

21. November 2023

**Stellungnahme zum
Leibniz-Institut für Katalyse e. V., Rostock (LIKAT)**

Inhaltsverzeichnis

1. Beurteilung und Empfehlungen	2
2. Zur Stellungnahme des LIKAT	4
3. Förderempfehlung	4

Anlage A: Darstellung

Anlage B: Bewertungsbericht

Anlage C: Stellungnahme der Einrichtung zum Bewertungsbericht

Vorbemerkung

Die Einrichtungen der Forschung und der wissenschaftlichen Infrastruktur, die sich in der Leibniz-Gemeinschaft zusammengeschlossen haben, werden von Bund und Ländern wegen ihrer überregionalen Bedeutung und eines gesamtstaatlichen wissenschaftspolitischen Interesses gemeinsam außerhalb einer Hochschule gefördert. Turnusmäßig, spätestens alle sieben Jahre, überprüfen Bund und Länder, ob die Voraussetzungen für die gemeinsame Förderung einer Leibniz-Einrichtung noch erfüllt sind.¹

Die wesentliche Grundlage für die Überprüfung in der Gemeinsamen Wissenschaftskonferenz ist regelmäßig eine unabhängige Evaluierung durch den Senat der Leibniz-Gemeinschaft. Die Stellungnahmen des Senats bereitet der Senatsausschuss Evaluierung vor. Für die Bewertung einer Einrichtung setzt der Ausschuss Bewertungsgruppen mit unabhängigen, fachlich einschlägigen Sachverständigen ein.

Vor diesem Hintergrund besuchte eine Bewertungsgruppe am 26. und 27. Januar 2023 das LIKAT in Rostock. Ihr stand eine vom LIKAT erstellte Evaluierungsunterlage zur Verfügung. Die wesentlichen Aussagen dieser Unterlage sind in der Darstellung (Anlage A dieser Stellungnahme) zusammengefasst. Die Bewertungsgruppe erstellte im Anschluss an den Besuch den Bewertungsbericht (Anlage B). Das LIKAT nahm dazu Stellung (Anlage C). Der Senat der Leibniz-Gemeinschaft verabschiedete am 21. November 2023 auf dieser Grundlage die vorliegende Stellungnahme. Der Senat dankt den Mitgliedern der Bewertungsgruppe und des Senatsausschusses Evaluierung für ihre Arbeit.

1. Beurteilung und Empfehlungen

Der Senat schließt sich den Beurteilungen und Empfehlungen der Bewertungsgruppe an.

Das LIKAT betreibt sehr erfolgreich grundlagenorientierte und angewandte Forschung auf dem Gebiet der homogenen und heterogenen Katalyse. Dazu werden Methoden und Ansätze aus verschiedenen Teildisziplinen der Chemie sowie aus den Nanowissenschaften und der Verfahrenstechnik kombiniert. Im Rahmen eines ganzheitlichen Forschungsansatzes werden Katalysatormaterialien identifiziert und präpariert, mit dem Ziel, neuartige chemische Verfahren zu entwickeln und zu optimieren.

Das LIKAT erarbeitet weltweit herausragende **Forschungsergebnisse**, die zu einer Vielzahl an Veröffentlichungen in international stark wahrgenommenen und häufig zitierten Zeitschriften führen. Hervorzuheben ist u. a. die Entwicklung katalytischer Prozesse basierend auf Plattformchemikalien, die aus Biomasse statt aus fossilen Rohstoffen hergestellt werden können. Die Grundlagenarbeiten werden sehr erfolgreich in die **Anwendung** überführt. Das Institut ist ein geschätzter Partner von Unternehmen aus dem In- und Ausland und bearbeitet jährlich etwa 50 bi- und multilaterale Projekte. Zwischen 2019 und 2021 waren die Beschäftigten an 86 Patentanmeldungen sowie 10 Überführungen von Prozessen aus dem Labormaßstab in die industrielle Produktion beteiligt. 2022 wurde das *Catalysis2Scale*-Transfer-technikum eröffnet. Dies erweitert maßgeblich die Möglichkeiten, Ergebnisse vom Labor-

¹ Ausführungsvereinbarung zum GWK-Abkommen über die gemeinsame Förderung der Mitgliedseinrichtungen der Wissenschaftsgemeinschaft Gottfried Wilhelm Leibniz e. V.

in einen anwendungsrelevanten Maßstab zu überführen. Für den Betrieb sind, so erläutern die Sachverständigen, zusätzliche personelle Ressourcen notwendig. Mittel für diesen Zweck sind Bestandteil eines Sondertatbestands, über den Bund und Länder inzwischen positiv entschieden haben.

Die **Entwicklung** des Instituts seit der letzten Evaluierung ist hervorragend. Die Anzahl der Forschungsbereiche (FB) erhöhte sich von sieben auf derzeit zehn. Für die Leitung der drei neuen sowie von drei weiteren FB, die ruhestandsbedingt neu zu besetzen waren, wurden international ausgewiesene Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler gewonnen. Im Jahr 2019 wurde eine Matrixstruktur etabliert, in deren Rahmen die FB gemeinsam sieben Themenfelder (TF) bearbeiten. Damit wurde die interne Zusammenarbeit weiter intensiviert, wobei insbesondere die Arbeiten zur homogenen und heterogenen Katalyse noch stärker miteinander verzahnt wurden. Die Leistungen der sieben TF werden viermal als „exzellent“ bewertet, zweimal als „sehr gut bis exzellent“ und einmal als „sehr gut“.

Die **Planungen für die Zukunft** sind ausgezeichnet, einen Schwerpunkt bildet die Entwicklung von Produktionsverfahren, die auf erneuerbaren Ressourcen basieren. Ziel ist es, neuartige katalytische Prozesse zu entwickeln, um Kreislaufströme wie den Kohlenstoff- und den Phosphorkreislauf zu schließen sowie den Ressourceneinsatz zu verringern. Im Jahr 2029 tritt der langjährige wissenschaftliche Direktor des LIKAT in den Ruhestand ein. Unter seiner Leitung hat sich das LIKAT zu einer der international führenden Einrichtungen im Bereich der Katalysatorforschung entwickelt. Es wird begrüßt, dass das Institut gemeinsam mit seinem Aufsichtsgremium bereits Maßnahmen ergriffen hat, um das Institut gut auf diesen Wechsel vorzubereiten. So wurde der Vorstand im Jahr 2019 erweitert. Er besteht laut Satzung nun aus der wissenschaftlichen und der kaufmännischen Leitung sowie bis zu drei weiteren wissenschaftlichen Vorstandsmitgliedern. Die wissenschaftliche Leitung soll bereits ab 2024 jeweils für zwei Jahre rotierend von den wissenschaftlichen Vorstandsmitgliedern ausgeübt werden.

Im **Stellenplan** sind fünf gemeinsame Berufungen vorgesehen. Künftig können nicht nur zwei, sondern alle fünf Positionen als W3-Professur besetzt werden. Der Senat begrüßt die zügige Umsetzung dieser Empfehlung der Sachverständigen. Wie das LIKAT in seiner Stellungnahme erläutert, wird dies bereits in Kürze bei zwei neu zu besetzenden Leitungspositionen eine Aufwertung ermöglichen.

Die institutionelle Förderung ist für die derzeitigen Aufgaben auskömmlich. Sie umfasste in den Jahren 2019–2021 durchschnittlich 12,9 Mio. € pro Jahr. Im selben Zeitraum erwirtschaftete das Institut bemerkenswert hohe Erträge aus **Drittmitteln** (37 % des Gesamtbudgets). Hervorzuheben sind die erfolgreichen Einwerbungen von Mitteln aus der Wirtschaft, die einen Anteil von 41 % der Drittmittel ausmachten. Wie empfohlen wurden die DFG-Einnahmen seit der letzten Evaluierung gesteigert.

Die ausgezeichnete Infrastruktur des LIKAT bietet dem **wissenschaftlichen Nachwuchs** hervorragende Entwicklungsmöglichkeiten. So werden beispielsweise regelmäßig unabhängige Nachwuchsgruppen sowohl mit eigenen als auch mit Drittmitteln eingerichtet. Am LIKAT ist eine hohe Zahl an Promovierenden tätig, die sehr gut betreut werden. Es

wird begrüßt, dass das Institut wie empfohlen plant, ein eigenes strukturiertes Doktorandenprogramm zu entwickeln, das verschiedene bereits bestehende Instrumente bündeln und erweitern soll.

Der Anteil an **Wissenschaftlerinnen** im Bereich Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen betrug wie bei der letzten Evaluierung etwa 30 %. Zum Stichtag im Jahr 2021 wurden drei von zehn Forschungsbereichen (FB) von Frauen geleitet. Die FB sind in insgesamt 25 Themengruppen untergliedert, von denen drei von Wissenschaftlerinnen geführt werden. Das LIKAT hat hier den Handlungsbedarf erkannt und der Senat erwartet, dass insbesondere auf dieser Ebene zukünftig ein höherer Frauenanteil erreicht wird.

Das LIKAT arbeitet über gemeinsame Berufungen hinaus eng mit der Universität Rostock zusammen. So sind im Rahmen des erfolgreichen Kooperationsmodells *Uni in Leibniz* assoziierte Professorinnen und Professoren über Honorarvereinbarungen am Institut tätig. Die nationale und internationale **Vernetzung** wurde in den vergangenen Jahren erfolgreich ausgeweitet: Im Bereich des Datenmanagements ist das Institut am Konsortium *NFDI4Cat* federführend beteiligt. Zudem kooperiert es innerhalb des EU-Programms *Horizon 2020* mit verschiedenen Hochschulen und Industriepartnern in mehreren Verbünden.

Der **Wissenschaftliche Beirat** begleitet das LIKAT mit großem Engagement. Zukünftig sollten während des Audits zwischen zwei Evaluierungen über die Gesamtentwicklung des Instituts hinaus auch die einzelnen Arbeitseinheiten betrachtet und bewertet werden. Beschäftigte von Einrichtungen, mit denen das LIKAT institutionell kooperiert, sollten nicht Mitglied im Beirat sein.

2. Zur Stellungnahme des LIKAT

Der Senat begrüßt, dass das LIKAT beabsichtigt, die Empfehlungen und Hinweise aus dem Bewertungsbericht bei seiner weiteren Arbeit zu berücksichtigen.

Aus Sicht des Senats sind die ausgesprochen positiven Bewertungen ebenso wie die Hinweise der Sachverständigen zu weiteren Verbesserungsmöglichkeiten gut begründet. Insbesondere wurden bei der Bewertung der Forschungsleistungen in den durchgehend sehr positiv eingestuften Themenfeldern quantitative Indikatoren und qualitative Einschätzungen einbezogen. Darüber hinaus flossen neben den Forschungsleistungen explizit auch Leistungen im Bereich des Transfers und der Datenwissenschaften in die Bewertung der Themenfelder ein.

3. Förderempfehlung

Der Senat der Leibniz-Gemeinschaft empfiehlt Bund und Ländern, das LIKAT als Einrichtung der Forschung und der wissenschaftlichen Infrastruktur auf der Grundlage der Ausführungsvereinbarung WGL weiter zu fördern.

Anlage A: Darstellung

Leibniz-Institut für Katalyse e.V., Rostock (LIKAT)

Inhaltsverzeichnis

1. Kenndaten, Auftrag und Struktur	A-2
2. Gesamtkonzept und zentrale Arbeitsergebnisse.....	A-3
3. Veränderungen und Planungen.....	A-7
4. Steuerung und Qualitätsmanagement.....	A-10
5. Personal	A-13
6. Kooperation und Umfeld	A-16
7. Teilbereiche des LIKAT	A-18
8. Umgang mit Empfehlungen der letzten externen Evaluierung	A-24

Anhang:

Anhang 1: Organigramm	A-27
Anhang 2: Publikationen	A-29
Anhang 3: Erträge und Aufwendungen	A-30
Anhang 4: Personalübersicht	A-31

1. Kenndaten, Auftrag und Struktur

Kenndaten

Gründungsjahr:	1952
Aufnahme in die Bund-Länder-Förderung:	2003
Aufnahme in die Leibniz-Gemeinschaft:	2003
Letzte Stellungnahme des Leibniz-Senats:	2016
Rechtsform:	Eingetragener Verein (e.V.)
Zuständiges Fachressort des Sitzlandes:	Ministerium für Wissenschaft, Kultur, Bundes- und Europaangelegenheiten (WKM MV)
Zuständiges Fachressort des Bundes:	Bundesministerium für Bildung und For- schung (BMBF)

Gesamtbudget (2021)

12,9 Mio. € Institutionelle Förderung,
8,2 Mio. € Erträge aus Zuwendungen zur Projektfinanzierung,
0,01 Mio. € Erträge aus Leistungen.

Personalbestand (2021)

131 Personen „Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen“,
48 Personen „Wissenschaftsunterstützendes Personal (Labore, Technik etc.)“
19 Personen „Wissenschaftsunterstützendes Personal (Administration)“
59 Stipendiat:innen (inkl. Gäste mit ext. Finanzierung)

Auftrag und Struktur

Satzungsauftrag gemäß Satzung §2 (1):

„Der Verein hat die Aufgabe, in seinem Institut grundlagen- und anwendungsorientierte Forschung insbesondere auf dem Gebiet der homogenen und heterogenen Katalyse durchzuführen und deren technische Umsetzung in Übereinstimmung mit den Grundsätzen des Gemeinnützigkeitsrechts zu fördern. Er führt dazu im Rahmen des Zweckbetriebs [...] Forschungsprojekte sowie Drittmittel- und Auftragsforschung durch und fördert die Aus- und Weiterbildung wissenschaftlicher Nachwuchskräfte auf dem Gebiet der Katalyse im Zusammenwirken mit Universitäten, speziell der Universität Rostock.“

Organisation

Die Forschungsarbeiten am Leibniz-Institut für Katalyse (LIKAT) sind in einer Matrixstruktur mit zehn Forschungsbereichen (FB) und sieben Themenfeldern (TF) organi-

siert (vgl. Organigramm in Anhang 1). Den Forschungsbereichsleitungen obliegt die Forschungs-, Personal- und Budgetplanung. Die Forschungsbereiche unterteilen sich in insgesamt 29 Themengruppen (TG).

- FB *Katalyse mit Bioressourcen* mit 2 TG
- FB *Angewandte Homogenkatalyse* mit 6 TG
- FB *Moderne Konzepte der molekularen Katalyse* mit 4 TG
- FB *Hydrierungen und Hydroformylierungen* mit 2 TG
- FB *Katalytische in situ-Studien* mit 2 TG
- FB *Elektrochemie & Katalyse* mit 2 TG
- FB *Biokatalyse & Polymerchemie* mit 2 TG
- FB *Katalysatorentwicklung und Reaktionstechnik* mit 3 TG
- FB *Heterogene Photokatalyse* mit 3 TG
- FB *Heterogen-katalytische Verfahren* mit 3 TG

Außerdem gibt es zwei unabhängige Nachwuchsgruppen (NWG) und zehn assoziierte Hochschulforschungsgruppen (*Uni in Leibniz*, siehe Kapitel 6). Drei Servicebereiche (Analytik, Technik und Verwaltung) stehen allen Mitarbeitenden zur Verfügung.

Die Forschungsbereiche bearbeiten gemeinsam sieben Themenfelder, von denen drei methodisch und vier stofflich ausgerichtet sind (siehe Kapitel 7):

- TF 01 Struktur-Reaktivitäts-Beziehungen
- TF 02 Kinetik, Theorie & Mechanismen
- TF 03 Reaktionstechnik & Implementierung
- TF 04 Erneuerbare Rohstoffe
- TF 05 Energie & Umwelt
- TF 06 Effizientere Prozesse
- TF 07 Neue Produkte & Verfahren

Die Themenfeldsprecherinnen und Themenfeldsprecher repräsentieren die Themenfelder nach außen. Außerdem koordinieren und leiten sie die Zusammenarbeit der verschiedenen Themengruppen innerhalb eines Themenfeldes.

2. Gesamtkonzept und zentrale Arbeitsergebnisse

Das LIKAT widmet sich der Erforschung der Katalyse an der Schnittstelle von Grundlagenforschung und Anwendung. Das dabei abgedeckte Aufgabenspektrum reicht von der Identifizierung geeigneter Katalysatormaterialien und deren Präparation über kinetische und mechanistische Forschungsarbeiten bis zur Entwicklung und Optimierung von chemischen Verfahren. Zu einem großen Teil geschieht dies in Kooperation mit der Industrie. Ein wesentliches Ziel ist der regelmäßige Transfer von Katalysatoren bzw. katalytischen

Prozessen in den industriellen Pilotmaßstab. Die Anwendungsgebiete reichen von Prozessen für die Energieversorgung bis zur Arzneimittelentwicklung.

Das Institut verzichtet mit Verweis auf ganzheitliche Forschungsansätze auf eine konzeptionelle Trennung zwischen homogener und heterogener Katalyse zugunsten einer übergreifenden, stofflich und methodisch orientierten Arbeitsweise. Dabei wirken anorganische, organische und technische Chemie sowie Nanowissenschaften, physikalische Chemie und Verfahrenstechnik interdisziplinär zusammen. Seinen Aufgabenschwerpunkt verortet das LIKAT in der Forschung und deren Anwendung. Forschungsinfrastrukturen zur externen Nutzung spielen eine untergeordnete Rolle. Das Institut verfügt jedoch über komplexe Apparaturen für *operando*-Messtechniken, die auch von Kooperationspartnern genutzt werden. Im Bereich des Technologie- und Wissenstransfers sieht sich das LIKAT insbesondere als Bindeglied zwischen Forschungseinrichtungen einerseits und der Industrie andererseits.

Arbeitsergebnisse

Forschung

Das LIKAT veröffentlichte in den Jahren 2019 bis 2021 insgesamt 880 wissenschaftliche Publikationen, davon 843 Artikel in Fachjournalen mit *peer review*-Verfahren (siehe Anhang 2). Es nennt folgende zehn Publikationen als zentrale Arbeitsergebnisse aus den sieben Themenfeldern

- *Dihydroxyacetone valorization with high atom efficiency via controlling radical oxidation pathways over natural mineral-inspired catalyst.* J. Wang, **X. Dai**, H. Wang, H. Liu, **J. Rabeah**, **A. Brückner**, F. Shi, M. Gong, X. Yang, *Nat. Commun.* 2021, 12, 6840. (TF 01)

Die Autorinnen und Autoren beschreiben ein von der Natur inspiriertes Katalysatordesign, bei dem kostengünstige MnO_2 /Goethit Katalysatoren die effiziente Umsetzung von Dihydroxyaceton (DHA) in Glykol- und Ameisensäure mit Ausbeuten von 83% und 93% ermöglichen. Die C-C-Spaltung der DHA-Substrate führt selektiv zu Glykolsäure und Hydroxymethyl-Radikalen, die weiter zu Ameisensäure oxidiert werden. Das Design verbessert die Kohlenstoffeffizienz auf 87%, und steigert die Effizienz der Sauerstoffatomnutzung von 11% auf 47%.

- *In situ formation of ZnO_x species for efficient propane dehydrogenation.* **D. Zhao**, **X. Tian**, D.E. Doronkin, **S. Han**, **V.A. Kondratenko**, J.-D. Grunwaldt, **A. Perechodjuk**, **T.H. Vuong**, **J. Rabeah**, **R. Eckelt**, **U. Rodemerck**, **D. Linke**, G. Jiang, H. Jiao, **E.V. Kondratenko**, *Nature* 2021, 599, 234-238. (TF 02)

Die Publikation beschreibt, wie bei der Propandehydrierung (PDH) zu Propen statt giftiger oder kostenintensiver Katalysatoren auf umweltverträgliche Trägerkatalysatoren auf der Grundlage von handelsüblichem ZnO zurückgegriffen werden kann, die *in situ* durch eine Reaktion der OH-Gruppen des Trägers mit Zn-Atomen gebildet werden. Der entwickelte Katalysator zeigt eine etwa dreifach höhere Propenproduktivität bei ähnlicher Propenselektivität.

- *NFDI4Cat: A Unified Research Data Infrastructure for Catalysis Research – Challenges and Concepts.* **C. Wulf**, **M. Beller**, T. Boenisch, O. Deutschmann, S. Hanf, N. Kockmann,

R. Krähnert, M. Oezaslan, S. Palkovits, S. Schimmler, S.A. Schunk, K. Wagemann, **D. Linke**, *ChemCatChem* 2021, 13, 3223-3236. (TF 03)

Das Konzeptpapier widmet sich dem Zugang zu großen Mengen an wissenschaftlich wertvollen Daten. Ausgehend vom aktuellen Stand wird der Forschungsbedarf ermittelt. Es wird ein Konzept für die Integration aller Forschungsdaten entlang der Wertschöpfungskette der Katalyse, vom Molekül bis zum chemischen Prozess, entwickelt. Die entsprechenden Kernthemen der Entwicklung werden erörtert, darunter Ontologien, Metadaten, erforderliche Infrastruktur, geistiges Eigentum und die Einbettung in die Forschungsgemeinschaft.

- *A meta-analysis of catalytic literature data reveals property-performance correlations for the OCM reaction.* R. Schmack, A. Friedrich, **E.V. Kondratenko**, J. Polte, A. Werwatz, R. Krähnert, *Nat. Commun.* 2019, 10, 441. (TF 03)

Hier wird eine Methode zur Meta-Analyse von jahrzehntelang gesammelten Daten vorgeschlagen, mit der Korrelationen zwischen den physikalisch-chemischen Eigenschaften eines Katalysators und seiner Leistung in einer bestimmten Reaktion ermittelt werden können. Die Methode verbindet Literaturdaten mit Lehrbuchwissen und statistischen Werkzeugen und wird auf die oxidative Kupplung von Methan (OCM) angewandt und validiert.

- *Adsorptive Capture of CO₂ from Air and Subsequent Direct Esterification under Mild Conditions.* **A. Wotzka, R. Dühren, T. Suhrbier, M. Polyakov, S. Wohlrab**, *ACS Sustainable Chem. Eng.* 2020, 8, 5013-5017. (TF 04)

Die Publikation beschäftigt sich mit *Carbon Mining*: CO₂ kann unter normalen Druckverhältnissen bei moderaten Temperaturen aus der Luft an einem katalytischen Material angereichert und direkt mit Methanol zu Dimethylcarbonat umgesetzt werden. Der Prozess erfolgt in drei Schritten an katalytisch aktiven Ce_{0,8}Zr_{0,2}O₂-Mischkristallen: i) adsorptive Anreicherung von CO₂, ii) Umwandlung unter milden Bedingungen (p=1 bar, T=70-110°C) durch Zufuhr von gasförmigem Methanol und iii) Desorption des Produkts.

- *Nylon Intermediates from Bio-Based Levulinic Acid.* **A. Marckwordt, F. El Ouahabi, H. Amani, S. Tin, V.N. Kalevaru, P.C.J. Kamer, S. Wohlrab, J.G. de Vries**, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2019, 58, 3486-3490. (TF 04)

Die Autorinnen und Autoren beschreiben Nylon-Vorstufen auf der Basis erneuerbarer Rohstoffe: ZrO₂/SiO₂ katalysiert die Ringöffnung von biobasiertem γ -Valerolacton mit Methanol in der Gasphase, was mit über 95% Selektivität zu Mischungen von 2-, 3- und 4-Pentensäuremethylester (MP) führt, die 81% M4P enthalten. Setzt man das Produktgemisch in einer selektiven Hydroformylierung um, wird lediglich M4P mit 90% Selektivität in 5-Formylvaleriansäuremethylester umgewandelt. Das verbleibende Gemisch aus 2- und 3-MP liefert in einer isomerisierenden Methoxycarbonylierung Dimethyldipat in 91% Ausbeute.

- *Transferring photocatalytic CO₂ reduction mediated by Cu(N[^]N)(P[^]P)⁺ complexes from organic solvents into ionic liquid media.* **P.A. Forero-Cortés, M. Marx, N.G. Moustakas**,

F. Brunner, C.E. Housecroft, E.C. Constable, **H. Junge, M. Beller, J. Strunk**, *Green Chem.* 2020, 22, 4541-4549. (TF 05)

Hier wird die Übertragung photokatalytischer CO₂-Reduktion mit katalytisch aktiven, unedlen Fe- und Cu-Metallkomplexen mit hoher Selektivität und moderaten Umsatzzahlen von organischen Lösungsmitteln in ionische Flüssigkeiten beschrieben. Unter hochreinen Bedingungen wurde nachgewiesen, dass das CO aus der CO₂-Reduktion und nicht aus anderen Kohlenstoffquellen stammt. Ein neuartiger Photosensibilisator auf Cu-Basis wurde synthetisiert und seine photo- und elektrochemischen Eigenschaften untersucht.

- *Direct synthesis of adipic acid esters via palladium-catalyzed carbonylation of 1,3-dienes.* **J. Yang, J. Liu, H. Neumann, R. Franke, R. Jackstell, M. Beller**, *Science* 2019, 366, 1514-1517. (TF 06)

Die Publikation beschreibt eine *Dream Reaction*, mit der es gelingt, Adipate direkt aus 1,3-Butadien in einem Schritt mittels doppelter Carbonylierung herzustellen. Die Schwierigkeit liegt in der Komplexität der Dicarboxylierungsreaktion. Aufgrund des komplexen Reaktionsnetzwerks aus regioisomeren Carbonylierungs- und Isomerisierungswegen neigt die Reaktion zur Bildung zahlreicher Nebenprodukte. Die Lösung ist der speziell entwickelte Ligand (HeMaRaphos), der in Kombination mit Pd hervorragende Selektivität bei hoher Reaktivität aufweist. Das Katalysatorsystem lässt sich auf weitere Diene übertragen und ebnet so den Weg für eine revolutionäre Syntheseroute für viele feinchemische Produkte.

- *1-Zirconacyclobuta-2,3-dienes: synthesis of organometallic analogs of elusive 1,2-cyclobutadiene, unprecedented intramolecular C-H activation, and reactivity studies.* **X. Shi, S. Li, M. Reiß, A. Spannenberg, T. Holtrichter-Roeßmann, F. Reiß, T. Beweries**, *Chem. Sci.* 2021, 12, 16074-16084. (TF 07)

Die Studie beschäftigt sich mit kleinen, hochgradig ungesättigten Ringsystemen wie dem viergliedrigen Metallacyclobuta-2,3-dien, die metallorganische Analoga von 1,2-Cyclobutadien, dem kleinsten zyklischen Alken, darstellen. Hier wird die Synthese der ersten beiden Beispiele solcher Verbindungen auf Zr-Basis vorgestellt. Das Reaktionsverhalten beider Komplexe wurde untersucht und alle Komplexe umfassend charakterisiert, einschließlich Röntgenkristallographie. Die experimentellen Ergebnisse wurden durch Dichtefunktionaltheorie (DFT)-Analysen bestätigt.

- *3,3-Difluoroallyl ammonium salts: highly versatile, stable and selective gem-difluoroalkylation reagents.* **F. Ye, Y. Ge, A. Spannenberg, H. Neumann, L.-W. Xu, M. Beller**, *Nat. Commun.* 2021, 12, 3257. (TF 07)

Ausgehend von der Bedeutsamkeit selektiver Synthesen fluorierter organischer Moleküle für die Entwicklung bioaktiver Verbindungen (Agrochemikalien und Pharmazeutika) und die Schwierigkeit der Einführung von -CF₂-Gruppen stellen die Autorinnen und Autoren die Synthese fluorierter Ammoniumsalze (DFPAs) als stabile und skalierbare Difluormethylierungs-Reagenzien vor. Sie ermöglichen eine hoch regioselektive, direkte Reaktion unter milden Bedingungen mit einer breiten Palette an Nukleophilen ohne die

Notwendigkeit eines Metallkatalysators, was die unkomplizierte Herstellung zahlreicher Analoga bestehender Pharmazeutika erlaubt.

Transfer

Der Technologietransfer wird als eine der wichtigsten Profilkonstanten des LIKAT verstanden und umfasst Industriekooperationen, Patentierungen und Überführungen in die industrielle Produktion. Der Transfer in beide Richtungen schließt dabei die Einbindung von industriellen Kooperationspartnern in den Forschungsprozess ein (siehe Kapitel 6). Die Patentierung von Ergebnissen erfolgt europaweit, bevorzugt gemeinsam mit den Industriepartnern. Zwischen 2019 und 2021 waren LIKAT-Wissenschaftlerinnen und -Wissenschaftler an insgesamt 86 Patentanmeldungen beteiligt (siehe Anhang 2) und haben an zehn Überführungen von Forschungserkenntnissen aus dem Labormaßstab in die industrielle Produktion (Pilotmaßstab, klein-tonnagige Produktion oder Großproduktion) mitgewirkt. Beteiligte Industrieunternehmen waren z. B. Bayer, Evonik und Symrise.

Das 2022 eröffnete *Catalysis2Scale*-Transfertechnikum (siehe Kapitel 3 und 4) soll zukünftig ein grundlegender strategischer Baustein der Forschungs- und Technologietransferarbeit des Instituts werden.

Den Wissenstransfer fördert das LIKAT unter anderem durch die Organisation des jährlich stattfindenden Sommer-Workshops *Rostock's Eleven*, bei dem Wissenschaftsjournalistinnen und -journalisten Nachwuchskräfte bei der populärwissenschaftlichen Vermittlung ihrer Forschungserkenntnisse unterstützen. Ein zentrales Element der Öffentlichkeitsarbeit stellt für das Institut die Pressearbeit dar. Es verweist auf zuletzt etwa 20 Presseinformationen pro Jahr mit einem Höhepunkt im Jahr 2020 (31 Pressemitteilungen und 21 Interviews von LIKAT-Mitarbeitenden). Seit 2021 werden in Zusammenarbeit mit den übrigen Leibniz-Einrichtungen in Mecklenburg-Vorpommern und dem Forschungsinstitut für Nutztierbiologie Clipping-Dienstleistungen in Anspruch genommen. In den Sozialen Medien (z. B. twitter und LinkedIn) ist das LIKAT seit 2020 vertreten. Mitarbeitende des Instituts sind in der Politikberatung aktiv, außerdem beteiligt sich das LIKAT an Veranstaltungsreihen für die Öffentlichkeit.

3. Veränderungen und Planungen

Entwicklung seit der letzten Evaluierung

Im Mittelpunkt der für den Zeitraum 2016-2023 geltenden Strategie 2023 des LIKAT stand das übergeordnete Ziel, Ressourcen optimal zu nutzen. Um die stoff- und energieeffiziente Verwertung gut verfügbarer Rohstoffe sowie kommerziell wenig genutzter erneuerbarer bzw. alternativer Ressourcen voranzutreiben, strebte das Institut eine gezielte Kombination intern vorhandener Kompetenzen mit durch Neuberufungen/-besetzungen und Kooperationen erschlossenen externen Expertisen an. In diesem Zuge wurde der Forschungsbereich *Prozessintensivierung* durch den neuen Bereich *Katalyse mit erneuerbaren Rohstoffen* (mittlerweile *Katalyse mit Bioressourcen*) ersetzt und eine neue Themengruppe *Katalyse mit erneuerbaren Rohstoffen & Plattformchemikalien* gegründet. Ein weiteres strategisches Ziel war es, methodische Ansätze zur Effektivitätssteigerung

bei der Nutzung von Katalyse in der Technik zu etablieren bzw. zu stärken. Beispielsweise wurde 2016 die Themengruppe *Synergien zwischen homogener und heterogener Katalyse* eingerichtet, die den Forschungsbereich *Katalyse mit erneuerbaren Rohstoffen/Katalyse mit Bioressourcen* ergänzte. Das LIKAT verweist darauf, dass Aktivitäten in diesem Forschungsbereich derzeit weiter ausgebaut würden.

Seit der letzten Evaluierung wurden drei neue Forschungsbereiche gegründet:

- Der Forschungsbereich *Biokatalyse & Polymerchemie* (2017 gegründet als FB *Bioinspierte Homo- und Heterogene Katalyse*), für den auch ein biochemisches S1-Labor etabliert wurde, beschäftigt sich unter anderem mit der Herstellung künstlicher Metalloenzyme.
- Zu den Themen des ebenfalls seit 2017 bestehenden Forschungsbereichs *Heterogene Photokatalyse* zählt die künstliche Photosynthese. Um den Reaktionsmechanismus unter hochreinen Bedingungen zu untersuchen, werden dort spezielle Gasphasenphotoreaktoren betrieben und *in situ* spektroskopische Methoden weiterentwickelt.
- 2021 etablierte das Institut den Forschungsbereich *Elektrochemie und Katalyse*, wo u.a. homogene und heterogene elektrokatalytische Systeme für die Umsetzung organischer Verbindungen und kleiner Moleküle wie CO₂, H₂O und N₂ entwickelt werden. Für das mechanistische Verständnis der katalytischen Prozesse werden elektroanalytische Techniken eingesetzt und mit spektroskopischen Methoden und Kontrollexperimenten kombiniert.

Der FB *Moderne Konzepte der molekularen Katalyse* setzt seit 2017 die Arbeiten des ehemaligen FB *Koordinationschemische Katalyse* nach der Emeritierung der bisherigen Leitung fort.

Seit 2019 sind die Forschungsarbeiten am LIKAT in der in Kapitel 2 beschriebenen Matrixstruktur mit Themenfeldern organisiert. Nach Einschätzung des Instituts sind bereits erste Resultate der neuen Organisationsstruktur bezüglich Synergieeffekten und stärker interdisziplinär ausgerichtetem Arbeiten zu verzeichnen.

Strategische Arbeitsplanung für die nächsten Jahre

Inhaltliche Planungen

Die strategische Arbeitsplanung des LIKAT für die kommenden Jahre formuliert es in seiner Strategie LIKAT 2030. Übergeordnetes Ziel ist darin die Forschung zur Ressourcenschonung und die Schließung von Kreislaufströmen. Die strategische Entwicklung soll auch weiterhin auf der Verknüpfung von grundlagen- und anwendungsorientierter Forschung sowie verschiedener Katalysedisziplinen basieren. Hinzu kommen neue Aspekte wie Digitalisierung und Datenmanagement. Konkret stehen die folgenden Forschungsthemen und -ziele im Mittelpunkt:

Schließung des Kohlenstoffkreislaufs

Aufbauend auf bestehender Expertise in den Themenfeldern soll künftig verstärkt die Wiedereinbringung von CO₂ in die chemische Produktion untersucht werden. Außerdem sollen Wasserstofftechnologien im Zusammenhang mit erneuerbarer Energie entwickelt

und optimiert sowie erneuerbare Rohstoffe für die Herstellung von Groß- und Feinchemikalien nutzbar gemacht werden.

Das LIKAT möchte in den nächsten drei Jahren mindestens zwei Demonstratoren im Technikumsmaßstab im Bereich der Erzeugung von Wasserstoff mit Hilfe erneuerbarer Energien, dessen chemischer Speicherung und der Nutzung grünen Wasserstoffs zur Synthese von flüssigen Energieträgern unter Verwertung von CO₂ realisieren. Zusätzlich sollen pro Jahr mindestens vier Prozesse mit innovativen Katalysatoren auf Basis gut verfügbarer Metalle bis zur Technikumsreife aufskaliert werden.

Zur Schließung von Kohlenstoffkreisläufen durch effiziente Recyclingprozesse soll das Recycling von Kunststoffabfällen mit Hilfe neuer katalytischer Methoden vorangetrieben werden.

Schließung des Phosphorkreislaufs

In Themenfeld 07 sollen ressourcenschonende und atomökonomische Synthesen von phosphor-basierten Liganden und reaktiven niedervalenten Hauptgruppenverbindungen entwickelt werden. Außerdem sollen Ansätze zur Phosphorrückgewinnung und zum Ersatz von Phosphorverbindungen untersucht werden.

Reaktionstechnik, Implementierung & Digitalisierung

Insbesondere in Themenfeld 03 werden künftig verschiedene Reaktorkonzepte evaluiert, Reaktor- und Verfahrenskonzepte synergetisch entwickelt und verfahrenstechnische Aspekte der Katalysatorsynthese erforscht, um Reaktordesigns und Betriebsregimes für katalysierte chemische Reaktionen zu optimieren. Ziel ist eine schnellere Umsetzung von Implementierungen durch schnellere und effizientere Übertragung wissenschaftlicher Ergebnisse aus dem Labor- in den Technikumsmaßstab einerseits und die Digitalisierung der Entwicklungskette vom Katalysator zum Prozess andererseits.

Personalplanungen

Angesichts der bis 2030 ruhestandsbedingt anstehenden umfassenden Wechsel auf der Leitungsebene strebt das LIKAT an, die Stellen frühzeitig und passgenau zur Forschungsstrategie auszuschreiben (siehe Kapitel 5). Dies betrifft folgende Leitungspositionen:

- 2023: wissenschaftliches Vorstandsmitglied mit Forschungsbereichsleitung (Berufungsverfahren zur Nachbesetzung läuft)
- 2029: wissenschaftliche Leitung mit Forschungsbereichsleitung
- 2030: kaufmännische Leitung.
- Zudem sind die Leitungen von 6 Themengruppen neu zu besetzen.

Catalysis2Scale-Transfertechnikum & Einrichtung eines Leibniz-Transferlabs für nachhaltige Energie- und Stofftransformationen (LTLNES)

Die Installation eines *Leibniz-Transferlabs für nachhaltige Energie- und Stofftransformationen* (LTLNES) ist Gegenstand eines separaten Antrags auf eine kleine strategische Institutserweiterung, der zum 1. Januar 2023 bei der Leibniz-Gemeinschaft eingereicht wurde und unabhängig vom Evaluierungsverfahren bewertet wird.

Das geplante LTLNES soll künftig die Arbeiten im Technikum koordinieren und durchführen, insbesondere auch im Kontext einer angestrebten Öffnung der LIKAT-Infrastruktur für wirtschaftliche Partner und andere Leibniz-Einrichtungen. Außerdem ist die Einrichtung einer entsprechenden Themengruppe geplant, deren Fokus auf erneuerbaren Energien und Technologien zum Aufbau einer Kohlenstoff-Kreislaufwirtschaft liegen soll.

Das LIKAT sieht sein *Catalysis2Scale*-Transfertechnikum als Baustein der strategischen Weiterentwicklung an der Schnittstelle zwischen Grundlagen- und angewandter Forschung. Unabhängig vom Ausgang des oben genannten Antrags plant das Institut die Bereitstellung des vorgesehenen Eigenanteils aus dem Kernhaushalt (etwa 420 T€) für die dauerhafte Nutzung. *Catalysis2Scale* soll zukünftig als Forschungsinfrastruktur der gesamten Leibniz-Gemeinschaft zur Verfügung stehen. Außerdem ist die Einwerbung öffentlicher und privatwirtschaftlicher Drittmittel für die Nutzung des Technikums vorgesehen.

4. Steuerung und Qualitätsmanagement

Ausstattung und Förderung

Förderung

Das LIKAT verfügte in den Jahren 2019 bis 2021 über ein durchschnittliches jährliches Budget von 20,5 Mio. €. Davon entfielen 12,9 Mio. € (63 %) auf die institutionelle Förderung und 7,5 Mio. € (37 %) auf Förderungen für wissenschaftliche Projekte. Hinzu kamen Erträge aus Leistungen von im Durchschnitt 89 T€ jährlich. Zusätzlich standen dem LIKAT Baumittel für das *Catalysis2Scale*-Transfertechnikum in Höhe von insgesamt 8,4 Mio. € zur Verfügung.

Die Projektförderungen stammten in den letzten drei Jahren durchschnittlich zu 41 % aus der Wirtschaft, zu 17% von Bund und Ländern, zu 14 % von der EU und zu 11 % von der DFG. Weitere Gelder wurden im Wettbewerb der Leibniz-Gemeinschaft (8 %), bei Stiftungen (1 %) und bei sonstigen Fördererinstanzen (9 %) eingeworben. Ein angestrebtes Ziel ist die Erhöhung des Drittmittelanteils aus der Wirtschaft auf 50 %. Auch der Anteil von Mitteln aus DFG- und EU-Förderungen soll von zusammen zuletzt durchschnittlich 25 % auf 30 % erhöht werden.

Ausstattung

Das Institut hat seinen Sitz auf dem Campus der Universität Rostock in einem Gebäudekomplex, der seit seinem Bezug im Jahr 2005 mehrfach baulich erweitert wurde. Derzeit verfügt es dort über ca. 3.150 m² Laborfläche. Zusätzlich wird seit Sommer 2022 auf über

1000 m² das *Catalysis2Scale*-Transfertechnikum mit weiteren Laboren, Büros und einer Versuchshalle betrieben. Zur technischen Ausstattung der Forschungslabore und des Servicebereichs Analytik zählen unter anderem kontinuierliche und Druckapparaturen, *Gloveboxen* und eigens entwickelte Anlagen für *operando*-Spektroskopie und kinetische Untersuchungen sowie moderne analytische Großgeräte.

Für die kommenden Jahre besteht bei der technischen Infrastruktur kurz- oder mittelfristiger Erneuerungsbedarf. Zur Bewältigung der steigenden Kosten für Strom und Fernwärme, die nach Angaben des LIKAT aus dem vorhandenen Budget nicht gedeckt werden können, sind mehrere Maßnahmen vorgesehen. Zum einen soll der vorgesehene kleine strategische Sondertatbestand neben der Verstetigung des Technikums auch Investitionen in dessen weitestgehend autarke Energieversorgung ermöglichen. Zum anderen wurden Mitte 2022 Energiesparmaßnahmen eingeleitet, etwa durch eingeschränkte Zugangszeiten für die Labore, um die Nutzung von Lüftung und Kälteanlage zu reduzieren.

Für die digitale Infrastruktur des LIKAT ist das Team Informationstechnik (4 VZÄ) zuständig, das auch das speziell auf die Archivierung von Messdaten der analytischen Geräte zugeschnittene Intranet betreut. Es gibt ein IT-Sicherheitskonzept und nach Angaben des Instituts wird kontinuierlich daran gearbeitet, das Sicherheitsniveau der Infrastruktur weiter auszubauen. Der Servicebereich Technik (10 VZÄ) bündelt die Betreuung von Haustechnik, Werkstätten und Glasbläserei.

Aufbau- und Ablauforganisation

Der Vorstand, der seit 2019 aus der wissenschaftlichen und der kaufmännischen Direktion sowie aktuell zwei wissenschaftlichen Vorstandsmitgliedern besteht, übt gemeinsam die Forschungsplanung und -kontrolle aus. Er wird vom Kuratorium auf jeweils fünf Jahre bestellt. Im März 2023 sollen im Anschluss an das ruhestandsbedingte Ausscheiden eines wissenschaftlichen Vorstandsmitglieds zwei neue wissenschaftliche Mitglieder in den Institutsvorstand aufgenommen werden.

Die Leitungsrunde umfasst neben den Vorstandsmitgliedern die Themenfeldsprecherinnen und -sprecher, die Leitungen der Forschungs- und Servicebereiche, die PhD- und PostDoc-Vertretung, die Vertretung des Betriebsrats sowie bei Bedarf auch die Leitungen der assoziierten Hochschulgruppen. Sie tagt mindestens monatlich und diskutiert aktuelle Probleme und organisatorische Planungen.

Zum Informationsaustausch auf allen Ebenen finden neben den halbjährlichen, thematisch fokussierten Institutsseminaren zusätzlich eigene Seminare der Forschungsbereiche (1-2x monatlich) und Themenfeldtreffen (2-4x jährlich) statt.

Qualitätsmanagement

Seit 2011 gibt es am LIKAT ein eigenes Regelwerk zur Guten wissenschaftlichen Praxis (GwP), das auf den Leitfäden der DFG und der Leibniz-Gemeinschaft basiert. Eine Ombudsperson und ihre Stellvertretung stellen deren Einhaltung sicher.

Eine institutseigene Leitlinie zum Umgang mit Publikationen und Open Access definiert Qualitätskriterien zur Bewertung von Publikationsleistungen und formuliert Zielstellungen zur Erhöhung von Qualität, Sichtbarkeit, Einfluss und Nutzung von LIKAT-Publikationen.

Die Ausrichtung aller Forschungsaktivitäten am LIKAT wird intern durch den Vorstand, die Leitungsrunde bzw. den Wissenschafts- & Industriebeirat evaluiert. Dazu wird ein definiertes Set von Leistungskriterien herangezogen, das sowohl qualitative als auch quantitative Faktoren umfasst.

In der Transfer-Leitlinie wird bezüglich des Technologietransfers die Überführung von mindestens drei Katalysatoren bzw. katalytischen Prozessen in den industriellen Pilotmaßstab pro Jahr als Ziel formuliert, außerdem identifiziert die Leitlinie die unterschiedlichen Zielgruppen des Wissenstransfers. Bei der Erfolgsmessung in beiden Transferbereichen kommen ebenfalls quantitative Indikatoren zum Einsatz.

Das Programmbudget bildet als Zielvereinbarung die verbindliche Grundlage für die Bewirtschaftung der Mittel am Institut. Zur Durchführung wissenschaftlicher Arbeiten werden den Forschungsbereichen über zwei Fonds leistungsorientiert Mittel zur Verfügung gestellt:

- ein *Investitions-Fonds* (ca. 1 Mio. €) zur Vergabe der Gesamtinvestitionsmittel nach ein- bis zweimal jährlich erfolgreicher Antragstellung durch die Themengruppen
- ein *Innovationsfonds* (2021: 450 T€) zur Förderung der Grundlagenforschung und Etablierung innovativer Arbeitsgebiete mit jährlicher kompetitiver Mittelvergabe

Neben diesen leistungsorientierten Instrumenten verfügt das Institut noch über zwei weitere Fonds:

- einen anhand der über den Haushalt finanzierten VZÄ eingerichteten *Bereichs-Fonds* (2021: pauschal 8 T€/VZÄ), der den Themengruppen innerhalb eines Forschungsbereichs jährlich zur Verfügung steht
- einen *LIKAT-Gemeinschafts-Fonds* zur Absicherung befristeter Arbeitsverhältnisse während Schwangerschaften, Eltern- oder Pflegezeiten sowie für soziale Härtefälle.

Die Maßnahmen zur Qualitätssicherung bei der Nutzung der LIKAT-eigenen operando-Messtechniken umfassen ein Auswahlverfahren zur Nutzung der Infrastruktur, eine Beschränkung der Nutzung und Auswertung auf Fachpersonal und ein allgemeines Bekenntnis zum LIKAT-Regelwerk guter wissenschaftlicher Praxis.

Das Institut beschäftigt sich mit Lösungsansätzen für das disziplinübergreifende Forschungsdatenmanagement und setzt dabei auf Expertisen aus Katalyse, Reaktionstechnik und Data-Science. Mehrere Forschungsgruppen sind in der nationalen Forschungsstrategie zur Digitalisierung (NFDI) engagiert, und der wissenschaftliche Direktor des LIKAT ist Wissenschaftlicher Sprecher des Netzwerks *NFDI4Cat*. Mehrere Arbeitsgebiete der Katalysatorforschung werden als Benchmark für die Implementierung eines effizienteren künftigen Datenmanagements bearbeitet. Aktuell wird außerdem ein *Electronic Lab Notebook/Laboratory Information Management System* (ELN/LIMS) eingeführt.

Qualitätsmanagement durch Beiräte und Aufsichtsgremium

Der Wissenschafts- & Industriebeirat (WIB, bis 2021 „Wissenschaftlicher Beirat“) besteht aus mindestens sechs Mitgliedern (derzeit 10), die auf den gemeinsamen Vorschlag des Vorstands und des WIB vom Kuratorium für vier Jahre berufen werden. Der WIB spiegelt die Arbeitsgebiete des Instituts wider und umfasst Mitglieder aus Industrie, Universitäten und anderen Forschungseinrichtungen. Der WIB bewertet regelmäßig die wissenschaftliche Leistung, das Forschungsprogramm sowie das Programmbudget des LIKAT. Zwischen den Evaluierungen führte er 2020 ein virtuelles Audit durch.

Das Kuratorium besteht aus mindestens sechs (aktuell neun) Mitgliedern, die den Bund, das Land Mecklenburg-Vorpommern, die Universität Rostock, die freie Wirtschaft sowie Fachwissenschaften vertreten. Ihm obliegt die Aufsicht über alle wesentlichen wissenschaftlichen und wirtschaftlichen Fragen des Instituts. Es bestimmt die Richtlinien der Institutsarbeit und überwacht die Tätigkeit des Vorstands.

5. Personal

Wissenschaftliche und Administrative Leitungspositionen

Die Besetzung von Leitungspositionen am LIKAT erfolgt gemäß den Standards der Leibniz-Gemeinschaft. Stellen werden national und international unter Angabe des erwarteten Profils ausgeschrieben und zusätzlich Kandidatinnen und Kandidaten gezielt angesprochen. Eine Findungskommission trifft die Auswahl. Das gesamte Verfahren wird zu Transparenz- und Qualitätssicherungszwecken vollständig dokumentiert.

Professuren besetzt das Institut in gemeinsamen Berufungsverfahren mit der Universität Rostock. Derzeit gibt es vier gemeinsame Berufungen (2x W3, 2x W2). Bei einer davon handelt es sich um eine Heisenberg-Professur, die 2027 verstetigt werden soll. Momentan läuft ein Verfahren zur Berufung der Nachfolge für eine 2023 ruhestandsbedingt auscheidende Forschungsbereichsleitung. Das Institut bemüht sich, die W2-Stellen in W3-Stellen umzuwandeln. Während Leitungspositionen allgemein bevorzugt extern besetzt werden, strebt das LIKAT für Themen- und Forschungsbereichsleitungen teils auch interne Besetzungen zwecks Erhalt von Schlüsseltechnologien und Expertise an. Hier erfolgen zunächst befristete Besetzungen mit Verstetigung nach zwei Jahren bei positiver interner Evaluierung.

Das Institut stellt finanzielle und zeitliche Ressourcen zur Weiterbildung und Qualifizierung von Führungskräften bereit, sowohl in internen Seminaren als auch zur Teilnahme an externen Programmen. Teil der Personalstrategie des LIKAT ist ein Engagement im Netzwerk „Rostock denkt 365°“ zur gemeinsamen, auch internationalen Vermarktung des Wissenschaftsstandorts Rostock.

Promoviertes Personal

Das LIKAT unterscheidet zwischen PostDocs und Habilitierenden. In der Post-Doc-Phase, die üblicherweise die ersten beiden Jahre nach der Promotion umfasst, sind Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler befristet angestellt und über Drittmittel oder Stipendien finanziert. 2021 waren das 39 Personen. Für Habilitandinnen und Habilitanden stellt

das Institut die Möglichkeit zum Aufbau unabhängiger Nachwuchsgruppen mit selbst eingeworbenen Finanzmitteln bereit. Nach erfolgreicher Habilitation wird ein Wechsel an andere Universitäten/Forschungseinrichtungen angestrebt. In den vergangenen 7 Jahren gab es auch drei interne Besetzungen von freiwerdenden Themengruppenleitungen. PostDocs und Habilitierende werden durch kontinuierlichen Austausch und strategische Beratung sowie jährliche oder halbjährliche Qualifizierungsgespräche unterstützt und sind in die Lehre an der Universität Rostock eingebunden. Es erfolgt eine verbindliche Dokumentation der Qualifizierungsverfahren.

Die Laufzeit einer Nachwuchsgruppe beträgt am LIKAT üblicherweise 5 Jahre. Seit der letzten Evaluierung wurden drei unabhängige Nachwuchsgruppen abgeschlossen. Alle drei Nachwuchsgruppenleitungen verblieben am Institut. Derzeit sind zwei Gruppen tätig. Nach ihrem Abschluss sollen bis 2030 zwei weitere Nachwuchsgruppen etabliert werden.

Zwischen 2019 und 2021 erfolgten zwei Habilitationen, eine weitere Habilitationsschrift wurde 2022 eingereicht. Zwei ehemalige Habilitierende sind seit ihrem Ruf an Universitäten im In- und Ausland (2015 bzw. 2021) assoziierte Professoren im Rahmen von *Uni in Leibniz* (siehe Kapitel 6).

Das LIKAT strebt an, befristete Arbeitsplätze vorrangig auf Promovierende, ausländische PostDocs und Gäste zu beschränken. Es sieht jedoch budgetbedingt keine Möglichkeiten, den Anteil festangestellten Personals von derzeit 105 der etwa 300 Mitarbeitenden weiter zu erhöhen.

Promovierende

Das LIKAT fördert sowohl promovierendes Personal als auch promoviertes Personal mit Habilitationsabsicht gemäß der *Leibniz-Leitlinie Karriereentwicklung* und der institutseigenen *Leitlinie zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses am LIKAT*. Da Qualifizierungsmaßnahmen in Kooperation mit der Universität Rostock durchgeführt werden, ist die Promotions- (bzw. Habilitations-) Ordnung der dortigen Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät maßgeblich. Zur Beratung ist am LIKAT ein Promotionsbeauftragter eingesetzt und es wird jährlich eine dreiköpfige PhD & PostDoc-Vertretung gewählt.

Jährlich forschen etwa 100 Promovierende am LIKAT. Die Promotionsdauer beträgt in der Regel zwischen drei und vier Jahren. Verträge werden üblicherweise auf mindestens drei Jahre festgelegt. 2021 waren 86% auf halben Stellen beschäftigt. Zwischen 2019 und 2021 wurden insgesamt 81 Promotionen abgeschlossen, wobei der Durchschnitt der letzten sieben Jahre bei 23 Promotionen jährlich liegt. Kommunikation und Zuständigkeiten zwischen Promovierenden und ihren häufig mehreren Betreuungspersonen sind in einer Betreuungsvereinbarung geregelt.

Gezielte Fördermaßnahmen sind über die Mentoring-Programme der Universität Rostock, der Leibniz-Gemeinschaft und der Gesellschaft Deutscher Chemiker verfügbar,

außerdem werden interne und externe Weiterbildungsmaßnahmen und eigens eingerichtete Seminare angeboten. Der *Gemeinschafts-Fonds* des LIKAT (siehe Kapitel 4) greift auch bei familiären Unterbrechungen in der Qualifizierungsphase.

Das LIKAT strebt eine Begleitung der Absolventinnen und Absolventen über die Promotion hinaus an, sowohl als LIKAT-interner Nachwuchs als auch hin zu einer internationalen wissenschaftlichen Karriere. In den letzten Jahren wurde ein LIKAT-Alumni-Netzwerk aufgebaut, das allen aktuellen und ehemaligen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern offensteht. Im zweijährlichen Turnus findet ein Alumni-Tag statt.

Wissenschaftsunterstützendes Personal

Weiterqualifizierungen von Mitarbeitenden in wissenschaftsunterstützenden Bereichen reichen von Kursen im IT- und Sekretariatsbereich über die Möglichkeit zur Meisterausbildung bis hin zu Fernstudien. Sie werden in individuellen Weiterbildungsvereinbarungen vertraglich abgesichert. Das LIKAT selbst bietet Sprachkurse und Kurse zum Umgang mit Software an.

Gemeinsam mit der Universität Rostock beteiligt sich das Institut an einer dualen Ausbildung für Chemielaborantinnen und -laboranten. Zwischen 2019 und 2021 wurden fünf Ausbildungen abgeschlossen. LIKAT und Universität bemühen sich um eine Übernahme der Auszubildenden. Bedarfsgerecht bildet das Institut zusätzlich auch in seinen Servicebereichen Technik und Verwaltung aus. Seit 2016 bestand kein Bedarf an einer solchen Ausbildung.

Chancengleichheit und Vereinbarkeit von Familie und Beruf

Das Bekenntnis zur aktiven Förderung von Chancengleichheit und Geschlechtergleichstellung ist seit 2012 in der Satzung des LIKAT verankert. Ein Gleichstellungsplan formuliert bindende Regeln und Maßnahmen zur Ermöglichung gleicher Chancen und zur Herbeiführung von ausgewogenen Geschlechteranteilen. Dazu zählen die Gestaltung von Rekrutierungsverfahren, aber auch Maßnahmen zur Ausbildung künftiger weiblicher Führungskräfte innerhalb des LIKAT sowie zur aktiven Rekrutierung externer Wissenschaftlerinnen. Eine Gleichstellungsbeauftragte und ihre Stellvertretung werden alle vier Jahre neu gewählt.

2021 waren 36 von 131 wissenschaftlichen Mitarbeitenden weiblich (28%). Zwei von vier LIKAT-Vorstandsmitgliedern (50%) und drei von zehn Forschungsbereichsleitungen (30%) waren Frauen. Bei den Themen- und Nachwuchsgruppenleitungen betrug der Frauenanteil 12%, bei den Wissenschaftspositionen ohne Leitungsfunktion 38%. Drei der sieben Themenfelder wurden von Frauen geleitet. Da nach Angaben des LIKAT die künftig freiwerdenden Leitungspositionen derzeit überwiegend mit Frauen besetzt sind, seien die 2019 für den Zeitraum bis 2025 festgelegten Zielquoten nur durch eine Nachbesetzung dieser Stellen mit weiblichem Personal haltbar.

Maßnahmen des Instituts zur Vereinbarkeit von Beruf und Fürsorgepflicht umfassen eine *LIKAT-Betriebsvereinbarung zur Regelung der gleitenden Arbeitszeit*, Dual-Career-Maßnahmen und den in Kapitel 4 beschriebenen *LIKAT-Gemeinschafts-Fonds*. 2020 erhielt das LIKAT zum vierten Mal in Folge das *Total E-Quality* Zertifikat. Mindestens einmal jährlich

werden geschlechterspezifische Statistiken erstellt und kommuniziert. Perspektivisch möchte das Institut Aspekte der Diversität weiter ausbauen. Mit mehreren Maßnahmen vor allem im schulischen Bereich setzt es sich dafür ein, das Interesse von Mädchen an Naturwissenschaften zu wecken.

6. Kooperation und Umfeld

Kooperation mit Hochschulen

Das LIKAT arbeitet fakultätsübergreifend eng mit der Universität Rostock zusammen. Der seit 2006 bestehende Kooperationsvertrag wurde 2015 erneuert und wird 2023 aktualisiert. Beschäftigte des Instituts sind über Professuren an die Universität angebunden. Derzeit (Stand Dez. 2022) sind das, wie in Kapitel 4 geschildert, eine W3-Professur, zwei W2-Professuren und eine W3-Heisenberg-Professur, außerdem zwei apl-Professuren. Habilitierte Mitarbeitende des LIKAT sind sowohl in Vorlesungen und Seminare als auch in die Betreuung von Praktika und Qualifizierungen sowie die Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses eingebunden. Zwischen 2019 und 2021 boten Mitarbeitende Lehrveranstaltungen im Umfang von durchschnittlich 50 SWS an, davon 8 an Universitäten im Ausland.

Über den Kooperationsvertrag mit der Universität Rostock ist auch das Kooperationsmodell Uni in Leibniz organisiert, eine fachliche Zusammenarbeit des LIKAT mit derzeit zehn assoziierten Hochschulforschungsgruppen. Die assoziierten Professoren sind über Honorarvereinbarungen am Institut tätig. Neben acht Professoren der Universität Rostock ist jeweils ein Professor aus Paderborn und Linz assoziiert, beide sind ehemalige Habilitanden des LIKAT. Auf der Basis eines Ideenwettbewerbs im Jahr 2020 wurde die Zusammenarbeit im Rahmen von Uni in Leibniz 2020 neu ausgerichtet. Über die Einreichung von vorab definierten Projektvorschlägen durch die Professoren und die vorausgesetzte Kooperation mit LIKAT-Forschenden soll der Austausch gefördert, die interne Anschubfinanzierung hoch risikobehafteter Forschung ermöglicht und eine Übereinstimmung mit der Forschungsstrategie des LIKAT gewährleistet werden.

International pflegt das LIKAT strategische Partnerschaften mit wissenschaftlichen Einrichtungen, deren Passfähigkeit und Renommee einen positiven Einfluss auf die Weiterentwicklung der eigenen Forschung versprechen. Es unterhält Memoranda of Understanding mit Einrichtungen in Großbritannien, Vietnam, Frankreich, China, Pakistan und der Tschechischen Republik.

Nationale und internationale Netzwerke und Verbünde

In Deutschland ist das LIKAT u.a. in den Netzwerken *Gesellschaft für chemische Technik und Biotechnologie* (DECHEMA), *Deutsche Gesellschaft für Katalyse – German Catalysis Society* (GeCatS) und *Gesellschaft Deutscher Chemiker* (GDCh) aktiv. Der wissenschaftliche Direktor des Instituts ist außerdem Mitglied der *Leopoldina* und der *Deutschen Akademie der Technikwissenschaften* (acatech), die Politik und Gesellschaft in technikwissenschaftlichen und technologiepolitischen Zukunftsfragen beraten. Seit 2019 ist das LIKAT einer von knapp 40 Partnern im Netzwerk *4chiral*, in dem KMU der ostdeutschen Feinchemie

und Biotechnologie sowie Universitäten, Hochschulen und Forschungsinstitute vertreten sind.

Das Institut hebt die folgenden nationalen und internationalen Forschungsverbünde hervor, an denen es beteiligt ist:

- Die beiden Leibniz-WissenschaftsCampi ComBioCat (gemeinsam mit dem *Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie* – INP und den Universitäten Greifswald und Rostock) und *Phosphorforschung* (unter Federführung des *Leibniz-Instituts für Ostseeforschung Warnemünde* – IOW)
- Das aus 16 Partnern aus den Bereichen der homogenen, heterogenen, Photo-, Bio- und Elektrokatalyse bestehende Konsortium NFDI4Cat, das als eines von neun Konsortien im Rahmen der Initiative *Nationale Forschungsdateninfrastruktur* (NFDI) gefördert wird
- Das Verbundprojekt Forschungsfabrik Wasserstoff MV, in dem gemeinsam mit dem *Fraunhofer-Institut für Großstrukturen der Produktionstechnik* (IGP) und dem INP Verfahren und Technologien für CO₂-neutrale Produktionskreisläufe auf der Basis erneuerbarer Energien erforscht, optimiert und zur Anwendungsreife geführt werden sollen
- Das DAAD-geförderte SDG-Graduiertenkolleg RoHan, eine Kooperation zwischen der Universität Rostock, der Hanoi University of Science and Technology und der Vietnam National University – University of Science
- GreenSolRes, ein Konsortium, das im Rahmen der *Bio-based Industries Innovation action – Demonstration* (Horizon 2020) gefördert wurde und zum Ziel hatte, die Wettbewerbsfähigkeit der Lävulinsäure-Wertschöpfungskette mit dem Ziel der Kommerzialisierung der Prozesse nachzuweisen
- CO2PERATE, ein im Rahmen des *Marie Skłodowska-Curie Innovative Training Network* (ITN)-Programms gefördertes Ausbildungsnetzwerk für Promovierende mit dem Ziel, CO₂ als Kohlenstoffquelle nutzbar zu machen
- Das ebenfalls im Rahmen des ITN-Programms geförderte Projekt BIOALL, das sich mit der Valorisierung von Biomasse und CO₂ beschäftigt
- Das aus dem EU Horizon 2020-Programm *Excellent Science - Future and Emerging Technologies* (FET open) geförderte Projekt FLIX, in dem an einem modularen Durchfluss-Chemiesystem für die flexible Isotopenmarkierung komplexer Chemikalien und biologischer Stoffe gearbeitet wird
- Das im Horizon 2020-Programm *Societal Challenges - Secure, clean and efficient energy* verortete Projekt EHL CATHOL, das darauf abzielt, das Abfallprodukt *Enzymatic Hydrolysis Lignin* (EHL) in hochleistungsfähige Kraftstoffmischungen umzuwandeln.

Kooperationen mit industriellen Partnern

Das LIKAT verweist auf jährlich etwa 50 vertrauliche bi- und multilaterale Kooperationsprojekte mit Industriebeteiligung, die in gemeinsamen Patentanmeldungen mit den Industriepartnern mündeten. Auch wissenschaftlich arbeite man aber in diesem Bereich

hochproduktiv. Beispielhaft hervorgehoben werden vier Unternehmen der Privatwirtschaft als wichtige Kooperationspartner, mit denen längerfristige Rahmenverträge bestehen: *Evonik Industries AG, Henkel AG & Co. KGaA, Symrise AG* und *Apex Energies*.

Im Zeitraum zwischen 2019 und 2021 erfolgten zehn Überführungen in den industriellen Pilotmaßstab bzw. in die industrielle Produktion.

Position der Einrichtung im fachlichen Umfeld

Unter den Forschungseinrichtungen, die in Deutschland Katalyseforschung betreiben, verortet sich das LIKAT mit seinem Schwerpunkt auf angewandte Grundlagenforschung zwischen Max-Planck-Instituten und universitären Forschungseinrichtungen auf der einen und Industrie und Fraunhofer-Instituten auf der anderen Seite. Als spezifisches Alleinstellungsmerkmal sieht es seine Positionierung an der Schnittstelle zwischen Grundlagenforschung und Anwendung.

Im internationalen Umfeld nennt das Institut das *Katalytische Institut des Pacific Northwest National Laboratory PNNL* (Washington, USA), das *Merck Center for Catalysis* (Princeton University, USA), das *Institute of Chemical Research of Catalonia ICIQ* (Tarragona, Spanien), das *Dalian Institute of Chemical Physics DICP* (Dalian, China) und das *KAUST Catalysis Center KCC* (Thuwal, Saudi Arabien) als Einrichtungen, mit denen es hinsichtlich der allgemeinen Ausrichtung und der konkreten inhaltlichen Schwerpunkte Überschneidungen gebe.

7. Teilbereiche des LIKAT

Themenfeld 1 – Struktur-Reaktivitäts-Beziehungen

[24,2 VZÄ, davon 13,3 VZÄ Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen, 8,5 VZÄ Promovierende und 2,4 VZÄ Servicebereiche]

Im TF 01 werden moderne experimentelle Methoden als wesentliche Grundlage für ein wissensbasiertes Katalysatordesign etabliert und kombiniert. Dies umfasst die Entwicklung, Optimierung und Anwendung innovativer Methoden, Verfahren und Aufbauten zur Durchführung katalytischer Reaktionen und Katalysatorsynthesen. Ziel ist es, die Entwicklung neuer katalytischer Verfahren zu beschleunigen und bestehende Verfahren effizienter zu gestalten.

Ein Schwerpunkt liegt auf der Entwicklung neuer spektroskopischer Reaktionszellen, in denen verschiedene *in situ*- und *operando*-Methoden simultan gekoppelt werden können, wie z.B. die weltweit erste 5-in-1-Kopplung von FTIR-ATR/UV-Vis/EPR/EXAFS/XANES, die die Aufklärung komplexer Reaktionsmechanismen ermöglicht. Darüber hinaus wurden mit einer Niedertemperatur-FTIR-Zelle zu Analyse exponierter Metallzentren auf der Oberfläche von Feststoffkatalysatoren und Reaktionszellen für die *operando*-Spektroskopie bei erhöhtem Druck bis zu 20 bar (FTIR, EPR, EXAFS/XANES) neue experimentelle Lösungen für anspruchsvolle experimentelle Bedingungen (Fischer-Tropsch-Synthese mit CO₂, Oligomerisierung von Olefinen) entwickelt.

Weitere Meilensteine auf dem Weg zu relevanten Reaktionsbedingungen bei *operando*-Untersuchungen sind (i) die Installation eines neuen NAP-XPS Spektrometers (Near Ambient Pressure) am LIKAT sowie (ii) ein gemeinsam eingeworbener innovativer TEM-Aufbau mit speziellen Probenhaltern für erhöhte Temperaturen und Drücke an der interdisziplinären Fakultät „Life, Light & Matter“ der Universität Rostock.

Das umfangreiche Instrumentarium von *operando*-Techniken wurde für das Monitoring von selektiven Oxidationen, Hydrierungen, photokatalytischen sowie umweltrelevanten Reaktionen wie der selektiven katalytischen Reduktion von NO_x (NH₃-SCR) und der photokatalytischen Ozonierung von organischen Verunreinigungen im Abwasser eingesetzt.

Ein Beispiel für die Zusammenarbeit verschiedener Gruppen in TF 01 ist die Entwicklung eines speziellen „Spin-Trapping“-Verfahrens in der TG „Magnetische Resonanz- und Röntgenmethoden“, das selektiv verschiedene Radikale unterscheiden kann und in verschiedenen TGs für die Aufklärung radikalischer Reaktionsmechanismen genutzt wird. Darüber hinaus konnte mit dem Methodeninstrumentarium des LIKAT gezeigt werden, dass bei der CO₂-Reduktion, Wasserspaltung und Methanoloxidation aus der klassischen Thermokatalyse bekannte Spezies auch als aktive Zentren in der Photokatalyse wirken können, sofern sie in der Lage ist, Licht zu absorbieren.

Künftig sollen mit der Kombination von *operando*-FTIR-Spektroskopie, Kinetik und Chemometrie sowie der Simultankopplung von EPR und NMR neue Möglichkeiten für die Mechanismusaufklärung geschaffen werden.

TF 01 hat 2019–2021 jährlich $\approx$ 43 Publikationen in Zeitschriften mit Begutachtungssystem veröffentlicht. Die Drittmittelträge betrugen rund 1,3 Mio. € p. a., sie wurden v. a. aus der Wirtschaft ($\approx$ 459 T € p. a.), von der DFG ($\approx$ 296 T € p. a.) und von der EU ($\approx$ 230 T € p. a.) eingeworben. Es wurden 15 Promotionen abgeschlossen.

Themenfeld 2 – Kinetik, Theorie & Mechanismen

[16,1 VZÄ, davon 9,2 VZÄ Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen, 5,4 VZÄ Promovierende und 1,5 VZÄ Servicebereiche]

Im Fokus von TF 02 stehen mechanistische und kinetische Aspekte der heterogenen, homogenen, Elektro- und Photokatalyse. Gegenstand der Untersuchungen sind großtechnische, zukunftsorientierte und nachhaltige katalytische Prozesse. Ziel ist es, Zusammenhänge zwischen makroskopischen Beobachtungen in Reaktoren mit der mikroskopischen Struktur der katalytisch aktiven Zentren/Phasen und der Reaktionsmikrokinetik auf möglichst elementarer Ebene abzuleiten. Dazu werden mit Hilfe mechanistischer und mikrokinetischer Untersuchungen Grundlagenbeziehungen zwischen der Struktur der aktiven Zentren und der Kinetik der selektiven und nichtselektiven Reaktionsschritte gewonnen. Diese bilden die Guidelines für eine kontrollierte Katalysatorherstellung und für die Entwicklung der neuen bzw. verbesserten Reaktorkonzepte, was insbesondere im Hinblick auf die sich ändernde Rohstoffbasis und Energietechnologien wichtig ist. TF 02 wendet dafür verschiedene Methoden an: transiente (zeitaufgelöste) Experimente mit isotoopenmarkierten Molekülen, stationäre kinetische und mechanistische Messungen, spektroskopische Katalysatorcharakterisierung, mathematische Modellierungen sowie numerischen Analysen von zeitaufgelösten Experimenten und Dichtefunktionaltheorie

(DFT)-Berechnungen. Die Kombination ermöglicht einen detaillierten Blick auf die Wirkungsweise verschiedenster Katalysatoren.

Die Zusammenarbeit in TF 02 fördert die Rationalisierung der experimentellen Ergebnisse, auf deren Basis Vorschläge zur gezielten Katalysatorentwicklung, Optimierung von Reaktionsbedingungen, Verbesserung von Reaktionsabläufen und Planung neuer Experimente gemacht werden können. TF 02 unterstützt damit die Forschungsarbeiten in den stofflich-orientierten Themenfeldern (TF 04-07). So ermöglichte bspw. die Mechanismusaufklärung zur Bildung zyklischer Carbonate aus Epoxiden und CO₂ die Optimierung der Reaktionsbedingungen, so dass cyclische Carbonate in Ausbeuten bis 99% isoliert werden können.

Künftig ist die Erweiterung der Expertise um Theorie der homogenen und Bio-Katalyse (Nachwuchsgruppe) geplant. Zudem sieht man großes Potenzial in Digitalisierung und Automatisierung, existierende Methoden zu verbessern und neue Methoden bzw. Techniken zu entwickeln.

TF 02 hat 2019–2021 jährlich $\approx$ 42 Publikationen in Zeitschriften mit Begutachtungssystem veröffentlicht. Die Drittmittelerträge betrugen 2019–2021 rund 774 T € p. a., sie wurden v. a. aus der Wirtschaft ($\approx$ 398 T € p. a.) und von der DFG ($\approx$ 215 T € p. a.) eingeworben. Es wurden eine Habilitation und 9 Promotionen abgeschlossen.

Themenfeld 3 – Reaktionstechnik & Implementierung

[11 VZÄ, davon 8,5 VZÄ Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen, 1,5 VZÄ Promovierende und 1 VZÄ Servicebereiche]

Im Hinblick auf die Reaktionstechnik in TF 03 geht es um die Entwicklung des bestmöglichen Reaktordesigns und Betriebsregimes für katalysierte chemische Reaktionen. Dabei können verschiedene Reaktorkonzepte evaluiert, aber auch Reaktor- und Verfahrenskonzepte gemeinsam entwickelt werden. Neben der katalytischen Reaktion werden verfahrenstechnische Aspekte der Katalysatorsynthese behandelt. Zur Implementierung gehören (i) die Übertragung katalytischer Reaktionen vom Labormaßstab in den Pilot- oder technischen Maßstab und (ii) die Übertragung von Methoden aus Nachbardisziplinen und der Informationstechnologie auf die Katalyse, die das Potenzial haben, den Transfer von der Forschung in die technische Anwendung zu beschleunigen. Der dritte Schwerpunkt in TF 03 liegt auf Data Science. Das Projekt *NFDI4Cat*, in dem das LIKAT federführend tätig ist, zielt auf das Management von Forschungsdaten ab. Um diese Ziele zu verwirklichen, arbeiten Themengruppen aus verschiedenen Forschungsbereichen zusammen. TF 03 sieht sich als kompetenten Partner für die Industrie in Bezug auf den Transfer von Neuentwicklungen in der Katalyse vom Labor in die Anwendung sowohl im Bereich der Fein- als auch der Bulk-Chemie. Mehrere Industrieprojekte befassen sich mit reaktionstechnischen oder Upscaling-Fragen für homogen- und heterogenkatalytische Reaktionen. Zur Unterstützung dieser Aktivitäten betreiben und entwickeln die LIKAT-Forscherinnen und -Forscher in TF 03 Versuchsanlagen unterschiedlichen Maßstabs (vom Mikroreaktor bis zum Technikums-Maßstab), die Daten von hoher Qualität und Aussagekraft liefern. Hier spielt das *Catalysis2Scale*-Transfer-Technikum eine wesentliche Rolle.

Im Gegensatz zu den TF 04 bis 07 konzentriert sich TF 03 weniger auf spezifische Reaktionen, sondern mehr auf Methodiken und Technologien. Dies hat zur Folge, dass die in TF 03 untersuchten Reaktionen oft auch Gegenstand der Forschung in den TF 04 bis 07 sind. Allerdings nicht wie dort mit dem Schwerpunkt auf grundlegender Katalysatorentwicklung, sondern mit Schwerpunkt auf reaktionstechnischen Aspekten. Bei der Entwicklung von kinetischen Modellen arbeitet TF 03 eng mit TF 02 zusammen, um eine mechanistische Basis für die Modelle zu schaffen.

Das *Catalysis2Scale*-Technikum ermöglicht TF 03 künftig u.a. den Fokus auf die schnellere Übertragung vom Labor- in den Technikumsmaßstab zu legen. Weitere Schwerpunkte werden auf die Digitalisierung der Entwicklungskette sowie die Entwicklung effizienterer Reaktionstechnik gesetzt.

TF 03 hat 2019–2021 jährlich ≈ 8 Publikationen in Zeitschriften mit Begutachtungssystem veröffentlicht. Es hat im gleichen Zeitraum jährlich $\approx 28,7$ Patente angemeldet und hielt 2021 53 Patente. Die Drittmittelerträge betrugen 2019–2021 rund 908 T € p. a., sie wurden v. a. aus der Wirtschaft (≈ 540 T € p. a.) und von Bund und Ländern (≈ 288 T € p. a.) eingeworben. Es wurde eine Promotion abgeschlossen.

Themenfeld 4 – Erneuerbare Rohstoffe

[12,9 VZÄ, davon 7,1 VZÄ Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen, 3,7 VZÄ Promovierende und 2,2 VZÄ Servicebereiche]

TF 04 bündelt Expertisen auf dem Gebiet der erneuerbaren Rohstoffe. In den Jahren 2019 – 2021 lag der Schwerpunkt auf der Erforschung katalytischer Umwandlungen nachwachsender Rohstoffe in Basischemikalien für Produkte des täglichen Lebens. Beispielsweise lassen sich aus Holzabfällen gewonnene Lignocellulose sowie deren Bestandteile oder Fettsäuren und Terpene nutzen, um diverse Polymere, Agrochemikalien, Lösungsmittel oder Aromastoffe herzustellen. Im ersten Schritt erfolgt dabei die Konvertierung der Biomasse in sogenannte Plattformchemikalien. Diese sind in der Regel in einfachen und ertragreichen Reaktionen in großen Mengen herzustellen und eignen sich als Synthesebausteine für zahlreiche andere Verbindungen. Diese Plattformchemikalien (bspw. Glycerin, Lävulin- oder Milchsäure, HMF, Furfural) werden in weiteren katalysierten Schritten in bestehende oder neue Chemikalien mit den gewünschten Eigenschaften umgewandelt. Da Biomasse einen Überschuss an Sauerstoff enthält, sind folgende Reaktionen für die ersten Schritte von großer Bedeutung: Hydrierung, Hydrogenolyse, Dehydratisierung, Decarbonylierung und Decarboxylierung. Im Berichtszeitraum wurde auch Kohlendioxid als Rohstoff genutzt, um es zum Beispiel in (Poly-)Carbonate umzuwandeln. Darüber hinaus wurden Fettsäuren durch katalytische Oxidation, Carbonylierung, Hydroformylierung oder Hydrierung in Monomere für Polymere umgewandelt. Für Terpene werden und wurden moderne katalytische Methoden der Umwandlung entwickelt, die vor allem für die Duftstoffindustrie interessant sind. Hier wurden sowohl molekular-definierte homogene als auch heterogene Katalysatoren eingesetzt. Durch die Mitarbeit im Leibniz-WissenschaftsCampus *ComBioCat* wurden auch biokatalytische Verfahren (in

Zusammenarbeit mit der Universität Greifswald) und Niedertemperaturplasma-Technologien (mit dem INP Greifswald) genutzt.

Die elektrochemische Veredelung erneuerbarer Rohstoffe, die ohne Einsatz stöchiometrischer Mengen an Reduktions- oder Oxidationsmitteln funktioniert, soll künftig eine zunehmende Rolle spielen. Ebenso werden Untersuchungen zum Ersatz unerwünschter Lösungsmittel oder unwirtschaftlicher Synthesestrategien verstärkt.

TF 04 hat 2019–2021 jährlich ≈ 22 Publikationen in Zeitschriften mit Begutachtungssystem veröffentlicht. Es hat im gleichen Zeitraum jährlich $\approx 3,3$ Patente angemeldet und hielt 2021 4 Patente. Die Drittmittelträge betrugen 2019–2021 rund 1,1 Mio. € p. a., sie wurden v. a. aus der Wirtschaft (≈ 469 T € p. a.), von Bund und Ländern (≈ 294 T € p. a.) und von der EU (≈ 139 T € p. a.) eingeworben. Es wurden 11 Promotionen abgeschlossen.

Themenfeld 5 – Energie & Umwelt

[25,3 VZÄ, davon 14,7 VZÄ Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen, 8,7 VZÄ Promovierende und 1,9 VZÄ Servicebereiche]

TF 05 befasst sich mit Grundlagen- und angewandter Forschung, die darauf abzielt, saubere und nachhaltige Ressourcen für zukünftige Prozesse im Bereich der Chemie und alternativen Energietechnologien zu nutzen. Im Fokus der Aktivitäten steht die Verwendung nachhaltiger Energiequellen, wie Sonnenlicht oder regenerativ erzeugter Strom, zum Antrieb chemischer Synthesen. Ein Schwerpunkt liegt auf der Wasserstofferzeugung, dessen Speicherung und Rückwandlung in elektrische Energie, insbesondere der katalytischen Herstellung und Zersetzung flüssiger Energieträger (bspw. Methanol, Ameisensäure) aus grünem Wasserstoff und CO_2 . Das Hinzufügen der natürlichen Aminosäure L-Lysin zu einem Ru-basierten Katalysatorsystem ermöglichte es, CO_2 direkt aus der Luft in Form von Formiaten zu binden und nach dem CCU-Konzept nachhaltig der Atmosphäre zu entziehen.

Künftig sollen bei den untersuchten Prozessen verstärkt Katalysatorsysteme auf Basis gut verfügbarer Metalle eingesetzt werden. Neue mechanistische Erkenntnisse in der photokatalytischen Wasserspaltung ermöglichen die Entwicklung von Systemen, die in einem wesentlich breiteren Wellenlängenbereich arbeiten.

Ein weiterer Schwerpunkt liegt auf der Rückführung von Treibhausgasen in die chemische Produktion. Dies beinhaltet bspw. die Abtrennung von CO_2 aus der Luft in für chemische Reaktionen signifikanten Mengen sowie dessen anschließende Umsetzung zu Kraftstoffen, Monomeren und Plattformchemikalien. In der letzten Dekade wurden weiterhin Verfahren für die Reinigung von Abwässern und Abgasströmen entwickelt. Für letzteres wurden bspw. neue Ta- und Mo-Katalysatoren eingeführt, die bis zu 95% der NO_x mit NH_3 bei niedrigen Temperaturen umsetzen.

Künftig soll in TF 05 die elektrochemische Katalyse eine größere Rolle spielen. Sie ermöglicht die direkte Nutzung grüner elektrischer Energie und die Vermeidung chemischer Oxidation- und Reduktionsmittel.

TF 05 hat 2019–2021 jährlich ≈ 26 Publikationen in Zeitschriften mit Begutachtungssystem veröffentlicht. Es hat im gleichen Zeitraum jährlich $\approx 0,7$ Patente angemeldet. Die

Drittmittelerträge betrugen 2019–2021 rund 686 T € p. a., sie wurden v. a. von Bund und Ländern (ø 236 T € p. a.) und von anderen Förderern (ø 261 T € p. a.) eingeworben. Es wurden 6 Promotionen abgeschlossen.

Themenfeld 6 – Effizientere Prozesse

[32,8 VZÄ, davon 19 VZÄ Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen, 8,6 VZÄ Promovierende und 5,3 VZÄ Servicebereiche]

Ziel des TF 06 ist die Energie- und Ressourcenoptimierung von wichtigen, industriell relevanten katalytischen Verfahren. Dabei stehen Entwicklungen von effizienteren Katalysatoren aber auch Verfahrensintensivierungen im Vordergrund. Hinsichtlich der Entwicklung effizienterer Katalysatoren sind neben wissenschaftlicher Weiterentwicklung auch gänzlich neue Materialkonzepte von Bedeutung. Um eine effizientere Prozessführung zu realisieren, werden innovative Technologien oder alternative Synthesewege erkundet. Der Kernansatz des Themenfeldes gilt der Optimierung katalytischer Kenngrößen wie Umsatz, Selektivität, Aktivität und Produktivität. Daneben kann die Steigerung der Katalysatorstabilität aber auch schon die Verminderung von Prozessschritten durch Direktsynthesen einen effizienteren Einsatz von Ressourcen bedeuten.

Ein anschauliches Beispiel ist die Realisierung einer sog. *Dream reaction*, deren Umsetzung seit über 60 Jahren von Industrie und Wissenschaft verfolgt wurde: Mittels direkter Dicarbonylierung von 1,3-Butadien lassen sich Adipate, bedeutsame Plattformchemikalien und Monomere, die im Millionen-Tonnenmaßstab bspw. zur Herstellung von Nylon genutzt werden, erstmals in einem Schritt synthetisieren. Ausschlaggebend für den Erfolg war die Entwicklung eines neuen P(III)-Liganden.

Künftig soll auch in diesem Themenfeld ein Schwerpunkt auf der Entwicklung nicht-toxischer und gut verfügbarer 3d-Metall-basierter Katalysatoren gelegt werden. Zudem soll mittels computergestützter Datenauswertung und neuer Simulationsmethoden Ressourcen geschont werden. Die Elektrokatalyse bietet das Potenzial, chemische Oxidations- und Reduktionsmittel durch elektrische Energie zu substituieren.

TF 06 hat 2019–2021 jährlich ø 33 Publikationen in Zeitschriften mit Begutachtungssystem veröffentlicht. Es hat im gleichen Zeitraum jährlich ø 1 Patent angemeldet und hielt 2021 15 Patente. Die Drittmittelerträge betrugen 2019–2021 rund 1,4 Mio. € p. a., sie wurden v. a. aus der Wirtschaft (ø 609 T € p. a.), von der EU (ø 233 T € p. a.) und von Bund und Ländern (ø 182 T € p. a.) eingeworben. Es wurden 21 Promotionen abgeschlossen.

Themenfeld 7 – Neue Produkte und Verfahren

[36,2 VZÄ, davon 19,4 VZÄ Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen, 13,4 VZÄ Promovierende und 3,5 VZÄ Servicebereiche]

Ziel der Untersuchungen in TF 07 ist die Entwicklung, Charakterisierung und Testung neuer Katalysatoren und Produkte sowie die Etablierung neuer Verfahren. Die Forschung im TF 07 basiert auf der bestehenden Expertise der LIKAT-Forscherinnen und -Forscher sowohl in grundlegenden als auch angewandten Aspekten der homogenen und heterogenen Katalyse. Dabei werden Expertisen von metallorganischer und Koordinationschemie

mit Hauptgruppenchemie, Photokatalyse sowie Organokatalyse kombiniert und ergänzt durch Aspekte der heterogenen Katalyse. Aus diesem Grund wird die Expertise vieler Themengruppen in TF 07 gebündelt. Seit der Etablierung der Matrixstruktur im Jahr 2019 ist es mit insgesamt 36,23 VZÄ aktuell das am stärksten besetzte Themenfeld. Neben industriennahen Forschungsprojekten nimmt im TF 07 die Grundlagenforschung einen großen Teil der Aktivitäten ein. Die Relevanz dieser Arbeiten sieht das LIKAT u.a. in der Untersuchung von Reaktivitäten und der Ergründung neuer Methoden, die Rückschlüsse auf katalysebezogene Fragestellungen erlaubt. Grundlegende Untersuchungen zur katalysierten Fluorierung organischer Moleküle sind bspw. die Basis für die Entwicklung neuer Syntheseverfahren in der Agro- oder Pharmaindustrie.

Künftig sollen in die Forschungsaktivitäten des TF 07 im Rahmen der Strategie LIKAT 2030 verstärkt erneuerbare Rohstoffe als Substrate integriert werden. Im Sinne einer Kreislaufwirtschaft werden u.a. Schwerpunkte auf die Rückgewinnung und Wiederverwendung von Katalysatorbestandteilen, wie Edelmetalle oder Phosphor, und Polymerbausteinen gesetzt.

TF 07 hat 2019–2021 jährlich ≈ 117 Publikationen in Zeitschriften mit Begutachtungssystem veröffentlicht. Es hat im gleichen Zeitraum jährlich $\approx 23,7$ Patente angemeldet und hielt 2021 34 Patente. Die Drittmittelträge betrugen 2019–2021 rund 1,1 Mio. € p. a., sie wurden v. a. aus der Wirtschaft (≈ 412 T € p. a.), von der EU (≈ 294 T € p. a.) und von Wettbewerbsverfahren der Leibniz-Gemeinschaft (≈ 157 T € p. a.) eingeworben. Es wurden eine Habilitation und 27 Promotionen abgeschlossen.

8. Umgang mit Empfehlungen der letzten externen Evaluierung

Die Empfehlungen der letzten Evaluierung (vgl. Stellungnahme des Senats der Leibniz-Gemeinschaft vom 23. November 2016) griff das Institut wie folgt auf:

1) „Seine neu implementierte und bereits bewährte **Programmbereich-Struktur** möchte das LIKAT beibehalten. Es wird ermutigt, dabei thematisch den eingeschlagenen Weg weiter zu verfolgen.“

Laut LIKAT waren die drei Programmbereiche flexibel und offen konzipiert. Sie bündelten durch enge Kooperationen untereinander und mit dem Servicebereich Analytik ihre jeweiligen Ressourcen, Forschungsthemen sowie Projektbearbeitungen. Das Institut hat das Konzept der Programmbereiche nun erweitert und in eine Matrixstruktur überführt, um die konzeptionelle Zusammenführung der homogenen und heterogenen Katalyse konsequent fortzuführen. Forschungsfragen werden nun in interdisziplinären zukunftsorientierten Themenfeldern von verschiedenen Themengruppen über die Grenzen der ehemaligen Programmbereiche hinaus gemeinsam bearbeitet.

2) „Für die nächsten Jahre ist eine Erweiterung des Instituts um **zwei neue Forschungsbereiche** „Kinetik und Theorie“ sowie „Moderne Technologien zwischen homogener und heterogener Katalyse“ vorgesehen. Die hierfür veranschlagten jährlichen Kosten in Höhe von rund 1,9 Mio. € sind plausibel. Die angestrebte Erweiterung stellt eine für die Zukunft des Instituts und dessen Wettbewerbsfähigkeit überaus wichtige strategische Maßnahme dar.“

Ihre Realisierung mit zusätzlichen Mitteln auf der Grundlage eines Sondertatbestands wird daher nachdrücklich befürwortet.“

Vor dem Hintergrund dieser Empfehlung erhält das LIKAT seit 2019 dauerhaft zusätzliche Mittel in Höhe von 1,1 Mio. € (Strategischer Sondertatbestand). Im Jahr 2016 entstand die zunächst explorative, später etablierte Themengruppe *Synergien zwischen homogener & heterogener Katalyse*. Die neue Leitung des Forschungsbereichs *Katalyse mit Bioressourcen* brachte zusätzliche Expertise in beiden Katalysedisziplinen mit. Hinsichtlich der Kinetik & Theorie erfolgte eine Fokussierung der vorhandenen Aktivitäten im Themenfeld 02 *Kinetik, Theorie & Mechanismen*. Dort ist seit Ende 2021 auch die Nachwuchsgruppe *Theorie der homogenen & Biokatalyse* angesiedelt.

3) „Nach dem voraussichtlichen Ausscheiden des Leiters im Jahr 2020 plant das LIKAT, den **Forschungsbereich (FB) „Asymmetrische Katalyse“** in seiner jetzigen Form nicht weiterzuführen. Eine thematische Umorientierung ist wissenschaftlich plausibel. Dennoch sollte das LIKAT prüfen, ob die Thematik in reduziertem Umfang, etwa im Zusammenhang mit dem Forschungsthema *Organokatalyse*, weiter am Institut erhalten bleiben kann.“

Der Forschungsbereich *Asymmetrische Katalyse*, der seit 2016 unter dem Namen *Hydrierungen & Hydroformylierungen* operiert, ist nach Angaben des LIKAT aktuell in der Auslaufphase, bestehende Projekte und Promotionen werden zum Abschluss gebracht. Es ist allerdings vorgesehen, dass das Personal mit entsprechender Expertise auch weiterhin am LIKAT beschäftigt und in einem langfristig angelegten Prozess für aktuelle Forschungsthemen verfügbar gemacht wird. Nach Angaben des Instituts gehört das Knowhow des Bereichs zu den prägenden Stärken der Vergangenheit im LIKAT und wird je nach Anforderung flexibel bearbeitet. Beispielsweise ist die vormals diesem Bereich angehörige Themengruppe *Mechanismen der homogenen Katalyse* nun dem FB *Moderne Konzepte der molekularen Katalyse* zugeordnet und bringt ihre Expertise in den Themenfeldern 02 und 03 ein.

4) „Der **Verwaltungsleiterin** des Instituts muss die Funktion als Beauftragte für den Haushalt übertragen werden.“

Nach Abstimmung mit den Zuwendungsgebern und den Aufsichtsgremien wurde eine entsprechende Änderung der Satzung bzw. der Geschäftsordnung vorgenommen. Parallel dazu wurden Maßnahmen ergriffen, um die bisherigen organisatorischen Rahmenbedingungen mit ihren Vorzügen zu erhalten. Das LIKAT weist außerdem darauf hin, dass im Frühjahr 2019 eine Doppelspitze im Vorstand des Instituts eingeführt wurde. Der Vorstand des Vereins im Sinne des § 26 BGB besteht nun aus der wissenschaftlichen Direktion, der kaufmännischen Direktion und aktuell zwei weiteren wissenschaftlichen Vorstandsmitgliedern. Der wissenschaftliche Direktor führt den Vorsitz im Vorstand. Beide Direktoren vertreten gemeinsam den Verein gerichtlich und außergerichtlich. Entsprechend wurden Satzung und Geschäftsordnung des LIKAT überarbeitet und aktualisiert.

5) „Zukünftig sollte, wie vom Senat der Leibniz-Gemeinschaft empfohlen, einmal zwischen zwei externen Evaluierungen ein das gesamte Institut umfassendes **Audit** stattfinden.“

Ein Audit wird nun mindestens einmal zwischen zwei Evaluierungen des Senats angesetzt. Im November 2020 hat der Wissenschafts- und Industriebeirat sein Audit für den

Berichtszeitraum 2017 - 2020 durchgeführt. Auch zukünftig sollen entsprechende regelmäßige Audits als Qualitätsprüfung stattfinden.

6) *„Derzeit ist die zweimalige Wiederberufung der Mitglieder des **Wissenschaftlichen Beirats** möglich. Die Standards der Leibniz-Gemeinschaft sehen hingegen lediglich die Möglichkeit zur einmaligen Wiederwahl vor. Eine entsprechende Satzungsänderung wird erwartet.“*

Gemeinsam mit den Aufsichtsgremien hat der Vorstand den Wiederberufungspassus der Satzung (§11 (1), Anlage 1.1) den Standards der Leibniz-Gemeinschaft angepasst: Die Mitglieder des Wissenschaftlichen Beirats werden mit Vorschlagsrecht des Vorstands und mit Zustimmung der Mitgliederversammlung vom Kuratorium für die Dauer von vier Jahren berufen. Einmalige Wiederberufung ist zulässig.

Anhang 1

Organigramm

Kuratorium		Mitgliederversammlung				Wissenschafts- & Industriebeirat								
Vors. Woldemar Venohr / WKM MV		Vors. Prof. Ralf Ludwig / Univ. Rostock				Vors. Prof. Brigitte Voit / IPF Dresden								
Vorstand	Prof. Matthias Beller	Prof. Angelika Brückner	Prof. Jennifer Strunk	Dr. Mirko Kirschowski			Stab							
	TF 01	TF 02	TF 03	TF 04	TF 05	TF 06	TF 07	TF 01 Struktur-Reaktivitäts-Beziehungen	TF 02 Kinetik, Theorie & Mechanismen	TF 03 Reaktionstechnik & Implementierung	TF 04 Erneuerbare Rohstoffe	TF 05 Energie & Umwelt	TF 06 Effizientere Prozesse	TF 07 Neue Produkte & Verfahren
FB Baráth								A. Brückner, W. Baumann (Stellv.)	E. Kondratenko, H. Jiao (Stellv.)	D. Linke, U. Armbruster (Stellv.)	E. Baráth, S. Tin (Stellv.)	J. Strunk, H. Junge (Stellv.)	S. Wohlrab, B. Müller (Stellv.)	T. Beweries, C. Hering-Junghans (Stellv.)
FB Beller														
FB Beweries														
FB Börner														
FB Brückner														
FB Francke														
FB Kragl														
FB Linke														
FB Strunk														
FB Wohlrab														
NWG														
Uni in Leibniz														
Servicebereich Analytik														
Personalvertretungen	Betriebsrat • Dr. J. Holz	Schwerbehinderte • A. Simmula	Gleichstellung • Dr. S. Hinze	Ombudsperson • Dr. W. Baumann										
LIKAT Rostock • Albert-Einstein-Str. 29A 18059 Rostock • Fon. 0381 1281-0 • Fax. 0381 1281-5000 • info@catalysis.de • catalysis.de														

Themenfelder	01 Struktur-Reaktivitäts- Beziehung	02 Kinetik, Theorie & Mechanismen	03 Reaktionstechnik & Implementierung	04 Erneuerbare Rohstoffe	05 Energie & Umwelt	06 Effizientere Prozesse	07 Neue Produkte & Verfahren
Forschungsbereiche	Angelika Brückner Wolfgang Baumann	Eugenii Kondratenko Haijun Jiao	David Linke Udo Ambruster	Eszter Baráth Sergey Tin	Jennifer Strunk Henrik Junge	Sebastian Wohlrab Bernd Müller	Torsten Beweries Christian Hering-Junghans
Katalyse mit Bioressourcen	Sel. Kat. Synthesemethoden Sergey Tin	Kat. m. phosphorhaltigen Materialien Christian Hering-Junghans	Synergie zw. homogener & heterogener Katalyse Jagedeesh Rajenahally	Sel. Kat. Synthesemeth. Sergey Tin Kat. m. phosphorhaltigen Materialien Christian Hering-Junghans		Synergie zw. homogener & heterogener Katalyse Jagedeesh Rajenahally	Sel. Kat. Synthesemeth. Sergey Tin Kat. m. phosphorhaltigen Materialien Christian Hering-Junghans
Angewandte Homogenkatalyse	Kat. f. Energietechnologien Henrik Junge Nachhal. Redoxreaktionen Kathrin Junge	Theorie der Katalyse Haijun Jiao Synergie zw. homogener & heterogener Katalyse Jagedeesh Rajenahally	Homog. Kat. f. Life Sciences Helfried Neumann Angew. Carbonylierungen Ralf Jackstell Kat. f. Energietechnologien Henrik Junge	Nachhal. Redoxreaktionen Kathrin Junge Synergie zw. homogener & heterogener Katalyse Jagedeesh Rajenahally	Kat. f. Energietechnologien Henrik Junge	Nachhal. Redoxreaktionen Kathrin Junge Homog. Kat. f. Life Sciences Helfried Neumann Angew. Carbonylierungen Ralf Jackstell	Nachhal. Redoxreaktionen Kathrin Junge Homog. Kat. f. Life Sciences Helfried Neumann
Moderne Konzepte der molekularen Katalyse	Kat. früher Übergangsmet. Fabian Reiß Kat. später Übergangsmet. Torsten Beweries Kat. Funktionalisierungen Jola Pospesch	Kat. früher Übergangsmet. Fabian Reiß Mech. d. homog. Katalyse Hans-Joachim Drexler				Kat. früher Übergangsmet. Fabian Reiß Kat. später Übergangsmet. Torsten Beweries Kat. Funktionalisierungen Jola Pospesch	Kat. früher Übergangsmet. Fabian Reiß Kat. später Übergangsmet. Torsten Beweries Kat. Funktionalisierungen Jola Pospesch
Hydrierungen & Hydroformylierungen				Katalyse zu Heterocyclen Xiao-Feng Wu		Hydrier. & Hydroformyl. Jens Holz	Katalyse zu Heterocyclen Xiao-Feng Wu Hydrier. & Hydroformyl. Jens Holz
Katalytische in situ-Studien	Magn. Res. & Röntgenmeth. Jabor Rabeah Opt. Spektroskopie Christoph Kubis	Magn. Res. & Röntgenmeth. Jabor Rabeah Opt. Spektroskopie Christoph Kubis			Magn. Res. & Röntgenmeth. Jabor Rabeah Opt. Spektroskopie Christoph Kubis		
Elektrochemie & Katalyse					Molekulare Elektrochemie Robert Francke	Molekulare Elektrochemie Robert Francke Kat.design f. Elektrosynth. Bernd Müller	Molekulare Elektrochemie Robert Francke Kat.design f. Elektrosynth. Bernd Müller
Biokatalyse & Polymerchemie			Polymerchemie & Katalyse Esteban Mejia Biokatalyse Udo Kragl	Polymerchemie & Katalyse Esteban Mejia Biokatalyse Udo Kragl		Polymerchemie & Katalyse Esteban Mejia	Polymerchemie & Katalyse Esteban Mejia
Katalysator-ent- wicklung & Reaktionstechnik	Reaktionsmechanismen Eugenii Kondratenko	Reaktionsmechanismen Eugenii Kondratenko	Hochdurchsatz-Technologie Udo Rodemerk Reaktionstechnik David Linke		Reaktionsmechanismen Eugenii Kondratenko Reaktionstechnik David Linke	Reaktionsmechanismen Eugenii Kondratenko Hochdurchsatz-Technologie Udo Rodemerk Reaktionstechnik David Linke	Reaktionsmechanismen Eugenii Kondratenko Hochdurchsatz-Technologie Udo Rodemerk Reaktionstechnik David Linke
Heterogene Photokatalyse	Struktur-Wirk-Beziehungen Jennifer Strunk				Photokat. CO ₂ -Reduktion Tim Peppel	Mikroverfahrenstechnik Norbert Steinfeldt	
Heterogenkatalytische Verfahren	Oberflächenchem. angew. Kat. Ali Abdel-Mageed Anorg. Funktionsmaterialien Sebastian Wohlrab		Technologieorient. Verf. Udo Ambruster Oberflächenchem. angew. Kat. Ali Abdel-Mageed Anorg. Funktionsmaterialien Sebastian Wohlrab	Oberflächenchem. angew. Kat. Ali Abdel-Mageed Anorg. Funktionsmaterialien Sebastian Wohlrab	Technologieorient. Verf. Udo Ambruster	Technologieorient. Verf. Udo Ambruster Anorg. Funktionsmaterialien Sebastian Wohlrab	
Nachwuchsgruppen	Moderne org. Chemie Osama El-Sepelgy Theorie d. homog. & Biokat. Milica Feldt	Theorie d. homog. & Biokat. Milica Feldt		Moderne org. Chemie Osama El-Sepelgy Theorie d. homog. & Biokat. Milica Feldt			Theorie d. homog. & Biokat. Milica Feldt
Uni in Leibniz Assoziierte Gruppen	Björn Corzilius · Marko Hapke · Axel Schulz	Ralf Ludwig · Klaus Neymeyr		Thomas Werner	Matte Brasholz · Klaus Neymeyr · Wolfram Seidel	Thomas Werner	Marko Hapke · Axel Schulz Thomas Werner
Analytik Wolfgang Baumann					Analytik		

Anhang 2**Publikationen, Patente und Gutachten**

	Zeitraum		
	2019	2020	2021
Veröffentlichungen insgesamt	301	261	318
Monografien	1	0	0
Einzelbeiträge in Sammelwerken	5	11	11
Aufsätze in Zeitschriften mit Begutachtungssystem	289	248	306
Aufsätze in übrigen Zeitschriften	6	0	0
Herausgeberschaft (Sammelwerke)	0	2	1

Patente	2019	2020	2021
Prioritätsbegründende Anmeldungen (im Kalenderjahr)	21	26	39
Patente (Bestand jeweils am 31.12. des Jahres)	114	127	53
LIKAT-Patentfamilien (Bestand jeweils am 31.12. des Jahres)	0	0	0

Weitere Schutzrechte¹	2019	2020	2021
Prioritätsbegründende Anmeldungen (im Kalenderjahr)	0	0	0
Schutzrechte (Bestand jeweils am 31.12. des Jahres)	1	1	0
Schutzrechtsfamilien (Bestand jeweils am 31.12. des Jahres)	0	0	0

¹ Zu den finanziellen Aufwendungen und Erträgen aus Patenten, übrigen Schutzrechten und Lizenzen vgl. Anhang 3 „Erträge und Aufwendungen“.

Anhang 3

Erträge und Aufwendungen

Erträge		2019			2020			2021 (vorl. IST)		
		T€	%	%	T€	%	%	T€	%	%
Erträge insg. (Σ I., II. & III.; ohne DFG-Abgabe)		19.297			23.732			27.033		
I.	Erträge (Σ I.1., I.2. & I.3)	19.107	100%		20.576	100%		21.822	100%	
1.	Institutionelle Förderung (außer Baumaßnahmen & Grundstückserwerb)	11.992	63%		13.240	64%		13.567	62%	
1.1	Institutionelle Förderung (außer Baumaßnahmen & Grundstückserwerb) durch Bund und Länder nach AV-WGL	11.992			12.740			12.937		
1.2	Institutionelle Förderung (außer Baumaßnahmen und Grundstückserwerb), soweit nicht nach AV-WGL	0			0			0		
1.3	Erträge aus Verbrauch Rückstellung SB-Mittel Betrieb für Invest	0			500			630		
2.	Erträge aus Zuwendungen zur Projektfinanzierung ¹	7.042	37%	100%	7.239	35%	100%	8.160	37%	100%
2.1	DFG	558		8%	736		10%	1.159		14%
2.2	Leibniz-Gemeinschaft (Wettbewerb)	500		7%	571		8%	634		8%
2.3	Bund, Länder	1.486		21%	724		10%	1.568		19%
2.4	EU	909		13%	1.325		18%	902		11%
2.5	Wirtschaft	3.102		44%	3.329		46%	2.683		33%
2.6	Stiftungen	24		0%	75		1%	91		1%
2.7	andere Förderer ²	463		7%	478		7%	1.123		14%
3.	Erträge aus Leistungen	73	0%		98	0%		96	0%	
3.1	Erträge aus Auftragsarbeiten	0			0			0		
3.2	Erträge aus Publikationen	0			0			0		
3.3	Erträge aus der Verwertung geistigen Eigentums, für das die Einrichtung ein gewerbliches Schutzrecht hält (Patente, Gebrauchsmuster etc.)	0			0			0		
3.4	Erträge aus der Verwertung geistigen Eigentums ohne gewerbliches Schutzrecht	31			45			10		
3.5	Erträge für weitere Leistungen	41			53			86		
II.	Sonstige Erträge (z. B. Mitgliedsbeiträge, Spenden, Mieten, Rücklage-Entnahmen)	-102			22			210		
III.	Erträge für Baumaßnahmen (institutionelle Förderung Bund und Länder, EU-Strukturfonds etc.)	292			3.133			5.001		
Aufwendungen		T€			T€			T€		
Aufwendungen (ohne DFG-Abgabe)		19.214			23.663			24.965 ⁴		
1.	Personal	11.842			12.187			13.177		
2.	Materialaufwand	966			1.181			1.298		
3.	Geräteinvestitionen	2.538			3.185			2.122		
4.	Baumaßnahmen, Grundstückserwerb	301			3.219			5.031		
5.	Sonstige betriebliche Aufwendungen ³	3.567			3.891			3.336		
DFG-Abgabe (soweit für die Einrichtung gezahlt, 2,5% der Erträge aus der inst. Förderung)		312			317			322		

[1] Die Summe aller Drittmittel des LIKAT ist größer als die Summe der Drittmittel der sieben TF, resultierend aus Projekten, die keinem TF zugeordnet werden, bspw. aus Förderprogrammen zur Transferarbeit im Bereich Stab. [2] Carbon Dioxide Activation Centre (Universität Aarhus), Qatar Environment and Energy Research Institute, BioFact (Research Foundation Flanders FWO), FCI, Technologie Beratungs-Institut GmbH, Fraunhofer-Institut für Großstrukturen in der Produktionstechnik (IGP), DECHEMA, Zhejiang University China, AiF, DAAD. [3] Gebäudebewirtschaftung, Wartungen, Fortbildungskosten, Lizenzen (Software, Datenbanken, Arbeitsschutz etc.). [4] Der Saldo zwischen Erträgen und Aufwendungen setzt sich für 2021 zusammen aus dem Kassenbestand 837 € und den Programmpauschalen/Overheads 742 € (Übertrag nach 2022) sowie Gewinnen aus Industrieprojekten 489 € (Rücklage).

Anhang 4

Personalübersicht

(Stand: 31.12.2021)

	Vollzeitäquivalente		Personen ¹		Frauen		Ausländer:innen
	insgesamt	davon dm-finanziert	insgesamt	davon befristet	insgesamt	davon befristet	insgesamt
	Zahl	Prozent	Zahl	Prozent	Zahl	Prozent	Zahl
Forschung (ohne Stipendiat:innen und Gäste mit ext. Finanzierung)	102,1	52%	130,5	65%	36	78%	19
Professur/Wiss. Direktion (W3)	1,0	0%	1,0	0%	0	0%	0
Professuren/Wiss. Vorstand (W2)	2,0	0%	2,0	0%	2	0%	0
Forschungsbereichsleitungen (E15)	5,0	0%	5,0	0%	1	0%	1
Themenleitungen/Nachwuchsgruppenleitungen (E14)	24,8	6%	25,0	12%	3	67%	1
Wissenschaftler:innen ohne Leitungsaufgaben (E13, E14)	40,3	68%	42,5	64%	16	75%	9
Promovierende (A13, E13, E13/2 u.ä.)	29,0	85%	55,0	100%	14	100%	8
Assoz. Hochschullehrer (Honorar)	1,8	6%	8,0	100%	0	0%	0
Wissenschaftsunterstützendes Personal (Labor, Servicebereiche Analytik & Technik, IT) ²	46,1	2%	47,5				
Labor (E9 bis E12)	9,0	0%	9,5				
Labor (E5 bis E8)	8,7	11%	9,0				
Servicebereich Analytik Leitung (E15)	1,0	0%	1,0				
Analytik (Großgeräte) (E13 bis E14)	5,5	0%	5,5				
Analytik (Service) (E7 bis E13)	7,8	0%	8,5				
Servicebereich Technik Leitung (E12)	1,0	0%	1,0				
Werkstattleitung (E10)	1,0	0%	1,0				
Werkstätten (E5 bis E8)	4,0	0%	4,0				
Hausdienste (E1 bis E4)	4,0	0%	4,0				
Team Informationstechnik - IT Leitung (E14)	1,0	0%	1,0				
Informationstechnik (E9 bis E12)	3,0	0%	3,0				
Administration (Servicebereich Verwaltung & Stab)	17,5	0%	19,0				
Servicebereich Verwaltung Leitung/Kaufm. Direktion (E15)	1,0	0%	1,0				
Verwaltung (Koordinator:innen, Sachgebietsleitungen) (E13 bis E14)	2,0	0%	2,0				
Verwaltung (ohne Leitungsaufgaben) (E6 bis E12)	10,7	0%	11,5				
Stabsleitung (E14)	0,8	0%	1,0				
Stab (E13, E14)	1,2	0%	1,5				
Stab (Sekretariat) (E9)	1,9	0%	2,0				
Studentische Hilfskräfte	0,4	0%	2,0				
Stipendiat:innen an der Einrichtung ³	38,7	92%	59,0		22		20
Promovierende	20,7	90%	41,0		17		15
Forschung (Wissenschaftler:innen & Post-Docs)	18,0	94%	18,0		5		5
Sonstige ⁴	-	-	31,0				

[1] Personen mit anteiligen VZÄ in zwei Kategorien werden als 0,5 Kopf in beiden Kategorien gewertet, [2] Die Summe des wissenschaftlichen und technischen Personals des LIKAT ist größer als die Summer derer der sieben TF, resultierend aus Personal, das keinem TF zugeordnet wird, bspw. Personal der Analytik, [3] inkl. Gästen mit externer Finanzierung, [4] Masterstudierende, geringfügig beschäftigte Wissenschaftler:innen, ruhende Verträge (Krankheit oder Elternzeit), etc.

Anlage B: Bewertungsbericht

Leibniz-Institut für Katalyse e.V., Rostock (LIKAT)

Inhaltsverzeichnis

1. Zusammenfassung und zentrale Empfehlungen.....	B-2
2. Gesamtkonzept, Aufgaben und Arbeitsergebnisse	B-3
3. Veränderungen und Planungen.....	B-5
4. Steuerung und Qualitätsmanagement.....	B-7
5. Personal	B-8
6. Kooperation und Umfeld	B-10
7. Teilbereiche des LIKAT	B-11
8. Umgang mit Empfehlungen der letzten externen Evaluierung	B-15

Anhang:

Mitglieder der Bewertungsgruppe

1. Zusammenfassung und zentrale Empfehlungen

Das Leibniz-Institut für Katalyse e.V. (LIKAT) betreibt sehr erfolgreich grundlagenorientierte und angewandte Forschung auf dem Gebiet der homogenen und heterogenen Katalyse. Dazu werden Methoden und Ansätze aus verschiedenen Teildisziplinen der Chemie sowie aus den Nanowissenschaften und der Verfahrenstechnik kombiniert. Im Rahmen eines ganzheitlichen Forschungsansatzes werden Katalysatormaterialien identifiziert und präpariert, mit dem Ziel, neuartige chemische Verfahren zu entwickeln und zu optimieren.

Das LIKAT erarbeitet regelmäßig hervorragende Forschungsergebnisse, die zu einer Vielzahl an Veröffentlichungen in international stark wahrgenommenen Zeitschriften führen. Hervorzuheben ist u. a. die Entwicklung katalytischer Prozesse basierend auf Plattformchemikalien, die aus Biomasse statt aus fossilen Rohstoffen gewonnen wurden. Das Institut überführt Forschungsergebnisse zudem sehr erfolgreich in die Anwendung. Zwischen 2019 und 2021 war es an 86 Patentanmeldungen sowie 10 Überführungen von Prozessen aus dem Labormaßstab in die industrielle Produktion beteiligt. Das LIKAT ist ein geschätzter Partner von Unternehmen aus dem In- und Ausland und bearbeitet jährlich etwa 50 bi- und multilaterale Projekte. Die Erträge aus Drittmitteln sind bemerkenswert hoch, wobei der Anteil der eingeworbenen Projektmittel aus der Wirtschaft mit 41 % die erfolgreiche Zusammenarbeit mit der Industrie unterstreicht. Mit dem 2022 eröffneten *Catalysis2Scale*-Transfertechnikum hat das Institut seine ausgezeichnete Ausstattung um weitere Kapazitäten zur Überführung von Projekten in den Pilotmaßstab erweitert.

Das LIKAT hat sich seit der letzten Evaluierung hervorragend weiterentwickelt. Die Anzahl der Forschungsbereiche (FB; Organisationseinheiten mit Personal- und Budgetverantwortung) erhöhte sich von sieben auf derzeit zehn. Für die Leitung der neuen sowie von drei weiteren FB, die ruhestandsbedingt neu zu besetzen waren, wurden sechs ausgewiesene Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler gewonnen. Zudem wurden im Jahr 2019 sieben Themenfelder (TF) definiert, die von den FB gemeinsam bearbeitet werden. Die neue Matrixstruktur ermöglicht es, die Arbeiten zur homogenen und heterogenen Katalyse noch stärker miteinander zu verzahnen und die interne Zusammenarbeit zu intensivieren. Die Planungen für die Zukunft sind sehr vielversprechend, einen Schwerpunkt bildet die Entwicklung von Produktionsverfahren basierend auf erneuerbaren Ressourcen. Die Leistungen der TF werden viermal als „exzellent“ bewertet, zweimal als „sehr gut bis exzellent“ und einmal als „sehr gut“.

Das Institut kooperiert eng mit der Universität Rostock, u. a. über derzeit drei gemeinsame Berufungen (zwei weitere Verfahren laufen) und zwei außerplanmäßige Professuren. Daneben arbeitet das LIKAT im Rahmen des Kooperationsmodells *Uni in Leibniz* erfolgreich mit acht assoziierten Professoren der Universität Rostock zusammen, die über Honorarvereinbarungen am Institut tätig sind.

Im Folgenden werden die im Bewertungsbericht durch Fettdruck hervorgehobenen zentralen Hinweise zusammengefasst:

Veränderungen und Planungen (Kapitel 3)

1. Im **Stellenplan sind fünf gemeinsame Berufungen** vorgesehen, davon zwei auf W3-Niveau und drei als W2-Professur. Bei der Gewinnung von wissenschaftlich herausragendem Leitungspersonal steht das LIKAT im Wettbewerb mit den international führenden Einrichtungen im Bereich der Katalyseforschung. Es wäre daher von Vorteil, wenn das Institut in Zukunft die Option hätte, alle fünf Professuren auf W3-Niveau zu besetzen (wobei auch eine W2-Besetzung weiterhin möglich bleiben sollte). Es ist sehr erfreulich, dass das Sitzland und die Universität Rostock in den Gesprächen vor Ort diesbezüglich ihre Unterstützung zugesagt haben.

Vor diesem Hintergrund wird empfohlen, die anstehende Ausschreibung für die Leitung des FB „Katalytische in-situ Studien“ als W3-Professur vorzusehen. Die sehr erfolgreiche Leiterin dieses für das LIKAT zentralen FB ging im März 2023 in den Ruhestand. Das seit Mai 2022 laufende Verfahren für eine W2-Professur „Synergien zwischen homogener und heterogener Katalyse“ zur Leitung eines anderen FB sollte wie geplant abgeschlossen werden.

Steuerung und Qualitätsmanagement (Kapitel 4)

2. Der **Wissenschaftliche Beirat** begleitet das LIKAT mit großem Engagement. Wie für Leibniz-Einrichtungen üblich wurde 2020 ein Audit durchgeführt. Zukünftig sollten dabei über die Gesamtentwicklung des Instituts hinaus auch die einzelnen Arbeitseinheiten betrachtet und bewertet werden. Beschäftigte von Einrichtungen, mit denen das LIKAT institutionell kooperiert, sollten nicht Mitglied im Beirat sein.

Personal (Kapitel 5)

3. Es wird begrüßt, dass das LIKAT an verschiedenen nationalen und internationalen Programmen zur Förderung von Promovierenden beteiligt ist. Das Institut sollte seine Planungen weiterverfolgen und ein eigenes, auf die Anforderungen des LIKAT zugeschnittenes, **strukturiertes Doktorandenprogramm** entwickeln. Dieses Programm sollte auch den am LIKAT tätigen extern finanzierten Promovierenden offenstehen.
4. Der **Anteil an Wissenschaftlerinnen** im Bereich Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen sank von 32 % (38 von 120 Personen) Ende 2014 auf 28 % (36 von 131 Personen) Ende 2021. Es wird erwartet, dass das LIKAT den Frauenanteil steigert, insbesondere auf der Leitungsebene müssen weitere Verbesserungen erreicht werden.

2. Gesamtkonzept, Aufgaben und Arbeitsergebnisse

Gesamtkonzept und Aufgaben

Das Leibniz-Institut für Katalyse e.V. (LIKAT) betreibt sehr erfolgreich grundlagenorientierte und angewandte Forschung auf dem Gebiet der homogenen und heterogenen Katalyse. Dazu werden Methoden und Ansätze aus verschiedenen Teildisziplinen der Chemie sowie aus den Nanowissenschaften und der Verfahrenstechnik kombiniert. Im Rahmen eines ganzheitlichen Forschungsansatzes werden Katalysatormaterialien identifiziert und präpariert, mit dem Ziel, neuartige chemische Verfahren zu entwickeln und zu optimieren.

Das LIKAT gliedert sich in derzeit zehn Forschungsbereiche (FB). Den Forschungsreichsleitungen obliegt die Forschungs-, Personal- und Budgetplanung. Im Rahmen einer überzeugend konzipierten Matrixstruktur bearbeiten die FB gemeinsam sieben Themenfelder (TF), die von einem bzw. einer Themenfeldsprecher(in) und einer Stellvertretung koordiniert werden (siehe Organigramm in Appendix 1 der Darstellung). Die TF 1 bis TF 3 sind methodisch-orientiert und die TF 4 bis TF 7 stofflich-orientiert. Die Leistungen der sieben TF werden vier Mal als „exzellent“ bewertet, zweimal als „sehr gut bis exzellent“ und einmal als „sehr gut“ (s. im Einzelnen Kapitel 7).

Zentrale Arbeitsergebnisse

Forschung

Das LIKAT erarbeitet regelmäßig hervorragende Forschungsergebnisse. Hervorzuheben ist ein am Institut entwickeltes Katalysatorsystem, das es erstmalig ermöglicht, die mehrstufige Synthese von Adipaten aus 1,3-Butadien in einem Schritt durchzuführen. Die Reaktion wird derzeit in eine Miniplant-Anwendung überführt. Das Katalysatorsystem lässt sich auf weitere Prozesse übertragen und ebnet den Weg für eine neuartige Syntheseroute für zahlreiche feinchemische Produkte.

Ein weiteres *Highlight* ist die Entwicklung katalytischer Prozesse basierend auf Plattformchemikalien, die aus Biomasse statt aus fossilen Rohstoffen gewonnen wurden. Hervorzuheben ist ebenso die Entwicklung eines Reaktionsmechanismus auf der Grundlage umweltverträglicher Trägerkatalysatoren bestehend aus handelsüblichen Materialien, der die bisher eingesetzten giftigen und kostenintensiven Katalysatoren ersetzt. Die hervorragenden Forschungsergebnisse führten zu einer Vielzahl an Veröffentlichungen in international stark wahrgenommenen Zeitschriften.

Transfer

Auf Grundlage der Forschungsergebnisse entwickelt das LIKAT innovative Verfahren und Technologien und überführt diese regelmäßig sehr erfolgreich in die Anwendung. Dies schlägt sich u. a. darin nieder, dass Mitarbeitende des LIKAT zwischen 2019 und 2021 an 86 Patentanmeldungen sowie 10 Überführungen von Prozessen aus dem Labormaßstab in die industrielle Produktion beteiligt waren (Pilotmaßstab, klein-tonnagige Produktion oder Großproduktion). Patenteinnahmen werden am LIKAT nur in geringem Umfang generiert, da die internationale Patentanmeldung aus Kostengründen in der Regel durch die Industriepartner vorgenommen wird. Für den Fall einer Kommerzialisierung wird das Institut am Gewinn beteiligt. Diese Patentstrategie ist zweckmäßig.

Das LIKAT ist ein sehr geschätzter Partner von Industrieunternehmen, wie z. B. *Evonik Industries AG*, *Henkel AG & Co.*, *Symrise AG* oder *Apex Energies*. Das Institut bearbeitet jährlich etwa 50 bi- und multilaterale Projekte, was sich auch in hohen Drittmiteinnahmen niederschlägt (siehe Kapitel 4). Von großer Bedeutung für die Zusammenarbeit ist, dass das LIKAT in der Lage ist, Chemikalien in Größenordnungen herzustellen, die den Labormaßstab übersteigen. Die Kooperationen werden administrativ sehr gut unterstützt. So können auch sehr kurzfristig Kooperationsverträge abgeschlossen und auch Projekte mit vergleichsweise kurzen Laufzeiten am LIKAT

bearbeitet werden. Zudem ergeben sich aus den Kooperationsprojekten regelmäßig weiterführende Fragestellungen, die zu neuen Forschungsprojekten am LIKAT führen. Dabei ist positiv hervorzuheben, dass die Industriepartner dem Institut die entsprechenden Daten zur weiteren Bearbeitung bereitstellen.

Im Jahr 2022 wurde das Catalysis2Scale-Transfertechnikum eröffnet. Für diese Baumaßnahme erhielt das LIKAT im Zeitraum von 2019-2021 ca. 8,4 Mio. €. Diese Forschungsinfrastruktur erweitert die Kapazitäten des LIKAT, Projekte in den Pilotmaßstab zu überführen, signifikant.

Infrastruktur

Der Servicebereich Analytik ist für die Forschung des gesamten Instituts von zentraler Bedeutung. Die Mitarbeitenden weisen eine sehr hohe Expertise auf. Die Infrastruktur steht zum Teil für die externe Nutzung zur Verfügung. Von dort werden insbesondere die *operando-Messtechniken* stark nachgefragt.

Im Bereich des Datenmanagements ist das Institut mit der Sprecherfunktion des wissenschaftlichen Direktors im Konsortium *NFDI4Cat* mit 16 Partnern federführend. Das Konsortium plant, übergreifende Repositorien und Standards zur Speicherung von Daten inklusive Metadaten zu entwickeln, um die verschiedenen Disziplinen der Katalyse im Hinblick auf das Datenmanagement zusammenzuführen.

3. Veränderungen und Planungen

Entwicklung der Einrichtung seit der letzten Evaluierung

Das LIKAT hat sich seit der letzten Evaluierung hervorragend weiterentwickelt. So wurden schlüssige Veränderungen auf der Ebene der FB (Organisationseinheiten mit Personal- und Budgetverantwortung) vorgenommen. Die Zahl der FB wurde von sieben auf zehn erhöht. Von den sieben existierenden FB wurden vier unter gleicher Leitung fortgeführt. In den drei anderen wurden die Leitungsstellen ruhestandsbedingt neu besetzt und die FB inhaltlich neu ausgerichtet. Zudem wurden drei FB neu eingerichtet, so dass derzeit insgesamt zehn FB existieren. Da sich ein FB ruhestandsbedingt in der Auslaufphase befindet und nicht fortgeführt wird, wird das LIKAT in Zukunft über neun FB verfügen. Für diesen überzeugend vollzogenen Wachstumsprozess setzte das LIKAT u. a. Mittel ein, die es seit 2019 im Anschluss an eine Empfehlung der letzten Evaluierung dauerhaft zusätzlich von Bund und Ländern erhält.

Für alle sechs neu zu besetzenden FB-Leitungspositionen (s.o.) wurden ausgewiesene Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler gewonnen. In zwei Fällen übernahmen erfolgreiche Wissenschaftler die Position, die bereits zuvor am LIKAT tätig waren. Für die Leitung der vier anderen FB wechselten zwei Wissenschaftlerinnen und zwei Wissenschaftler von außerhalb an das LIKAT.

Zur besseren inhaltlichen Verknüpfung von homogener und heterogener Katalyse sowie der weiteren Stärkung der internen Zusammenarbeit wurde 2019 eine überzeugend kon-

zipierte Matrixstruktur eingeführt. In diesem Rahmen bearbeiten die FB gemeinsam sieben Themenfelder. Die Bewertungsgruppe begrüßt, dass das LIKAT die Themenfelder dynamisch anpassen und somit entsprechend auf zukünftige Entwicklungen reagieren kann.

Strategische Arbeitsplanung für die nächsten Jahre

Die in der „Strategie LIKAT 2030“ formulierte Arbeitsplanung für die Zukunft ist sehr vielversprechend. Ziel ist es, neuartige katalytische Prozesse zu entwickeln, um Kreislaufströme wie den Kohlenstoff- und den Phosphorkreislauf zu schließen, und den Ressourceneinsatz zu verringern. Vor diesem Hintergrund fokussiert das LIKAT u. a. auf die Entwicklung von Produkten und Produktionsverfahren basierend auf erneuerbaren Ressourcen. Ein weiterer Schwerpunkt besteht in der Untersuchung von Möglichkeiten zur Rückgewinnung und Wiedereinbringung dieser Ressourcen in die chemische Produktion. Zudem soll das Datenmanagement optimiert und die Entwicklungskette vom Katalysator zum Prozess digitalisiert werden.

Im Stellenplan sind fünf gemeinsame Berufungen vorgesehen, davon zwei auf W3-Niveau und drei als W2-Professur. Bei der Gewinnung von wissenschaftlich herausragendem Leitungspersonal steht das LIKAT im Wettbewerb mit den international führenden Einrichtungen im Bereich der Katalyseforschung. Es wäre daher von Vorteil, wenn das Institut in Zukunft die Option hätte, alle fünf Professuren auf W3-Niveau zu besetzen (wobei auch eine W2-Besetzung weiterhin möglich bleiben sollte). Es ist sehr erfreulich, dass das Sitzland und die Universität Rostock in den Gesprächen vor Ort diesbezüglich ihre Unterstützung zugesagt haben.

Vor diesem Hintergrund wird empfohlen, die anstehende Ausschreibung für die Leitung des FB „Katalytische in-situ Studien“ als W3-Professur vorzusehen. Die sehr erfolgreiche Leiterin dieses für das LIKAT zentralen FB ging im März 2023 in den Ruhestand. Das seit Mai 2022 laufende Verfahren für eine W2-Professur „Synergien zwischen homogener und heterogener Katalyse“ zur Leitung eines anderen FB sollte wie geplant abgeschlossen werden.

Im Jahr 2029 wird der langjährige wissenschaftliche Direktor des LIKAT in den Ruhestand eintreten. Er leitet das Institut mit herausragendem Erfolg und hat es zu einer der weltweit führenden Einrichtungen im Bereich der Katalyseforschung entwickelt. Es wird begrüßt, dass das Aufsichtsgremium und der wissenschaftliche Beirat den anstehenden Wechsel bereits im Blick haben und planen, die notwendigen Schritte rechtzeitig einzuleiten, um die Direktorenposition nahtlos mit einer international ausgewiesenen Führungspersonlichkeit zu besetzen.

Das im Jahr 2022 eröffnete Catalysis2Scale-Transfertechnikum wird maßgeblich dazu beitragen, die Überführung von Ergebnissen in die Anwendung, d. h. aus dem Labor- in den Technikumsmaßstab, zu stärken. Wie vom LIKAT vorgesehen, sind für den Betrieb des Technikums zusätzliche personelle Ressourcen notwendig. Das LIKAT hat dazu zum 1. Januar 2023 einen Antrag auf zusätzliche Mittel der institutionellen Förderung vorgelegt, über den in einem gesonderten Verfahren entschieden wird. Es wird begrüßt, dass das Institut sich auch auf den Fall vorbereitet, dass das Verfahren nicht erfolgreich verläuft, und entsprechende alternative Planungen verfolgt.

4. Steuerung und Qualitätsmanagement

Ausstattung und Förderung

Budget

Die institutionelle Förderung ist für die derzeitigen Aufgaben des LIKAT auskömmlich. Sie umfasste in den Jahren 2019–2021 durchschnittlich 12,9 Mio. € pro Jahr.

Die Erträge aus Drittmitteln sind bemerkenswert hoch. Sie betrugen im Durchschnitt der Jahre 2019–2021 7,6 Mio. € p.a. (37 % des Gesamtbudgets) und stammten im Wesentlichen aus Zuwendungen für wissenschaftliche Projekte (Ø 7,5 Mio. € p.a.). Hervorzuheben sind die erfolgreichen Einwerbungen von Mitteln aus der Wirtschaft, die einen Anteil von 41 % der Drittmittel ausmachten. Wie empfohlen wurden die DFG-Einnahmen seit der letzten Evaluierung gesteigert.

Räumliche und apparative Ausstattung

Die räumliche Ausstattung des Instituts ist angemessen. Das Institut hat seinen Sitz auf dem Campus der Universität Rostock in einem Gebäudekomplex mit einer Laborfläche von ca. 3.150 m². Zusätzlich wird seit Sommer 2022 auf über 1.000 m² das *Catalysis2Scale*-Transfertechnikum mit weiteren Laboren, Büros und einer Versuchshalle betrieben.

Das LIKAT verfügt über eine hervorragende gerätetechnische Ausstattung. Die Infrastruktur der Forschungslabore und des Servicebereichs Analytik umfasst u. a. kontinuierliche und Druckapparaturen, *Gloveboxen*, eigens entwickelte Anlagen für die *operando*-Spektroskopie und kinetische Untersuchungen sowie moderne analytische Großgeräte. Die notwendige stetige Erneuerung der umfangreichen technischen Infrastruktur stellt eine große finanzielle Herausforderung für das LIKAT dar. Eine zusätzliche Belastung entsteht zudem durch die derzeit stark steigenden Betriebskosten. Es wird begrüßt, dass das LIKAT und seine Zuwendungsgeber anstreben, diese Mehrbelastung möglichst so aufzufangen, dass notwendige Investitionen in die Forschungsinfrastruktur nicht zurückgestellt werden müssen.

Die digitale Infrastruktur des LIKAT ist hervorragend. Sie umfasst u. a. ein Intranet-System, das speziell auf die Archivierung von Messdaten der analytischen Geräte zugeschnitten ist. Das Institut verfügt über ein IT-Sicherheitskonzept und arbeitet kontinuierlich daran, das Sicherheitsniveau der Infrastruktur weiter auszubauen. Der Servicebereich Technik bündelt effizient die Betreuung von Haustechnik, Werkstätten und Glasbläserei.

Aufbau- und Ablauforganisation

Es wird begrüßt, dass der Vorstand des LIKAT im Jahr 2019 erweitert wurde. Er besteht laut Satzung nun aus der wissenschaftlichen und der kaufmännischen Direktion sowie bis zu drei (derzeit zwei) weiteren wissenschaftlichen Vorstandsmitgliedern. Der Vorstand führt gemeinsam die Forschungsplanung und -kontrolle durch. Er wird vom Kuratorium auf jeweils fünf Jahre bestellt.

Die Leitungs- und Kommunikationsstrukturen am LIKAT sind effizient und effektiv. Die Leitungsrunde umfasst neben den Vorstandsmitgliedern die Leitungen der Forschungs- und

Servicebereiche, die Themenfeldsprecherinnen und -sprecher, die PhD- und PostDoc-Vertretung, die Vertretung des Betriebsrats sowie bei Bedarf auch die Leitungen der assoziierten Hochschulgruppen. Sie tagt mindestens monatlich und diskutiert aktuelle Probleme und organisatorische Planungen.

Zum Informationsaustausch auf allen Ebenen finden neben den halbjährlichen, thematisch fokussierten Institutsseminaren zusätzlich eigene Seminare der Forschungsbereiche und Themenfeldtreffen statt. Die sehr gute interne Kommunikation spiegelt sich in einer hohen Mitarbeiterzufriedenheit und Identifikation mit dem Institut wider, wie in den Gesprächen vor Ort deutlich wurde.

Qualitätsmanagement

Das LIKAT hat angemessene Maßnahmen zur Qualitätssicherung implementiert. Es folgt gängigen Qualitätsstandards zur guten wissenschaftlichen Praxis, die sich an den entsprechenden Richtlinien der Leibniz-Gemeinschaft und der DFG orientieren. Eine gewählte Ombudsperson und ihre Stellvertretung stellen deren Einhaltung sicher.

Das Publikationskonzept ist überzeugend und beinhaltet auch eine Leitlinie zum Umgang mit Open-Access. Es wird begrüßt, dass das Institut plant, den Anteil an Open-Access-Publikationen weiter zu steigern (2022 ca. 34 %).

Positiv hervorzuheben ist die vom LIKAT entwickelte Transfer-Leitlinie. Darin werden u.a. verschiedene Zielgruppen des Wissenstransfers identifiziert und jährliche Ziele für die Überführung von Katalysatoren bzw. katalytischen Prozessen in den industriellen Maßstab festgelegt.

Das wesentliche Instrument der Steuerung des Gesamthaushalts ist das Programmbudget, in dem Leistungs- und Strukturziele definiert werden. Es wird begrüßt, dass über einen Investitionsfonds (ca. 1 Mio. €) und einen Innovationsfonds (2021: 450 T€) auch leistungsorientiert Mittel an die Forschungsbereiche vergeben werden.

Qualitätsmanagement durch Beiräte und Aufsichtsgremium

Das Kuratorium kommt seiner satzungsgemäßen Aufgabe als Aufsichtsgremium in überzeugender Weise nach.

Der Wissenschaftliche Beirat begleitet das LIKAT mit großem Engagement. Wie für Leibniz-Einrichtungen üblich wurde 2020 ein Audit durchgeführt. Zukünftig sollten dabei über die Gesamtentwicklung des Instituts hinaus auch die einzelnen Arbeitseinheiten betrachtet und bewertet werden. Beschäftigte von Einrichtungen, mit denen das LIKAT institutionell kooperiert, sollten nicht Mitglied im Beirat sein.

5. Personal

Wissenschaftliche und Administrative Leitungspositionen

Es wird begrüßt, dass die Besetzung von Forschungsbereichsleitungsstellen gemäß den „Standards für die Besetzung von wissenschaftlichen Leitungspositionen in der Leibniz-Gemeinschaft“ erfolgt. Forschungsbereiche werden in der Regel von gemeinsam mit der

Universität Rostock berufenen sowie außerplanmäßigen Professorinnen und Professoren geleitet. Es ist plausibel, dass in Einzelfällen auch Forschungsbereiche von erfahrenem wissenschaftlichem Personal ohne Professur geleitet werden.

Die Stelle des kaufmännischen Direktors wurde gemäß der Leibniz-Standards 2021 neu besetzt. Der Stelleninhaber erfüllt seine Aufgaben sehr gut.

Promoviertes Personal

Die ausgezeichnete wissenschaftliche Infrastruktur des LIKAT bietet jungen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern hervorragende Entwicklungsmöglichkeiten. In der Postdoc-Zeit sind sie befristet angestellt und in der Regel über Drittmittel oder Stipendien finanziert (2021: 39 Personen).

Es wird begrüßt, dass das LIKAT regelmäßig unabhängige Nachwuchsgruppen einrichtet. Derzeit sind zwei solcher Gruppen am Institut tätig, wobei eine im Rahmen des Leibniz-Wettbewerbs eingeworben wurde und eine durch Haushaltsmittel finanziert ist. Seit der letzten Evaluierung wurden drei weitere Nachwuchsgruppen eingerichtet, die erfolgreich abgeschlossen wurden. Alle drei Gruppenleitungen erhielten Anschlussstellen am Institut. Zwischen 2019 und 2021 erfolgten zwei Habilitationen, eine weitere Habilitationsschrift wurde 2022 eingereicht.

Der wissenschaftliche Nachwuchs wird durch kontinuierlichen Austausch und strategische Beratung sowie jährliche oder halbjährliche Qualifizierungsgespräche unterstützt. Außerdem ist er in die Lehre an der Universität Rostock eingebunden.

Promovierende

Die Doktorandinnen und Doktoranden werden sehr gut betreut. Am 31. Dezember 2021 waren 55 vom LIKAT finanzierte Promovierende sowie 41 extern finanzierte (inkl. Stipendiaten) am Institut beschäftigt. Zwischen 2019 und 2021 wurden insgesamt 81 Promotionen abgeschlossen. Die Promotionsdauer ist angemessen lang, sie liegt in der Regel zwischen drei und vier Jahren.

Promovierende werden in internen Seminaren sowie über Mentoring-Programme der Universität Rostock, der Leibniz-Gemeinschaft und der Gesellschaft Deutscher Chemiker gefördert. Darüber hinaus haben sie Zugang zu den Weiterbildungsangeboten der Graduiertenakademie der Universität Rostock. International ist das Institut innerhalb des *Marie Skłodowska-Curie Innovative Training Network* (ITN) der EU an zwei Promotionsnetzwerken beteiligt. Zudem partizipiert es gemeinsam mit der Universität Rostock an einem vom DAAD-geförderten Graduiertenkolleg mit zwei vietnamesischen Partneruniversitäten.

Es wird begrüßt, dass das LIKAT an verschiedenen nationalen und internationalen Programmen zur Förderung von Promovierenden beteiligt ist. Das Institut sollte seine Planungen weiterverfolgen und ein eigenes, auf die Anforderungen des LIKAT zugeschnittenes, strukturiertes Doktorandenprogramm entwickeln. Dieses Programm sollte auch den am LIKAT tätigen extern finanzierten Promovierenden offenstehen.

Wissenschaftsunterstützendes Personal

Das wissenschaftsunterstützende Personal weist eine sehr hohe Expertise auf und hat eine große Bedeutung für die Arbeit des Instituts. Es werden umfassende Weiterbildungsmöglichkeiten angeboten, die von Kursen im IT- und Sekretariatsbereich über die Möglichkeit zur Meisterausbildung bis hin zu Fernstudien reichen. Gemeinsam mit der Universität Rostock beteiligt sich das Institut an einer dualen Ausbildung für Chemielaborantinnen und -laboranten. Zwischen 2019 und 2021 wurden fünf Ausbildungen abgeschlossen.

Chancengleichheit und Vereinbarkeit von Familie und Beruf

Der Anteil an Wissenschaftlerinnen im Bereich Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen sank von 32 % (38 von 120 Personen) Ende 2014 auf 28 % (36 von 131 Personen) Ende 2021. Zum Stichtag 2021 wurden von acht Forschungsbereichsleitungen drei von Wissenschaftlerinnen geleitet (38 %, unter den sechs seit der letzten Evaluierung eingestellten FB-Leitungen sind zwei Wissenschaftlerinnen). Bei den Gruppenleitungen betrug der Frauenanteil 12 % (3 von 25), bei den Wissenschaftspositionen ohne Leitungsfunktion 37 % (16 von 43). Von den 55 vom LIKAT finanzierten Promovierenden waren 14 Frauen (25 %). Unter den acht assoziierten Professuren der Universität Rostock (darunter zwei FB-Leitungen) befindet sich keine Frau. **Es wird erwartet, dass das LIKAT den Frauenanteil steigert, insbesondere auf der Leitungsebene müssen weitere Verbesserungen erreicht werden.**

Das Institut bietet seinen Beschäftigten geeignete Instrumente an, um die Vereinbarkeit von Beruf und Fürsorgepflicht zu fördern, wie z. B. gleitende Arbeitszeiten und Dual-Career-Maßnahmen. Zusätzlich dient der *LIKAT-Gemeinschafts-Fonds* der Absicherung befristeter Arbeitsverhältnisse während Schwangerschaften, Eltern- oder Pflegezeiten sowie für soziale Härtefälle. Es wird begrüßt, dass dem LIKAT 2020 zum vierten Mal in Folge das Prädikat „Total E-Quality“ verliehen wurde.

6. Kooperation und Umfeld

Kooperation mit der Universität Rostock

Die Zusammenarbeit des LIKAT mit der Universität Rostock ist hervorragend. Beide Partner sind über drei gemeinsame Berufungen (2x W3, 1x W2) und zwei außerplanmäßige Professuren verbunden. Zudem laufen zwei gemeinsame Berufungsverfahren (siehe Kapitel 2).

Darüber hinaus arbeitet das LIKAT im Rahmen eines *Uni in Leibniz* genannten Modells erfolgreich mit derzeit acht Professoren der Universität Rostock zusammen, die über Honorarvereinbarungen am Institut tätig sind. Grundlage bildet ein umfassender Kooperationsvertrag mit der Universität, der seit 2006 stetig erweitert wurde. Dieser ermöglicht es dem LIKAT Forschungsgruppen der Universität in hohem Maße in die Arbeiten einzubinden. Das Institut stellt den auf diese Weise assoziierten Professoren befristet Labore mit entsprechender Infrastruktur, Analytik und ausgebildetem Fachpersonal bereit (eine

ähnliche Zusammenarbeit besteht mit zwei Professoren der Universitäten Paderborn und Linz, beides ehemalige Habilitanden des LIKAT).

Das Institut koordiniert den seit 2019 geförderten Leibniz-WissenschaftsCampus ComBioCat, an dem neben dem Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie Greifswald (INP) die Universitäten Greifswald und Rostock beteiligt sind. Die Forschung widmet sich dem Übergang von fossilen Ressourcen zu nachwachsenden Rohstoffen als Energieträger und für die Herstellung von Chemikalien. Zudem ist das LIKAT beteiligt am 2015 gegründeten WissenschaftsCampus *Phosphorforschung* unter Federführung des Leibniz-Instituts für Ostseeforschung Warnemünde (IOW).

Kooperationen mit industriellen Partnern

Das LIKAT arbeitet weltweit äußerst erfolgreich mit großen und kleinen Unternehmen zusammen. Es ist eindrucksvoll, dass das Institut jährlich etwa 50 vertrauliche bi- und multilaterale Projekte bearbeitet, die in gemeinsamen Patentanmeldungen mit den Industriepartnern münden. Wichtige Kooperationspartner, mit denen längerfristige Rahmenverträge bestehen, sind u. a. die *Evonik Industries AG*, *Henkel AG & Co. KGaA*, *Symrise AG* und *Apex Energies*.

Netzwerke und Verbünde

Die internationale Vernetzung wurde in den vergangenen Jahren erfolgreich ausgeweitet. Innerhalb des „Horizon 2020-Programms“ der EU kooperiert das LIKAT mit verschiedenen Hochschulen und Industriepartnern in mehreren Verbünden (*GreenSolRes*, *FLIX* und *EHL CATHOL*). Zudem wird im vom DAAD-geförderten SDG-Graduiertenkolleg *Rohan* gemeinsam mit der Universität Rostock, der *Hanoi University of Science and Technology* und der *Vietnam National University – University of Science* erfolgreich zusammengearbeitet.

7. Teilbereiche des LIKAT

Themenfeld 1 – Struktur-Reaktivitäts-Beziehungen

[24,2 VZÄ, davon 13,3 VZÄ Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen, 8,5 VZÄ Promovierende und 2,4 VZÄ Servicebereiche]

Das TF 1 forscht äußerst erfolgreich auf den Gebieten der homogenen und heterogenen Katalyse. Eine Stärke des TF liegt dabei in der Entwicklung und Anwendung neuartiger spektroskopischer Messzellen, mit denen eine Vielzahl an *in situ*- und *operando*-Methoden gekoppelt werden können. Die experimentellen Ansätze werden in ausgezeichneter Weise mit theoretischen Untersuchungen ergänzt. Die Expertise und Methoden werden intern stark nachgefragt und stehen auch externen Partnern zur Verfügung.

Das TF erarbeitet regelmäßig hervorragende Forschungsergebnisse, die hochrangig publiziert werden. Eine besondere Leistung ist die weltweit erste 5-1-Kopplung von FTIR-ATR/UV-vis/EPR/EXAFS/XANES, die die Aufklärung komplexer Reaktionsmechanismen ermöglicht und die führende Stellung des TF insbesondere in der EPR-Spektroskopie verdeutlicht. Diese Kopplung wurde vom LIKAT zum Patent angemeldet und inzwischen an

die *Bruker BioSpin GmbH* übertragen. Darüber hinaus wurde eine neuartige Messzelle entwickelt, in der katalytische Prozesse im Aggregatzustand des Plasmas mittels Infrarot-Spektroskopie untersucht werden können. Das umfangreiche Instrumentarium von Techniken wurde zudem sehr erfolgreich für das Monitoring von photokatalytischen sowie umweltrelevanten Reaktionen eingesetzt. Beispiele sind die selektive katalytische Reduktion von Stickstoffoxiden und die photokatalytische Ozonierung von organischen Verunreinigungen im Abwasser. Die erfolgreiche Forschungsarbeit schlägt sich auch nieder in sehr hohen Drittmiteinnahmen.

Die TF-Sprecherin, die gleichzeitig den für das gesamte LIKAT zentralen FB „Katalytische in-situ Studien“ leitete, ist seit März 2023 emeritiert. Die Nachfolge sollte nun zügig ausgeschrieben werden (siehe Empfehlung in Kapitel 2). Das Themenfeld 1 wird als „exzellent“ bewertet.

Themenfeld 2 – Kinetik, Theorie & Mechanismen

[16,1 VZÄ, davon 9,2 VZÄ Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen, 5,4 VZÄ Promovierende und 1,5 VZÄ Servicebereiche]

Das TF 2 führt sehr erfolgreich mechanistische und kinetische Untersuchungen großtechnischer katalytischer Prozesse durch. Dabei werden verschiedene experimentelle Methoden mit theoretischen Ansätzen wie numerischer Analyse, mathematischer Modellierung und Dichtefunktionaltheorie-(DFT)-Berechnungen kombiniert. Hervorzuheben ist, dass die erhobenen Daten automatisiert in Datenbanken einfließen. Das TF ist von übergeordneter Bedeutung für das gesamte Institut und mit anderen Themenfeldern bestens vernetzt.

Das TF erarbeitet Forschungsergebnisse von höchster Qualität, die regelmäßig in hochrangigen Zeitschriften publiziert werden. Besonders hervorzuheben sind Studien, die darauf abzielen, bisher eingesetzte giftige und kostenintensive Katalysatoren durch umweltverträgliche Katalysatoren zu ersetzen. Ein bemerkenswertes Ergebnis ist die Entwicklung eines Katalysators basierend auf handelsüblichen Materialien zur Umwandlung von Propan in Propen. Dieser Prozess ist eine wichtige Alternative zu erdölbasierten Verfahren. Die bearbeiteten Themen weisen eine sehr hohe Relevanz für Industriepartner auf, da die Experimente in dieser Form in der Industrie nicht durchgeführt werden können. Es werden konstant hohe Drittmittel eingeworben, v. a. aus der Wirtschaft.

Die strategischen Planungen für die Zukunft sind überzeugend. Wie vom Institut geplant, sollte der Bereich der theoretischen Modellierung am LIKAT zukünftig weiter ausgebaut werden. Es wird begrüßt, dass zu diesem Zweck bereits seit Anfang 2022 eine Nachwuchsgruppe „Theorie der homogenen & Bio-Katalyse“ die Arbeiten im TF stärkt. Das Themenfeld 2 wird als „exzellent“ bewertet.

Themenfeld 3 – Reaktionskinetik & Implementierung

[11 VZÄ, davon 8,5 VZÄ Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen, 1,5 VZÄ Promovierende und 1 VZÄ Servicebereiche]

Das TF 3 arbeitet sehr erfolgreich an der Entwicklung optimaler Reaktordesigns und Betriebsregimes für katalysierte chemische Reaktionen. Der Fokus liegt dabei auf Methodiken

und Technologien. Ein Schwerpunkt ist die Übertragung katalytischer Reaktionen vom Labormaßstab in den Pilot- oder technischen Maßstab sowohl im Bereich der Fein- als auch der *Bulk*-Chemie. Das TF ist maßgeblich verantwortlich für den Betrieb des kürzlich etablierten *Catalysis2Scale*-Technikums mit dem die Wertschöpfungskette von der Grundlagenforschung hin zur industriellen Anwendung ausgebaut wird. Die Mitarbeitenden fokussieren sich zudem auf die Datenwissenschaft und arbeiten in diesem Zuge daran, die Entwicklung vom Katalysator zum Prozess zu digitalisieren.

Das TF erarbeitet hervorragende Forschungsergebnisse und wirbt konstant hohe Drittmittel ein. Aufgrund seiner Schnittstellenfunktion zur großtechnischen Anwendung, war es im Berichtszeitraum an allen Patentanmeldungen des Instituts beteiligt. Das TF ist intern sehr gut vernetzt und erbringt zahlreiche Leistungen, wie z. B. eigens entwickelte Softwarelösungen, die die Automatisierung experimenteller Datenströme ermöglichen. Im Bereich der Datenwissenschaften leistet das TF hervorragende Arbeit, die für das gesamte LIKAT von hoher Bedeutung ist. Insbesondere bindet es das Institut äußerst erfolgreich in das Konsortium *NFDI4Cat* ein.

Die strategischen Planungen sind schlüssig. Im Hinblick auf die zukünftige Entwicklung verschiedener Reaktor- und Verfahrenskonzepte wird angeregt, auch Prozesse in *bubble column*-Reaktoren, im Rührkessel und im kontinuierlichen Durchfluss zu betrachten, die in der Industrie sehr relevant sind. Das Themenfeld 3 wird als „sehr gut bis exzellent“ bewertet.

Themenfeld 4 – Erneuerbare Rohstoffe

[12,9 VZÄ, davon 7,1 VZÄ Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen, 3,7 VZÄ Promovierende und 2,2 VZÄ Servicebereiche]

Das TF 4 erforscht sehr erfolgreich die katalytische Umwandlung nachwachsender Rohstoffe in Basischemikalien für Produkte des täglichen Lebens. Im November 2021 ging der Sprecher des TF, der auch den FB „Katalyse mit erneuerbaren Rohstoffen“ leitete, in den Ruhestand. Der FB wurde in „Katalyse mit Bioressourcen“ umbenannt und die Leitungsposition nahtlos mit einer ausgewiesenen Wissenschaftlerin besetzt, die nun ebenfalls auch Sprecherin des TF 4 ist.

Seit der letzten Evaluierung wurden hervorragende Forschungsergebnisse erarbeitet, die in international wahrgenommenen Fachzeitschriften veröffentlicht wurden. Hervorzuheben sind die Arbeiten unter Verwendung des erneuerbaren Rohstoffs Lävulinsäure, u. a. für die Herstellung von Nylon-Vorstufen sowie hochaktiven und selektiven Nanokatalysatoren auf Kobaltbasis. Zudem gelang es, CO₂ unter normalen Druckverhältnissen bei moderaten Temperaturen an einem katalytischen Material anzureichern und chemisch umzusetzen (*Carbon Mining*). Die eingeworbenen Drittmittel, insbesondere aus der Wirtschaft und von Bund und Ländern, sind hoch.

Unter den vielversprechenden Planungen für die Zukunft bietet insbesondere die Erforschung der elektrochemischen Veredelung von nachwachsenden Rohstoffen bzw. Plattformchemikalien aus bio-basierten Abfällen unter Nutzung von grünem Strom hohes Potential. Das Themenfeld 4 wird als „sehr gut bis exzellent“ bewertet.

Themenfeld 5 – Energie & Umwelt

[25,3 VZÄ, davon 14,7 VZÄ Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen, 8,7 VZÄ Promovierende und 1,9 VZÄ Servicebereiche]

Das TF 5 befasst sich mit grundlagen- und anwendungsorientierter Forschung, die darauf abzielt, saubere und nachhaltige Ressourcen für chemische Syntheseprozesse sowie alternative Energietechnologien wie Sonnenlicht oder regenerativ erzeugten Strom zu nutzen. Ein Schwerpunkt liegt auf der Wasserstofferzeugung, dessen Speicherung und Rückwandlung in elektrische Energie. Dabei spielt insbesondere die katalytische Herstellung und Zersetzung flüssiger Energieträger (bspw. Methanol, Ameisensäure) aus grünem Wasserstoff und CO₂ eine Rolle.

Das TF erzielt sehr gute Ergebnisse, die angemessen publiziert werden. Hervorzuheben ist u. a. die Entwicklung verschiedener Katalysatoren zur photokatalytischen CO₂-Reduktion. Im Jahr 2021 wechselte ein ausgewiesener Wissenschaftler als neuer Leiter eines FB an das LIKAT, der zudem stellvertretender Sprecher des TF 5 wurde. Seine zusätzliche Expertise in den Bereichen Elektrochemie und Katalyse komplementär zur Thematik der Photokatalyse bietet hervorragende Möglichkeiten für zukünftige innovative Arbeiten, wie z. B. zur elektrochemischen Syntheseroute von Brom-(III)-Verbindungen. Das Themenfeld 5 wird als „sehr gut“ bewertet.

Themenfeld 6 – Effizientere Prozesse

[32,8 VZÄ, davon 19 VZÄ Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen, 8,6 VZÄ Promovierende und 5,3 VZÄ Servicebereiche]

Das TF 6 forscht sehr erfolgreich zur Optimierung von katalytischen Kenngrößen wie Umsatz, Selektivität, Aktivität und Produktivität. Zudem wird auch an der Steigerung der Katalysatorstabilität und der Verringerung von Prozessschritten durch Direktsynthesen gearbeitet. Ziel ist es, bei katalytischen Verfahren, die in der Industrie äußerst relevant sind, einen effizienteren Einsatz von Ressourcen zu ermöglichen.

Das TF erzielt herausragende Forschungsergebnisse, die regelmäßig in hochrangigen Fachzeitschriften veröffentlicht werden. Ein besonders bemerkenswertes Resultat ist ein entwickeltes Katalysatorsystem, das es erstmals ermöglicht, die Synthese von Adipaten aus 1,3-Butadien in einem einzigen Schritt durchzuführen. Nach langjähriger weltweiter Forschung wurde die Reaktion am LIKAT realisiert und wird derzeit gemeinsam mit der *Evonik Industries AG* in eine *Miniplant*-Anwendung überführt. Das Katalysatorsystem lässt sich auf weitere Prozesse übertragen und ebnet den Weg für eine neuartige Syntheseroute für zahlreiche feinchemische Produkte. Die Drittmittelwerbungen sind sehr hoch, insbesondere aus der Wirtschaft und von der EU.

Die strategischen Planungen mit Fokus auf eine effizientere Ressourcennutzung sind schlüssig. Das Forschungsthema wird in Zukunft weiter an Bedeutung gewinnen, da es für eine Vielzahl an industriellen Prozessen relevant ist. Das Themenfeld 6 wird als „exzellent“ bewertet.

Themenfeld 7 – Neue Produkte und Verfahren

[36,2 VZÄ, davon 19,4 VZÄ Forschung und wissenschaftliche Dienstleistungen, 13,4 VZÄ Promovierende und 3,5 VZÄ Servicebereiche]

Das TF 7 ist das größte Themenfeld am LIKAT und von zentraler Bedeutung für das gesamte Institut. Es betreibt grundlegende und industriennahe Forschung auf höchstem wissenschaftlichem Niveau. In den Arbeiten werden neue Katalysatoren und Produkte entwickelt und getestet sowie neue Verfahren etabliert. Die Studien in den Bereichen homogene und heterogene Katalyse bündeln die Expertise aus den Fachgebieten Metallorganik, Photokatalyse, Organokatalyse, Koordinations- sowie Hauptgruppenchemie.

Die herausragende Qualität der innovativen Arbeiten spiegelt sich in einer Vielzahl hochrangig veröffentlichter Publikationen wider. Hierzu zählen u. a. Arbeiten zu neuen Reaktionsmechanismen für die Synthese fluorierter organischer Moleküle, die für Agrochemikalien und Pharmazeutika relevant sind. Die Ergebnisse bilden die Grundlage für die weitere anwendungsorientierte Forschung in anderen Themenfeldern und das TF ist dementsprechend sehr gut am LIKAT vernetzt. Das TF ist ebenso sehr erfolgreich im Bereich des Transfers tätig und wirbt hohe Drittmittel ein, insbesondere aus der Wirtschaft und von der EU.

Die strategischen Planungen, zukünftig erneuerbare Rohstoffe als Substrate in die Forschung zu integrieren, sind hervorragend. Es ist schlüssig, im Sinne einer Kreislaufwirtschaft Schwerpunkte auf die Rückgewinnung und Wiederverwendung von Katalysatorbestandteilen, wie Edelmetalle oder Phosphor, und Polymerbausteinen zu legen. Das Themenfeld 7 wird als „exzellent“ bewertet.

8. Umgang mit Empfehlungen der letzten externen Evaluierung

Die Empfehlungen des Senats der Leibniz-Gemeinschaft aus dem Jahr 2016 (vgl. Darstellungsbericht S. A-24 ff.) wurden vom Institut in angemessener Weise aufgegriffen.

Anhang

1. Bewertungsgruppe

Vorsitz (Mitglied des Senatsausschusses Evaluierung)

Tanja **Weil**

Max-Planck-Institut für Polymerforschung,
Mainz

Stellvertretender Vorsitz (Mitglied des Senatsausschusses Evaluierung)

[kurzfristige Absage]

Sachverständige

Jeroen van **Bokhoven**

Institut für Chemie und Bioingenieurwissenschaften, ETH Zürich, CH

Olga **Garcia Mancheño**

Professur für Organische Chemie, Universität Münster

Ulrich Kaspar **Heiz**

Zentralinstitut für Katalyseforschung,
Technische Universität München

Paul **Knochel**

Department Chemie, Ludwig-Maximilians-Universität München

Sabine **Laschat**

Institut für Organische Chemie, Universität Stuttgart

Gerhard **Mestl**

Clariant AG, Bruckmühl

Beatriz **Roldán Cuenya**

Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin

Armido **Studer**

Professur für Organische Chemie, Universität Münster

[kurzfristige Absage]

Biokatalyse

Vertretung des Bundes (stellvertretendes Mitglied des Senatsausschusses Evaluierung)

Volker **Wiesenthal**

Bundesministerium für Bildung und Forschung, Berlin

Vertretung der Länder

keine Teilnahme

28. Juni 2023

Anlage C: Stellungnahme der Einrichtung zum Bewertungsbericht

Leibniz-Institut für Katalyse e.V., Rostock (LIKAT)

1. Generelle Bemerkungen

Vorab möchten wir als LIKAT dem Senatsausschuss Evaluierung der Leibniz-Gemeinschaft, der Vorsitzenden der Bewertungsgruppe, sowie allen Mitgliedern der Bewertungsgruppe danken für ihre Sorgfalt und ihr Engagement bei der Begutachtung, der vom LIKAT vorgelegten Unterlagen und der Begehung unseres Instituts im Januar 2023! Den Mitarbeitenden des Referats Evaluierung danken wir für die freundliche, unkomplizierte und konstruktive Betreuung während des Evaluierungsprozesses.

Wir freuen uns über die ausgesprochen positive Bewertung des LIKAT und sehen die Empfehlungen der Bewertungsgruppe als wesentliche Impulse, das LIKAT wissenschaftlich und organisatorisch konsequent weiterzuentwickeln. Wir begrüßen vor allem die positive Beurteilung der Matrixstruktur sowie der Themenfelder als Teilbereiche des LIKAT.

Nicht alle Bewertungen der Themenfelder sind für uns vollumfänglich nachvollziehbar. *Themenfeld 03*, ein strategisch außerordentlich wichtiges und wertvolles Themenfeld, scheinen wir bspw. im Evaluierungsbericht nicht ausreichend gut abgebildet zu haben. Die Stärken von *TF 03* liegen über die reine Forschung hinaus im Transfer und den Datenwissenschaften,¹ die mit konventionellen Kennzahlen textbasierter wissenschaftlicher Veröffentlichungen mit Peer-Review-Verfahren nur unzureichend abgebildet werden. Die Leibniz-Gemeinschaft erkennt die Erhebung und Veröffentlichung von Forschungsdaten aufgrund der dadurch entstehenden genuinen Wertschöpfung als eigenständige wissenschaftliche Leistung an.² Unseren Beitrag dazu im Rahmen des Konsortiums NFDI4Cat (Federführung bei der Antragstellung und Projektarbeit) scheinen wir leider nicht deutlich genug gemacht zu haben.

Unsere detaillierte Stellungnahme zur Bewertung von *Themenfeld 05* finden Sie in Abschnitt 3 (S. 6).

2. Stellungnahme zu den zentralen Empfehlungen

Nachfolgend gehen wir auf unsere konkreten Vorstellungen zur Umsetzung der im Bewertungsbericht enthaltenen Empfehlungen und Anregungen ein.

2.1 Veränderungen & Planungen (Kapitel 3): Hebung aller Planstellen für Professuren auf W3

Wir sehen die Empfehlung, **alle fünf Planstellen** für gemeinsame Berufungen mit der Universität Rostock (bisher zwei W3- und drei W2-Professuren) **auf W3-Niveau zu heben**, als außerordentlich positiv und essenziell für die positive Weiterentwicklung des Instituts. Bei der Gewinnung fachlich hervorragender **weiblicher Führungspersönlichkeiten** konkurriert das LIKAT weltweit mit führenden Hochschulen und außeruniversitären Forschungsinstituten.

¹ (a) Mitarbeit von LIKAT-Autor:innen an vier Open Source Software-Paketen: [INCATools/ontology-access-kit](https://github.com/INCATools/ontology-access-kit), [linkml/linkml-runtime](https://github.com/linkml/linkml-runtime), [linkml/linkml-model](https://github.com/linkml/linkml-model), [linkml/schema-automator](https://github.com/linkml/schema-automator); (b) S. Arndt, F. Burger, B. Dreyer, S. Espinoza, B. Fischer, M. Fuhrmans, C. Henzen, V. Hofman, D. Jaeger, D. Linke, M. Löbe, B. Mathiak, T. Rose, C. Saalbach, A. Shutsko, E. Soeding, R. Stein, D. Terzijska, ["Cookbooks, Guidance, and Best Practices" - Working Group Charter \(NFDI section-metadata\)](https://zenodo.org/record/6758256/files/Cookbooks_Guidance_and_Best_Practices.pdf). Zenodo, 27 June 2022. <https://doi.org/10.5281/zenodo.6758256>.

² [Leibniz-Leitlinie Forschungsdaten 2018](https://www.leibniz-leitlinie.de/)

Aktuell wird mit der Universität Rostock ein neuer Kooperationsvertrag vorbereitet, der die oben vorgeschlagenen Änderungen berücksichtigt. Dieser neue Vertrag wird voraussichtlich nach der Sommerpause in Kraft treten. Entsprechend den Empfehlungen der Bewertungsgruppe werden wir dann die Nachfolgen zweier ehemaliger Vorstandsmitglieder und Forschungsbereichsleiterinnen als W3-Professuren ausschreiben. Das bereits seit letztem Jahr laufende Verfahren für die W2-Professur „Synergien zwischen homogener und heterogener Katalyse“ wird wie geplant abgeschlossen. Diese Professur kann gegebenenfalls später angehoben werden.

Der Eintritt des langjährigen wissenschaftlichen Direktors in den Ruhestand im Jahr 2029 wird im Bewertungsbericht angesprochen. Bereits jetzt wird in enger Zusammenarbeit mit dem Aufsichtsgremium des LIKAT, dem *Kuratorium*, eine Strategie für die Nachfolge des wissenschaftlichen Direktors ausgearbeitet, die Ende 2023 in Kraft treten soll. Geplant ist die Reorganisierung des Vorstandes, bei der die wissenschaftliche Leitung im Institut jeweils für zwei Jahre rotierend von den wissenschaftlichen Vorstandsmitgliedern ausgeübt wird. Ein Abstimmungsprozess für die dazu notwendigen Satzungsänderungen wurde mit den Zuwendungsgebern ebenfalls schon angestoßen. Dieses Modell soll einen Leitungswechsel im LIKAT nachhaltig absichern und Risiken für das Institut für die Zukunft minimieren. Dem ist hinzuzufügen, dass das vorgeschlagene Organisationsmodell nur die Umsetzung dessen ist, was bereits am LIKAT gelebt wird. Vorteile des Modells sind auch eine Minimierung des Risikos von Verlust weiterer wissenschaftlicher Vorstände sowie eine steigende Attraktivität für anstehende Berufungen.

2.2 Steuerung & Qualitätsmanagement (Kapitel 4): Wissenschafts- & Industriebeirat

Die Bewertungsgruppe bestätigt das große Engagement, mit dem der *Wissenschafts- & Industriebeirat* des LIKAT das Institut begleitet. Sowohl der Beirat und als auch wir als LIKAT stimmen vollkommen zu im Rahmen **zukünftiger Audits** neben der Bewertung des Instituts als Ganzem **die Teilbereiche zu betrachten und zu bewerten**. Wir werden künftige Audits entsprechend vorbereiten.

Hinsichtlich der **Zusammensetzung des Wissenschafts- & Industriebeirats** wurde empfohlen: „Beschäftigte von Einrichtungen, mit denen das LIKAT institutionell kooperiert, sollten nicht Mitglied im Beirat sein.“ Wir bedanken uns für den Hinweis. Das entspricht unserem Grundsatz, der wissenschaftlichen Unabhängigkeit trotz anwendungsnaher Katalyseforschung mit etwa 50 bilateralen Industriekooperationen pro Jahr. Das LIKAT achtet bei der Besetzung seiner Gremien entsprechend der Leibniz-Leitlinien³ neben einer geschlechtergerechten Verteilung und Internationalität auf die ausgeglichene Repräsentation der am LIKAT vertretenen Teildisziplinen mit entsprechendem Fachwissen. Die Umbenennung des Beirats im Jahr 2021 in *Wissenschafts- & Industriebeirat* erfolgte, um die tatsächliche langjährige Zusammensetzung und Expertise des Beratungsgremiums genau abzubilden. Vor dem Hintergrund unserer verstärkten Transferarbeit mit künftigen Pilotierungen im *Catalysis2Scale*-Transfertechnikum hat die Beteiligung von Industrievertreter:innen an

3 [Aufgaben Beiräte \(leibniz-gemeinschaft.de\)](https://www.leibniz-gemeinschaft.de/Aufgaben-Beiräte)

diesem Gremium eine hohe Relevanz. Gleichmaßen ist uns bewusst, dass die Unabhängigkeit des Beirats gewahrt bleiben muss, um Interessenkonflikte für das LIKAT zu verhindern. Aktuell sind die Mitglieder unseres *Wissenschafts- & Industriebeirats* aus den Institutionen IPF Dresden, Univ. Tübingen, ETH Zürich, Ruhr-Univ. Bochum, Clariant/TUM, Univ. Oldenburg, RWTH Aachen, Evonik Operations, Univ. of Oslo sowie der TU Berlin. Im Rahmen öffentlich geförderter Kooperationsprojekte liegt die Entscheidung über die Zusammenarbeit beim öffentlichen Zuwendungsgeber und ist für das LIKAT konfliktfrei. Im Rahmen bilateraler Kooperationsprojekte mit industriellen Partnern (bspw. Evonik Operations) prüfen wir für den Zeitraum der Mitgliedschaft von einer Vertreterin des Unternehmens Evonik Operations sehr genau, ob ein Interessenskonflikt besteht. Firmen, mit denen wir langfristige Rahmenverträge haben (Evonik Industries, Symrise, Henkel und Apex) sind nicht im *Wissenschafts- & Industriebeirat* vertreten.

2.3 Personal (Kapitel 5): Entwicklung eines strukturierten Doktorandenprogramms

Die Bewertungsgruppe begrüßt, die Teilhabe des LIKAT an verschiedenen nationalen und internationalen Programmen zur Förderung seiner Promovierenden, empfiehlt darüber hinaus nachdrücklich ein **eigenes**, auf die Anforderungen des LIKAT zugeschnittenes, **strukturiertes Doktorandenprogramm** zu entwickeln, das allen Promovierenden des LIKAT unabhängig von der Finanzierungsquelle offensteht. Zu den am LIKAT bereits bestehenden Maßnahmen gehören u.a.:

- » die *PhD & PostDoc Lecture Series* (katalyserelevante Themenkomplexe: u.a. Vorlesungen zu speziellen Charakterisierungsmethoden von Katalysatoren, in-situ/operando-Methoden sowie kinetische Aspekte in der Katalyse),
- » ein eigens für Promovierende und PostDocs eingerichtetes Zeitfenster für Mentoring-Gespräche mit externen Vortragenden,
- » die Mitorganisation der jährlichen Weiterbildungsveranstaltung durch den Ostseelehrverbund Katalyse (gemeinsam mit der Univ. Kiel und dem INP Greifswald),
- » unsere zweijährlich organisierten Alumni-Treffen,
- » die zeitweise Einbindung von Promovierenden und PostDocs in Industriekooperationen
- » sowie die Möglichkeit zur kostenlosen Teilnahme aller Promovierender an Weiterbildungskursen der Graduiertenakademie der Univ. Rostock.

Künftig werden wir diese Angebote in einem strukturierten Programm bündeln, ergänzen und sowohl Angebot als auch Teilnahme standardisieren. Dafür wird eine Leitungsperson die Koordination übernehmen und mit Kolleg:innen sowie der PhD & PostDoc-Vertretung zusammenarbeiten.

2.4 Personal (Kapitel 5): Anteil an Wissenschaftlerinnen

„Es wird erwartet, dass das LIKAT den Frauenanteil steigert, insbesondere auf der Leitungsebene müssen weitere Verbesserungen erreicht werden.“

Die im Bewertungsbericht erwartete Erhöhung des Frauenanteils insbesondere in Leitungspositionen nehmen wir sehr ernst. Neben den klassischen (*Betriebsvereinbarung zur Gleitzeit, befristete Teilzeit, Dual-Career*) hat das LIKAT eigene Maßnahmen implementiert, bspw. den *LIKAT-Gemeinschaftsfonds*, der eigens zur Unterstützung von Mitarbeitenden in Phasen familiärer Unterbrechungen eingerichtet wurde. Insgesamt stellt das LIKAT 6% seines Grundbudgets für Gleichstellungsmaßnahmen zur Verfügung. Damit verfolgt das LIKAT das erklärte Ziel, den Frauenanteil vor allem im Bereich der Leitungspositionen nachhaltig zu erhöhen.

Mit unseren Maßnahmen sind/waren wir auf höchster Leitungsebene sehr erfolgreich: das Ergebnis langjähriger intensiver Gleichstellungsarbeit am Institut ist ein **langjährig überdurchschnittlich hoher Frauenanteil im LIKAT-Vorstand: 25% seit 2009, 50% seit 2018, 60% 2019-2021 (Berichtszeitraum) sowie 50% im Jahr 2022**. Aktuell stehen wir vor der Herausforderung, dass **nach der Evaluierung** im Januar 2023 zwei Frauen aus dem Vorstand ausgeschieden sind (beide W2-Professuren). Eine der Frauen hat einen Ruf auf eine W3-Professur angenommen, die ihr das LIKAT mit den gegebenen Rahmenbedingungen bisher nicht bieten konnte. Die zweite Frau hat aufgrund ihres Eintritts in den Ruhestand ihre Aktivitäten reduziert und auf ausgewählte, rein wissenschaftliche Tätigkeiten begrenzt. Die Nachfolgen werden innerhalb der nächsten beiden Jahre ausgeschrieben und durch aktive Rekrutierung entsprechend den für uns bindenden Leibniz-Leitlinien begleitet. Wir haben jedoch schon jetzt entsprechend reagiert: Innerhalb der letzten drei Jahre war am LIKAT eine Position auf der Forschungsbereichsleitungsebene (zweite Ebene) vakant. Es gelang uns mithilfe unserer Maßnahmen, dafür eine Frau zu gewinnen. Sie wurde von der Institutsleitung zu einer Bewerbung um Fördermittel des Leibniz-spezifischen Professorinnenprogramms ermutigt und hat sich erfolgreich im Auswahlverfahren durchgesetzt. Das Programm richtet sich an international hervorragend ausgewiesene Wissenschaftlerinnen. Diese werden im Fall des LIKAT durch eine unbefristete W2/W3-Stelle gefördert. Die Dauer der Förderung beträgt fünf Jahre, davon werden zwei Jahre durch das LIKAT finanziert. Die geförderten Wissenschaftlerinnen erhalten zudem die Möglichkeit zur Vernetzung und Weiterbildung. Die geförderte Kandidatin ist zudem seit dem 1. März 2023 Vorstandsmitglied (aktueller Frauenanteil 25%). Laut GWK beträgt der Frauenanteil aller wissenschaftlicher Führungspositionen im Jahr 2021 innerhalb der WGL 27,5%.⁴ Im Mittel lag der Frauenanteil an Führungspositionen aller außeruniversitärer Forschungseinrichtungen mit der Eingruppierung TV-L E15 bei 18,5%.⁴ Diese Eingruppierung entspricht am LIKAT der zweiten Leitungsebene, also Themenfeldsprecher:innen und Forschungsbereichsleitungen. Auf dieser Ebene weist das LIKAT zum 31.12.2022 einen Frauenanteil von 38% auf, der deutlich über dem Durchschnitt liegt.

⁴

[GWK Bericht Chancengleichheit in Wissenschaft und Forschung - 2020/21](#)

Im Bereich der Nachwuchsgruppenleitungen haben wir aktuell eine Nachwuchsgruppenleiterin für das LIKAT gewonnen, die sich erfolgreich um Fördermittel im Leibniz-Junior Research Group-Wettbewerb beworben hat und in diesem Rahmen seit Januar 2021 bei uns tätig ist. Eine weitere Nachwuchswissenschaftlerin, die im Jahr 2022 am Institut promoviert hat, wurde gezielt durch die Institutsleitung angesprochen, nach ihrem PostDoc-Aufenthalt im Ausland an das LIKAT zurückzukehren, um sich ebenfalls um Fördermittel im Leibniz-Junior Research Group-Wettbewerb zu bewerben.

Der rückläufige Frauenanteil auf der dritten Leitungsebene der Themenleitung (aktuell 12%) trotz aller Maßnahmen ist uns sehr bewusst. Innerhalb der kommenden drei Jahre wird eine Themenleitungsposition aufgrund von Renteneintritt neu zu besetzen sein. Angesichts dessen ist zu erwarten, dass der Frauenanteil an Führungspositionen dieser dritten Ebene gleichbleibt unter der Bedingung, dass jede freiwerdende Position mit einer Frau besetzt wird. Wir stellen uns der schwierigen Herausforderung und werden aktiv geeignete Kandidatinnen suchen und ermuntern, sich zu bewerben. Gleichzeitig möchte das Institut dauerhaft für Frauen und Männer gleichermaßen familienfreundliche und planungssichere Rahmenbedingungen für die Arbeit am Institut schaffen. Denn Gleichstellung kann auch dadurch entstehen, dass bspw. für Väter bessere Voraussetzungen für die Vereinbarkeit von Fürsorgearbeit und Beruf geschaffen werden und sie darin bestärkt werden, diese wahrzunehmen, wie bspw. eine Führungsposition in Teilzeit.

Zu den extern besetzten Gremien des LIKAT gehören die *Mitgliederversammlung*, das *Kuratorium* und der *Wissenschafts- & Industriebeirat*. Das LIKAT wirkt auch bei diesen Gremien darauf hin, den Frauenanteil nachhaltig zu erhöhen. So wurden bspw. für Neuberufungen in den *Wissenschafts- & Industriebeirat* aktiv geeignete Frauen erfolgreich angesprochen: aktuell ist der Beirat paritätisch besetzt, Vorsitz und stellvertretender Vorsitz werden von Frauen bekleidet. Seit Mai 2023 ist auch unter den assoziierten Hochschulforschungsgruppenleitungen eine Frau.

3. Stellungnahme zur Bewertung des Themenfelds 05 Energie & Umwelt

Wir freuen uns über die außerordentlich positive Bewertung unserer wissenschaftlichen Leistungen anhand der zugrunde liegenden Kennzahlen. Die Bewertung des *TF 05* ist für uns leider nicht nachvollziehbar. *Themenfeld 05* wird mit „**sehr gut**“ bewertet.

Die Sprecherin des *TF 05* war bis April 2023 am LIKAT tätig. Sie hat den Ruf auf einen der europaweit renommiertesten Lehrstühle der Technischen Chemie an der TU München angenommen und ist seit dem 1. Mai 2023 dort tätig. Nachfolgender Sprecher des Themenfeldes ist der Leiter des Forschungsbereichs *Elektrochemie & Katalyse*. Im Bewertungsbericht wird die fachliche Ergänzung des Themenfelds um die Expertise der Elektrochemie und Elektrokatalyse positiv hervorgehoben. Allerdings war bereits im Bewertungszeitraum das Themenfeld breit aufgestellt (z.B. Wasserstofftechnologien, Kohlendioxidnutzung) und ging weit über die Photochemie hinaus. Anscheinend ist es uns bei der Vorortbegehung nicht gelungen, diese Leistungen klar herauszustellen. Dafür bitten wir um Entschuldigung.

Im Fokus der Aktivitäten in *TF 05* steht die Verwendung nachhaltiger Energiequellen, wie Sonnenlicht oder regenerativ erzeugter Strom, zum Antrieb chemischer Synthesen. Wie

in den zur Verfügung gestellten Evaluierungsunterlagen dargestellt, ist ein zentraler Aspekt von *TF 05* die Erzeugung von Wasserstoff sowie dessen Speicherung und Rückwandlung in elektrische Energie. Hierbei wurde besondere Aufmerksamkeit der katalytischen Herstellung und Zersetzung flüssiger Energieträger (bspw. Methanol, Ameisensäure) aus grünem Wasserstoff und CO₂ gewidmet. Ein weiterer Schwerpunkt lag auf der Rückführung von Treibhausgasen in die chemische Produktion. Dies beinhaltet bspw. die Abtrennung von CO₂ aus der Luft in für chemische Reaktionen signifikanten Mengen sowie dessen anschließende Umsetzung zu Kraftstoffen, Monomeren und Plattformchemikalien. In der letzten Dekade wurden weiterhin Verfahren für die Reinigung von Abwässern und Abgasströmen entwickelt, ein möglicherweise wissenschaftlich als unpopulär erachtetes aber außerordentlich gesellschaftsrelevantes Gebiet.

Die Forschungsaktivitäten in *TF 05* sind hochrisikobehaftet, vorrangig grundlagenorientiert mit verfahrenstechnischen Komponenten. Das Themenfeld selbst hat, insbesondere vor dem Hintergrund der Strategie *LIKAT 2030 - Katalyseforschung zur Ressourcenschonung & Schließung von Kreislaufströmen* (die ebenfalls in den Evaluierungsunterlagen enthalten war), eine außerordentliche strategische Bedeutung. Die veröffentlichten Forschungsergebnisse werden seit 2019 zunehmend sichtbarer: Publikationen in besonders renommierten Journalen wie *Energy & Environmental Science* (1x, IF 39,7), *Chem.* (1x, IF 25,8), *Angew. Chem. Int. Ed.* (3x, IF 16,8) und schließlich drei Publikationen in Journalen der *Nature*-Familie zeigen unseres Erachtens deutlich die wissenschaftliche Wertschätzung dieses TFs.⁵ Wir möchten deshalb darauf hinweisen, dass die Bewertung „sehr gut“ in Anbetracht dieser überdurchschnittlichen Leistungen ausgesprochen demotivierend für alle beteiligten Mitarbeitenden ist und von den Kolleg:innen im Institut nicht nachvollzogen werden kann.

Im Sinne des Positionspapiers der DFG,⁶ die Bewertungsgrundlage wissenschaftlicher Aktivitäten, auch über bibliometrische Indizes hinaus, auf eine breitere Basis zu stellen, sind bei der Bewertung von *TF 05* nur unzureichend berücksichtigt worden. Bspw. sei hier die Initiierung der ersten deutschen DIN SPEC zu einem photokatalytischen Syntheseprozess genannt (siehe Evaluierungsbericht S. 96), an dem die Themenfeldsprecherin maßgeblich beteiligt war, und die reproduzierbare Messbedingungen in der photokatalytischen CO₂-Reduktion etabliert. Der Geschäftsplan der *DIN SPEC 91457: Photokatalyse - Bestimmung der Produktbildung in der CO₂-Reduktion*⁷ wurde im Februar 2021 erstellt, der entsprechende Entwurf ist im August 2022 erschienen. Damit wurde ein wesentliches und notwendiges Werkzeug zur Verbesserung der Qualität auf diesem Forschungsgebiet bereitgestellt, das entsprechend nationale und internationale Würdigung erfahren hat.

5 (a) D. Wei, R. Sang, P. Sponholz, H. Junge, M. Beller, *Nat. Energy* **2022**, 7, 438-447; (b) R. Sang, Y. Hu, R. Razzaq, G. Mollaert, H. Atia, U. Bentrup, M. Sharif, H. Neumann, H. Junge, R. Jackstell, B.U.W. Maes, M. Beller, *Nat. Commun.* **2022**, 13, 4432; (c) R. Sang, Z. Wei, Y. Hu, E. Alberico, D. Wei, X. Tian, P. Ryabchuk, A. Spannenberg, R. Razzaq, R. Jackstell, J. Massa, P. Sponholz, H. Jiao, H. Junge, M. Beller, *Nat. Catal.* **2023**, 6, 543-550.

⁶ [Wissenschaftliches Publizieren als Grundlage und Gestaltungsfeld der Wissenschaftsbewertung - Herausforderungen und Handlungsfelder. Positionspapier der DFG, Mai 2022.](#)

⁷ [DIN SPEC 91457-European Standards \(en-standard.eu\)](#)

Im Rahmen der Vorortbegehung ist uns bereits klar geworden, dass es uns offenbar nicht gelungen ist, die *Themenfelder 04* und *05* klar thematisch voneinander abzugrenzen. So wurden Fragen von der Bewertungsgruppe zur Unterscheidung beider Themenfelder von uns nicht ausreichend beantwortet. Wir sehen diese Diskussion als einen sehr konstruktiven Impuls, die *Themenfelder 04* und *05* künftig zu einem *Themenfeld: Energie, Ressourcen & Umwelt* zu vereinen. Das Themenfeld bündelt damit sämtliche Expertisen auf den Gebieten der erneuerbaren Rohstoffe, alternativer Energiequellen (Photo- und Elektrochemie), CO₂-Nutzbarmachung sowie Abwasser- und Abgasreinigung. Vor allem hinsichtlich der Anwendung von Elektrokatalyse bzw. -chemie für die Nutzbarmachung erneuerbarer Ressourcen ist die Zusammenlegung beider *Themenfelder* von absolutem Vorteil. Dementsprechend wird die Strategie LIKAT 2030 zeitnah angepasst.