

Die (langen) Wege vom Grundlagenexperiment bis zum Prozess oder Material

Der Profilbereich „Molecular Science & Engineering“ (MSE)

Die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler im Profilbereich „Molecular Science & Engineering“ (MSE) arbeiten an der Schnittstelle der Natur- mit den Ingenieur- und Lebenswissenschaften, die die Disziplinen Chemie, Biologie, Physik, Verfahrenstechnik, Maschinenbau und Medizin verknüpft. Die Forschung generiert Grundlagenwissen und schafft technologisches Know-how für das Design und die Entwicklung von molekularen Transformationen, Prozessen und Materialien. Diese gehen über alle Größenskalen hinweg und interagieren, um komplexe und langfristig adaptive Systeme zu bilden. Damit schafft der Profilbereich eine Grundlage für Innovation und nachhaltige Entwicklung in vielfältigen Applikationsfeldern. Die globalen Herausforderungen in den Bereichen Gesundheit, Ernährung, Energie und Umwelt stehen im Mittelpunkt.

Die Forschungsprojekte sind den beiden Schwerpunkten „Molecular Transformation“ und „Soft Matter/Interactive Materials“ zugeordnet. Dabei wird zunehmend deutlich, dass die Grenzen verschwimmen und eine Anstrengung zur Integration vom molekularen Verständnis der Stoffumwandlung und des Materials in komplexen Prozessen und Systemen notwendig ist. Während Prozesse zur molekularen Stoffumwandlung und das Design funktionaler Materialien auf stationäre Zustände und dauerhafte Performance unter optimalen Bedingungen ausgerichtet sind, ermöglichen adaptive Systeme selbstregulierend eine Anpassung oder Optimierung. Dieses Prinzip ist für synthetische Systeme bisher bestenfalls in Ansätzen zu erkennen. Die Biologie liefert das natürliche Vorbild für

adaptive Systeme, die sich auf molekularer Ebene selbst organisieren und auf Umweltveränderungen reagieren. Die Biotechnologie macht sich die Möglichkeit des Eingriffs in die zellulären Abläufe seit jeher zunutze. Die Synthetische Biologie als eine Ausprägung der Biotechnologie befasst sich mit dem gezielten Engineering molekularer Wechselwirkungsnetzwerke in Zellen und zellfreien Systemen, um damit nützliche Funktionalitäten zu erzeugen. Dabei spielen adaptive metabolische Prozesse, molekulare Schaltkreise und Mikrokompimente eine entscheidende Rolle. Die Synthetische Biologie stellt zudem

ein fachübergreifendes Thema zwischen Natur- und Ingenieurwissenschaften dar, denn technische Konzepte der Modularisierung, Entkopplung, Komplexitätsreduktion, Automatisierung oder des rechnergestützten Systementwurfs gehören zum Handwerkzeug dieser Disziplin.

Die Kernkompetenzen der Chemie in der molekularen Stoffumwandlung und den funktionellen Materialien bilden eine Grundlage der Entwicklung. Durch hoch selektive Veränderungen des elektronischen und räumlichen Aufbaus von Molekülen wie Materialien lassen sich Korrelationen von Struktur oder Wirkung

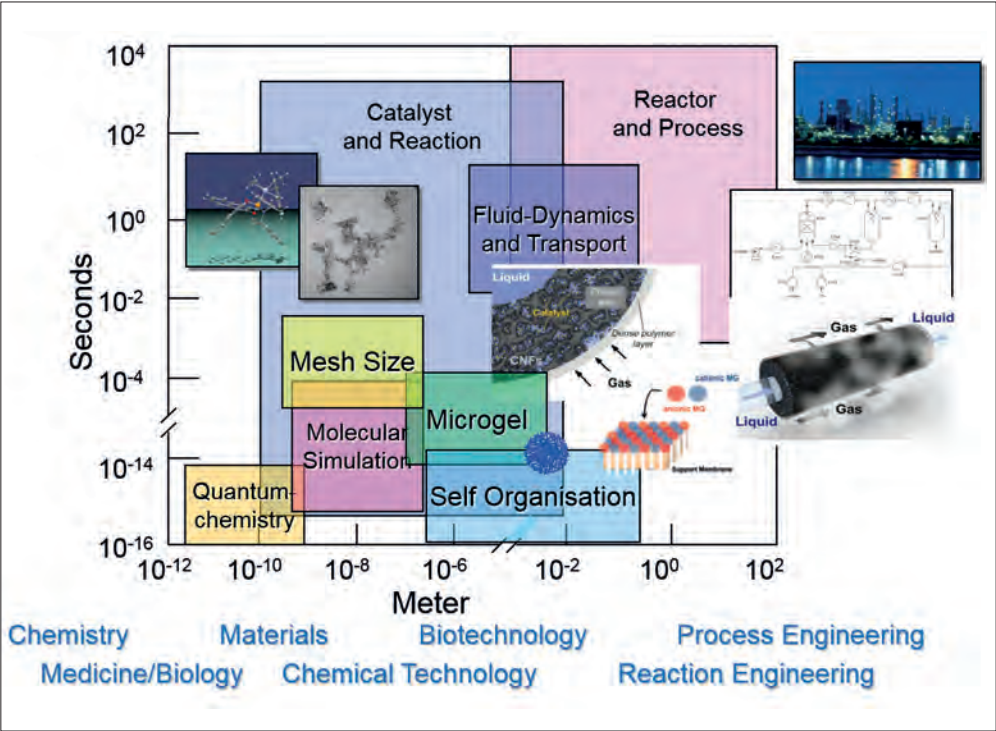


Bild 1: Der skalenübergreifende Forschungsansatz im Profilbereich „Molecular Science & Engineering“ reicht vom molekularen Design bis hin zum komplexen System.

analysieren. In interdisziplinären Ansätzen können diese zur Definition von inversen Problemen auf Basis dieser Struktur/Wirkungsbeziehung herangezogen werden. Das enorme wissenschaftlich-technische Potenzial zeigt sich bereits im RWTH-Exzellenzcluster „Tailor-Made Fuels from Biomass“ (TMFB) sowie im Sonderforschungsbereich „Funktionelle Mikrogele und Mikrogelsysteme“. Auch ergeben sich synergistische Schnittmengen mit den Zielen des Profilbereichs „Energy, Chemical & Process Engineering“ (ECPE). Als Ausgangsstoff kann auf komplexe biologische Materialien – etwa Biomasse – zurückgegriffen werden, deren Sicherung und Adaption fächerübergreifend untersucht werden.

Nur auf den ersten Blick sind Material- und Reaktionssysteme getrennt zu betrachten. Das Vorbild der Natur zeigt, dass die Steuerung von Strukturbildung und Kompartimentierung eine Voraussetzung für die Kontrolle komplexer Reaktionssysteme darstellen. In analoger Weise gilt dies auch für die Materialbildung. Hybride Strukturen eröffnen auch den Weg zur zellfreien Biotechnologie, deren Fortschritt letztlich ohne ein Verständnis der zugrundeliegenden chemischen Prozesse unmöglich ist.

Die aus der Medizin bereits gut verstandenen skalenübergreifenden Prozesse können als Vorbild für komplexe synthetische Systeme dienen. Die Variabilität der Form und Funktionalität der Stimuli, einschließlich der Feedbackmechanismen in den Reaktionssystemen, lassen sich auf chemische Prozesse übertragen und ermöglichen die konzeptionelle Nachbildung „biologischer“ Funktionalitäten der Selbstorganisation, Adaption und Autoreparation in technische Systeme. Hierdurch kommen grundlegende medizinische Fragestellungen in der Implantologie und der biohybriden medizinischen Systeme in den Fokus. Zusätzlich werden potenzielle Lösungswege an der Schnittstelle zum Profilbereich „Medical Science & Technology“ (MedST) generiert.

Die systemorientierten Ingenieurwissenschaften profitieren von der deduktiven Analyse der Materialien und Reaktionen in Biologie und Chemie, sie tragen durch Modellbildung zum Verständnis der Wechselwirkungen auf molekularer Ebene, insbesondere von Struktur und Funktion sowie Reaktion und Transport, bei. Skalenübergreifende mechanistische Modelle erlauben die Formulierung und Lösung inverser Probleme und somit die Modellidentifikation. Sie bilden die Voraus-

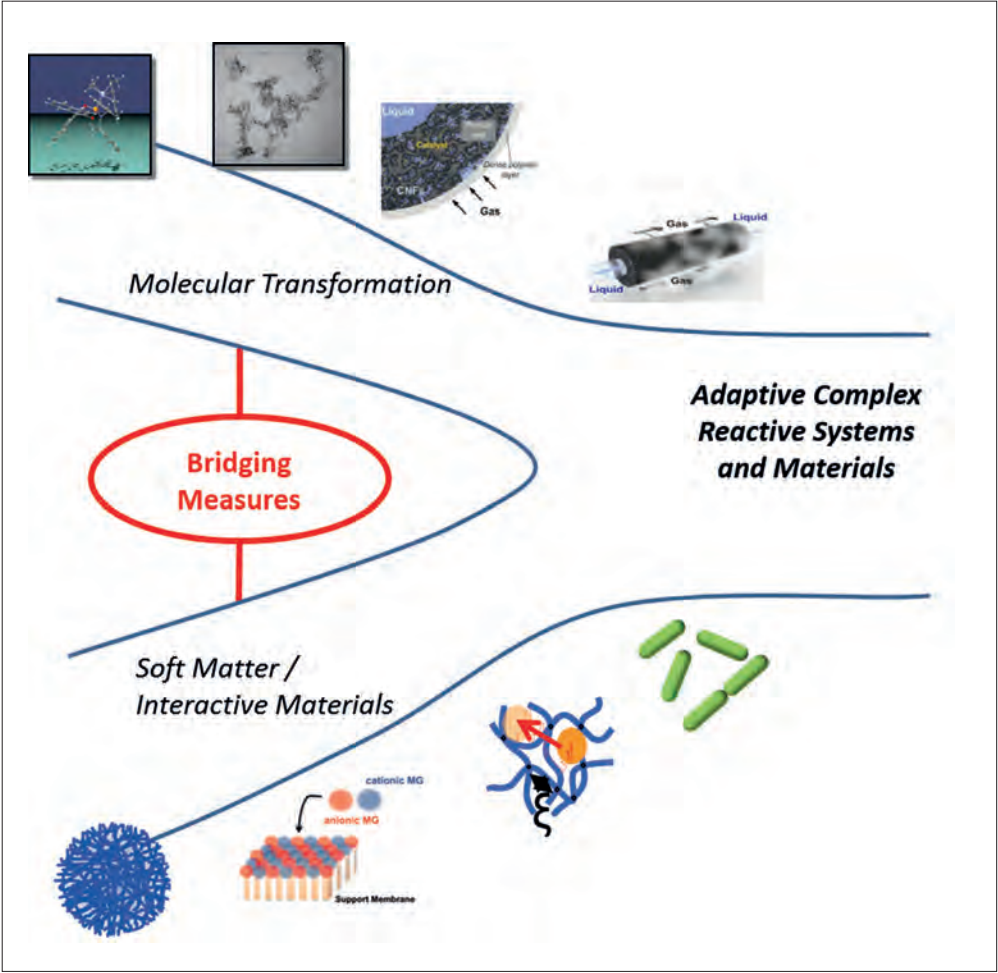


Bild 2: Zusammenwachsen der beiden Themenbereiche „Molecular Transformation“ und „Soft Matter/Interactive Materials“ mit dem Ziel der „Adaptive Complex Reactive Systems and Materials“.

setzung für eine auf molekularem Verständnis basierende Vorhersage des Verhaltens zunehmend größerer Strukturen. Auf der Grundlage von validierten Modellen können komplexe Systeme rechnergestützt entworfen und optimiert werden. Gleichzeitig bilden zelluläre Systeme, die durch eine Kompartimentierung auf der sub- μm -Skala gekennzeichnet sind, eine Blaupause für effiziente Prozessintegration.

Ein quantitatives Verständnis für die erwähnten adaptiven (katalytischen) Systeme kann durch die Kombination von Simulation und Experiment entscheidend verbessert werden. Während relativ einfache beziehungsweise kleine Systeme mit Ab-initio-Simulationsmethoden zugänglich sind, erfordert die Untersuchung komplexer Systeme geeignete Strategien zur skalenübergreifenden Modellierung oder eine angemessene Kombination von modellgestützter Simulation und Experiment. Dabei stellt die typische Überlagerung von Reaktions- mit Transport- oder Bewegungsprozessen eine Herausforderung für die Orts- und Zeitaufklärung nicht invasiver Messmethoden dar. Hier bieten sich vorwiegend spektroskopische Methoden an, die neben

einer Qualifizierung auch eine Quantifizierung (bio)chemischer Spezies ermöglichen. Diese werden in den Kompetenzzentren FLAMENCO, RamAc sowie MARC adressiert. Aktuelle Erfolge und Perspektiven für die verschiedenen interdisziplinären Ansätze werden in den folgenden Beiträgen vorgestellt.

Autoren

Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Carsten Bolm ist Sprecher des Profilbereichs und Inhaber des Lehrstuhls für Organische Chemie II. Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Walter Leitner war bis September 2017 Sprecher des Profilbereichs. Er ist Inhaber des Lehrstuhls für Technische Chemie und Petrochemie sowie Direktor für „Molekulare Katalyse“ am Max-Planck-Institut für Chemische Energiekonversion (CEC), Mülheim an der Ruhr. Dr. rer. nat. Marc Schmitz ist Referent des Profilbereichs und wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Technische Chemie und Petrochemie.