

Positionspapier

Hochdurchsatztechnologien in der Materialforschung

ergänzte Fassung Mai 2009

erarbeitet durch den
ProcessNet-Arbeitsausschuss Hochdurchsatzforschung für
Materialien, Katalysatoren und Formulierungen

Positionspapier

Hochdurchsatztechnologien in der Materialforschung

erarbeitet durch den

ProcessNet-Arbeitsausschuss Hochdurchsatzforschung für Materialien, Katalysatoren und
Formulierungen

Inhalt

- 1 1. Zusammenfassung
- 2 2. Einführung
- 3 3. Wirtschaftliche und wissenschaftliche Bedeutung von Hochdurchsatztechnologien
 - 1 3.1. Stand der Technik
 - 2 3.2. Der Standort Deutschland im internationalen Vergleich
 - 3 3.3. Wirtschaftliches Potential
 - 4 3.4. Wissenschaftliches Potential
- 4 4. Erfolgsbeispiele
 - 1 4.1. Anwenderindustrien
 - 2 4.2. Hochdurchsatzfirmen und –dienstleister
 - 3 4.3. Forschungsinstitute
- 5 5. Herausforderungen und Hemmnisse
 - 1 5.1. Finanzielle Aspekte
 - 2 5.2. Neue Strukturen in Forschung und Lehre
- 6 6. Handlungsempfehlungen
- 7 7. Anhang
 - 1 7.1. Detaillierte Darstellung der Handlungsempfehlungen
 - 2 7.2. Beteiligte Fachleute

Hochdurchsatztechnologien in der Materialforschung

1 Zusammenfassung

Neuartige und optimierte Funktionsmaterialien sind die Träger jedes technologischen Fortschritts. Um den verkürzten Entwicklungszeiten in einem globalen Umfeld gerecht zu werden, müssen neue Technologien zur effizienteren Materialentwicklung erforscht und erprobt werden. Ein erfolgreiches Beispiel hierfür sind die Hochdurchsatztechnologien. Sie stellen ein Werkzeug zum Erhalt der Wettbewerbsfähigkeit der deutschen Hochtechnologie und zur Unterstützung moderner Felder der Materialforschung dar. Die konsequente Weiterentwicklung und Nutzung der Technologie verschafft Deutschland einen weltweiten Standortvorteil.

Der Weltmarkt für Hochdurchsatztechnologien und die Nachfrage nach entsprechenden Dienstleistungen wird auf ca. 1 Mrd. € pro Jahr geschätzt¹. Die jährlichen Wachstumsraten werden mit beeindruckenden 7% prognostiziert. Ca. 30 % des Umsatzes erwirtschaften kleine, hochspezialisierte Firmen.

In Deutschland wurde 1999 von der DECHEMA ein Positionspapier zur Hochdurchsatztechnologie erarbeitet, auf dem aufbauend im Jahr 2000 durch das BMBF ein Forschungsprogramm zur Förderung interdisziplinärer Projekte initiiert wurde. Die Anschubförderung führte zur Bildung von Hochdurchsatztechnologiekeimzellen in den beteiligten Unternehmen. Eine weitere Verbreitung insbesondere in mittlere und kleinere Unternehmen steht ebenso wie die flächendeckende und nachhaltige Verankerung von Hochdurchsatztechnologie an deutschen Universitäten noch aus.

Im Jahre 2006 gründete sich ein temporärer Arbeitskreis innerhalb von ProcessNet „Hochdurchsatzforschung für Materialien, Katalysatoren und Formulierungen“. Der Arbeitskreis, aus ungefähr gleichen Teilen von Mitgliedern der Industrie und Hochschulen besetzt, leistete durch eine Vielzahl von Aktivitäten Pionierarbeit in der Informationsverbreitung über Hochdurchsatzmethoden auf nationaler Ebene:

- Informationstag für Hochschullehrer (28.3.2007)
- Unterstützung von Konferenzen (5th International Conference on Combinatorial and High-Throughput Materials Science, Kloster Seeon, 28.9.-2.10.2008)
- Ausrichtung einer europäischen Sommerschule „High-Throughput Technologies in Catalysis and Materials Research mit 35 Teilnehmern, Schullandheim Oberthal, 15.-17.9.2008)
- Konzeption preiswerter Praktikumsversuche für Anwendung in Hochschulen

Die erfolgreiche Arbeit des temporären Arbeitskreises wurde 2008 durch die Umwandlung in einen ProcessNet-Arbeitsausschuss auf eine dauerhafte Grundlage gestellt.

Aufbauend auf den oben beschriebenen Rahmenbedingungen und unter Berücksichtigung der auf europäischer Ebene von SusChem erarbeiteten Strategic Research Agenda, die Hochdurchsatztechnologien ebenfalls als ein prioritäres Forschungs- und Entwicklungsgebiet heraushebt, wurden die folgenden sechs Schwerpunkte für zukünftige Aktivitäten identifiziert. Es wird für jedes der Themen eine Priorisierung, zeitliche Abstufung, zu involvierende Akteure und die notwendige finanzielle Unterstützung dargestellt. Eine detaillierte Beschreibung der

1 Frost & Sullivan's Strategic Analysis of the World Combinatorial Chemistry Markets (Report A710)

Aktivitäten und Zielsetzungen findet sich im Anhang. Im Einzelnen wurden folgende Schwerpunkte für zukünftige Handlungsfelder identifiziert:

- I. Wissenschaftliche und instrumentelle Weiterentwicklung von Hochdurchsatztechnologien**
- II. Stärkung der Thematik in Ausbildung und Lehre**
- III. Etablierung von Exzellenzzentren unter Einbindung von Universitäten und KMUs**
- IV. Netzwerkbildung und Förderung des wissenschaftlichen Austauschs zwischen Industrie und Hochschulen**
- V. Verbesserung der Information über Hochdurchsatztechnologien**
- VI. Standardisierung von Apparaten und Software**

2 Einführung

Neuartige und optimierte Funktionsmaterialien, wie z.B. Hochleistungswerkstoffe, maßgeschneiderte Formulierungen oder selektivere Katalysatoren sind die Träger jedes technologischen Fortschritts. Wegen des zunehmenden Wettbewerbs unterliegen sie immer schnelleren Entwicklungszyklen. Um diesen verkürzten Entwicklungszeiten gerecht zu werden, müssen neue Technologien zur effizienteren Materialentwicklung erforscht und erprobt werden. Ein erfolgreiches Beispiel hierfür sind die Hochdurchsatztechnologien.

Hochdurchsatztechnologien zeichnen sich durch schnelle, automatisierte Herstellung von Materialien und sofortige Charakterisierung ihrer Eigenschaften aus. Dies führt zu kürzeren Entwicklungszeiten, höheren Erfolgswahrscheinlichkeiten und besseren Reproduzierbarkeiten. Die damit verbundenen Vorteile im internationalen Wettbewerb haben bei vielen Firmen zum Aufbau von internen Hochdurchsatzaktivitäten (DOW, Dupont, BASF, Bayer, Degussa, Henkel, Exxon Mobile, GE, UOP, BP, etc.) bzw. zu gezielten Firmengründungen (Symyx/USA, Avantium/Niederlande, hte/Deutschland) geführt.

Beispiele für den Einsatz von Hochdurchsatztechnologien sind die Forschung an Katalysatoren, Materialien für Elektronikanwendungen, Kunststoffen, Werkstoffen sowie Formulierungen für Pflanzenschutz, Pharma, Kosmetika, Lacke, Waschmittel und Klebstoffe. Aber nicht nur die Suche nach neuartigen Materialien steht im Vordergrund, sondern in vielen Fällen werden Materialien optimiert oder die Prozesse zu ihrer Herstellung verbessert.

Die Erzeugung einer großen Vielfalt neuer Materialien durch gezielte Variation der chemischen Zusammensetzung und der Prozessführung hat auch zur Erschließung bisher unzugänglicher Parameterräume und damit zu Materialien mit unerwarteten Eigenschaften und somit zu mehr Wissen und der Möglichkeit zur Patentierung geführt.

Hochdurchsatztechnologien stellen somit auch ein Werkzeug zum Erhalt der Wettbewerbsfähigkeit der deutschen Hochtechnologie und zur Unterstützung moderner Felder der Materialforschung, wie z.B. Nano(Bio)materialien, Materialien aus nachwachsenden Rohstoffen sowie für ein nachhaltiges Energiemanagement dar. Der Einsatz dieser Hochtechnologie erfordert die Einstellung von hochqualifiziertem Fachpersonal. Auch in sogenannten Billiglohnländern, wie z.B. China, sind die Personalkosten für diese hoch spezialisierten Fachkräfte mit denen in Europa vergleichbar, weshalb sich durch die konsequente Weiterentwicklung und Nutzung der Technologie insbesondere in Deutschland ein weltweiter Standortvorteil entwickeln kann.

Trotz dieser Perspektive und bereits einiger Erfolge ist eine breite Verankerung von Hochdurchsatztechnologien in der wissenschaftlichen und industriellen Welt, vor allem aber bei KMU, noch nicht erfolgt. Gründe dafür liegen im Fehlen technischer Lösungen für Einzelprobleme sowie in der komplexen Systemintegration. Zudem machen sich der Zwang zu hohen Anfangsinvestitionen sowie der Mangel an gut ausgebildeten Spezialisten in diesem interdisziplinären Feld nachteilig bemerkbar.

3 Wirtschaftliche und wissenschaftliche Bedeutung von Hochdurchsatztechnologien

3.1 Stand der Technik

Automatisierte Technologien der Wirkstoffsuche aus der Pharmaforschung konnten aufgrund erhöhter Anforderungen an die Herstellung und Charakterisierung nur in geringem Maße für die Materialforschung genutzt werden. So werden z.B. höhere Temperaturen, komplexere Materialzusammensetzungen mit aufwendigeren Verarbeitungseigenschaften und unterschiedlichste Testanforderungen benötigt. Dies führte zu einer Vielzahl von zum Teil beeindruckenden Einzelösungen in Spezialgebieten, wie z.B. der Katalyse, die aber nicht oder nur begrenzt breiter eingesetzt werden können.

Eine Entwicklung flexibler und kostengünstiger Module und Systeme, die für verschiedenste Materialien und Anwendungen einsetzbar sind, ist bisher aufgrund der frühen Marktentwicklung nur unzureichend erfolgt.

Die entsprechende Entwicklung von Softwarelösungen zur Planung, Steuerung, Visualisierung und Archivierung von Hochdurchsatz-Experimenten ist wegen der noch höheren Anforderungen an die Systemintegration ebenfalls nur für Einzelfälle und wenig kompatibel realisiert worden.

In den Hochdurchsatztechnologien ist die technologische Entwicklung von Apparaten eng an die gleichzeitige Entwicklung von Software und Computersteuerung gekoppelt. Instrumente zur parallelen Datenauswertung, Data-Mining und Rückkopplung der Daten mit der Planung der Synthese und der Prozessführung wurden in den vergangenen Jahren von spezialisierten IT-Firmen, aber auch von Forschungsdienstleistern weiterentwickelt.

3.2 Der Standort Deutschland im internationalen Vergleich

Hochdurchsatztechnologieaktivitäten wurden zuerst in den **USA** an Spitzenuniversitäten, z.B. UC Berkeley, Anfang bis Mitte der 90er Jahre aufgenommen. Kurz darauf erfolgte der Know-how-Transfer auf die zu diesem Zweck gegründete Firma Symyx, die sich eine weltweit führende Stellung erarbeitet hat. Parallel dazu sind meist über staatliche Förderprogramme Forschungsschwerpunkte in der Großindustrie entstanden (GE, Dupont, Avery-Dennison, Exxon, DOW, UOP etc.). Später engagierten sich auch staatliche Institutionen wie NIST (National Institute of Standards and Technologies), North Dakota State University, University of Iowa, in diesem Arbeitsgebiet. Speziell in der amerikanischen Großindustrie sind Hochdurchsatztechnologien in der Zwischenzeit in umfangreichen Programmen von mehreren 100 Mio. US\$ etabliert.

In **Japan und Korea** konzentrieren sich Hochdurchsatztechnologieaktivitäten auf Materialien für Elektronik- oder Kommunikationsanwendungen mit breiter staatlicher Förderung.

In **Europa** engagierte sich als erstes die Großindustrie (Hoechst, Bayer, Siemens, BASF, Shell) zunächst insbesondere in Projekten mit Dienstleistern, wie z.B. Symyx, ab 1998 allerdings vorwiegend in internen Hochdurchsatzprojekten. Parallel dazu erfolgte die Gründung erster europäischer Start-up Unternehmen wie z.B. hte/D; Avantium/NL oder Accelab/D.

Begleitet wurde dies durch öffentliche Förderprogramme, wie z.B. das Projekt TOPCOMBI im 6. Rahmenprogramm der EU, die wiederum Aktivitäten in Firmen und Universitäten initiierten. Besonders zu nennen ist das niederländische Dutch Polymer Institute (DPI), das sich zu **dem** europäischen Hochdurchsatzzentrum mit vielen Mitgliedern aus Industrie und Hochschule entwickelte. Ein neuer Ansatz für ein Hochdurchsatzzentrum mit Mitgliedern aus Industrie und Hochschule ist FLAMAC (Flanders Materials Centre) in Belgien. In Großbritannien versucht Insight Faraday, Hochdurchsatzprojekte zu katalysieren.

In **Deutschland** wurden im Jahr 2000 durch das BMBF in einem Forschungsprogramm interdisziplinäre Projekte für Hochschule und Industrie initiiert. Mittlerweile sind diese Projekte erfolgreich beendet. Die Anschubförderung führte zur Bildung von Hochdurchsatztechnologie-keimzellen in den beteiligten Unternehmen. Damit gelang es diesen zwar, eine in Europa führende Stellung bei der Entwicklung und dem Einsatz von Hochdurchsatztechnologien einzunehmen. Eine weitere Verbreitung insbesondere in mittlere und kleinere Unternehmen war aber nicht Zielsetzung dieser Projekte und steht ebenso wie die flächendeckende und nachhaltige Verankerung von Hochdurchsatztechnologie an deutschen Universitäten noch aus.

Gelingt es nicht, die Hochdurchsatztechnologie in Forschung und Entwicklung in der Industrie und in den Hochschulen weiter zu etablieren, ist der schwindende, aber durchaus noch existierende Vorsprung gegenüber dem europäischen Ausland nicht zu halten.

3.3 Wirtschaftliches Potential

Der Aufbau von Wissen und größerer Innovationsfähigkeit ist vor dem Hintergrund globaler Arbeitsplatzverlagerungen die Voraussetzung für die Sicherung von Arbeitsplätzen und künftigem Wachstum in Deutschland. Innovative Technologien zur Erarbeitung eines Know-how-Vorsprungs in zukunftsfähigen Geschäftsfeldern können dazu entscheidend beitragen.

Hier können Hochdurchsatztechnologien durch die automatisierte und damit effiziente, schnelle und reproduzierbare Entwicklung neuer Materialien und Formulierungen eine maßgebliche Rolle spielen. Neue und wesentlich komplexere Produkte aus der ganzen Wertschöpfungskette und verschiedensten Marktsegmenten können schneller an den Markt gebracht werden, bzw. ein breiterer und länger nutzbarer Patentschutz erreicht werden. Neue oder verbesserte Stoffe zeigen Auswirkungen auch in andere Industriebereiche. In der Kommunikationstechnologie oder Energietechnik wären z.B. zahlreiche Entwicklungen der letzten Jahre ohne neue Materialien nicht möglich gewesen.

Durch die schnelle und breitere Gewinnung von Daten und Information ist es außerdem möglich, die oft risikoreichen Forschungs- und Entwicklungsprojekte früher und objektiver zu beurteilen und damit die Kosten deutlich zu reduzieren.

Neben dem wirtschaftlichen Potential von neuen Materialien und Formulierungen ist es auch möglich, das wirtschaftliche Potential aus der Herstellung und dem Vertrieb von Hochdurchsatzapparaturen und -anlagen, Daten-Management und Dienstleistungen auszunutzen. Die notwendigen Disziplinen Maschinenbau, Robotik, Datenverarbeitung und Chemie bilden in Deutschland starke und innovative Industriebereiche. Durch gemeinsame Anstrengungen von Unternehmen aus diesen Bereichen lässt sich eine weltweit führende Stellung erreichen und verteidigen.

Nach Schätzungen von UBS Warburg können für das Jahr 2010 für Westeuropa Umsätze für Hochdurchsatzapparaturen von über 400 Mio € abgeleitet werden. Hinzuzurechnen ist natürlich noch der wirtschaftliche Vorteil, den die Anwender aus dem Betrieb dieser Anlagen erzielen. Dieser ist naturgemäß um ein Vielfaches höher als die Investitionen von 400 Mio €.

Der Weltmarkt für Hochdurchsatztechnologien und die Nachfrage nach entsprechenden Dienstleistungen wird weltweit auf ca. 1 Mrd. € pro Jahr geschätzt¹. Die jährlichen Wachstumsraten werden mit 7% prognostiziert. Insbesondere kleine, hoch spezialisierte Firmen erwirtschaften ca. 30 % des Umsatzes für Produkte und Dienstleistungen im Bereich der Hochdurchsatztechnologien.

Eine tiefer gehende Durchdringung des Marktes mit der Technologie setzt jedoch die erfolgreiche Absenkung der Einstiegshemmnisse voraus. Um die Technologie insbesondere auch für KMU interessant zu machen, muss die Flexibilität der Anlagen erhöht werden bei gleichzeitiger Reduzierung des Systempreises. Dies lässt sich nur durch eine weitergehende Standardisierung der Komponentenschnittstellen sowie der zentralen Hard- und Softwarearchitektur erreichen.

3.4 Wissenschaftliches Potential

Die automatisierte parallele Durchführung einer Vielzahl von Experimenten unter identischen Bedingungen mit Hilfe von Hochdurchsatztechnologien hat bedeutende wissenschaftliche Auswirkungen. Das Verhalten vieler Materialien wie Katalysatoren oder auch Formulierungen wird nämlich nicht nur von der Art, Struktur und Zusammensetzung der Stoffe bestimmt, sondern auch durch Herstellungs- und Prozessbedingungen wie Temperatur, Feuchtigkeit oder Prozesshilfsmittel. Diese Vielfalt an Parametern macht die vollständige Charakterisierung über den gesamten Parameterraum sehr aufwendig und die Ableitung von Struktur-Eigenschafts-Beziehungen schwierig. Durch die Hochdurchsatztechnologie können diese viel dimensional Parameteräume nun sehr schnell vergleichbar und reproduzierbar erfasst werden.

Die deutlich vergrößerte Datenbasis erlaubt über spezielle Auswerteverfahren die Erschließung neuer Struktur-Eigenschafts-Beziehungen, die für Materialien bisher kaum bekannt sind. Wesentliche, für die wissenschaftliche Beschreibung notwendige Deskriptoren können viel schneller und fundierter abgeleitet werden als mit konventionellen Methoden. Auch die Analyse nichtlinearer Wechselwirkungen, z.B. zwischen verschiedenen Einsatzstoffen oder Dotierungen, die gemeinsam eine gewünschte Materialeigenschaft stärker verbessern als addierte Einzeleffekte, können mittels Hochdurchsatzverfahren wesentlich effizienter erfolgen.

Somit wird die wissenschaftliche Leistungsfähigkeit durch die größere Datenbasis und die verbesserte Reproduzierbarkeit verstärkt und ein besseres Verständnis komplexer Materialsysteme ermöglicht.

4 Erfolgsbeispiele

4.1 Anwenderindustrien

Hochdurchsatztechnologien werden von **Groß- und Mittelunternehmen** in frühen Phasen der Materialforschung eingesetzt, um so Zeit und Kosten zu sparen.

Obwohl die Hochdurchsatzforschung eine relativ junge Technologie ist und es Jahre dauert, bis ein Produkt seinen Weg in den Markt findet, sind bereits erste Erfolgsbeispiele veröffentlicht.

Die folgende Liste soll einen groben Überblick verschaffen und erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit. Naturgemäß verhalten sich viele Firmen sehr zurückhaltend bei der Veröffentlichung von Erfolgsbeispielen. Dies gilt besonders für intern verwendete optimierte Materialien und Prozesse, z.B. für effizientere Katalysatoren und komplexe Formulierungen.

- Agfa (Symyx) Radiographie-Detektor DirectriX
- DOW (Symyx) Katalysator für Versify* Elastomere
- Arkema Silyl-Additiv für Anti-Fouling-Schiffsanstriche
- DOW Katalysator für asymmetrische Hydrierung
- Katalysator für Polypropylen (SHAC®)
- UOP C5-C6-Isomerisierungskatalysator
- GE Katalysator für Monomerproduktion für Polycarbonat

- BASF (hte) heterogener Katalysator für Zwischenprodukte

4.2 Hochdurchsatzfirmen oder -dienstleister

Das Geschäftsmodell solcher Firmen basiert auf gezielter Auftragsforschung, der Entwicklung und dem Verkauf von Geräten, Apparaturen und Software für Hochdurchsatztechnologien sowie der Vermarktung eigener Entdeckungen.

Weltweit existieren nur wenige Firmen wie z.B. Symyx, hte, Chemspeed, Zinser, Amtec, Manz-Automation, Avantium, Bosch Lab Systems oder Accelry. Sie bieten einzelne Hochdurchsatz-"Workflows" mit der dazu gehörigen Software an. Die Anwendungsexpertise ist auf Teilbereiche der Materialforschung fokussiert.

Ein weiteres Indiz für die erfolgreiche Anwendung von Hochdurchsatztechnologien ist die Zahl von verkauften Apparaturen und Geräten. Integrierte Hochdurchsatzsysteme mit Preisen von teilweise mehreren Mio. € sind von Symyx, hte, Bosch, Accelab oder Chemspeed z.B. für die Katalysatorforschung, Lackformulierung, Polymorphismusuntersuchungen etc. geliefert worden. Darüber hinaus sind viele modifizierte Anlagen mit automatischer Feststoff- und Flüssigkeitsdosierung ebenso wie Parallelreaktoren in zahlreichen Materialforschungslaboratorien im Einsatz.

4.3 Forschungsinstitute

Erfolgreiche Institute wie NIST in den USA oder DPI in den Niederlanden haben frühzeitig die Herausforderungen der Hochdurchsatztechnologien bezüglich Komplexität, Interdisziplinarität und Standvermögen angenommen und ihre Organisation, Finanzierung und Kundenbeziehungen entsprechend ausgerichtet. Die Wissenschaftler in diesen Instituten werden durch die hohe Komplexität der Technologie und der stark interdisziplinären Zusammenarbeit gefordert und gefördert. Durch die Zusammenführung von Fördermitteln, Mitarbeitern und Geräten aus Industrie **und** öffentlicher Hand gelang es, in kurzer Zeit schlagkräftige Hochdurchsatzzentren zu schaffen. In Belgien wurde Anfang 2006 ein weiteres Hochdurchsatzforschungsinstitut FLAMAC gegründet. Mit dem Ziel, den Zugang zur Technologie auch für kleinere Firmen und Institute zu ermöglichen, widmet sich FLAMAC der Integration von Systemen verschiedener Hersteller, insbesondere in dem Bereich Formulierungen. In Deutschland ist mit der Gründung des CELISCA-Instituts ein Forschungszentrum gegründet worden, dass mit seinem innovativen, interdisziplinären Aufbau deutliche Akzente im Bereich der angewandten Automatisierungstechnik setzen wird.

5 Herausforderungen und Hemmnisse

Trotz aller Vorteile von Hochdurchsatztechnologien sind Vorurteile und Missverständnisse zu diesem Thema in Industrie und Hochschule nach wie vor sehr verbreitet.

In den Anfängen der Entwicklung von Hochdurchsatztechnologien wurde ihr Einsatz zur Entwicklung komplexer Materialien oder zur beschleunigten Produktformulierung als völlig ungeeignet angesehen. Als Gründe hierfür wurden unzulässige Miniaturisierung, übertriebene Vereinfachung von Abläufen, reine Parallelisierung ohne Einbindung empirischen Wissens etc. angegeben.

Im Gegensatz zu diesen negativen Erwartungen war gerade die Komplexität dieser Anwendungen eine ideale Herausforderung für den zielgerichteten Einsatz von Hochdurchsatztechnologien. Es zeigte sich, dass insbesondere für diese hoch komplexen Systeme sehr erfolgreich neue und optimierte Lösungen gefunden werden können.

5.1 Finanzielle Aspekte

Die Einführung von Hochdurchsatztechnologien ist mit einer hohen finanziellen Eintrittsbarriere und beträchtlichen Folgekosten verbunden. Dies kann hohe Investitions- und Personalkosten bei Inhouse-Projekten oder auch hohe Projektkosten bei einer Zusammenarbeit mit einem Hochdurchsatzdienstleister bedeuten.

Da schnelle Erfolge wegen der Komplexität von Hochdurchsatztechnologien meist nicht erreicht werden, müssen die Projekte gründlich und vollständig geplant und über die Einbettung in wichtige Produktgruppen bzw. Forschungsvorhaben langfristig finanziert werden.

Ebenso erfordert die interdisziplinäre Zusammenarbeit eine kritische Masse an Spezialisten, die entweder teuer oder nicht verfügbar sind. Erst dann können Vorteile wie beschleunigte Entwicklung und Reduktion der Kosten pro Probe realisiert werden.

5.2 Ausbildung und Lehre

In akademischen Laboratorien verhindern oftmals die Begrenzung der Investitionsmittel und der Anzahl von permanenten Mitarbeitern sowie die schwierige interdisziplinäre Zusammenarbeit über mehrere Institute hinweg die Anschaffung und sinnvolle Nutzung komplexer Hochdurchsatz-Anlagen. Die Stärke akademischer Laboratorien, der Zugang zu kreativen jungen Wissenschaftlern, ist auch deren Schwäche, da mit jedem die Gruppe verlassenden Mitarbeiter Expertenwissen verschwindet.

Durch den geringen Verbreitungsgrad von Hochdurchsatztechnologien an Universitäten werden diese in Ausbildung und Lehre oftmals nur randständig behandelt. Als Folge davon verharrt die Anzahl spezialisierter Absolventen für die Industrie weiter auf niedrigem Niveau, und es kommt kein weiterer Impuls zur Verbreitung von Hochdurchsatztechnologien aus den Universitäten heraus.

Der ProceNet-Arbeitsausschuss „Hochdurchsatzforschung für Materialien, Katalysatoren und Formulierungen“ hat einen Schwerpunkt seiner Tätigkeit in dem Bereich Ausbildung und Lehre angesiedelt. Um Studenten, auch an Universitäten, die selbst über keine aktive Hochdurchsatzaktivitäten zu erreichen, hat der Arbeitsausschuss einen Satz von Experimenten entwickelt, der Aspekte der kombinatorischen und hochdurchsatzorientierten Arbeitsweise darstellt und dabei preislich für ein Hochschullabor erschwinglich ist. Es ist geplant, diesen Satz an Experimenten auf Anfrage in Form eines „Koffers“ auch physisch zu Verfügung zu stellen und an Hochschulen zu verleihen. Diese Experimente bildeten einen integralen Bestandteil der europäischen Sommerschule „High-Throughput Technologies in Catalysis and Materials Research“, die der Arbeitsausschuss im September 2008 im Schullandheim Oberthal im Saarland ausrichtete.

6 Handlungsempfehlungen

Ziel des verstärkten Einsatzes von Hochdurchsatztechnologien ist es, neue Materialien kostengünstig und mit verkürzten Entwicklungszeiten herzustellen. Diese Materialien bilden die Basis für innovative Produkte am Markt, die die Stärke der auf Hochtechnologie basierenden deutschen Volkswirtschaft begründen.

Aufbauend auf der Analyse der Bedeutung von Hochdurchsatztechnologien für die wissenschaftliche und wirtschaftliche Entwicklung der F&E-Landschaft in Deutschland und den oben beschriebenen Rahmenbedingungen wurden sechs Schwerpunkte für zukünftige Aktivitäten identifiziert. Es wird für jedes der Themen eine Priorisierung, zeitliche Abstufung, zu involvierende Akteure und die notwendige finanzielle Unterstützung in grafischer Form dargestellt. Eine detaillierte Beschreibung der Aktivitäten und Zielsetzungen findet sich im

Anhang. Im einzelnen wurden folgende Schwerpunkte für zukünftige Handlungsfelder identifiziert:

- I. Wissenschaftliche und instrumentelle Weiterentwicklung von Hochdurchsatztechnologien**
- II. Stärkung der Thematik in Ausbildung und Lehre**
- III. Etablierung von Exzellenzzentren unter Einbindung von Universitäten und KMUs**
- IV. Netzwerkbildung und Förderung des wissenschaftlichen Austauschs zwischen Industrie und Hochschulen**
- V. Verbesserung der Information über Hochdurchsatztechnologien**
- VI. Standardisierung von Apparaten und Software**

7 Anhang

7.1 Detaillierte Darstellung der Handlungsempfehlungen

I. Stärkung der Thematik in Ausbildung und Lehre

Zielsetzung

Kombinatorisches und im Sinne von Hochdurchsatztechnologien „paralleles“ Denken soll in Lehre und Ausbildung an den Hochschulen etabliert werden. Hierzu muss die Thematik Hochdurchsatzforschung in die Vorlesungen an Hochschulen integriert werden.

Maßnahmen

Integration von Hochdurchsatzthemen in die Lehrpläne der Universitäten. Organisation von Vortragsreihen mit Beispielen aus der industriellen und akademischen Praxis. Entwicklung von kostengünstigen Praktikumsversuchen zu Hochdurchsatztechniken in Kombination mit Ausstattungsunterstützung durch öffentliche Mittel.

Priorität

Essentiell.

Die angestrebten Maßnahmen sollen in direkter Verbindung mit den unter II. vorgeschlagenen Aktivitäten durchgeführt werden.

Zeitraumen

Die vorgeschlagenen Aktivitäten sollen den Zeitraum 2007 – 2011 umfassen.

Adressaten

Die in dem Gebiet aktiven Hochschullehrer sollen Aspekte von Hochdurchsatztechnologien in die Vorlesungen integrieren. Als erster Ansatzpunkt soll dieses von den im DECHEMA-Arbeitskreis Hochdurchsatzforschung für Materialien, Katalysatoren und Formulierungen vertretenen Hochschullehrern umgesetzt werden. Über die entsprechenden Gremien der GDCh und der DECHEMA soll die Aufnahme der Thematik als Standard in den Chemievorlesungen an deutschen Hochschulen erreicht werden. Die Entwicklung von Geräten und Versuchsvorschriften, die für den Einsatz in Praktikumsversuchen geeignet sind, soll durch Industrie und öffentliche Mittel gefördert werden.

Bisher erzielte Ergebnisse

Der ProcesNet-Arbeitsausschuss „Hochdurchsatzforschung für Materialien, Katalysatoren und Formulierungen“ hat einen Satz von Experimenten entwickelt, der Aspekte der kombinatorischen und hochdurchsatzorientierten Arbeitsweise darstellt und dabei preislich für ein Hochschullabor erschwinglich ist. Es ist geplant, diesen Satz an Experimenten auf Anfrage in Form eines „Koffers“ auch physisch zu Verfügung zu stellen und an Hochschulen zu verleihen. Diese Experimente bildeten einen integralen Bestandteil der europäischen Sommerschule „High-Throughput Technologies in Catalysis and Materials Research“, die der Arbeitsausschuss im September 2008 im Schullandheim Oberthal im Saarland ausrichtete.

II. Wissenschaftliche und instrumentelle Weiterentwicklung von Hochdurchsatztechnologien

Zielsetzung

Hochdurchsatztechnologien sollen als Routinewerkzeug in den Forschungslabors an Universitäten und in der Industrie etabliert werden. Insbesondere an den Hochschulen soll eine nachhaltige Verankerung der Technologie erzielt werden. Ziele sind u.a. die Verarbeitung hochviskoser Materialien, die Durchführung von Formulierungen unter Kontrolle der Teilchengröße, der Oberflächeneigenschaften und der Kompatibilität der verschiedenen Einsatzstoffe. Darüber hinaus müssen Techniken wie z.B. Beschichten, Einbrennen, Vernetzen, Oberflächenpassivieren usw. für den Einsatz in Hochdurchsatzapparaturen adaptiert werden. Ein weiteres wichtiges Entwicklungsgebiet für die nächsten Jahre ist die Übertragung und Entwicklung von Informationstechnologien für die Materialforschung. Hierbei ist vor allen Dingen auf eine Standardisierung der Schnittstellen zwischen verschiedenen Anwendungen und Komponenten hinzuwirken.

Maßnahmen

Es müssen Forschungs- und Entwicklungsarbeiten hinsichtlich der wissenschaftlichen Weiterentwicklung und experimentellen Erprobung von Hochdurchsatztechnologien durchgeführt sowie eine optimierte Instrumentierung und eine einfach zu adaptierende intelligente Datenauswertung im Rahmen von Kooperationsprojekten zwischen Hochschulen und der Industrie entwickelt werden.

Zur nachhaltigen Einführung von Hochdurchsatztechnologien an den Hochschulen muss die Förderung an strukturelle Forderungen gekoppelt werden, die die Etablierung eines entsprechenden kombinatorischen Umfeldes vorsieht. An den Hochschulen müssen parallel zur Förderung von Forschungsaktivitäten sinnvolle interdisziplinäre und institutsübergreifende Arbeitsstrukturen zur effizienten Nutzung von Hochdurchsatztechnologien etabliert werden. Neben der Anschaffung und dem Einsatz des notwendigen Instrumentariums sind adäquate Arbeitsmodelle an den Hochschulen einzurichten, die eine kontinuierliche und langfristige personelle Betreuung zum fachgemäßen Betrieb von Hochdurchsatzanlagen ermöglicht. Ggf. kann die Etablierung von Hochdurchsatztechnologien auch als Serviceabteilung analog der gängigen Praxis gemeinsam genutzter NMR- oder MS-Geräte (resource-sharing) in den chemischen und materialwissenschaftlichen Fakultäten an den Hochschulen realisiert werden.

Priorität

Essentiell

Die angestrebten Maßnahmen sollen in direkter Verbindung mit den unter I. vorgeschlagenen Ausbildungsaktivitäten durchgeführt werden.

Zeitraum

Die vorgeschlagenen Aktivitäten sollen baldmöglichst angegangen werden und den Zeitraum 2007 – 2011 umfassen.

Adressaten

Aufgrund der hohen Anwendungsrelevanz der Thematik sollen die geplanten Aktivitäten durch das BMBF und ggf. durch Forschungstiftungen, wie z.B. die VW Stiftung gefördert werden. Eine Abstimmung mit geplanten Ausschreibungen im 7. Forschungsrahmenprogramm der EU ist zwingend erforderlich.

III. Etablierung von Exzellenzzentren

Zielsetzung

Den hohen Kosten von Hochdurchsatztechnologielabors kann durch die Einrichtung geeigneter Zentren und die Öffnung der Technologien für externe Nutzung begegnet werden. Hochdurchsatztechnologien werden von großen Unternehmen der Chemie bereits routinemäßig eingesetzt. Eine weitere Verbreitung in forschungsintensive KMU und Institute/Hochschulforschergruppen soll erreicht werden.

Maßnahmen

Ausgehend von den vorhandenen Strukturen an den Hochschulen und Forschungsinstituten sollen tragfähige Geschäftsmodelle und Anwendungsgebiete zur Etablierung von Exzellenzzentren in den Hochdurchsatztechnologien identifiziert werden. Ziel dieser Exzellenzzentren ist es, weltweite Spitzenforschung im Gebiet der Hochdurchsatztechnologien durchzuführen und den Standort Deutschland als führend in dem Gebiet zu etablieren. Die Gründung der Exzellenzzentren soll durch eine Anschubfinanzierung eines öffentlichen Förderers und unterstützende Finanzmittel der Industrie ermöglicht werden. Diese Zentren sollen in komplette kommerzielle „workflows“ investieren (Hardware und Software), die dort betrieben und gegen Gebühr externen Nutzern befristet zur Verfügung gestellt werden.

Priorität

Sehr hoch

Zeitraumen

Die Diskussion zur Bildung von Exzellenzzentren sollte baldmöglichst mit Vertretern aus der Industrie, aus Forschungsinstituten und Hochschulen sowie Förderorganisationen begonnen werden. Die Gründung von Exzellenzzentren könnte ab 2009 realisiert werden.

Adressaten

Eine enge Kooperation zwischen der Industrie, Forschungseinrichtungen und der öffentlichen Hand ist notwendig. Als Ansprechpartner der ersten beiden genannten Gruppen können die Mitglieder des DECHEMA-Arbeitskreises Hochdurchsatzforschung für Materialien, Katalysatoren und Formulierungen dienen. Von Seiten öffentlicher Förderer soll das BMBF, die DFG und ggf. auch die EU mit in die Diskussion eingezogen werden.

IV. *Netzwerkbildung und Förderung des wissenschaftlichen Austauschs zwischen Industrie und Hochschule*

Zielsetzung

Der Erfahrungsaustausch zwischen Forschern aus der Industrie und den Hochschulen ist für die Weiterentwicklung der Hochdurchsatztechnologie und eine breitere Etablierung in Forschung und Lehre essentiell.

Maßnahmen

Es soll eine Plattform für diesen Erfahrungsaustausch geschaffen werden. Die Plattform soll der Vertrauensbildung dienen, um den für eine nachhaltige und fruchtbare Kooperation notwendigen Datenaustausch und eine bestmögliche Informationsoffenheit zu erreichen. Nationale und Internationale Kongresse sollen diesen Erfahrungsaustausch unterstützen. Neben dem internen Informationsaustausch soll diese Plattform auch aktiv die Zusammenarbeit und den Informationsaustausch mit Gebieten suchen, in denen eine Anwendung von Hochdurchsatzmethoden möglich wäre, wie z.B. Polymere, Mikroverfahrenstechnik..

Priorität

Sehr hoch.

Zeitraumen

2007 -2012

Adressaten

Die Netzwerkbildung ist auf nationaler Ebene bereits durch die Gründung des DECHEMA-Arbeitskreises „Hochdurchsatzforschung für Materialien, Katalysatoren und Formulierungen“ initiiert worden.

Bisher erzielte Ergebnisse

Der temporärer Arbeitskreis wurde in einen permanenten ProcessNet-Arbeitsausschuss umgewandelt.

V. Verbesserung der Information über Hochdurchsatztechnologien

Zielsetzung

Erhöhung der Akzeptanz bei Forschern in Hochschulen und der Industrie. Stärkung des Interesses bei Studenten für die Thematik.

Maßnahmen

Zur Verbreitung der Thematik in der Fachöffentlichkeit sollen Vortragsreihen organisiert werden. Des Weiteren kann durch die Organisation und Durchführung von Laborbegehungen insbesondere in der chemischen Industrie für Schülergruppen und Studenten ein höherer Bekanntheitsgrad der Technologie bei jungen Wissenschaftlern erzielt werden.

Darüber hinaus bieten Sommerschulen, die speziell für Nachwuchswissenschaftler geeignet sind und die Organisation einer Hochdurchsatztechnologiekonferenz, die entsprechend den bisherigen Gordon Konferenzen organisiert ist, und Fachleute aus Industrie und Hochschule in einem nicht-öffentlichen Umfeld zu intensiver Diskussion von Fachthemen zusammenbringt, ein hohes Potential zur wissenschaftlichen Förderung der Thematik.

Priorität

Sehr hoch.

Zeitraumen

Die Organisation von Vortragsreihen soll baldmöglichst beginnen.

Adressaten

Als erster Ansatzpunkt werden von dem DECHEMA-Arbeitskreis Hochdurchsatzforschung für Materialien, Katalysatoren und Formulierungen zwei Veranstaltungen im Jahr 2006 organisiert. Weitere Veranstaltungen sollen ggf. auch gemeinsam mit anderen europäischen Netzwerken und Organisationen (z.B. Royal Society of Chemistry, Insight Faraday) geplant und umgesetzt werden. Die DECHEMA wird sich mit anderen Organisationen in Europa und international über die Organisation von Sommerschulen und Konferenzen austauschen.

Bisher erzielte Ergebnisse

Das Konzept für eine Sommerschule wurde im September 2008 vom Arbeitsausschuss umgesetzt. Die Nachfolgekonzferenz zur Gordon-Reihe fand im September/Oktobre 2008 in Kloster Seeon statt. Die Konferenz war sehr erfolgreich und die notwendigen Maßnahmen zu der Fortsetzung der Reihe wurden auf internationaler Ebene eingeleitet.

VI. *Standardisierung von Apparaten und Software*

Zielsetzung

Eine Standardisierung von zentralen Apparaten und Software in der Hochdurchsatzforschung ist notwendig, um die Wirtschaftlichkeit und die Geschwindigkeit der Implementierung zu erhöhen und eine Kostenreduzierung zu bewirken. Eine Interaktion mit nationalen und internationalen Normungsorganisationen (DIN, CEN) wird angestrebt.

Maßnahmen

Erarbeitung eines Katalogs mit Vorschlägen zur Standardisierung von Geräten und Software. Diskussion des Vorschlagkatalogs mit Anwendern und Herstellern und Erarbeitung eines abgestimmten Vorschlags. Anschließend ist die Umsetzung der Ergebnisse durch die Hersteller und die Systemintegratoren geplant. Parallel soll der Kontakt zu Standardisierungsorganisationen (DIN, CEN) aufgenommen werden.

Priorität

Hoch

Zeitraumen

In einem ersten Schritt sollen bis 2009 deutsche Firmen einen gemeinsamen Vorschlag zur Standardisierung erarbeiten. Eine Diskussion auf internationaler Ebene kann anschließend begonnen werden.

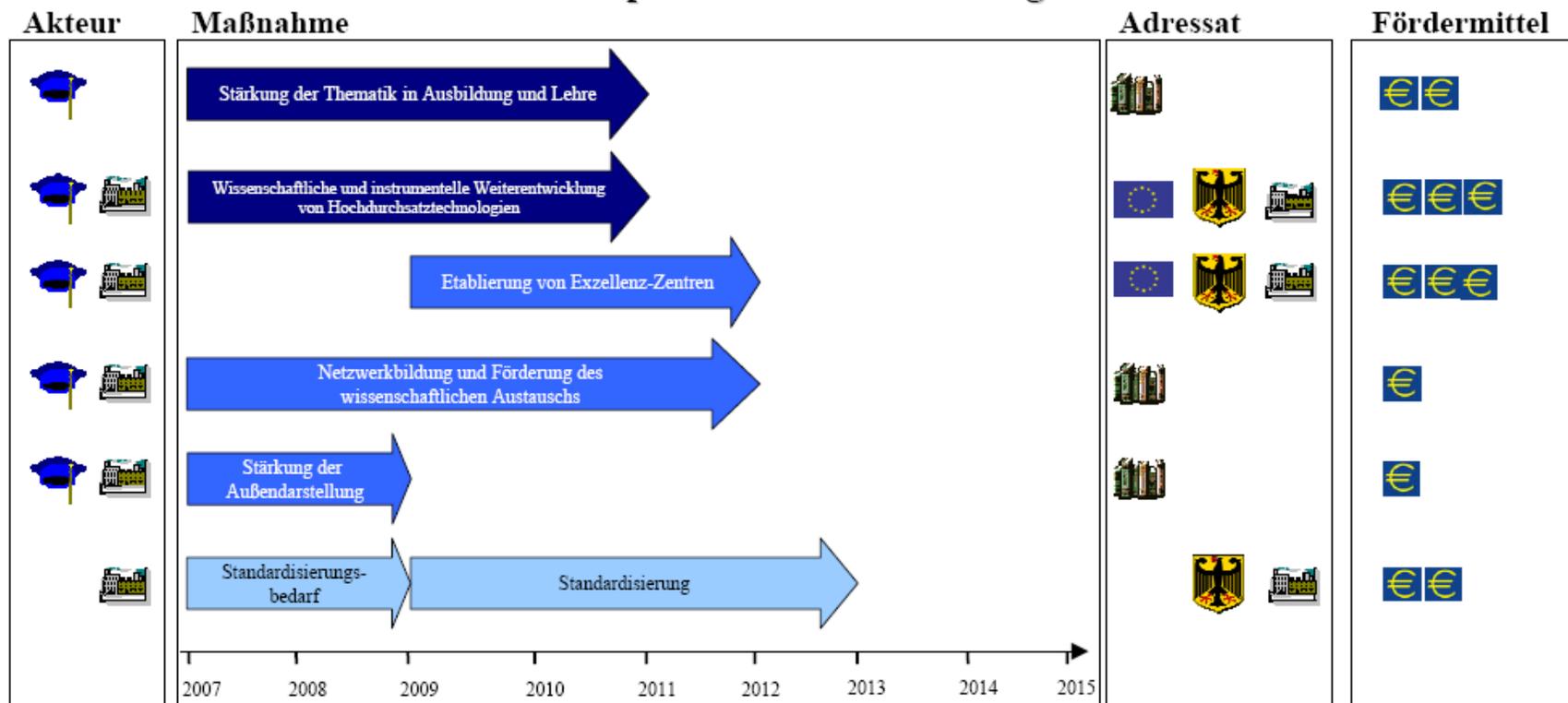
Adressaten

Alle in dem Bereich Hochdurchsatztechnologie aktiven Firmen, sowohl als Anwender als auch als Dienstleister. In einem ersten Schritt sollen die im DECHEMA-Arbeitskreis Hochdurchsatzforschung für Materialien, Katalysatoren und Formulierungen vertretenen Firmen einen gemeinsamen Standpunkt erarbeiten. Parallel soll ein direkter Kontakt zu DIN und zu einem späteren Zeitpunkt zu CEN/ISO aufgebaut werden.

An der Ausarbeitung des Positionspapiers waren folgende Fachleute beteiligt:

Dr. Florian **Ausfelder** DECHEMA e.V. Theodor-Heuss-Allee 25 60486 Frankfurt
Dr. Thomas **Brinz** Robert Bosch GmbH PA/PJ-BLS Stuttgarter Str. 130 71332 Waiblingen
Prof. Dr. Peter **Claus** TU Darmstadt Ernst-Berl-Institut, TC II Petersenstr. 20 64287 Darmstadt
Dr. Dirk **Demuth** hte Aktiengesellschaft Kurpfalzring 104 69123 Heidelberg
Dr.-Ing. Uwe **Dingerdissen** Leibniz Institut für Katalyse e.V. Richard-Willstätter-Str. 12 12489 Berlin
Dr. Andreas **Förster** DECHEMA e.V. Theodor-Heuss-Allee 25 60486 Frankfurt
Prof. Dr. Günter **Gaiglitz** Universität Tübingen Institut für Physikalische und Theoretische Chemie Auf der Morgenstelle 8 72076 Tübingen
Prof. Dr. Wilhelm F. **Maier** Universität des Saarlandes Lehrstuhl für Technische Chemie Am Stadtwald 66123 Saarbrücken
Prof. Dr. Rolf **Mülhaupt** Albert-Ludwigs-Universität Freiburg Inst. für Makromolekulare Chemie Hermann-Staudinger-Haus Stefan-Meier-Str. 31 79104 Freiburg freiburg.de
Dr. Stephan **Nowak** Bayer MaterialScience AG CAS-INN-PH-LP Q 23 51368 Leverkusen
Dr. Thomas **Riermeier** Degussa AG Degussa Homogeneous Catalysts Rodenbacher Chaussee 4 63457 Hanau
Dr. Marc-Steffen **Schiedel** Henkel KGaA VTD-Zentrale Analytik, Geb. Z43 40191 Düsseldorf
Dr. Wolfgang **Schrof** BASF Aktiengesellschaft GKP/C - B001 67056 Ludwigshafen
Prof. Dr. Ulrich **Simon** RWTH Aachen Lehrstuhl für Anorganische Chemie und Elektrochemie Landoltweg 1 52074 Aachen
Prof. Dr. Norbert **Stock** Universität Kiel Anorganische Chemie Otto-Hahn-Platz 6-7 24098 Kiel
Dipl.-Ing Frank **Teuber** Beiersdorf AG Product Development Pilot Plant Unnastr. 48 20245 Hamburg
Dr. Berit **Wessler** Siemens AG Abt.: CT MM 2 Otto-Hahn-Ring 6 81739 München
Dr. Martin **Winter** accelab GmbH Laborautomation Lustnauer Str. 78 72127 Kusterdingen
PD Dr. Horst-Werner **Zanthoff** Degussa AG S-TE-VT-R Paul -Baumann-Str. 1 45764 Marl

Roadmap Hochdurchsatztechnologien



Die graphische Darstellung der Handlungsempfehlungen zeigt die Aktivitätsfelder, Akteure, Adressaten, benötigte Finanzmittel und eine zeitliche Priorisierung.

Akteure: Wer ist aktiv



Akademia: Von der Grundlagenforschung bis zu ersten Anwendungsbeispielen



Industrie: Von ersten Anwendungen bis zur Marktdurchdringung

Adressaten: Wer soll fördern und unterstützen



Europäische Union



Bundesministerium für Bildung und Forschung



Industrie



Wissenschaftliche Gesellschaften

Priorität: Wo ist der höchste Bedarf



essentiell



sehr hoch



hoch

Fördermittel: Wieviel Unterstützung wird benötigt



< 1 Mio Euro



1 – 10 Mio Euro



> 10 Mio Euro