific head of the COMET K-Project Network of Excellence for Joining Technologies JOIN 4+. Since 2006 he has been head of the Christian Doppler Laboratory for Materials Modelling and Simulation.

Abb. 1: Abguss eines Turbinengehäuses bei der voestalpine Gießerei Linz.

Abb. 2: Wärmebehandlung eines Turbinengehäuses.

Fig. 1: Casting of a turbine casing at voestalpine Gießerei Linz.

Fig. 2: Heat treatment of a turbine casing.

alle relevanten Prozesse von der Stahlerzeugung bis hin zum Verhalten der Komponenten im mehrjährigen Dauereinsatz. Da sich die Mikrostruktur des Stahls sowohl während der Fertigung als auch dann im Einsatz fortlaufend verändert, ist die Charakterisierung dieser Evolution mittels modernster Verfahren unerlässlich. In diesem Projekt werden neben konventioneller Lichtmikroskopie hochmoderne elektronenmikroskopische Methoden sowie Untersuchungen an Teilchenbeschleunigern angewendet. Der Einsatz von Transmissions-Elektronenmikroskopie (TEM) und den angekoppelten analytischen Methoden wie energiegefilterte TEM (EFTEM), Elektronenenergieverlustspektroskopie (EELS) und energiedispersive Röntgenspektroskopie (EDX) erlaubt die Charakterisierung von bis zu Nanometer kleinen Karbiden und Nitriden im Stahl, die für die hohen Festigkeiten im Hochtemperaturbereich ausschlaggebend sind. So wird am Institut für Elektronenmikroskopie der TU Graz in Kooperation mit dem Zentrum für Elektronenmikroskopie ständig an verbesserten Methoden mit noch höherem Auflösungsvermögen und gesteigerter Sensitivität gearbeitet.

In Forschungsarbeiten am Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik werden mittels hochenergetischer Synchrotronstrahlung aus Teilchenbeschleunigern unter anderem Phasenumwandlungen studiert oder die Schädigung in Bauteilen in Form von Porenbildung mittels Synchrotrontomografie charakterisiert. Diese Untersuchungen werden am Advanced Photon Source, USA, und am SPring-8 in Japan, zwei der modernsten Teilchenbeschleuniger der Welt, durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Strukturanalyse fließen wiederum direkt in die Modellbildung und Simulation ein.

Modellierung

Da experimentelle Untersuchungen mit enormen Kosten und mehrjährigen Prüfzeiten verbunden

sind, ist dies oft mit einer Degradation der mechanischen Eigenschaften verbunden. Die Charakterisierung der strukturellen Evolution ist daher mandatory. In dieser Arbeit werden vorwiegend charakterisierende Methoden angewendet. Konventionelle Licht-optische Mikroskopie, moderne elektronenmikroskopische Methoden und Untersuchungen mit Synchrotronstrahlung, die in einem Teilchenbeschleuniger erzeugt wird, werden eingesetzt. Die Verwendung von Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) und deren analytischen Methoden, wie energiegefilterte TEM (EFTEM), Elektronenenergieverlustspektroskopie (EELS) und energiedispersive Röntgenspektroskopie (EDS) ermöglicht die Charakterisierung von Mikrometer bis Nanometer kleinen Karbiden und Nitriden. Diese kleinen Partikel sind essenziell für den Stahl und liefern die Festigkeit bei hohen Temperaturen. Das Institut für Elektronenmikroskopie der TU Graz in Kooperation mit dem Zentrum für Elektronenmikroskopie entwickelt kontinuierlich neue Charakterisierungsmethoden mit erhöhter räumlicher Auflösung und Sensitivität.

In Forschungsprojekten am Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik wird hochenergetische Synchrotronstrahlung zur Überwachung von Phasenumwandlungen im Stahl während des Schweißens und der Wärmebehandlung sowie zur Dokumentation von Schäden wie Poren oder Mikrorissen in langzeitgetesteten Proben mittels Synchrotrontomografie eingesetzt. Diese Untersuchungen werden an zwei der modernsten Synchrotronen der Welt, dem Advanced Photon Source in den USA und dem SPring-8 in Japan, durchgeführt. Die Ergebnisse der strukturellen Analyse werden direkt in die Modellbildung und Simulation des Materialverhaltens einfließen.

Modelling

Da experimentelle Untersuchungen mit enormen Kosten und mehreren Jahren Prüfzeit verbunden sind, ist dies oft mit einer Degradation der mechanischen Eigenschaften verbunden. Die Charakterisierung der strukturellen Evolution ist daher mandatory. In dieser Arbeit werden vorwiegend charakterisierende Methoden angewendet. Konventionelle Licht-optische Mikroskopie, moderne elektronenmikroskopische Methoden und Untersuchungen mit Synchrotronstrahlung, die in einem Teilchenbeschleuniger erzeugt wird, werden eingesetzt. Die Verwendung von Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) und deren analytischen Methoden, wie energiegefilterte TEM (EFTEM), Elektronenenergieverlustspektroskopie (EELS) und energiedispersive Röntgenspektroskopie (EDS) ermöglicht die Charakterisierung von Mikrometer bis Nanometer kleinen Karbiden und Nitriden. Diese kleinen Partikel sind essenziell für den Stahl und liefern die Festigkeit bei hohen Temperaturen. Das Institut für Elektronenmikroskopie der TU Graz in Kooperation mit dem Zentrum für Elektronenmikroskopie entwickelt kontinuierlich neue Charakterisierungsmethoden mit erhöhter räumlicher Auflösung und Sensitivität.

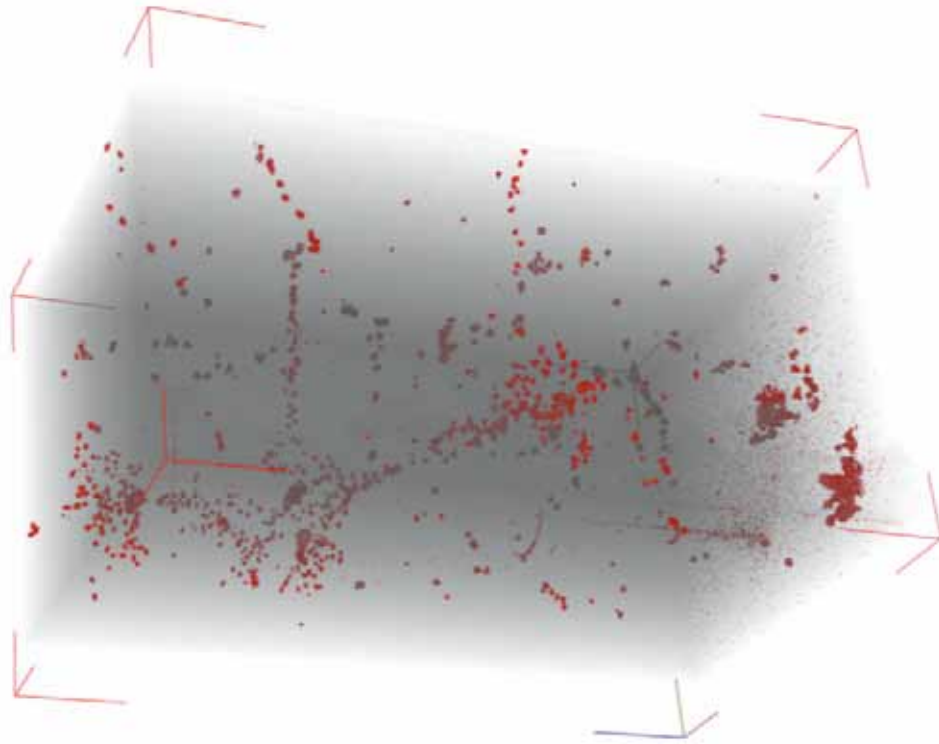


Abb. 3/Fig. 3

© IWS, TU Graz

sind, wird die konventionelle Werkstoffentwicklung immer mehr durch computergestützte Methoden unterstützt. Dazu wurden Modelle entwickelt, welche die Veränderung der Werkstoffe während der Produktion und im Langzeitbetrieb beschreiben können. Aus den Ergebnissen dieser Simulationen können wiederum direkt Rückschlüsse auf den Festigkeitsabfall gezogen werden. Diese computergestützte Werkstoffentwicklung verkürzt die Entwicklungszeiten um ein Vielfaches. Weitere Simulations- und Modellierungsaktivitäten beschäftigen sich mit der Voraussage der Verformung unter Hochtemperaturbelastung, dem sogenannten Kriechen, und der damit einhergehenden Schädigung im Werkstoff durch Porenbildung, welche letztlich bis zum Bauteilversagen führt. Im neu gestarteten EraSME-Projekt „HotPipes“ wird zum Beispiel ein Onlinebetriebsüberwachungssystem für Rohrleitungen, welches Schädigungen bereits im Frühstadium erkennen soll und so Aufschluss über die Restlebensdauer von Kraftwerkskomponenten ermöglichen wird, entwickelt.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass an der TU Graz durch den ganzheitlichen Forschungsansatz, den Einsatz modernster Charakterisierungstechniken und die Einbindung computergestützter Methoden Werkstoffe für energieeffizientere thermische Kraftwerke der Zukunft entwickelt werden.

based on thermodynamic and kinetic materials data are developed. They are able to describe changes in the materials during production and under long-term service conditions. Results of this simulation are directly coupled to models predicting the evolution of strength as a function of time. This computer-aided materials design allows costs and the time-to-market of new alloys to be reduced significantly. Further simulation and modelling activities include the prediction of deformation at high temperatures with time, the so-called creep behaviour, and the accompanied damage in the material. Damage evolves from submicron-sized pores to microscopic to macroscopic cracks that finally cause component failures. The recently launched EraSME project “Hotpipes” targets the development of an online monitoring system for high-energy piping systems in power plants. Damage should be recorded at a very early stage and predictions of the remaining lifetime of damaged components will be made possible.

In summary, in the holistic research approach, the use of most advanced characterisation techniques as well as modelling and simulation allow the development of new improved steels for applications at high temperatures in the energy-efficient thermal power plants of the future.



Gerald Kothleitner ist Professor am Institut für Elektronenmikroskopie / FELMI an der TU Graz. Die praxisrelevanten Forschungsaktivitäten konzentrieren sich u. a. auf die Methodenentwicklung im Bereich der analytischen Transmissions-elektronenmikroskopie für den Einsatz in der modernen Werkstoffforschung.

Gerald Kothleitner is professor at the Institute for Electron Microscopy / FELMI at Graz University of Technology. His applied research activities focus among other things on the development of methods in the area of analytical transmission electron microscopy for applications in the modern materials research.

Abb. 3: Schädigungsverteilung (Poren) in einem langzeitgetesteten 12%-Chromstahl, ermittelt mittels Synchrotrontomografie.

Fig 3: Visualisation of void distribution in a long-term tested 12% chromium steel through synchrotron tomography.

Cluster als neuartige Materialbausteine:

Tieftemperaturuntersuchungen quantenmechanischer Eigenschaften

Clusters as Building Blocks of New Materials:

Low-Temperature Investigations of Quantum Mechanical Properties

Wolfgang E. Ernst, Markus Koch



Wolfgang E. Ernst leitet das
Institut für Experimentalphysik.

Seine Forschung umfasst
grundlegende Untersuchungen
zur Struktur und Dynamik von
Molekülen, Clustern und
Oberflächen, wobei Laser-,
Atom- und Molekularstrahltechni-
ken zum Einsatz kommen. Er ist
auch Dekan der Fakultät für
Technische Mathematik und
Technische Physik.

Wolfgang E. Ernst is head of the
Institute of Experimental Physics.
His research includes fundamen-
tal investigations of the structure
and dynamics of molecules,
clusters, and surfaces by using
laser as well as atomic and
molecular beam techniques. He
is also dean of the Faculty of
Mathematics, Physics and
Geodesy.

Die Bedeutung der Nanotechnologie für die zukünftige Entwicklung technischer Produkte liegt nur teilweise in der Verkleinerung von mechanischen oder elektronischen Baukomponenten in den Größenbereichen von 1 nm bis 100 nm, entsprechend einer Anordnung von 10 bis 1000 Atomen in einer Reihe. Von größerer Bedeutung als die Einsparungen beim Platzbedarf durch eine solche Schrumpfung sind die quantenphysikalischen Effekte, durch die sich die mechanischen, thermischen, elektrischen, magnetischen und optischen Eigenschaften eines Objekts mit seiner Größe ändern, selbst, wenn es weiterhin aus den gleichen Elementen zusammengesetzt ist.

Objekte, die aus weniger als einigen Tausend Atomen oder Molekülen bestehen, werden auch als atomare oder molekulare Cluster bezeichnet. Während die Zusammensetzung von Festkörpern normaler Alltagsdimensionen (mm, cm oder größer) hinsichtlich ihrer geometrischen Kristallstruktur, ihrer elektrischen und magnetischen Eigenschaften und ihrer temperaturabhängigen Phasen (fest, flüssig) in der Regel gut bekannt ist, war es für Teilchen, die aus weniger als einigen Millionen Atomen bestehen, nicht selbstverständlich, ob man von fester und flüssiger Phase sprechen kann, ob ihre Elektronen delokalisiert sein können, sie also elektrisch leitfähig sind, und ob ihnen die üblichen magnetischen Eigenschaften fester Stoffe zuzuordnen sind. Das Verhältnis von Oberfläche zu Volumen und die Gesetze der Quantenmechanik regeln zum Beispiel, welche Spektralfarben ein aus bestimmten Elementen bestehender Cluster in Abhängigkeit seiner Größe absorbiert und ob er elektrischen Strom leitet oder nicht. Seitdem die Forschung an Clustern gezeigt hat, auf welche Weise in solchen Teilchen Phasenübergänge sowie elektronische und mag-

The miniaturization of mechanical and electronic components to the size range of 1 to 100 nm, corresponding to an arrangement of 10 to 1000 atoms in a row, is an obvious achievement of nanotechnology. However, an even more important aspect than the shrinking in space is given by the changes of mechanical, thermal, electric, magnetic, and optical properties with the size of such atomic arrangements that are caused by the effects of quantum physics.

Objects consisting of fewer than several thousand atoms or molecules are called atomic or molecular clusters, respectively. While the phases (solid or liquid) of condensed matter objects of macroscopic size (mm, cm, or larger) are well characterized in terms of structure and electric or magnetic properties, it was not obvious whether it is appropriate to speak about a solid or liquid cluster, about electric conductivity and magnetism of a cluster. The surface to volume ratio of a cluster and the laws of quantum mechanics govern which color of light is absorbed and whether electrons are free to move inside the cluster. So, these properties change with cluster size even though the clusters are made of the same elements. Since research on clusters has shown how phase transitions as well as electric and magnetic properties of finite size matter can be described, scientists try to tailor building blocks for new materials according to different applications.

The composition of new building blocks can be achieved by different methods that need to include the appropriate diagnostics to determine the atomic structure, the optical absorption, the magnetic dipole moment etc. Low temperatures are essential for a controlled formation process that would be disturbed by thermal motion. A successful technique makes use of the manipulation

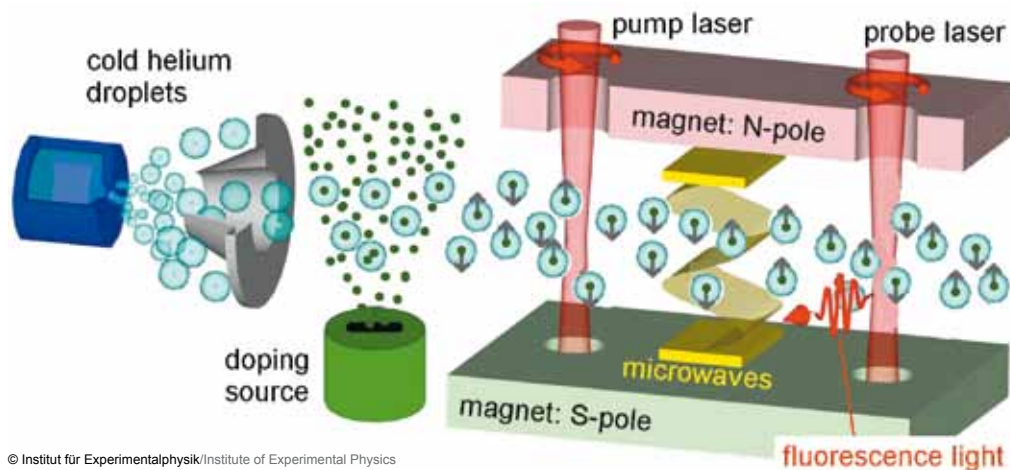


Abb. 1: Schematische Darstellung der Laser-optisch nachgewiesenen magnetischen Resonanz an dotierten Heliumnanotröpfchen. Ein Pump-Laser kreiert eine Spinpolarisation in der ursprünglich gleichen Verteilung von auf- und abwärtsgerichteten Spinorientierungen. Diese wird dann kohärent beeinflusst in einem resonanten Mikrowellenfeld. Da der Probe-Laserstrahl nur Spin-up-Teilchen anregt, wird eine korrelierte Änderung des Fluoreszenzsignals beobachtet.

Fig. 1: Scheme for laser-optically detected magnetic resonance on doped helium nanodroplets: A pump-laser creates a spin polarization of the originally equal distribution of spin-up and spin-down orientations. This polarization is coherently influenced by a resonant microwave field. As the probe-laser beam excites only spin-up particles a correlated change of the fluorescence signal is detected.

netische Eigenschaften eindeutig beschrieben werden können, versuchen Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen, Bausteine für neue Materialien für verschiedene Anwendungen zu schneiden.

Das Zusammensetzen neuer Bausteine kann auf verschiedene Arten stattfinden, die gleichzeitig mit einer Diagnostik und Messtechnik einhergehen müssen, die atomare Strukturen auflösen und gleichzeitig bestimmte Eigenschaften wie die optische Absorption oder das magnetische Dipolmoment bestimmen sollen. In jedem Fall sollte das Zusammensetzen bei sehr tiefer Temperatur erfolgen, da die unregelmäßige thermische Bewegung der Atome zu unterbinden ist. Eine Möglichkeit hierfür ist z. B. mit der Manipulation von einzelnen Atomen auf einer kalten Festkörperoberfläche mittels der Spitze eines Rastertunnelmikroskops gegeben. Da die auf einer zweidimensionalen Oberfläche zusammengefügte Aggregate oder Cluster u. U. Eigenschaften aufweisen, die von ihrer Unterlage mitgeprägt werden und sich daher von denen freier Cluster unterscheiden, werden unterschiedliche Verfahren der Aggregation bei tiefen Temperaturen verfolgt und die Ergebnisse miteinander verglichen. Eine nahezu ohne jede Störung erfolgende Aggregation kann bei Einlagerung einzelner Atome oder Moleküle in supraflüssige Heliumtröpfchen, die eine Temperatur von 0,4 Kelvin haben, erreicht werden. In den Labors am Institut für Experimentalphysik

of single atoms or molecules on a cold surface via the tip of a scanning tunneling microscope. As clusters or aggregates that are composed on a two-dimensional substrate may exhibit different properties from those of free clusters, different ways of low-temperature aggregation are applied and the results compared. An almost unperturbed aggregation is observed when atoms or molecules are dissolved in superfluid helium droplets of 0.4 Kelvin temperature. At the Institute of Experimental Physics, we developed methods to dope helium droplets with single atoms and molecules to produce cold new aggregates whose properties are analyzed by mass and laser spectroscopy as well as electron spin resonance. The



Abb. 2: Heliumtröpfchen als supraflüssiges Substrat zur Untersuchung von (links nach rechts): 1. Photoinduzierten Molekülreaktionen, 2. Photoionisation mit nachfolgender Helium-Schneeballbildung, 3. Aggregation von Metallatomen in Hoch- und Niedrigspinzuständen, 4. Spinresonanz zur Messung von molekularen Wechselwirkungen bei „Abstandsregulierung“ durch supraflüssiges Helium.

Fig. 2: Helium droplets as superfluid substrate for the investigation of (left to right): 1. Photo-induced molecular reactions, 2. Photo ionization with subsequent helium snowball formation, 3. Aggregation of metal atoms in high and low spin states, 4. Spin resonance for probing molecular interactions with other non-reacting dopants by distance control through droplet size.



Markus Koch ist Universitätsassistent am Institut für Experimentalphysik. Als Leiter eines FWF-Projekts untersucht er mit seinen Mitarbeitern magnetische und spindynamische Eigenschaften einzelner Atome, Moleküle und Cluster in Heliumnanotröpfchen.

Markus Koch is scientific assistant at the Institute of Experimental Physics. He is PI of an FWF project with the focus on magnetic and spin dynamic investigations of single atoms, molecules, and clusters isolated in superfluid helium nanodroplets.

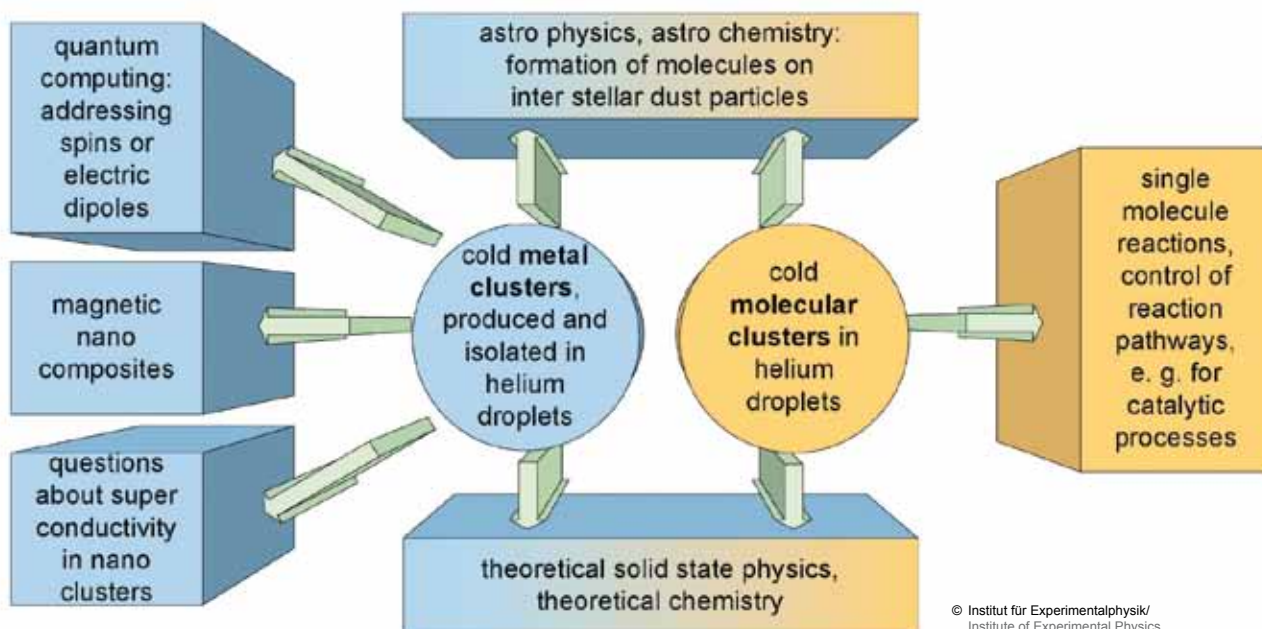


Abb. 3: In dem Diagramm sind die Bezüge der beschriebenen Forschung dargestellt, die von der materialbezogenen Nanophysik bis in die chemische Physik oder physikalische Chemie reichen.

Fig. 3: The diagram shows connections of the described research with areas ranging from materials related nanophysics to chemical physics and physical chemistry.

wurden in den letzten Jahren Methoden entwickelt, einzelne Atome und Moleküle in kalten supraflüssigen Heliumtröpfchen zu isolieren, aus solchen einzelnen Atomen und Molekülen neue kalte Aggregate zu erzeugen und diese mit massen- und laserspektroskopischen Verfahren sowie Spinresonanzmethoden zu analysieren. Der Stand dieser Technik ist in einem ausführlichen Buchkapitel beschrieben.¹

In Abb. 1 werden kleinste Heliumtröpfchen (Durchmesser etwa 10 nm) in einer Vakuumapparatur erzeugt, mit Fremdatomen oder -molekülen dotiert und während ihres Durchflugs durch ein Magnetfeld untersucht. Im Fall der Abbildung können Absorptionen von Laserlicht unterschiedlicher Polarisation im Feld gemessen werden, mittels Pump- und Probe-Lasern kann die zeitliche Relaxation von magnetischen Unterzuständen festgestellt werden. Als empfindlichste Methode wird die im Institut hierfür entwickelte Cluster-Spinresonanzmethode angewandt.

Zurzeit wird am Institut für Experimentalphysik an Aggregaten, die in Heliumtröpfchen bei der Temperatur von 0,4 Kelvin gebildet werden, eine Reihe unterschiedlicher Untersuchungen durchgeführt, die in dem Sketch der Abb. 2 angedeutet sind (siehe Bildunterschrift). Die Verknüpfungen dieser sehr grundlagenorientierten Forschung mit anderen Gebieten sind in dem Diagramm der Abb. 3 wiedergegeben. Ein von uns organisierter und von der WE-Heraeus-Stiftung finanzierter internationaler Workshop wird im Mai 2011 diese Zusammenhänge behandeln:

► <http://heraeus482.tugraz.at/>

state of the art of these techniques is described in detail in a recent book chapter ("Helium Droplets as Nanocryostats for Molecular Spectroscopy – from the Vacuum Ultraviolet to the Microwave Regime" by C. Callegari and W. E. Ernst in Handbook of High Resolution Spectroscopies, Eds. F. Merkt and M. Quack (Wiley 2010)).

Figure 1 shows the production of helium nanodroplets in a vacuum chamber, the doping process and subsequent passage through a magnetic field. In this experiment, the absorption of laser light of variable polarization is measured. Using a pump laser and a probe laser further downstream, the relaxation of magnetic sublevels is determined and as most sensitive technique, our optically detected magnetic resonance spectroscopy is applied.

Currently we conduct various investigations of aggregates formed in and on helium droplets at 0.4 Kelvin. Figure 2 shows schematically a number of such studies ranging from photo induced single molecule reactions to the coherent control of spin states (see figure caption). The connection of this basic research to other areas of science is depicted in the diagram of Fig. 3. In May 2011, we organize an international workshop on this topic with the support of the WE Heraeus Foundation:

► <http://heraeus482.tugraz.at/>

¹ Vgl. „Helium Droplets as Nanocryostats for Molecular Spectroscopy – from the Vacuum Ultraviolet to the Microwave Regime“ by C. Callegari and W. E. Ernst in Handbook of High Resolution Spectroscopies, Eds. F. Merkt and M. Quack (Wiley 2010).

Atomare Defekte mit makroskopischer Wirkung

Atomic Defects – Small in Size but Big in Effect

Wolfgang Sprengel, Werner Puff, Roland Würschum

Materialien wie Metalle und Keramiken bestehen makroskopisch betrachtet aus dichtest gepackter Materie. Auf atomistischer Skala jedoch sind sehr wohl freie Gitterplätze (Leerstellen) oder aber im Fall von amorphen Materialien bzw. Gläsern auch freie Volumen¹ vorhanden. Diese Defekte, zu denen im weitesten Sinn auch Versetzungen oder Grenzflächen gehören, sind jedoch keineswegs unerwünscht. Sie können im Vergleich zum perfekten Festkörper die physikalischen Eigenschaften signifikant verbessern, wenn sie gezielt eingesetzt werden.

Atomare Defekte im Kristallgitter wirken zum Teil plastischer Verformbarkeit entgegen und können so eine Erhöhung der Festigkeit bewirken. Für das Verständnis solcher Phänomene bedarf es experimenteller Methoden, die spezifisch für atomare Defekte sind. Die Art und die Kinetik dieser Defekte, wie sie am Institut für Materialphysik untersucht werden, können durch eine einzigartige Kombination zweier direkter Methoden, der Messung der makroskopischen Längenänderung (Dilatometrie)^{1,2} und der atomistischen Methode der Positron-Elektron-Zerstrahlung, gezielt bestimmt werden, wie jetzt erfolgreich gezeigt werden konnte³.

Die oben beschriebenen Defekte sind im Vergleich zum perfekten Festkörper stets mit einem zusätzlichen Volumen verknüpft, sodass man die Konzentration und die Kinetik dieser Defekte studieren kann, indem man sie durch thermische Behandlung wieder aus dem Festkörper in Richtung auf einen perfekten Festkörper hin ausheilen lässt. Diese Prozesse sind mithilfe der Dilatometrie, also direkt über eine makroskopische Längenänderung, messbar (Abb. 1). Eine weitere Methode, die spezifisch für atomare Volumen ist, ist die Positron-Elektron-Zerstrahlung. Wenn Positronen, die Antiteilchen der Elektronen, im zu

Viewed on a macroscopic scale, materials such as metals or ceramics appear as closely packed matter. From an atomistic viewpoint, however, unoccupied lattice sites (vacancies) or in the case of amorphous materials such as glasses, free volume can also exist inside a solid material¹. These kinds of atomic defects also comprising dislocations and interfaces are by no means detrimental to a material's properties. Compared to the perfect crystal lattice, these defects can enhance some of a material's physical properties significantly.

Deliberately induced atomic defects and/or imperfection in the lattice structure such as dislocations or interfaces can, for instance, inhibit plastic deformation and thus strengthen the material. For the study of such phenomena, experimental methods are required that are sensitive and specific to atomic defects. The type and the kinetics of such defects can be studied by a unique combination of two direct experimental techniques: by macroscopic length change measurements (dilatometry)^{1,2} and by the atomistic techniques of positron-electron annihilation, as has been demonstrated recently³.

Compared to the perfect solid material, the above-described atomic defects always induce additional volume, so-called excess volume. The type of defect and its kinetics can be studied during thermal heat treatment. Then this additional volume is removed when the solid again approaches the ideal, defect-free state. These processes can be directly studied by macroscopic length change measurements (Fig. 1). Another also very effective method, specific to atomic volume, is based on positron-electron annihilation. When a positron, the antiparticle of the electron, annihilates with an electron inside a solid, analysis of the annihilation radiation gives detailed information about the atomic defects³ (Fig. 2). For statistically

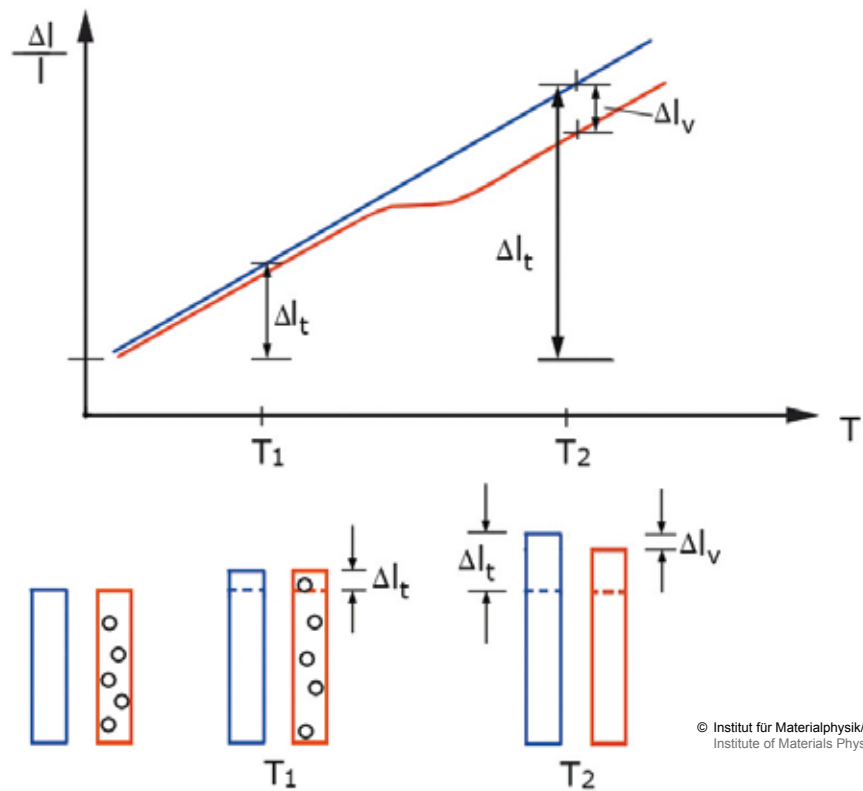


Wolfgang Sprengel arbeitet am Institut für Materialphysik auf dem Gebiet der Physik strukturell komplexer Materialien, zu denen neben nanostrukturierten Materialien auch intermetallische Verbindungen und metallische Gläser zählen.

Wolfgang Sprengel is with the Institute of Materials Physics and is working in the field of physics of structurally complex materials which besides nanostructured materials also comprises intermetallic compounds and bulk metallic glasses.

Abb. 1: Bei einer Temperaturbehandlung heilen in realen Materialien (rot) atomare Defektvolumen aus, was eine Schrumpfung Δl_v bewirkt, die der linearen thermischen Ausdehnung überlagert ist. Im Vergleich zu einer perfekten Referenzprobe (blau) sind somit das Ausheilen der Defekte und deren Kinetik direkt messbar.

Fig. 1: In real materials (red) excess volume associated with atomic defects anneal out upon heating. This produces a shrinking of the specimen Δl_v which is superimposed to the linear thermal expansion. Thus, in comparison with a perfect, defect-free reference specimen (blue) the atomic defects and their kinetics can directly be measured.



Werner Puff leitet das Arbeitsgebiet Nukleare Festkörperphysik am Institut für Materialphysik.

Er befasst sich schwerpunktmäßig mit der Untersuchung atomarer Defekte mit Methoden der Positron-Elektron-Annihilation.

Werner Puff is in charge of the research topic on nuclear solid-state physics at the Institute of Materials Physics. His focus is on the study of atomic defects by means of methods of positron-electron annihilation.

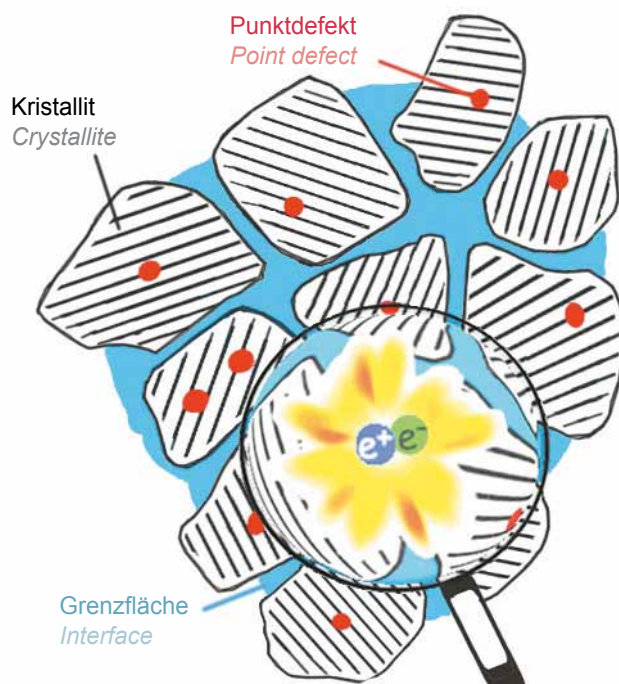
untersuchenden Material mit den dort vorhandenen Elektronen zerstrahlen, kann eine Analyse der Zerstrahlung detailliert Auskunft über die atomaren Defekte geben (Abb. 2). Um statistisch gesicherte Aussagen zu bekommen, benötigt man Millionen solcher Positron-Elektron-Zerstrahlungseignisse, was im Labor Messzeiten von Stunden bedeuten kann. Zur Charakterisierung stabiler Zustände ist das unproblematisch. Reale Prozesse in Materialien aber, wie etwa Verformung oder Bruch, laufen im Bereich von Sekunden oder Minuten ab. Zu deren Untersuchung reichen dann die Intensitäten von Positronenquellen, so wie sie im Labor standardmäßig genutzt werden und die einen radioaktiven Zerfall ausnutzen, nicht mehr aus.

Das Institut für Materialphysik hat nun in einer Kooperation mit Kollegen des Forschungsreaktors FRM II der TU München den dortigen Positronenstrahl mit der weltweit zurzeit höchsten Intensität nutzen können, um die schnelle Kinetik atomarer Defekte in neuartigen, nanostrukturierten Metallen zu untersuchen³ (Abb. 2). Die nanokristallinen Massivmetalle wurden mit dem Verfahren der Hochdruck-Torsion erzeugt, bei dem ein Metall unter einer sehr hohen Last langsam verdreht wird. Das ist ein spezielles Verfahren, das am Erich Schmid Institut für Materialwissenschaft in Leoben weiterentwickelt wurde. Die Forschungsarbeiten der TU Graz-Wissenschaftler und -Wissenschaftlerinnen sind daher auch eng

relevant results, millions of such annihilation events have to be analysed, which easily can add up to several hours of measurement time in the laboratory. This fact is not critical for the analysis of static, stable conditions inside the material. However, real processes in solids, such as deformation or fracture occur in the range of seconds or minutes. For the study of such phenomena, positron sources conventionally used in the laboratory and the exploitation of certain radioactive decay events do not show high enough intensity. For this reason, in a successful collaboration with colleagues of the research reactor FRM II at TU München, which has the world's highest-intensity positron beam capability, the Institute of Materials Physics carried out a study of fast atomic defect kinetics in novel nanocrystalline bulk metals (Fig. 2). The nanocrystalline bulk metals have been produced by methods of high-pressure torsion where a metal is subjected to slow mechanical distortion under a high axial load; this special technique has been further developed and up-scaled at the Erich Schmid Institute, Leoben. Thus, the TU Graz researchers are also in close collaboration with a national research network (NFN) of the Austrian Science Fund (FWF) on bulk nanocrystalline metals where besides the Erich Schmid Institute in Leoben, the University of Vienna, Karl Franzens University Graz and TU Vienna are also involved. In a joint effort the researchers are elucidating the secrets of the en-

Abb. 2: Wenn in einem Festkörper ein Positron (e^+) und ein Elektron (e^-) aufeinandertreffen, löschen sie sich gegenseitig aus. Eine genaue Analyse der bei der Zerstrahlung entstehenden Gammastrahlung gibt spezifische Informationen über den Zerstrahlungsort und somit über die Materialdefekte. So lassen sich die atomaren Prozesse, an denen fehlende Atome (Punktdefekte), eingeschobene Gitterebenen (Versetzungen) oder aber auch Grenzflächen zwischen den Kristalliten beteiligt sind, genau untersuchen.

Fig. 2: When a positron (e^+) encounters an electron (e^-) inside a solid, both annihilate. Detailed analysis of the resulting gamma-radiation yields specific information about the annihilation site and thus about the defect situation inside the material. By this method atomic processes can be studied which are based on missing atoms (point defects), additional lattice planes (dislocation) or interfaces between crystallites.



verknüpft mit einem nationalen Forschungsnetzwerk (NFN) zu nanokristallinen Massivmetallen, an dem neben dem Erich Schmid Institut auch die Universitäten Wien und Graz sowie die TU Wien beteiligt sind. Gemeinsam versucht man, dem Geheimnis dieser eigenartigen Materialien auf die Spur zu kommen. Dabei wird schnell klar, dass die bei der starken plastischen Verformung eingebrachten atomaren Defekte eine nicht unerhebliche Rolle spielen. Auf Grazer Seite sind an dieser Kooperation auch die Jungwissenschaftlerin Eva-Maria Steyskal im Rahmen ihrer Masterarbeit und der Jungwissenschaftler Bernd Oberdorfer im Rahmen seiner Dissertation beteiligt. Die Arbeit wird durch den Wissenschaftsfonds (FWF) unterstützt (P21009-N20).

Am Institut für Materialphysik wird weiterhin auch Grundlagenforschung an neuartigen, funktionellen und strukturellen Materialien wie nanoporösen Metallen mit durchstimmbaren elektrischen und magnetischen Eigenschaften im Rahmen nationaler und internationaler Kooperationen durchgeführt^{4,5}.

hanced mechanical properties of these materials. It is already obvious that the small atomic defects have a big impact on these properties. At Graz University of Technology, two young scientists are taking part in this collaboration: Eva-Maria Steyskal in the framework of her master's thesis and PhD candidate. Bernd Oberdorfer. This work is funded by the FWF (P21009-N20). At the Institute of Materials Physics basic research is also performed on novel functional and structural materials, such as nanoporous metals with tunable electrical and magnetic properties^{4,5}, in collaboration with national and international partners.



Roland Würschum ist Leiter des Instituts für Materialphysik. Seine Forschungsschwerpunkte umfassen Nanokristalline und nanoporöse Materialien sowie atomare Defekte.

Roland Würschum is head of the Institute of Materials Physics. His main area of research covers nanocrystalline and nanoporous materials as well as atomic defects.

¹ F. Ye, W. Sprengel, R.K. Wunderlich, H.-J. Fecht and H.-E. Schaefer: *Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS)* 104 (2007) 12962

² B. Oberdorfer, B. Lorenzoni, K. Unger, W. Sprengel, M. Zehetbauer, R. Pippan, R. Würschum, *Scripta materialia* 63 (2010) 452

³ B. Oberdorfer, E.-M. Steyskal, W. Sprengel, W. Puff, P. Pikart, C. Hugenschmidt, M. Zehetbauer, R. Pippan and R. Würschum, *Physical Review Letters* 105 (2010) 146101

⁴ M. Sagmeister, U. Brossmann, S. Landgraf and R. Würschum: *Physical Review Letters* 96 (2006) 156601

⁵ P. Wahl, T. Traußnig, S. Landgraf, H.-J. Jin, J. Weissmüller, and R. Würschum: *Journal of Applied Physics* 108 (2010) 073706

Angriff von Beton

Nachweis über stabile Isotope

Concrete Attack

Evidence from Stable Isotopes

Martin Dietzel, Dietmar Klammer, Florian Mittermayr



Martin Dietzel habilitierte an der Universität Göttingen im Fach Mineralogie und ist seit 2001 Professor für Mineralogie an der TU Graz. Seine Forschungsschwerpunkte umfassen die Mechanismen der Kristallisation und Auflösung von Mineralen und Gesteinen, Anwendung von Element- und Isotopenfraktionierungen und Modellierungskonzepten.

Martin Dietzel habilitated at the University of Göttingen in Mineralogy and has been professor of Mineralogy at Graz University of Technology since 2001. Focus of his research comprises mechanisms of crystallization and dissolution of minerals and rocks, application of elemental and isotopic fractionation, and modelling approaches.

Am Institut für Angewandte Geowissenschaften wird in grundlagenorientierten Forschungsprojekten und für konkrete Anwendungsbe-reiche der chemische Angriff von Beton durch Wechselwirkung mit Grund- und Oberflächenwässern untersucht. Diese Thematik stellt für die Betreiber vieler Bauwerke, z. B. Tunnelbauten und Drainagen, eine nahezu allgegenwärtige Herausforderung bezüglich Stabilität, Nachhaltigkeit und Kosten dar. Experimentelle Arbeiten und aktuelle Fallstudien unserer Arbeitsgruppe decken die Ursachen individueller Schädigungen auf. Moderne Methoden der Angewandten Mineralogie und Isotopen-geochemie, wie sie in der Material- und Klimaforschung angewendet werden, kommen hierbei zum Einsatz. Ziel ist es, durch ein erweitertes Verständnis des schädigenden Prozessverlaufes zuverlässige Prognosen für bestehende Bauwerke zu geben und die Entwicklung von maßgeschneiderten und nachhaltigen Baustoffen voranzutreiben.

Schädigungen von Betonkonstruktionen durch chemischen Angriff sind oft mit enormen Kosten für Instandsetzung und Gegenmaßnahmen sowie mit erheblichem Gefährdungspotenzial verbunden. Die Art und der Umfang der Schädigung hängen einerseits von der chemischen und mineralogischen Zusammensetzung des Betons und seiner Mikrostruktur ab. Andererseits steuern die chemische Zusammensetzung des angreifenden Wassers sowie die Wechselwirkung mit der Atmosphäre wesentlich den Reaktionsverlauf. Die Aufklärung der Ursachen einer Schädigung ist mit klassischen Techniken oft nicht möglich. In vielen Fällen können jedoch hochauflösende Materialcharakterisierungen und die Analyse geeigneter Isotopensignale detaillierte Auskunft über Herkunft der schädigenden Komponenten und der zugrunde liegenden Reaktionsmechanismen geben.

The Institute of Applied Geosciences is where fundamental research in the field of chemical attack from ground and surface water on concrete is carried out. Tunnel and drainage system operators are frequently dealing with issues in terms of stability, sustainability and costs. Experiments and case studies are used to discover the actual causes of concrete damage. State-of-the-art methods in the fields of Applied Mineralogy and Isotope Geochemistry – commonly used in material and climate science – are applied. The aim of the study is to gain an advanced understanding of deterioration mechanisms, to provide reliable predictions and to develop tailored and sustainable building materials.

Deterioration of concrete constructions by chemical attack is frequently associated with enormous maintenance charges and countermeasures as well as serious risk exposure. The type of damage is related to the chemical and mineralogical composition and microstructure of the concrete. Additionally the chemical content of the ambient water and gases strongly controls reaction paths. Classical techniques are mostly not able to decipher the causes of the damage. In this case detailed information on the origin of the attacking compounds and their respective reaction mechanisms can be provided by high-resolution analyses of solid material and isotopic distribution in all phases.

Sulphate attack by neoformation of minerals, like thaumasite, may cause deterioration of the microstructure of concrete and can lead to a collapse of the solid structure. In the case of thaumasite, deterioration is related to the transformation of the binding material which is responsible for the strength of the concrete. From crystallization experiments further insight into formation conditions are obtained. In case studies the locally occurring



Abb. 1/ Fig. 1

© Institut für Angewandte Geowissenschaften/Institute of Applied Geosciences

Der Sulfatangriff von Beton kann über die Neubildung von Mineralen, wie dem Thaumasit, eine Schädigung des Mikrogefüges bewirken und letztendlich zu einem kompletten Zerfall der festen Struktur führen. Im Fall des Thaumasits erfolgt dies durch die Umwandlung von Zementphasen, welchen der Beton seine eigentliche Festigkeit verdankt. Experimente zur Kristallisation von schädigenden Mineralen liefern wichtige Erkenntnisse über die Bildungsbedingungen. Fallstudien klären die lokalen Vorgaben ab und sollen das Auftreten und die Herkunft von Sulfat evaluieren. Letzteres wird erfolgreich über das Verhältnis der stabilen Isotope des Schwefels, $^{34}\text{S}/^{32}\text{S}$, im Sulfat erkannt. Ein ähnlicher Ansatz wird zur Aufklärung der Herkunft des Kohlenstoffs im Karbonat, welches zumeist in Form des Minerals Kalzit aus der Reaktion von Wässern mit Betonphasen gebildet wird, verwendet. In diesem Fall gibt das $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ -Verhältnis im Kalzit an, ob der Kohlenstoff im Karbonat aus dem Grundwasser, der Auflösung von Zuschlägen oder der Absorption von atmosphärischem Kohlendioxid generiert wurde. Neben der mikrostrukturellen und -chemischen Untersuchung mittels Elektronenmikroskopie und Mikrosonde erweist sich in unseren neusten Arbeiten insbesondere die Analyse von Porenlösungen aus dem Beton als zielführend zur Aufdeckung von Reaktionsabläufen. Mithilfe einer Presse werden hierbei bei Drücken bis 2000 kN Porenlösungen aus geschädigtem Betonmaterial separiert. Anschlie-

environmental conditions and the origins of sulphate are evaluated. The latter are successfully discovered by using the stable isotope ratio of sulphur, $^{34}\text{S}/^{32}\text{S}$, in sulphate. A similar approach is used to decipher the origin of carbon in carbonate, which is mostly present as calcite and formed by the reaction of concrete and water. The $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ratio of calcite permits distinction of potential carbon sources from groundwater, dissolution of aggregates and absorption of atmospheric carbon dioxide.

Besides micro-structural investigations using a scanning electron microscope and electron micro probe, the separation and analyses of interstitial solutions from damaged concrete is an effective way to evaluate reaction paths. The solutions are extracted from damaged material using a hydraulic press at pressures up to 2000kN and are subsequently analyzed for major and trace elements as well as their isotopic signatures. Isotope ratios of oxygen, $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$, and hydrogen, $^2\text{H}/^1\text{H}$, of the H_2O molecules indicate that extremely high chloride and sulphate concentrations are caused by evaporation, which is also documented by trace element accumulation. Interpretation of data obtained from the interstitial solution is supported by experiments and modelling approaches based on thermodynamic and kinetic databases.

Novel insights can be obtained by combining theoretical and applied science. Both approaches are currently being advanced at the Institute of



Dietmar Klammer habilitierte im Fach Mineralogie und ist seit 1998 Professor am Institut für Angewandte Geowissenschaften. Seine Forschungsschwerpunkte umfassen die grundlagen- und anwendungsorientierte physikalische, chemische und strukturelle Charakterisierung von anorganischen Materialien.

Dietmar Klammer habilitated in Mineralogy and has been professor at the Institute of Applied Geosciences since 1998. The focus of his research comprises physical, chemical and structural characterisation of natural and synthetic inorganic materials.

Abb. 1: Probennahme

Fig. 1: Sampling



Abb. 2/ Fig. 2 © Institut für Angewandte Geowissenschaften/Institute of Applied Geosciences



Florian Mittermayr studierte Petrologie an der Universität Innsbruck und ist Projektassistent am Institut für Angewandte Geowissenschaften. Seine Forschungsschwerpunkte liegen in der Angewandten Mineralogie und Mikroanalytik.

Florian Mittermayr studied Petrology at the University of Innsbruck and is a research assistant at the Institute of Applied Geosciences. His research activities are applied mineralogy and micro analytics.

Abb. 2: Zerfall eines Betonsockels zu Brei durch die Bildung des Minerals Thaumasit.

Fig. 2: Destruction of a concrete foundation into mush by formation of the mineral thaumasite.

ßend erfolgt die Bestimmung der Haupt- und Spurenelemente sowie der Isotopenverhältnisse. Das Verhältnis der stabilen Isotope des Sauerstoffs, $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$, und Wasserstoffs, $^2\text{H}/^1\text{H}$, in den H_2O -Molekülen zeigt eindrücklich, dass extrem hohe und für Beton äußerst schädliche Konzentrationen an Sulfat oder Chlorid oft über Verdunstungseffekte entstehen. Anreicherungen an Spurenelementen belegen dieses Verhalten, sodass der Akkumulationsgrad und die Reaktionsumsätze ermittelt werden können. Schlussfolgerungen bezüglich des Systems Porenlösung – Beton werden durch speziell designte Laborversuche und hydrochemische Modellierungskonzepte, im Wesentlichen basierend auf thermodynamischen und kinetischen Datensätzen, verifiziert und weiter entwickelt. Neuartige Erkenntnisse basieren wesentlich auf der Kopplung von grundlagenorientierten Forschungsergebnissen und konkreten Anwendungen in der Praxis. Beide Aspekte werden am Institut für Angewandte Geowissenschaften intensiv vorangetrieben und mündeten in aktuellen Großprojekten in Kooperation mit Forschungspartnern am Standort Graz (Institut für Materialprüfung und Baustofftechnologie, TU Graz, und Laborzentrum für Isotopenhydrologie und Umweltanalytik, Joanneum Research) sowie vielfältigen nationalen und internationalen Partnern. Vielversprechende Perspektiven ergeben sich durch die Kombination von Kenngrößen und der verstärkten Implementierung von Isotopensignalen der Elemente Ca, Mg und Sr.

Applied Geosciences, in cooperation with scientific partners in Graz (Institute of Technology and Testing of Building Materials, Graz University of Technology, and Laboratory Centre for Isotope Hydrology and Environmental analysis, Joanneum Research) and further national and international partners. Promising perspectives are arising for the implementation of additional isotopes of the elements Ca, Mg and Sr.



Abb. 3: Rasterelektronenmikroskopie von Thaumasitnadelchen (10.000-fache Vergrößerung).

Fig. 3: Scanning electron microscopy of thaumasite needles (10000x magnification).

Polymer Biotechnologie

Neue Strategien zur Entwicklung von bioresponsiven Polymeren und funktionellen Materialien

Polymer Biotechnology

Novel Approaches towards Bioresponsive Polymers and Functional Materials

Georg Gübitz

Am Institut für Umweltbiotechnologie wird an biotechnologischen Prozessen zur Entwicklung von Materialien mit interessanten Eigenschaften gearbeitet. Dabei werden Enzyme eingesetzt, um hochspezifisch und unter schonenden Bedingungen funktionelle Gruppen auf Polymeroberflächen anzubringen. Auf diese Weise entstehen intelligente Materialien, die mit biologischen Systemen in Wechselwirkung treten. Bioresponsive Polymere können einerseits kontrolliert Wirkstoffe freisetzen oder Infektionen von Wunden diagnostizieren. Andererseits werden mittels Enzymen Materialien auf Basis nachwachsender Rohstoffe wie Lignozellulose antimikrobiell oder wasserweisend funktionalisiert. In diesem jungen Forschungsgebiet sind insbesondere auch die mechanistischen Grundlagen der Wechselwirkung von Enzymen mit Polymeren Gegenstand laufender Projekte am Institut.

Bioresponsive Polymere antworten auf Änderungen in biologischen Systemen und können daher zur kontrollierten Freisetzung von Wirkstoffen oder als hochspezifische Sensoren eingesetzt werden. Letztere können die Anwesenheit von pathogenen Mikroorganismen detektieren, was im FFG-K-Projekt MacroFun untersucht wird. Immerhin kommt es bei mehr als 25 % aller chronischen Wunden zu Infektionen. Daher gibt es einen großen Bedarf an einem Diagnosesystem, das eine rasche Detektion der Wunden ermöglicht – und zwar noch vor dem Auftreten klinischer Symptome. Basierend auf dem Nachweis von Enzymen des Immunsystems haben wir im EU-Projekt Lidwine ein solches System entwickelt und patentiert. Eva Wehrschütz-Sigl und ihr Team konnten tatsächlich deutlich erhöhte Aktivitäten der von Makrophagen und neutrophilen Granulozyten sekretierten Enzyme wie Lysozym, Elastase oder Myeloperoxidase in infizierten Wunden nachweisen.

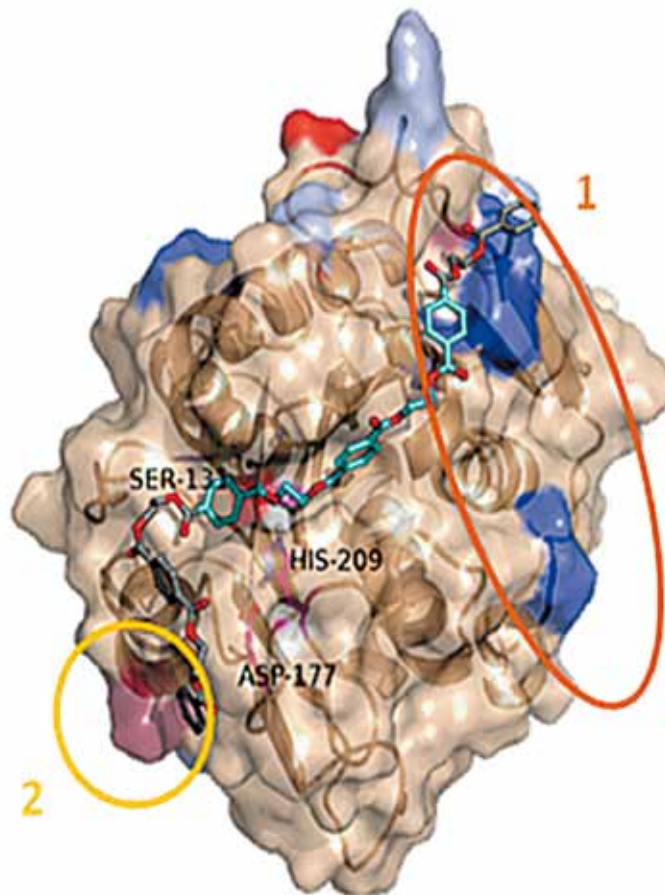
At the Institute of Environmental Biotechnology the potential of biotechnology for the construction of smart materials is being assessed. Enzymes are being used as highly specific catalysts for the selective introduction of functional groups to polymer surfaces without compromising polymer bulk properties. The resulting intelligent materials can interact with biological systems. For example, bioresponsive polymers can indicate infection in wound fluids or initiate controlled release of drugs. On the other hand, enzymes are used for permanent antimicrobial or hydrophobic functionalisation of materials based on renewable resources like lignocellulose. In this emerging research area several projects at the institute are focusing on the mechanistic investigation of enzyme – polymer interaction.

Bioresponsive polymers respond to biological systems to serve as controlled release devices or as highly specific sensors. The latter could detect the presence of pathogenic or contaminating microorganisms in wounds or in food products, respectively; something which is being investigated in the K-project MacroFun. Interestingly, infections occur in more than 25% of chronic wounds. Thus, there is a strong need for a fast prognostic aid to predict infection of a wound prior to clinical symptoms. In the human body, neutrophilic polymorphonuclear leukocytes and macrophages play a crucial role in the host defence against infections, liberating a variety of enzymes such as elastase, myeloperoxidase and lysozyme. Eva Wehrschütz-Sigl & team demonstrated together with medical doctors in the Lidwine EU project that the activity of these enzymes is considerably elevated in infected wound fluids. Consequently, bioresponsive devices were developed and patented to predict clinical infection.



Georg Gübitz beschäftigt sich am Institut für Umweltbiotechnologie mit enzymatischen Prozessen zur Funktionalisierung von nachwachsenden und synthetischen Materialien. In diesem Forschungsgebiet leitet er das FFG-K-Projekt MacroFun sowie zwei EU-Projekte.

Georg Gübitz investigates enzymatic processes for the functionalisation of renewable and synthetic materials. In this research area he currently coordinates the FFG-K project MacroFun and two European projects at the Institute of Environmental Biotechnology.



© G. Steinkellner, K. Gruber

Abb. 1: Vergleich zweier PET-hydrolysierender Cutinasen Thc_Cut2 und Thc_Cut1 aus *Thermobifida cellulolytica* mit PET als Substrat. Diese Enzyme unterscheiden sich um nur 18 Aminosäuren außerhalb des aktiven Zentrums. Die markierten Bereiche 1 und 2 weisen auf Unterschiede hinsichtlich Hydrophobizität und elektrostatischem Potenzial an der Oberfläche hin. Interessanterweise ist Thc_Cut2 bezüglich PET-Hydrolyse weitaus effizienter, was die Bedeutung der Oberflächeneigenschaften des Enzyms bei der Wechselwirkung mit dem polymeren Substrat bestätigt.

Fig. 1: Surface comparison of two isomers of the PET-hydrolysing cutinases Thc_Cut2 and Thc_Cut1 from *Thermobifida cellulolytica* with a modeled PET substrate. The enzymes are highly homologous with only 18 different amino acids outside the active site. The marked areas 1 and 2 indicate changes in surface hydrophobicity and electrostatic potential. Interestingly, only Thc_Cut2 efficiently hydrolyses PET, indicating the importance of enzyme surface properties in interaction with the polymeric substrate.

Basierend auf dieser Erkenntnis wurden nun Strategien zur kovalenten (= permanenten) Bindung von Enzymsubstraten an Polyethylenterephthalat (PET) oder Siloxane entwickelt, um eine Integration des Systems in Wundauflagen zu ermöglichen. Nach diesem Prinzip kann nun erstmals in wenigen Minuten über eine Farbänderung eine Infektion diagnostiziert werden.

Millionen von Menschen sind weltweit von Entzündungen betroffen. In der Behandlung ist der Transport von Wirkstoffen zu aktivierten Makrophagen, d. h. zum Ort der Entzündung, essenziell. Im Rahmen des EU-Projekts Nanofol realisieren wir das mit „drug delivery devices“, welche an der Oberfläche zur Erkennung durch Folsäurerezeptoren der Makrophagen mit Folsäure funktionalisiert sind. Enzyme werden als hochspezifische Werkzeuge zur Quervernetzung dieser Proteinkapseln sowie auch von Kollagen eingesetzt. Kollagen hat in der Medizintechnik ein breites Anwendungsfeld für Implantate, als Hämostyptikum, als chirurgisches Nahtmaterial oder als Matrix für die Züchtung von Gewebe. Bei der Verarbeitung von Kollagen kommt es jedoch zu einer dramatischen Verschlechterung der thermischen und mechanischen Stabilität. Bislang wurden giftige Chemikalien wie Aldehyde zu Quervernetzung von Kollagen verwendet, um diese Eigenschaften wiederherzustellen. Im Rahmen des EU-Comet-Projekts konnten wir zeigen, dass Kollagen mittels Enzymen aus der Klasse der Oxidoreduktasen

Essentially, specific substrates for these enzymes were covalently (permanently) immobilised on polymers such as polyethyleneterephthalate or siloxanes to allow integration into wound dressings. These bioresponsive polymers can indicate infection in wound fluids with simple colour reactions within minutes while future applications could involve controlled release of antibiotics. Inflammatory diseases affect millions of people worldwide. Selective targeting of activated macrophages occurring in inflammatory diseases is a major issue. In the Nanofol EU project we develop polymer based drug delivery devices which are surface functionalised with folic acid to be recognised by folate receptors of the macrophages. Enzymes are used as specific tools for cross-linking and functionalisation of these protein based devices as well as of collagen based materials. Collagen has a variety of uses in medical applications, such as suture material, non-woven hemostyptic, implant material, matrix material for drug delivery systems and in tissue engineering. However, processing of collagen leads to a dramatic loss in mechanical and thermal stability. Conventionally, toxic chemicals like aldehydes are used to recover these properties. Within the EU-Comet project we demonstrated that oxidoreductases can be used both for covalent cross-linking and functionalisation of collagens resulting in increased mechanical, proteolytic and thermal stability.

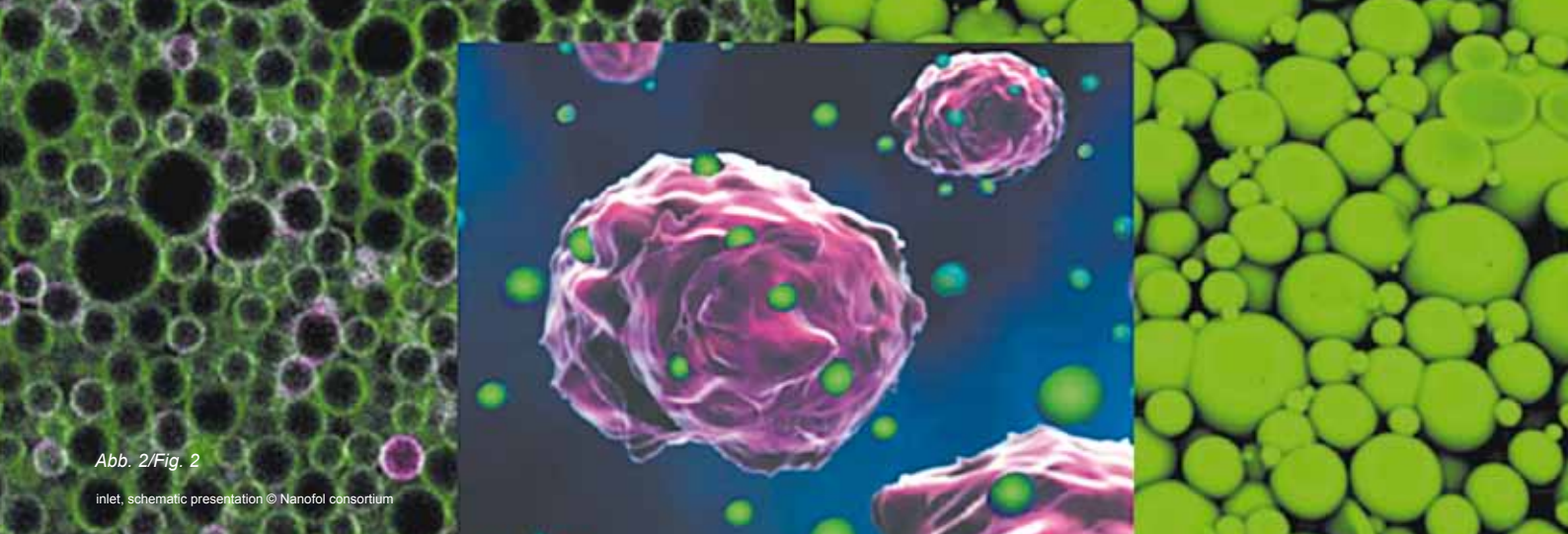


Abb. 2/ Fig. 2

inlet, schematic presentation © Nanofol consortium

sowohl quervernetzt wie auch hochspezifisch mit Peptiden funktionalisiert werden kann und somit Eigenschaften wie Temperatur- oder mechanische Stabilität verbessert werden.

Funktionalisierung von Polymeren

Eine „Biorefinery“ involviert die möglichst vollständige Umwandlung von Lignozellulose in hochwertige Produkte durch den Einsatz biotechnologischer Prozesse. In diesem Sinne gelang kürzlich die enzymatische Polymerisation von Lignosulfonaten für den Einsatz als Dispergiermittel. Dabei wurde mit analytischen Methoden wie NMR¹, PyrGC², LC-MS³ etc. die Bildung neuer C-C-Bindungen bewiesen. Enzyme ermöglichen auch die permanente (kovalente) Bindung von funktionellen Molekülen an die Oberfläche von Lignozellulose wie Gibson Stephen Nyanhongo und sein Team zeigten. Laccasen können Tannine als natürliche Biozide oder wasserabweisende Alkylamine permanent an die Oberfläche von Lignozellulose binden. Mittels NMR und LC-MS wurde bewiesen, dass diese Moleküle dabei an die Ligninbausteine Syringyl- und Guaiacylglycerol β -guaiacylether nach dem 4-O-5- bzw. 5-5-Mechanismus binden. In ähnlicher Weise werden im K2-Zentrum ACIB neue Strategien zur Oberflächenmodifikation von synthetischen Polymeren wie Polyamid, Polyethylenterephthalat (PET) oder Polyacrylonitril mittels Enzymen entwickelt, mit Anwendungen vom Elektronik- bis zum Textilsektor. Zur mechanistischen Untersuchung der neuen Enzym-katalysierten Reaktionen verwenden die Forscherinnen und Forscher um Doris Ribitsch und Enrique Herrero-Acero oligomere Modellssubstrate in Verbindung mit modernen analytischen Verfahren. Die erfolgreiche Aufklärung von Enzym – Struktur / Funktionsbeziehungen ermöglicht letztendlich über genetische Methoden eine Verbesserung bzw. „Adaption“ der Enzyme an diese nicht natürlichen Substrate.

Surface functionalisation of polymers

The “biorefinery” involves a complete transformation of lignocellulose into high-value products by using biotechnical approaches. Following this concept, enzymatic polymerization of lignosulfonates to obtain dispersants was achieved. By means of this, using analytical tools like NMR¹, PyrGC², LC-MS³ etc. the formation of novel C–C bonds was demonstrated. Gibson Stephen Nyanhongo & team has also employed enzymes to specifically bind functional molecules such as tannins as biocides or alkylamines as hydrophobic water repellent molecules onto the surface of lignocellulose materials. Covalent binding (4-O-5 / 5-5) of these molecules to the lignin structural elements syringyl- and guaiacylglycerol β -guaiacylether was demonstrated.

Similarly, novel strategies for surface functionalisation of synthetic polymers such as polyamides, polyalkyleneterphthalates or polyacrylonitriles with applications ranging from electronics to textiles are developed in Eva Ribitsch’s & Enrique Herrero-Acero’s project within the K2 Centre on Industrial Biotechnology (ACIB). All enzyme based modifications are permanent in contrast to many conventional methods due to the establishment of covalent bonds. Mechanistic investigations to elucidate novel enzyme catalyzed reactions use oligomeric model molecules combined with sophisticated analysis tools while enzyme structure / function relationships are studied to ultimately allow genetic enzyme “adaption” to these non natural substrates.

Abb. 2: 3-D (rechts) und 2-D (links) CLSM (confocal laser scanning microscopy)-Bild von Mikrosphären, hergestellt aus fluoreszenzmarkiertem (FITC) humanem Serumalbumin (HSA). Mit Fluorescent Red markierte Folsäure (lila, linkes Bild) wurde an die Mikrosphären gebunden, um eine Erkennung durch Makrophagen zu ermöglichen.

Fig. 2: 3-D (right) and 2-D (left) confocal laser scanning microscopy (CLSM)-image of microspheres produced from human serum albumin (HSA) labelled with fluorescein isothiocyanate. Folic acid labelled with fluorescent red was bound to the microspheres (pink circles, left) to allow recognition by activated macrophages.

¹ NMR: nuclear magnetic resonance Spektroskopie

² PyrGC: pyrolysis chromatography

³ LC-MS: Flüssigchromatografie mit Massenspektrometrie-Koppelung

Monographic Series TU Graz

NEU! Advanced Materials Science

Monographic Series TU Graz

NEW Advanced Materials Science



Die Herausgeber:

Christof Sommitsch

*(Institut für Werkstoffkunde und
Schweißtechnik)*

Klaus Reichmann

*(Institut für Chemische
Technologie von Materialien)*

Ferdinand Hofer

*(Institut für Elektronenmikrosko-
pie und Feinstrukturforschung)*

The editors:

Christof Sommitsch

*(Institute for Materials Science
and Welding)*

Klaus Reichmann

*(Institute of Chemistry and
Technology of Materials)*

Ferdinand Hofer

*(Institute of Electron Microscopy
and Fine Structure Research)*

An der TU Graz wurde in diesem Sommer die Reihe „Monographic Series TU Graz“ um den Fachbereich Advanced Materials Science erweitert.

Die Entwicklung von modernen Hochleistungswerkstoffen ist der Schlüssel für zukünftige Herausforderungen der Industrie im Hochtechnologie-segment, vor allem im Bereich der Mikro- und Nanotechnologie. An der TU Graz bieten zahlreiche Gruppen und Institute eine umfassende Expertise in diesem Forschungsbereich und sind weltweit anerkannt. Das Field of Expertise (FoE) „Advanced Materials Science“ vereint die laufenden Forschungsarbeiten unterschiedlicher Fakultäten, um die Sichtbarkeit nach außen zu erhöhen und um Kooperationen zu stimulieren. In diesem FoE bilden Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler der Fachrichtungen Chemie, Physik und Werkstoffkunde eine multidisziplinäre fakultätsübergreifende Einheit, und arbeiten an der Entwicklung und Modellierung neuer Werkstoffe, funktionaler Schichten und Komponenten.

Mit der neuen monografischen Serie wollen wir eine generelle Plattform für die Veröffentlichung von aktuellen Forschungsthemen der Werkstoffwissenschaften anbieten, die für alle Themen der Materialsynthese, der Werkstoffcharakterisierung und -anwendung offen ist. Die neue Serie wurde mit drei Bänden eröffnet, und zwar W. Mitter und C. Sommitsch: Zur Theorie der Gefügeänderungen in Metallen: Verfestigung, Erholung, Korngrenzenbewegung und Rekristallisation (Volume 1); I. Holzer: Modelling and Simulation of Strengthening in Complex Martensitic 9–12% Cr Steel and a Binary Fe-Cu Alloy (Volume 2) sowie R. Radis: Numerical Simulation of the Precipitation Kinetics of Nitrides and Carbides in Microalloyed Steels (Volume 3).

This summer, “Monographic Series TU Graz” was extended to include Advanced Materials Science.

Materials science is the key scientific basis for the future challenges of industry in the high-tech segment, especially in micro- and nano-technology. Throughout the world great efforts are being made to develop new materials and to understand and optimize their structural and functional properties. Within Graz University of Technology a number of groups and institutes offer comprehensive expertise in this field with high international recognition. The Field of Expertise “Advanced Materials Science” concentrates the broad know-how across faculties in order to increase “visibility” and cooperation. Within this Field of Expertise a multidisciplinary community of scientists from the fields of chemistry, physics and materials science spread over different faculties works on the development, characterization and modeling of new materials, functional layers and components.

With this series of monographs, we intend to install a platform for the comprehensive presentation of current topics in materials science, open for all issues of material synthesis, characterization and application.

The new series started with 3 volumes, i.e. W. Mitter and C. Sommitsch: On the Theory of Microstructure Changes in Metals. Hardening, Recovery, Grain Boundary Movement and Recrystallization (Volume 1); I. Holzer: Modelling and Simulation of Strengthening in Complex Martensitic 9–12% Cr Steel and a Binary Fe-Cu Alloy (Volume 2) as well as R. Radis: Numerical Simulation of the Precipitation Kinetics of Nitrides and Carbides in Microalloyed Steels (Volume 3).

Antimikrobielle Kunststoffe – oder wie werde ich die Mikroben los?

Antimicrobial Polymers or How to Get Rid of Microbes

Nadja Noormofidi

Mit zunehmender Resistenzbildung des Menschen gegen eine immer größer werdende Anzahl von Mikroorganismen steigt auch der Bedarf an langzeitwirksamen, antibakteriellen Materialien, die keine niedermolekularen Bestandteile an die Umgebung abgeben und so das Risiko der Resistenzbildung minimieren. Derartige Materialien finden sowohl in der Lebensmittel- und Verpackungsindustrie als auch in der Medizintechnik Anwendung. Das RP7-Projekt BIOSURF – koordiniert von der TU Graz – hat sich die Entwicklung solcher antimikrobieller Oberflächen und Beschichtungen, die die Mikrobenadhäsion minimieren, zum Ziel gesetzt. Weiters werden entsprechende Sensormodule zur Detektion von Mikroben und Biofilmen entwickelt.

Die Prävention von mikrobiellen Kontaminationen und Biofilmbildung ist von großem Interesse für viele verschiedene Anwendungsgebiete. Besonders in der Lebensmittelindustrie – Produktion sowie Verpackung von Lebensmitteln – besteht eine zunehmende Notwendigkeit, mikrobielle Kontaminationen zu verhindern bzw. ihnen vorzubeugen. Dabei ist es besonders wichtig, dass Oberflächen, die in Kontakt mit Lebensmitteln kommen, frei von schädlichen Mikroorganismen sind. In den letzten Jahren konnten sich antimikrobielle Kunststoffe als attraktive Alternative zu niedermolekularen Wirkstoffen vermehrt etablieren. Gründe dafür sind schwerwiegende Nachteile der niedermolekularen Verbindungen wie z. B. deren Toxizität, deren Akkumulation im Erdboden und eine zunehmende Resistenzbildung vieler Keime. Im Vergleich dazu haben antibakterielle Kunststoffe den Vorteil, thermisch stabil und nicht flüchtig zu sein und keine niedermolekularen Bestandteile in die Umgebung freizusetzen. Kommen Mikroorganismen in Kontakt mit derartigen Materialien, werden diese abgetötet (Kontaktbiocide).

With increasing resistance formation in humans against more and more microorganisms, the demand increases for long-term active, antimicrobial materials which do not release low molecular weight components to the surroundings and thus minimise the risk of resistance formation. Such materials are applicable in the foods and beverages industries as well as in medical care products. The FP7-project BIOSURF – coordinated by the Graz University of Technology – aims at the development of such antimicrobial surfaces and coatings that minimise microbe adhesion. Furthermore, corresponding monitoring modules for the detection of microbes are being developed.

The prevention of microbial contamination and biofilm formation is a topic of great interest for many different fields of application. Especially across the supply and production chain in the food industry – in the food processing and packaging industries – there is a common need for preventing and eradicating microbial contamination. Thus, it is important that all surfaces which come into close contact with food and foodstuffs are free of potentially hazardous micro-organisms. In recent years, polymeric antimicrobial materials have been intensively explored as an attractive alternative to low molecular weight agents. These small molecules exhibit severe drawbacks such as human toxicity and the tendencies to develop bacterial resistance and to accumulate in the soil. In comparison, polymeric antimicrobial materials have the advantages of being non-volatile, chemically stable and do not release degradation products of low molecular weight into the environment. Microorganisms are killed on contact with such materials (contact biocides). Such contact biocides are currently being developed in the BIOSURF project at the Institute of



Nadja Noormofidi studierte Technische Chemie und ist seit 2007 wissenschaftliche Assistentin am Institut für Chemische Technologie von Materialien der TU Graz. Sie ist wissenschaftliche Koordinatorin des Projekts BIOSURF und neben Roland Fischer Projektleiterin des FEMtech-Karrierewegeprojekts „erfinderin“. In beiden Projekten liegt der Forschungsschwerpunkt auf der Entwicklung antimikrobieller Materialien.

Nadja Noormofidi studied Chemical Engineering and has been employed as scientific assistant at the Institute of Chemistry and Technology of Materials at Graz University of Technology since 2007. She is scientific coordinator of the BIOSURF project and together with Roland Fischer project manager of the FEMtech-Karrierewege project „erfinderin“. In both projects the main research focus is on the development of antimicrobial materials.



Abb. 1: Produkte und Verpackungsmaterialien des Endnutzers COASA.

Fig. 1: Products and packaging material of the end-user COASA.

Im Zuge von BIOSURF wird derzeit am Institut für Chemische Technologie von Materialien (ICTM) der TU Graz an der Entwicklung derartiger Kontaktbiocid gearbeitet. BIOSURF (development and implementation of a contact biocid polymer as anti-microbial and anti-deposit surface in food industry) ist ein europäisches Forschungsprojekt zur Unterstützung von Klein- und Mittelbetrieben (KMUs), das von der europäischen Kommission innerhalb des siebenten Rahmenprogramms gefördert wird. Das Konsortium besteht aus sechs Partnern aus Österreich, Deutschland, Spanien und Großbritannien, wobei das ICTM mit tatkräftiger Unterstützung von Eva Bradacs vom F&T-Haus der TU Graz die Rolle des Koordinators übernimmt.

Die Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten basieren auf patentgeschützten Konzepten, die von den KMUs KEKELIT Kunststoff GmbH (Linz, Österreich) und LAGOTEC GmbH (Magdeburg, Deutschland) bereits entwickelt wurden. Das Know-how und die Interessen der einzelnen Partner ergänzen sich derart, dass im BIOSURF-Projekt alle Partner an der Erreichung eines gemeinsamen Ziels arbeiten. KEKELIT produziert Kunststoffteile für verschiedene Anwendungen wie z. B. Wasserrohre und Fernwärme. LAGOTEC entwickelt industrielle Sensortechnologien (Kontrolle von Biofilmbildungen) und COASA (Oviedo, Spanien) ist spezialisiert auf die Produktion, Verpackung und den Verkauf von Käse, Honig, Marmeladen, Konservendosen und Cider. Diese drei KMU-Partner werden von den drei Forschungseinrichtungen Universität Dundee (Dundee, Großbritannien), TTZ Bremerhaven (Bremerhaven, Deutschland) und dem ICTM der TU Graz unterstützt.

Das Ziel des BIOSURF-Projekts ist die Entwicklung von antimikrobiellen Oberflächen sowie die Untersuchung ihrer antimikrobiellen und Antihafteigenschaften. Dazu konzentrierte sich das Kon-

Chemistry and Technology of Materials (ICTM) of Graz University of Technology. BIOSURF (development and implementation of a contact biocid polymer as anti-microbial and anti-deposit surface in food industry) is a European research project for the benefit of small and medium sized enterprises (SMEs) funded by the European Commission within the Seventh Framework Programme. The consortium consists of six participating partners from Austria, Germany, Spain and the United Kingdom, and is coordinated by the ICTM and vigorously supported by Eva Bradacs from Graz University of Technology's Research & Technology House.

The research and development activities are based on initial patent-protected concepts developed by KEKELIT GmbH (Linz, Austria) and LAGOTEC GmbH (Magdeburg, Germany). The project is centred on complementary technological issues and innovation needs of the participating SMEs. KEKELIT manufactures plastic equipment such as plastic pipe systems, pipe insulation and pre-insulated pipes for different industrial applications. LAGOTEC develops industrial monitoring technologies (biofilm control/microbial plant safety) and COASA (Oviedo, Spain) as the end-user is specialized in the production, packaging and distribution of farmhouse cheese, honey, jams, canned food and cider. These three SME partners are supported by the three researchers University of Dundee (Dundee, United Kingdom), TTZ Bremerhaven (Bremerhaven, Germany) and the ICTM of Graz University of Technology.

The aim of the BIOSURF project is the development of antimicrobial surfaces and their assessment with regard to their antimicrobial and anti-deposit characteristics. In order to develop antimicrobial surfaces, the consortium initially focused on the assessment and specification of the microbial and deposit characteristics being typical for food processing branches in general and



© Noormofidi

sortium zunächst auf die Untersuchung und Beschreibung von mikrobiellen Ablagerungen, die typischerweise in der Lebensmittel verarbeitenden Industrie im Allgemeinen und beim Endnutzer COASA im Speziellen auftreten. Verpackungsmaterialien des Partners COASA wurden analysiert, um dessen Bedingungen vor Ort genau zu untersuchen. Durch diese Maßnahmen konnten vier Zielbakterien ermittelt werden, deren Auftreten in den darauf folgenden antimikrobiellen Tests untersucht wurde. Das heißt, derzeitige Reinigungs- und Desinfektionsbedingungen wurden abgeschätzt und auf die Anforderungen an angemessene Kontrollmodule übertragen. Entsprechend wurden auch die Polymerarchitekturen und die Zusammensetzung der Beschichtungen optimiert und die Softwareanforderungen definiert.

Das ICTM synthetisierte verschiedene aminofunktionalisierte Kunststoffe unter Verwendung unterschiedlicher Konzepte unter Berücksichtigung niedriger Produktionskosten sowie einfacher Verarbeitung und Produktion der entsprechenden Materialien. Die antimikrobielle Aktivität der Kunststoffe in Hinblick auf deren potenzielle Anwendung als antimikrobielle Oberflächen wurde untersucht. Die Universität Dundee verfolgte einen weiteren Ansatz und konzentrierte sich auf die Entwicklung neuer Beschichtungen für Stahlrohre aus Nanoverbundmaterialien, die eine minimale Bakterienanhaftung gewährleisten. Die Kombination der beiden komplementären Konzepte könnte sogar zu einer besseren Aktivität führen. Das ICTM arbeitet gemeinsam mit der Universität Dundee derzeit an der Entwicklung dieser Hybridmaterialien.

Weiters werden antimikrobielle und Antihaftelemente sowie Kontrollprotokolle für die Endnutzer entwickelt. Während der Partner LAGOTECH das Sensormodul entwickelte, war das TTZ Bremerhaven für die Softwareentwicklung ver-

antwortlich für die BIOSURF End-user Partner in particular. Packaging samples of COASA were analysed aiming at the determination of the end-user's on-site conditions. This led to the identification of "target bacteria" used for antimicrobial tests. Thus, current cleaning and disinfection requirements were assessed and then transferred into requirements for adequate monitoring tools. Accordingly, the polymer architectures and coating compositions were optimised and the sensor and software requirements were defined.

The ICTM synthesised different amino-functionalised polymers using different approaches taking into account low production costs as well as easy processing and production. The antimicrobial effectiveness of the polymers was tested with regards to their implementation as antimicrobial surfaces. As another approach, the University of Dundee is developing new coatings-based nanocomposites that assure minimal bacteria attachment. The combination of both complementary concepts might lead to a further improved antimicrobial activity. Preparations to produce such hybrid materials are currently ongoing.

Furthermore, the development and testing of anti-deposit monitoring modules as well as the development of monitoring and control protocols for the end-users was addressed. While the LAGOTECH partner was responsible for the development of an anti-deposit monitoring module, TTZ Bremerhaven was in charge of the sensor software development which will be required for process control and monitoring.

The developed materials together with the monitoring modules are currently being tested and optimised under real production conditions in a pilot plant in order to achieve marketable products which should be available on the free market in the next three years.

The development of anti-microbial and anti-deposit surfaces and coatings aims at preventing

Abb. 2: Laborarbeit der Mitarbeiterinnen des BIOSURF-Projekts.

Fig. 2: Laboratory work of BIOSURF employees.



© Noormofidi

Abb. 3: BIOSURF-Konsortium
bei der Betriebsbesichtigung des
Endnutzers COASA.

Fig. 3: BIOSURF consortium
visiting the facilities of the
end-user COASA.

antwortlich, die für die Prozesskontrolle notwendig ist.

Derzeit werden die entwickelten Materialien in Kombination mit den Sensormodulen unter realen Prozessbedingungen in einer Pilotanlage getestet und optimiert, um marktfähige Produkte zu erzielen, die innerhalb der nächsten drei Jahre auf dem freien Markt erhältlich sein sollen.

Die Entwicklung von antimikrobiellen Antihaftoberflächen und -beschichtungen hat die Prävention von Biofouling zum Ziel, um so Durchlaufzeiten zu erhöhen und Totzeiten sowie Kosten zu minimieren. Dadurch kann der Umsatz potenzieller Endnutzer beträchtlich erhöht werden. Darüber hinaus kann die Verwendung von gefährlichen Chemikalien dramatisch verringert werden, da Reinigungs- und Desinfektionsprozesse minimiert werden. Davon profitieren nicht nur die Endnutzer, sondern alle Menschen und unsere Umwelt.

biofouling and longer processing times and thus minimises downtimes and gives substantial cost benefits. This results in a substantial increase in turnover for the end-user. Moreover, the consumption of partially hazardous chemicals is dramatically decreased by minimising cleaning and disinfection processes. Beneficiaries are not only the end-users but also people in general and the entire environment.

Abb. 4: Bakterienbewuchs
auf Agarplatten.

Fig. 4: Bacterial growth
on agar.



© TTZ Bremerhaven

HYDROSYS

Vor-Ort-Beobachtung von Umweltprozessen unter Einsatz mobiler Augmented Reality

HYDROSYS

On-site Monitoring of Environmental Processes Using Mobile Augmented Reality

Ernst Kruijff

Die Softwaresysteminfrastruktur von HYDROSYS unterstützt Teams von Benutzern und Benutzerinnen bei der Vor-Ort-Beobachtung und dem Management von Events, bei der Analyse von Vorgängen, welche eine Verschlechterung des Umweltzustands verursachen können, sowie bei der Erörterung potenzieller Lösungen für einmal identifizierte Probleme.

Das Projekt führt das innovative Konzept von eventgeführten Einsätzen mit mobilen Geräten ein, welche potenziell von einem unbemannten Luftschiff (Blimp) unterstützt werden. Bei diesen Einsätzen werden Daten von zahlreichen Sensoren, von auf dem Luftschiff und anderen entfernten Orten montierten Kameras erfasst. Hierdurch werden kleinflächig dichte Informationen generiert (Datenerfassung). Durch das Sensornetz werden die Sensordaten abgefragt, geprüft und gespeichert sowie Simulationen auf Grundlage physikalischer Prozessmodelle durchgeführt (Datenspeicherung und Bearbeitung). Die Benutzer und Benutzerinnen können die Umwelt mit Handys und Handcomputern analysieren, indem sie Daten aus dem Datenspeicher anfordern (Datenvisualisierung und -analyse). Durch die starke Integration von mobilen Geräten und Sensornetzen soll das Projekt ein besseres Umweltmonitoring und Management für Umweltwissenschaftler und -wissenschaftlerinnen, Institutionen, Dienstleister, Technikunternehmen und Gemeinden ermöglichen. Es wird erwartet, dass die im Rahmen des Projekts angebotenen Tools die interdisziplinäre Kommunikation und die Entwicklung von Lösungen für die beobachteten Probleme erleichtern.

Zu diesem Zweck arbeitet ein Konsortium namhafter europäischer Universitäten, Institutionen und Firmen mit einer großen Gruppe von Endbenutzern und -benutzerinnen zusammen. Dabei

HYDROSYS provides a software system infrastructure to support teams of users in on-site monitoring and management events, analyzing processes that may cause environmental degradation, and discussing potential solutions for problems found.

The project introduces the innovative concept of event-driven campaigns with mobile devices, potentially supported by an unmanned aerial vehicle (blimp). In these campaigns, data from numerous sensors, cameras mounted on the blimp and other remote locations and external sources is gathered, generating dense information on a small area (data acquisition). The sensor network system retrieves, checks and stores sensor data, and processes simulations based on physical process models (data storage and processing). Users can analyze the environment using cell phones and handheld computers by requesting the data from the data storage (data visualization and analysis). The system is validated in multiple deployments in Switzerland and Finland, dealing among others with pollution caused by storm water, avalanches and permafrost melting. The project is expected to improve environmental monitoring and management for environmental scientists, institutions, service providers, engineering companies and municipalities through its strong integration of mobile devices and sensor networks. It is expected that the tools offered by the project will ease inter-disciplinary communication and solution finding for the problems being observed.

To this extent, a consortium of renowned European universities, institutions and companies is working together with a large group of end-users, binding experience from various areas to create a uniform platform. To aid the process, the research is being steered by considerable end-user involvement throughout the full project. In the first



Ernst Kruijff ist Senior Researcher am Institute for Computer Graphics and Vision. Kruijff ist Koordinator von HYDROSYS, einem von der EU finanzierten Projekt, welches auf die Entwicklung von Raumanalysewerkzeugen für das Vor-Ort-Umweltmonitoring und -Management spezialisiert ist.

Ernst Kruijff is a senior researcher at the Institute for Computer Graphics and Vision. Kruijff coordinates HYDROSYS, an EU-funded project focusing on the development of spatial analysis tools for on-site environmental monitoring and management.



© University of Cambridge

Abb. 1: Unbemannte Fluggeräte-
plattform für die Verfeinerung
von Geländemodellen und die
Generierung thermischer Daten.

Fig. 1: Unmanned Aerial vehicle
platform used for refinement of
terrain models and generation of
thermal data.

werden Erfahrungen aus verschiedenen Bereichen einbezogen, um eine einheitliche Plattform zu schaffen. Zahlreiche Gespräche mit Endbenutzern und -benutzerinnen führten zu einem Verständnis darüber, was Vor-Ort-Beobachtung und Management umfassen, und wie sie sich in den aktuellen Arbeitsprozess einpassen lassen. Von besonderem Interesse ist der Wandel des Arbeitsprozesses. Stand der Arbeitsplatz traditionell selbst im Mittelpunkt des Arbeitsprozesses, werden jetzt einige Aufgaben in das Feld verlagert, ohne dass hierdurch der Zugang zu den Datenquellen verloren ginge, die für die Analyse einer Situation und das Treffen von Entscheidungen erforderlich sind. Der identifizierte Aufgabenraum reicht von spezifischen Monitoring- und Managementaufgaben bis hin zu unterstützenden Aufgaben wie beispielsweise Treffen und Kommunizieren von Entscheidungen sowie Aufbau und Wartung von Sensoren.

Die Forschungssystemprototypen wurden an mehreren Orten in der Schweiz und in Finnland eingesetzt. Dort wurden verschiedene Sensoren installiert und erste Beobachtungen durchgeführt. Multivariate Sensoren speisen das globale Sensornetz (GSN), welches die Sensordaten speichert und verteilt. Über die Datendienste, welche die Daten filtern und für die Anzeige auf mobilen Geräten vorbereiten, können die Benutzer und Benutzerinnen auf die Nahe-Echtzeit-Sensordaten sowie die damit zusammenhängenden Alt-

two years of the project, the consortium has taken considerable effort to perform a user-centered design and implementation of the system. Numerous discussions were made with a group of around 65 end-users. Next to key users, some external experts have been taken onto the advisory board, providing valuable feedback throughout the project life cycles. These interviews have resulted in an overview of what on-site monitoring and management comprises, how it fits in the current work process, and what the specific end-user needs are. Of specific interest is the shift from the traditional work process, centered on the workplace itself, towards the extension of moving some of the tasks to the field itself, without losing the access to data sources needed to analyze a situation and take decisions. The identified task space spans from specific monitoring and management tasks, up to support tasks such as decision-making and communication, and sensor setup and maintenance. The end-user needs affected the created system platform to a large extent, taking into account both easily accessible technology for end-users to use in daily work processes after the end of the project, and true innovation in key technologies of the system platform.

The research system prototypes have been deployed at several sites in Switzerland and Finland, which have been prepared by installing numerous sensors and doing initial observations.



daten zugreifen. Besonders geachtet wurde auf die Integration von Simulationswerkzeugen, um das Auswählen und Generieren von Simulationen gespeicherter Sensordaten zu vereinfachen.

Mittels Tracking wird der Standort der im Feld eingesetzten mobilen Geräte nachverfolgt. So sind die Benutzer und Benutzerinnen dazu in der Lage, die Daten stets im Kontext des Ortes, an dem sie entstanden sind, zu analysieren. Die Benutzer und Benutzerinnen können mit ihren mobilen Geräten ins Feld gehen und am beobachteten Ort vom Sensornetzsystem verfügbare Datenquellen auswählen sowie mit Visualisierungen der Sensordaten interagieren. Die Daten können als numerische Darstellung, als Diagramm oder als auf ein 3-D-Modell oder einen Video-Stream überlagerte Simulation – als befänden sie sich in der echten Umgebung an der „richtigen Stelle“ – visualisiert werden. Die Benutzer und Benutzerinnen können ferner Kommentare hinzufügen, um ihre Tätigkeiten im Feld zu dokumentieren. Zusätzlich werden mit dem Luftschiff hochauflösende Bild- und Wärmedaten aufgenommen.

Insbesondere ist die Visualisierung von auf Video-Streams überlagerten Daten ein hochinteressanter und aktuell viel beachteter Bereich. Diese Art der Visualisierung wird auch als Augmented Reality bezeichnet. Eine der weltweit führenden Forschungsgruppen in diesem Bereich ist an der TU Graz angesiedelt.

Multivariate sensors feed the global sensor network (GSN) that handles the storage and distribution of sensor data. Users can access the near real-time sensor data and associated legacy data via the data services that handle filtering and pre-processing of data for display on the mobile devices. Particular care has been taken to integrate simulation tools, easing the selection and generation of simulations of the stored sensor data.

The location of the mobile devices that are taken into the field is “tracked”; users can always analyze data in the context where the data originates. Users can go into the field with their mobile devices and select data sources available at the observed site from the sensor network system, and interact with visualizations of the sensor data. The data can be visualized as numerical representation, graph or simulation overlay on top of a 3D model or video stream, as if positioned at the “right position” in the real-environment. Users can also add annotations to document their actions in the field. Additionally, the blimp is starting to be deployed, capturing high resolution image and thermal data. In particular the visualization of data on top of video streams is an area of high interest, currently gaining much attention. This kind of visualization is also known as Augmented Reality, an area where Graz University of Technology hosts one of the leading research groups worldwide.

The data being observed is related to selected sites in Switzerland and Finland where, mean-

Abb. 2: Nutzer eines mobilen Geräts vor der SensorScope Station.

Fig. 2: Mobile device user in front of SensorScope station.

HYDROSYS

(7. EU-Rahmenforschungsprogramm, Projekt Nr. 224416):

Forschungsprojekt zwischen
TU Graz und École Polytechnique
Fédérale de Lausanne (Schweiz),
Eidg. Forschungsanstalt für Wald,
Schnee und Landschaft
(Schweiz), University of
Cambridge (UK), Helsinki
University of Technology
(Finnland), Ubisense (UK) und
Luode Consulting (Finnland).

HYDROSYS

(EU-funded project no. 224416):

The project is a cooperation
between TU Graz, EPFL
(Switzerland), WSL (Switzerland),
University of Cambridge (UK),
Helsinki University of Technology
(Finland), Ubisense (UK) and
Luode consulting (Finland).

Zusammen mit den am Projekt beteiligten Endbenutzern und -benutzerinnen wurden von dem Konsortium Orte mit verschiedenen gelagertem Schwerpunkt und unterschiedlichen technologischen Herausforderungen ausgewählt. In der Schweiz waren dies drei Orte. Jeder Ort hat einen eigenen spezifischen Schwerpunkt: Im Fall von La Fouly (in der Nähe des Mont Blanc) sind dies Naturkatastrophen (insbesondere hydrologische Katastrophen), Prognose und Management, im Fall von Gemsstock nahe Andermatt die Analyse des Dauerfrostbodens und im Fall von Dorfberg (Davos) das Auslösen und die Bildung von Nassschneelawinen. In Finnland wurden schließlich zwei Orte ausgewählt. In Kylmäoja befasst man sich schwerpunktmäßig mit der Auswirkung der Verschmutzung, des Bauens und anderer Aktivitäten im Einzugsbereich. An diesem Szenario sind die Bürger und Bürgerinnen aktiv beteiligt. Der Ort Nummela wurde im Rahmen einer Sanierungsaktion untersucht. Für das Konsortium sind diese Orte ideal, um die Infrastruktur des Systems mit Endbenutzern und -benutzerinnen im Feld zu testen, allerdings gibt es für das im Einsatz stehende System auch erhebliche Herausforderungen – von netzbedingten Einschränkungen und der Versorgung bis hin zu Gutwetterbedingungen.

Das Projekt geht weit über den derzeitigen Stand der Technik hinaus – es behandelt kurzfristige Ereignisse und die detaillierte Analyse von kleinen Orten unter Einsatz der zuvor erwähnten mobilen Geräte. Die Analyse solcher Ereignisse wird von den derzeit verfügbaren Verfahren kaum unterstützt, sie haben aber einen großen Einfluss auf die Umweltzerstörung. Unter Berücksichtigung der aktuellen Belastung unseres Ökosystems hofft das Konsortium, einen kleinen, jedoch wertvollen Beitrag zur potenziellen, schrittweisen Verbesserung dieser Situation zu leisten.

while, numerous sensors have been set up. Together with the end-users involved in the project, the consortium has selected sites that differ in focus and pose different challenges to the technology. In Switzerland, three sites have been selected. Each site focuses on its own topic: natural disasters (and especially hydrological disasters) prediction and management for La Fouly (close to Mont Blanc), permafrost degradation for Gemsstock near Andermatt, and triggering and formation of wet snow avalanches for Dorfberg (Davos). Accordingly, different sets of sensors / sensor stations are deployed, providing a wide range of data. In Finland, two final sites have been selected. The Kylmäoja site is a larger site that is on two municipalities. The focus on Kylmäoja is the impact of pollution, construction and other activities in the catchment area, with a possible need for engineering the channel. In this scenario, citizens are actively involved. The Nummela site has been under investigation as part of a restoration action. The sites provide the consortium with excellent possibilities to test the system infrastructure with end-users in the field, but also offer considerable challenges to the deployed system, from network limitations and power issues to benign weather conditions.

The project is progressing well beyond the current state of the art by dealing with short-term events and detailed analysis of small sites using the previously mentioned mobile devices. The analysis of such events is hardly supported by current methods, but has a large impact on environmental degradation. With the current pressure on our ecosystem in mind, the consortium hopes to provide a small but valuable asset to potentially take its share in improving this situation step by step.

Die besten Köpfe in Graz versammelt: FWF Doktoratskolleg-plus „Discrete Mathematics“

Gathering the Best Brains in Graz:

The Discrete Mathematics FWF Doctoral Programme (DK-plus)

Wolfgang Woess

Mit drei prominenten Gastrednern, 17 angehenden Doktoranden und Doktorandinnen, Universitätsvertretern und vielen weiteren Teilnehmern und Teilnehmerinnen fand am 15. Oktober 2010 die festliche Eröffnung des neuen Doktoratskollegs „Discrete Mathematics“ statt. Schon vor fast zwei Jahren taten sich eine Mathematikerin und neun Mathematiker von der TU Graz, der KFU-Graz und der Montanuniversität Leoben zusammen, um gemeinsam den großen Antrag für dieses Projekt einzureichen. Zusätzlich werden sie von zwei weiteren assoziierten Wissenschaftlern unterstützt. Seit dem 1. Mai 2010 läuft dieses DK-plus offiziell, mit einem Fördervolumen von knapp zwei Millionen Euro bis 2014 und der Aussicht auf Verlängerung um bis zu acht Jahre.

Die Diskrete Mathematik ist ein wichtiger Teil der modernen Mathematik, der das gesamte Spektrum von der reinen bis hin zur Angewandten Mathematik umfasst. Betrachtet man die in der Steiermark situierten Mathematikinstitute, so stellt sich heraus, dass die an diesen Instituten in vielen Facetten betriebene Forschung über Themen der Diskreten Mathematik ein entscheidendes Charakteristikum mit vielfältigen Möglichkeiten der Zusammenarbeit ist. Die genaue Abgrenzung der Diskreten Mathematik zur modernen Mathematik ist fast unmöglich, hat sie doch insbesondere seit dem Anbruch des Computerzeitalters viele andere Teildisziplinen der Mathematik durchdrungen und umgekehrt deren Einfluss absorbiert. Die beteiligten Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen vertreten eine breite Auffassung, die über die typischen Kerngebiete hinausgeht. Dadurch können viele verschiedene Aspekte abgedeckt werden: kombinatorische, additive und algorithmische Zahlentheorie, Diskrete Dynamik

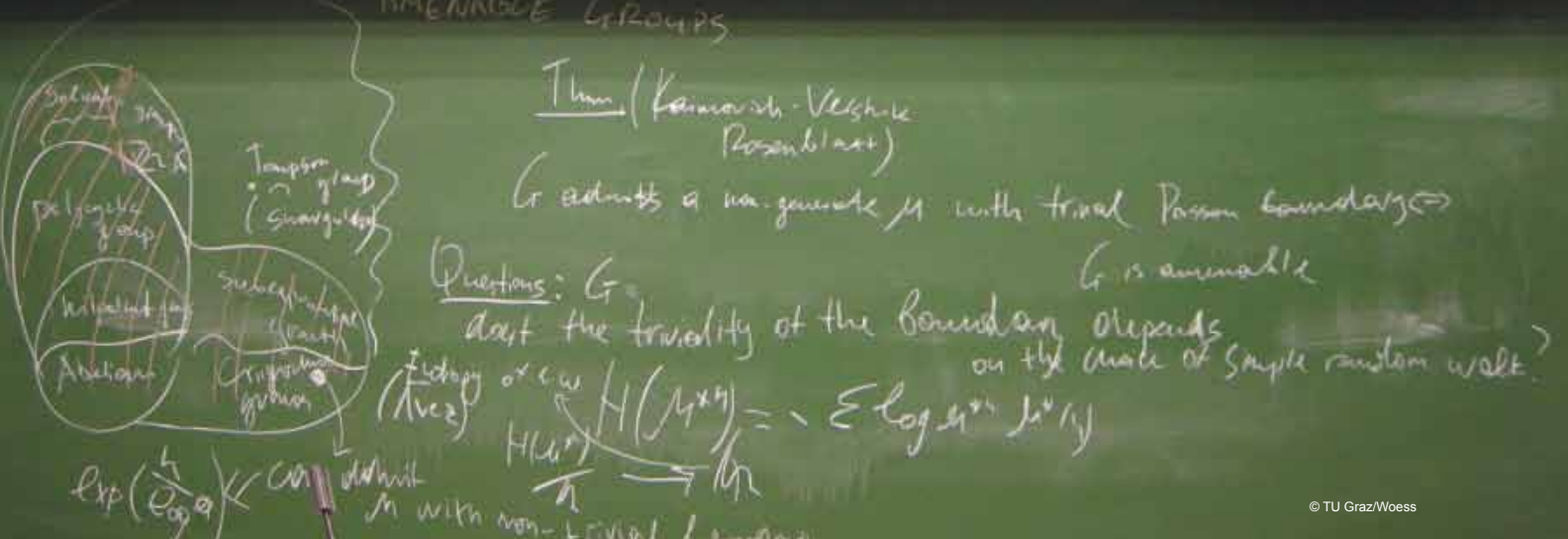
On October 15, 2010, the festive opening of the new doctoral programme Discrete Mathematics took place with three prominent guest speakers, 17 prospective PhD students, representatives of the universities and many other participants. Already two years ago, 10 mathematicians from Graz University of Technology, the University of Graz, and the University of Leoben gathered to prepare the voluminous application for this project. Additional support comes from two associated scientists. This DK-plus programme has been officially operative since May 1, 2010 with a support of approximately 2m euros until 2014 and possible renewal for up to 8 more years.

Discrete mathematics is an important part of modern mathematics and comprises the entire spectrum from pure to applied mathematics. In the mathematical community of Styria, multifaceted research in discrete mathematics is one of the significant features that unites the mathematical expertise present at the three participating universities. A precise delimitation of discrete mathematics is hardly feasible because since the beginning of the computer age it has penetrated most areas of mathematics and, conversely, has absorbed their influence. The scientists participating in the doctoral programme share a broad perception which reaches beyond the typical core topics. Thus, a variety of aspects are covered: combinatorial, additive and algorithmic number theory, discrete dynamics and fractals, algebraic structures, graph theory, ergodic theory, harmonic analysis and spectral theory, discrete stochastics, analysis of algorithms, cryptography, combinatorial optimization, discrete applied geometry, and more.



Wolfgang Woess ist Leiter des Instituts für Mathematische Strukturtheorie (Math C) an der TU Graz. Seine Forschungsinteressen umfassen Zufallsprozesse auf Graphen und Gruppen, die Struktur von unendlichen Graphen und Gruppen, formale Sprachen, Theorie der Ränder und harmonische Funktionen sowie Diskrete Potentialtheorie.

Wolfgang Woess is head of the Department of Mathematical Structure Theory (Math C). His research interests are random walks on infinite graphs and groups, structure of infinite graphs, groups and formal languages, boundary theory and harmonic functions and discrete potential theory.



© TU Graz/Woess

und Fraktale, algebraische Strukturen, Graphentheorie, Ergodentheorie, harmonische Analyse und Spektraltheorie, Diskrete Stochastik, Analyse von Algorithmen, Kryptografie, kombinatorische Optimierung, Diskrete Angewandte Geometrie und weitere Themen.

Im vorliegenden DK-plus werden die vorhandenen Kompetenzen vereint, um an den drei genannten steirischen Universitäten ein gemeinsames Doktoratsprogramm auf hohem Niveau zum Thema Diskrete Mathematik einzurichten. Das gesamte DK-plus geht über enge Projektfor-schung hinaus; das Anliegen ist es, eine interna-tional sichtbare Schule aufzubauen. Einem aktu-ellen Trend folgend, wird die „Mission und Vision“ als „exzellente mathematische Ausbildung durch exzellente mathematische Forschung und exzel-lente mathematische Forschung durch exzellente mathematische Ausbildung“ formuliert.

Die wichtigsten Merkmale dieses Doktoratskol-legs bestehen in einem intensiven Mentoringsys-tem, einem Curriculum, das sich aus Vorlesungen und Seminaren zusammensetzt, in welchen den DK-Studierenden die Möglichkeit geboten wird, ihre eigenen Resultate vor dem gesamten Kolle-gium des DK zu präsentieren. Daneben erfolgt ein intensives Austauschprogramm, das den Stu-dierenden erlaubt, die internationale wissen-schaftliche Gemeinschaft kennenzulernen und in ihr Fuß zu fassen. Dieser Austausch umfasst die Erweiterung der Themenvielfalt durch Einladung ausländischer Gastprofessoren und -professorin-nen, die Organisation von Tagungen und Work-shops sowie die Teilnahme an internationalen Kongressen. Außerdem verpflichtet sich jeder Doktorand/jede Doktorandin, im Laufe der Ausbil-dung insgesamt mindestens ein Semester bei ei-ner Forschungsgruppe im Ausland zu verbringen. Die gemeinsamen Aktivitäten in diesem Pro-

The present DK-plus unites those competences in order to establish a joint, high level doctoral programme in discrete mathematics at the three universities. The entire concept goes beyond nar-row project research; the principal goal is to cre-ate an internationally visible school. Following a current trend, the mission and vision is formulated as “advanced mathematical education through advanced mathematical research and advanced mathematical research through advanced math-ematical education”.

The key features of this doctoral programme con-sist in an intense mentoring system, a curriculum composed of courses and seminars in which PhD students have the opportunity to present their own results in front of the entire faculty of the DK, and an extensive exchange programme which supports the PhD students in becoming part of the international scientific community. Within the exchange programme is included inviting foreign visiting professors, organizing conferences and workshops, and participating in international con-ferences. Every PhD student is obliged to spend one semester abroad. The joint activities within this programme, such as the Seminar in Discrete Mathematics and the annual Discrete Mathemat-ics Day are also intended to create a kind of cor-porate identity among all members of the pro-gramme that stay beyond graduation.

10 PhD positions are directly FWF-funded within the DK-plus. The meaning of the “plus” is that up to 11 further “associated” PhD students can be incorporated into the programme. They are sub-ject to the same, rigorous selection criteria as well as the elevated requirements, while their project salaries come from other sources. Among those associated positions, two were reserved for fe-male applicants and are funded by the NAWI (natural sciences) cooperation in Graz. As a bo-



© TU Graz/Bergmann

gramm, wie beispielsweise das Seminar aus Diskreter Mathematik und der jährliche „Tag der Diskreten Mathematik“, sollen auch dazu dienen, ein Gemeinschaftsdenken („Corporate Identity“) unter allen Mitgliedern des DK-plus zu schaffen, das über die Promotion hinaus erhalten bleibt.

Direkt aus dem DK-plus werden insgesamt zehn Doktoranden- und Doktorandinnenstellen voll finanziert. Das „plus“ bedeutet, dass bis zu elf weitere Doktoranden und Doktorandinnen in das Programm eingebunden werden können. Diese sind denselben strengen Auswahlkriterien ebenso wie den erhöhten Anforderungen unterworfen, während ihre Projektgehälter aus anderen Quellen stammen. Darunter befinden sich insbesondere zwei aus der NAWI-Kooperation finanzierte Frauennstellen. Als Bonus kommen die assoziierten Doktoranden und Doktorandinnen in den Genuss eines großzügigen Reisebudgets, das vom FWF zur Verfügung gestellt wird. Bereits kurz nach Bewilligung des Großprojekts am 30. November 2009 wurden die Doktoranden- und Doktorandinnenstellen international ausgeschrieben. Aus den 140 Bewerbern und Bewerberinnen aus vielen Ländern der Welt wurden 40 im Frühsommer 2010 zu Interviews eingeladen. Mit 13 dieser jungen Mathematiker und Mathematikerinnen aus Österreich, Italien, Serbien, Kroatien, Ukraine und Russland wurde am 1. Oktober 2010 der volle Betrieb des Doktoratskollegs begonnen. Vier weitere, aus Deutschland und Österreich, werden bis März 2011 dazustoßen, und mit Ende des Studienjahres wird das Plansoll von 21 Doktoranden und Doktorandinnen in dieser österreichischen Schule der Diskreten Mathematik erreicht werden.

nus, the associated PhD students obtain a generous travel budget from the FWF.

Immediately after approval of this large project on November 30, 2009, the PhD positions were advertised internationally. Among the 140 applicants from many different countries worldwide, 40 were invited to interviews that took place in early summer 2010. With 13 young mathematicians, from Austria, Italy, Serbia, Croatia, Ukraine and Russia, the full activities of the DK began on October 1, 2010. A further four, from Germany and Austria, will join by March 2011, and by the end of the academic year, the full body of 21 PhD students will be enrolled in this Austrian school of discrete mathematics.

DOCTORAL PROGRAM DISCRETE MATHEMATICS



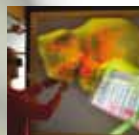
**TU & KFU GRAZ • MU LEOBEN
AUSTRIA**

Sprecher/Spokesmann: Wolfgang Woess, TU Graz
E-Mail: woess@TUGraz.at

► <http://www.math.tugraz.at/discrete>

Fünf zukunftssträchtige Bereiche in Forschung und Lehre bilden den unverwechselbaren Fingerabdruck der TU Graz auf dem Weg zur Exzellenz. Diese Fields of Expertise sind Kompetenzbereiche, die zu einzigartigen Markenzeichen der TU Graz im 21. Jahrhundert werden sollen. Gestärkt werden die Fields of Expertise durch thematisch neue Professuren und Investitionen sowie intensive Zusammenarbeit mit Industrie und Wirtschaft in Form von zahlreichen gemeinsamen Beteiligungen an wissenschaftlichen Kompetenzzentren und Forschungsnetzwerken. Kooperationen mit wissenschaftlichen Partnereinrichtungen wirken als weiterer Motor zum Erfolg.

Five areas with a promising future in research and teaching go to form the unmistakable fingerprint of Graz University of Technology on its path to excellence. These fields of expertise will become distinctive hallmarks of Graz University of Technology in the 21st century. They will be strengthened by thematically new professorships and investments as well as intensive co-operation with industry and business in the form of numerous shared participations in scientific competence centres and research networks. Cooperations with scientific partner institutes represent a further dynamo to success.



Information, Computing, and Communication Technologies



Human- & Biotechnology



Advanced Materials Science

FOE

Fields of Expertise

Mobility Research and Production Sciences



Sustainability in Design, Construction and Energy Systems



Impressum: Eigentümer: Technische Universität Graz. Herausgeber: Büro des Rektorates im Namen des Vizerektors für Forschung und Technologie. Redaktion: Ines Hopfer, TU-research@tugraz.at. Redaktionsadresse: TU Graz, Büro des Rektorates, Rechbauerstraße 12/I, 8010 Graz. Gestaltung/Layout: Christina Fraueneder, Satz: B&R Satzstudio, A.R. Reinprecht. Druck: Medienfabrik Graz. Auflage: 4800 Stück. Wir danken den Autorinnen und Autoren für die Bereitstellung der Texte und Fotos. Geringfügige Änderungen sind der Redaktion vorbehalten. Titelbild: TU Graz/FELMI-ZFE. TU Graz *research* erscheint zweimal jährlich.

► www.tugraz.at/research-journal

ISSN 2074-9643

© Verlag der Technischen Universität Graz 2010, www.ub.tugraz.at/Verlag