

## Structure2Fun

Single Crystal X-ray Diffraction - A Key Technique for Functional Materials

<b>Programm / Ausschreibung</b>	F&E Infrastruktur, F&E Infrastruktur, F&E-Infrastrukturförderung 6. Ausschreibung 2024	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	01.09.2025	<b>Projektende</b>	31.08.2028
<b>Zeitraum</b>	2025 - 2028	<b>Projektlaufzeit</b>	36 Monate
<b>Keywords</b>	single-crystal X-ray diffraction; structural chemistry; functional materials; non-ambient conditions		

### Projektbeschreibung

Die Universität Innsbruck beantragt Fördermittel für die Anschaffung eines hochmodernen Einkristall-Diffraktometers, das mit einer innovativen Röntgenquelle ausgestattet wird – einer Drehanode, die zwei verschiedene Wellenlängen zur Verfügung stellen kann. Zur vollen Ausnutzung der Kapazität wird das Gerät mit einem automatisierten Probenwechselroboter sowie speziellen Hochtemperatur- und Hochdruck-Probenumgebungen ausgestattet. Dieses Instrument stellt die neueste und leistungsstärkste Technologie im Bereich der Röntgendiffraktion dar und wird neue Möglichkeiten in der Strukturchemie, der Pharmazie, zur Entwicklung funktionaler Materialien und in der mineralogischen Kristallographie bieten.

Das System ist mit der leistungsstärksten Röntgenquelle ausgestattet, die derzeit für Laboranwendungen verfügbar ist, und übertrifft herkömmliche Diffraktometer bei weitem. Diese außergewöhnliche Leistungsfähigkeit wird Messungen ermöglichen, die bisher nicht realisierbar waren, und damit die experimentellen Möglichkeiten erheblich erweitern. Dadurch eröffnen sich neue, bedeutende Perspektiven für die Strukturforschung.

Mit den Möglichkeiten dieses hochmodernen Einkristall-Röntgendiffraktometers streben wir an, ein international anerkanntes Zentrum für Strukturchemie und fortschrittliche Materialien zu etablieren. Das Instrument wird eine zentrale Rolle in der strukturellen und dynamischen Charakterisierung von Festkörper- und molekularen Funktionsmaterialien spielen und die Forschung in Schlüsselbereichen der modernen Chemie maßgeblich vorantreiben. Dazu zählen unter anderem Leuchtstoffe für LED-Technologien, die Abscheidung und Verwertung von Treibhausgasen, pharmazeutische Technologien, innovative synthetische Chemie sowie das Verhalten von Mineralien und Materialien unter Hochdruck- und Hochtemperaturbedingungen.

Das neue Diffraktometer wird in zwei der fünf zentralen Forschungsschwerpunkte der Universität Innsbruck verankert: dem Center for Molecular Biosciences Innsbruck (CMBI) und dem Forschungsschwerpunkt Functional Materials (FunMAT). Ausgestattet mit einem Probenwechselroboter, der der erwarteten hohen Nachfrage und der großen Nutzerzahl gerecht wird, sowie der Fähigkeit, Hochtemperatur- und Hochdruckexperimente durchzuführen, erfüllt das Instrument auch die

speziellen Anforderungen der Materialwissenschaften und Mineralogie. Diese Kombination von Merkmalen macht das Gerät nicht nur in Österreich, sondern auch auf internationaler Ebene einzigartig.

Mit dieser hochmodernen Infrastruktur wird sich die Universität Innsbruck als führend in der strukturellen Charakterisierung von festen und molekularen Funktionsmaterialien positionieren, wodurch eine einzigartige wissenschaftliche Stellung in Österreich und darüber hinaus erreicht wird. Diese Investition wird nicht nur die interdisziplinären Forschungskapazitäten erweitern, sondern die Universität auf ihrem Weg zur weltweiten Spitzenposition im Bereich der Strukturchemie, der fortschrittlichen Funktionsmaterialien und der mineralogischen Kristallographie maßgeblich vorantreiben.

## **Abstract**

The University of Innsbruck is requesting funding for a state-of-the-art single-crystal diffractometer. The instrument will be equipped with a powerful dual-wavelength rotating anode X-ray source, a sample-changing robot, as well as high-temperature and high-pressure sample environments. This cutting-edge instrument represents the most advanced technology currently available in X-ray diffraction and will serve as a cornerstone for pioneering research in structural chemistry, pharmacy, advanced functional materials, molecular sciences, and mineralogy.

The system features the most powerful X-ray source currently available for in-house laboratories, vastly outperforming any standard diffractometer systems. This breakthrough capability will enable experiments that were previously impossible, significantly advancing experimental possibilities and allowing researchers to explore new frontiers in structural characterization.

By integrating this high-end single-crystal X-ray diffractometer into our research infrastructure, we aim to establish an internationally recognized hub for structural chemistry and advanced materials research. The instrument will play a critical role in the structural and dynamic characterization of solid-state and molecular functional materials, significantly advancing research in key areas of modern chemistry. These include luminescent materials for LED technology, the capture and valorization of greenhouse gases, pharmaceutical technology, innovative synthetic chemistry, as well as the behavior of minerals and materials under non-ambient conditions.

The new diffractometer will be housed within two of the major research centers at the University of Innsbruck: the Center for Molecular Biosciences Innsbruck (CMBI) and the Functional Materials (FunMAT) research cluster. Equipped with a high-throughput sample-changing robot to accommodate the expected high demand and large number of users, as well as the capability for high-temperature and high-pressure experiments to address the specific needs of materials science and mineralogy, the combination of these features makes this instrument truly unique, not only in Austria but also on the international stage.

With this cutting-edge infrastructure, the University of Innsbruck will establish itself as a leader in structural characterization techniques for both hard and soft-matter materials, securing a unique scientific position in Austria and beyond. This investment will not only enhance interdisciplinary research capabilities but also propel the university towards becoming a world-class institution in the field of structural chemistry, advanced functional materials, and mineralogical crystallography.

## Projektpartner

- Universität Innsbruck