

Drs. 5918-17  
Berlin 20 01 2017

Stellungnahme zum Antrag auf  
eine strategische Erweiterung des  
**Leibniz-Instituts für  
Analytische Wissenschaften  
– ISAS – e.V., Dortmund,**  
großer strategischer Sondertat-  
bestand im Rahmen der  
Ausführungsvereinbarung WGL



---

<b>Vorbemerkung</b>	<b>5</b>
<b>A. Kenngrößen</b>	<b>7</b>
<b>B. Aufgaben</b>	<b>9</b>
<b>C. Zur Bedeutung der beantragten strategischen Erweiterung</b>	<b>10</b>
<b>D. Zur wissenschaftlichen Qualität des Erweiterungsvorhabens</b>	<b>13</b>
<b>E. Stellungnahme zum Antrag auf eine strategische Erweiterung</b>	<b>19</b>
<b>Anlage: Bewertungsbericht zum Antrag auf eine strategische Erweiterung des Leibniz-Instituts für Analytische Wissenschaften – ISAS – e.V., Dortmund, großer strategischer Sondertatbestand im Rahmen der Ausführungsvereinbarung WGL</b>	<b>21</b>



---

# Vorbemerkung

Der Ausschuss der Gemeinsamen Wissenschaftskonferenz (GWK) hat den Wissenschaftsrat im Oktober 2015 gebeten, die Anträge für einen großen inhaltlich-strategischen Sondertatbestand – die strategische Erweiterung des Leibniz-Instituts für Analytische Wissenschaften (ISAS), Dortmund – sowie für die Aufnahme von Einrichtungen in die gemeinsame Förderung durch Bund und Länder nach Ausführungsvereinbarung WGL |<sup>1</sup> zu prüfen. Der Wissenschaftsrat ist hierbei aufgefordert, zur wissenschaftlichen Qualität der Einrichtungen bzw. des Sondertatbestands, zur überregionalen Bedeutung und zur strukturellen Relevanz für das Wissenschaftssystem Stellung zu nehmen. Hierbei soll die Position der Leibniz-Gemeinschaft einbezogen werden. Über die Einzelbewertung der Einrichtungen bzw. des Sondertatbestands hinaus wird der Wissenschaftsrat vom Ausschuss der GWK ersucht, die Förderwürdigkeit der Anträge sowohl hinsichtlich dieser drei Kriterien als auch insgesamt anhand der Prädikate exzellent, sehr gut, gut und nicht hinreichend zu beurteilen. |<sup>2</sup>

Der Wissenschaftsrat hat den Evaluationsausschuss im Januar 2016 gebeten, die Evaluation des Antrags auf eine strategische Erweiterung des ISAS durchzuführen; dieser hat eine entsprechende Arbeitsgruppe eingesetzt. In dieser Arbeitsgruppe haben auch Sachverständige mitgewirkt, die nicht Mitglieder des Wissenschaftsrates sind. Der Wissenschaftsrat ist ihnen zu besonderem Dank verpflichtet.

Die Arbeitsgruppe hat das ISAS am 27. und 28. Juni 2016 besucht und auf der Grundlage des Besuchs einen Bewertungsbericht verfasst. Nach Verabschiedung durch die Arbeitsgruppe ist der Bewertungsbericht im weiteren Verfahren nicht mehr veränderbar. Der Evaluationsausschuss des Wissenschaftsrates hat auf der Grundlage dieses Bewertungsberichts am 3. und 4. November 2016 die wissenschaftspolitische Stellungnahme erarbeitet. Er hat hierbei auch eine am 13. Juli 2016 vom Senat der Leibniz-Gemeinschaft verabschiedete Stellung-

|<sup>1</sup> Gemeinsame Wissenschaftskonferenz: Ausführungsvereinbarung zum GWK-Abkommen über die gemeinsame Förderung der Mitgliedseinrichtungen der Wissenschaftsgemeinschaft Gottfried Wilhelm Leibniz e.V. – Ausführungsvereinbarung WGL (AV-WGL) vom 27.10.2008, zuletzt geändert am 20.04.2012.

|<sup>2</sup> Ebd., Art. 2.5.4.3., S. 10.

6           nahme zur Aufnahme der strategischen Erweiterung des ISAS in die gemeinsame Förderung durch Bund und Länder nach Ausführungsvereinbarung WGL sowie die Ergebnisse eines Gesprächs mit Vertreterinnen und Vertretern der Leibniz-Gemeinschaft berücksichtigt.

Der Wissenschaftsrat hat die vorliegende Stellungnahme auf seinen Sitzungen vom 18. bis 20. Januar 2017 in Berlin beraten und verabschiedet.

---

# A. Kenngrößen

Das Leibniz-Institut für Analytische Wissenschaften (ISAS) wurde 1952 als Institut für Spektrochemie und Angewandte Spektroskopie gegründet und wird seit 1953 von Bund und Ländern gemeinsam gefördert, seit 1980 im Rahmen der „Blauen Liste“. |<sup>3</sup> Seit dem Frühjahr 1993 ist das ISAS als An-Institut mit der Universität Dortmund verbunden. Neben zwei Standorten in Dortmund verfügt das ISAS über eine Außenstelle in Berlin. Mit Einrichtung des Berliner Standorts wurde das fachliche Spektrum des Instituts, in dessen Mittelpunkt zunächst die Spektrochemie als Teil der Analytischen Chemie stand, um Fragen der Umweltanalytik ergänzt.

Das ISAS wird als Leibniz-Institut von Bund und Ländern nach Art. 91b GG jeweils hälftig institutionell gefördert. Im Haushaltsjahr 2015 verfügte das ISAS über institutionelle Zuwendungen von Bund und Ländern in Höhe von insgesamt rund 11,8 Mio. Euro |<sup>4</sup>; die institutionellen Personalausgaben betragen rund 7,0 Mio. Euro.

Die Drittmiteinnahmen des ISAS beliefen sich im Zeitraum von 2013 bis 2015 auf insgesamt rund 6,5 Mio. Euro, davon stammten 41 % von den Ländern, 18 % vom Bund, 17 % von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) und 13 % von Stiftungen. Das ISAS erhielt außerdem Drittmittel von der Europäischen Union (7 %) und der Wirtschaft (4 %). Im Jahr 2015 lag das Drittmittelvolumen bei rund 3,0 Mio. Euro.

Zum Stichtag 31. Dezember 2015 standen dem ISAS insgesamt 112 institutionelle Stellen (Vollzeitäquivalente, VZÄ) zur Verfügung, darunter 39 Stellen für wissenschaftliches Personal. 13,15 Stellen für wissenschaftliches Personal und 13,0 Stellen für nichtwissenschaftliches Personal waren zum Stichtag unbesetzt. Hinzu kamen 17,2 drittmittelfinanzierte VZÄ für Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler. Insgesamt waren am Stichtag 165 Personen am ISAS tätig, darunter 27 Wissenschaftlerinnen und 46 Wissenschaftler.

|<sup>3</sup> Das ISAS gehört zu den Gründungsmitgliedern der Arbeitsgemeinschaft Blaue Liste, der heutigen Leibniz-Gemeinschaft.

|<sup>4</sup> Einschließlich Leibniz-Wettbewerbsabgabe in Höhe von rund 471 Tsd. Euro.

Der Antrag auf einen großen strategischen Sondertatbestand sieht vor, die methodische Bandbreite des ISAS um das Fachgebiet der Biospektroskopie an einem neuen Standort auf dem Campus der Ruhr-Universität Bochum (RUB) zu erweitern. Geplant ist die zusätzliche Einrichtung von zwei Abteilungen. Die Abteilung „Biospektroskopie“ soll sich mit grundlegenden Entwicklungen im Bereich der zeit- und orts aufgelösten Spektroskopie an Proteinen befassen, die Abteilung „Translationale Biospektroskopie“ soll ihren Schwerpunkt in der Anwendung markierungsfreier spektroskopischer Methoden setzen.

Der institutionelle Zuwendungsbedarf für die strategische Erweiterung beträgt laut Kalkulation des ISAS 6,2 Mio. Euro im Jahr 2018, rund 6,3 Mio. Euro im Jahr 2019 und rund 6,4 Mio. Euro im Jahr 2020. |<sup>5</sup> Zusätzlich sollen jährlich rund 1,5 Mio. Euro durch Beiträge Dritter erbracht werden. Außerdem will das ISAS im Jahr 2018 410 Tsd. Euro (2019: 430 Tsd. Euro; 2020: 440 Tsd. Euro) als Eigenanteil erbringen.

Insgesamt kalkuliert das ISAS für das Erweiterungsvorhaben mit einem zusätzlichen Personalbedarf von 63 VZÄ in der endgültigen Ausbauphase ab dem Jahr 2021, davon zwei W3-Stellen, 30 Stellen für wissenschaftliches Personal im höheren Dienst (einschließlich Annex-Personal) und 31 Stellen für nicht-wissenschaftliches Personal.

Es ist geplant, dass das ISAS mit der Erweiterung Räumlichkeiten der RUB bezieht, die durch anstehende Baumaßnahmen der RUB in Zukunft frei werden sollen. Die anfallenden Renovierungs- und Herrichtungskosten schätzt das ISAS auf 1,5 Mio. Euro; zusätzlich rechnet das ISAS mit einem Aufwand von 600 Tsd. Euro für die allgemeine Labor- und Büroausstattung. Zusammen mit der Planung für die Erstinvestitionen in (Groß-)Geräte in Höhe von 6,15 Mio. Euro beläuft sich die Kostenschätzung für die initiale Gebäude- und Geräteausstattung im Rahmen des angemeldeten Sondertatbestands auf insgesamt 8,25 Mio. Euro. |<sup>6</sup>

|<sup>5</sup> Programmbudget 2017 (Entwurf vom 17.03.2016) sowie Planung vom 11.07.2016. Die Abgabe für das Leibniz-Wettbewerbsverfahren (SAW-Verfahren; SAW = Senatsausschuss Wettbewerb) ist hier bereits eingerechnet. Diese wird vom Ausschuss der Gemeinsamen Wissenschaftskonferenz jeweils als Rate der für das nächste Jahr festzustellenden gemeinsamen Zuwendung festgelegt. Hier noch nicht eingerechnet ist jedoch die so genannte DFG-Abgabe von 2,5 % des Kernhaushalts, durch die das ISAS die Möglichkeit erhält, Förderungen bei der DFG zu beantragen. Diese muss vom ISAS aus den genannten Beträgen eingespart werden.

|<sup>6</sup> Dabei sollen Teile auch aus Gründen der zeitlichen Realisierbarkeit nach dem Jahr 2019 aus dem geplanten regelmäßigen Investitionsansatz finanziert werden, etwa die Anpassung der IT-Kapazität u. ä.

---

# B. Aufgaben

Das ISAS dient laut § 2 Abs. 1 seiner Satzung der Förderung der Forschung auf dem Gebiet der analytischen Wissenschaften, wozu „insbesondere die Entwicklung neuer und verbesserter analytischer Verfahren, Methoden und Geräte und die Anwendung der wissenschaftlichen Erkenntnisse als analytischer Beitrag zu Problemlösungen, vor allem auf den Gebieten der Material- und Lebenswissenschaften“ zählen. Dies wird nach § 2 Abs. 2 der Satzung „insbesondere verwirklicht durch

- a) die Durchführung wissenschaftlicher Forschungs- und Entwicklungsvorhaben,
- b) die Kooperation mit anderen Forschungseinrichtungen, Universitäten und Unternehmen,
- c) die Aus- und Fortbildung wissenschaftlichen Nachwuchses,
- d) die Vergabe von Forschungsaufträgen,
- e) die Beteiligung an und Veranstaltung von wissenschaftlichen Fachtagungen, Vorträgen und Seminaren,
- f) die Herausgabe oder die Mitarbeit an wissenschaftlichen Publikationen.“

---

# C. Zur Bedeutung der beantragten strategischen Erweiterung

Das ISAS leistet grundlegende Beiträge zur Entwicklung und Verbesserung analytischer Verfahren, Methoden und Instrumente auf den Gebieten der Material- und Lebenswissenschaften von insgesamt hoher Qualität. Seine breitgefächerte fundierte Methodenkompetenz überwiegend mit chemischem, physikochemischem und physikalischem Schwerpunkt gründet auf einer langen Tradition des ISAS in den Analytischen Wissenschaften. Die Arbeit des Instituts zeichnet sich durch die Integration unterschiedlicher analytischer Methoden in eine Messstrategie und die Zusammenführung der so gewonnenen Ergebnisse aus. Durch erfolgreiche gemeinsame Berufungen besteht eine sehr gute wissenschaftliche Anbindung des ISAS an die universitäre Forschung insbesondere der Region. Aber auch darüber hinaus ist das Institut sehr gut verbunden mit der universitären und außeruniversitären Forschung im In- und Ausland.

Der Wissenschaftsrat würdigt ausdrücklich die positive wissenschaftliche Entwicklung, die das ISAS seit der zurückliegenden Evaluation |<sup>7</sup> im Jahr 2000 und der Umsetzung des im Anschluss daran vorgelegten Neuordnungskonzepts |<sup>8</sup> vollzogen hat. Durch eine gemeinsame Berufung |<sup>9</sup> mit der RUB wurden u. a. die Lebenswissenschaften in das interdisziplinäre Spektrum des ISAS eingebunden und damit die Neuausrichtung auf einen guten Weg gebracht. Die jüngste gemeinsam mit der Medizinischen Fakultät der Universität Duis-

|<sup>7</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Stellungnahme zum Institut für Spektrochemie und angewandte Spektroskopie (ISAS), Dortmund und Berlin, vom Januar 2001, in: Stellungnahmen zu Instituten der Blauen Liste sowie zum Aufnahmeantrag des Hans-Knöll-Instituts für Naturstoff-Forschung in die Blaue Liste, Bd. XI, Köln 2001, S. 321-374.

|<sup>8</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Stellungnahme zum Neustrukturierungskonzept des Instituts für Spektrochemie und Angewandte Spektroskopie (ISAS), Dortmund und Berlin, in: Empfehlungen und Stellungnahmen 2003, Bd. I, Köln 2004, S. 221-238.

|<sup>9</sup> Im Jahr 2008 wurde die Professur für Angewandte Proteomik und Bioanalytik gemeinsam mit der Medizinischen Fakultät der Universität Bochum berufen.

burg-Essen berufene Abteilungsleitung „Biomedizinische Forschung“ ist ein weiterer begrüßenswerter Schritt zur angestrebten stärkeren Fokussierung auf Fragestellungen der Gesundheitsforschung. Im Rahmen der Untersuchung von Mechanismen kardiovaskulärer Erkrankungen (Herz-Kreislauf-Erkrankungen) sollen diagnostische Marker identifiziert und therapeutische Interventionen eröffnet werden. Damit wird ein überzeugendes translationales Forschungsinteresse auf einem wissenschaftlich herausragenden Niveau am ISAS etabliert. Im Bereich der biomolekularen und biomedizinischen Forschung hat sich bereits ein sichtbarer, komplementärer und auch intern gut vernetzter Institutsteil gebildet.

In Anbetracht dieser Entwicklung ist das Vorhaben des ISAS, die Forschung verstärkt auf analytische Verfahren für die Lebenswissenschaften auszurichten und diese substanziell durch neue komplementäre Kompetenzen in der Biospektroskopie zu ergänzen, grundsätzlich nachvollziehbar und sinnvoll. Die Medizin benötigt dringend molekulare Anhaltspunkte für eine zielgerichtete Frühdiagnostik und -behandlung. Relevanz und Innovationspotenzial der übergeordneten Thematik sind generell sehr hoch. Allerdings ist dieser Bedarf bereits seit Jahren erkannt und insbesondere auf diesem Forschungsgebiet wurden bzw. werden große Anstrengungen im In- und Ausland unternommen (vgl. D.). Ausgehend von den bestehenden Arbeitsbereichen hat das ISAS nur wenige (konkrete) Anknüpfungspunkte zur geplanten biospektroskopischen Methodenerweiterung aufgezeigt. Am ISAS ist ein breites Methodenspektrum etabliert, das in Teilen allerdings nicht in eine übergreifende Programmatik eingebunden ist. Gerade für den geplanten Ausbau des Methodenspektrums um die Biospektroskopie ist die Verpflichtung auf eine kohärente Forschungsprogrammatik entscheidend, um neben der Breite auch eine qualitative Tiefe zu erreichen, die sich auch in qualitativ erstklassigen Publikationen niederschlagen kann.

Für eine Reihe von Fragen der Forschungsprogrammatik, der Organisationsstruktur und der Umsetzungsplanung hat der Klärungs- und Koordinierungsprozess erst begonnen. In diesem Zusammenhang würdigt der Wissenschaftsrat, dass das ISAS im Sommer 2016 unter Einbindung des wissenschaftlichen Beirats einen breiten Strategieprozess aufgenommen hat. Sehr begrüßenswert ist die Ende Oktober 2016 geschlossene Kooperationsvereinbarung zwischen der RUB und dem ISAS sowie die gemeinsam abgestimmte Investitionsplanung für (Groß-)Geräte |<sup>10</sup> als ein erstes Ergebnis dieses Prozesses. Unabdingbar für eine erfolgreiche Integration der Biospektroskopie in das Methodenportfolio ist jedoch vor allem die Erarbeitung einer übergreifenden Forschungsprogramma-

| <sup>10</sup> Kooperationsvertrag ISAS-RUB (10/2016), Anlage 5: Verteilung der Erstinvestitionen auf die Jahre 2018 bis 2022.

12 tik, die die Forschungsinteressen der ISAS-Abteilungen schlüssig verbindet und ein spezifisches Profil definiert. Ungeachtet der anzuerkennenden Schritte in die richtige Richtung ist diese inhaltlich-programmatische Arbeit weitgehend noch zu leisten. Daher wird das vorgelegte Konzept zum gegenwärtigen Zeitpunkt noch nicht als eine geeignete Basis für die beantragte strategische Erweiterung beurteilt.

---

## D. Zur wissenschaftlichen Qualität des Erweiterungsvorhabens

Der wissenschaftliche Mehrwert eines Ausbaus des am ISAS etablierten Methodenspektrums um bildgebende biospektroskopische Verfahren ist in der Forschungsprogrammatisierung nicht schlüssig begründet; eine systematische Verknüpfung der geplanten Methodenerweiterung mit den Forschungsarbeiten des ISAS ist noch nicht ausreichend substantiiert. Die notwendige systematische Analyse der wissenschaftlichen Bedeutung einer Methodenerweiterung für die Forschungs- und Anwendungsschwerpunkte des ISAS steht erst am Anfang. Vor allem lässt das Erweiterungskonzept offen, in welcher Weise massenspektrometrische und biospektroskopische Forschungsinteressen verbunden werden sollen. Ein zielführender Ausbau des Methodenspektrums um biospektroskopische Verfahren muss aber auf klare im Forschungsprogramm verankerte Leitlinien bezogen werden. Eine konsequente inhaltliche Fokussierung ist unabdingbar, um die erforderliche kritische Masse für innovative Spitzenforschung erreichen zu können. Es ist unklar, wie das ISAS die kritische Größe für den Bereich der Biospektroskopie im Falle einer Erweiterung erreichen will. Dies ist insofern von besonderer Relevanz, als deutschland- und europaweit eine Reihe von Initiativen |<sup>11</sup> zu beobachten ist, die einen ähnlichen Ansatz wie das ISAS zur Probenstandardisierung von Gewebsproteomen verfolgen und dabei ebenfalls auf bildgebende Verfahren setzen. Für die angestrebte abteilungsübergreifende Einbindung der am ISAS vorhandenen Kompetenzen müssen zunächst gemeinsame inhaltliche Anknüpfungspunkte in allen Arbeitsbereichen formuliert werden. Perspektivisch kann das mit der Erweiterung angestrebte Ziel der übergreifenden Entwicklung einer möglichst simultanen Multiparameteranalyse für Applikationen in der Gesundheitsforschung (wie die

| <sup>11</sup> Zur Proteomstandardisierung beispielsweise am *European Molecular Biology Laboratory* – EMBL Heidelberg; zur Proteomstandardisierung plus Imaging oder andere Analysen beispielsweise am Max-Planck-Institut für Biochemie, Martinsried.

Untersuchung und Aufbereitung von Gewebeproben für klinische Anwendungen) als ein solches inhaltliches Bindeglied der Forschung am ISAS fungieren.

#### \_ Abteilung „Biospektroskopie“

Mit der Einrichtung einer neuen Abteilung Biospektroskopie wird das Ziel verfolgt, die Grundlagen biospektroskopischer Methoden (weiter) zu entwickeln. Profil und Struktur der geplanten Abteilung sind aber im Hinblick darauf nicht überzeugend konzipiert. Das zugeordnete Methodenspektrum (Raman-Spektroskopie einschließlich Breitband-CARS-Methoden und MS-Imaging) |<sup>12</sup> gründet nicht auf einer kohärenten und innovativen Forschungsprogrammatisierung. Während Raman-Spektroskopie zur Untersuchung von molekularen Strukturen und Grenzflächen bereits seit langem am ISAS entwickelt und eingesetzt wird, steht die Etablierung von Breitband-CARS-Methoden erst am Anfang. Vor allem aber sind die geplante Einrichtung einer Arbeitsgruppe „Nahfeldspektroskopie“ und ihre Rolle in diesem Zusammenhang nicht nachvollziehbar erklärt. Für das ISAS selbst spielt die Einrichtung einer Professur für Nahfeldspektroskopie eine zentrale Rolle insbesondere hinsichtlich der Anbindung des Berliner Standorts, aus Bochumer Sicht soll diese Technologie aber erst im zweiten Schritt als Ergänzung zur Raman-Spektroskopie eingeführt werden. Die vorgesehene Anbindung der Arbeitsgruppe „Nahfeldspektroskopie“ zunächst an die Abteilung Grenzflächenanalytik am Standort Berlin ist ebenso wenig plausibel wie ihre spätere Umsiedlung zur Abteilung Biospektroskopie am Standort Bochum. Außerdem verfügt das ISAS derzeit nicht über die notwendige Expertise für eine tragfähige Investitionsplanung dieses Bereichs, da die Leitung der Forschungsgruppe „Nahfeldspektroskopie“ noch nicht besetzt ist.

Eine grundlagenorientierte Abteilung sollte sich nach Auffassung des Wissenschaftsrates konsequent auf die Entwicklung neuartiger Methoden der Biospektroskopie fokussieren. Eine erfolgreiche Umsetzung dieses ambitionierten Ziels ist nur in enger Kooperation mit der RUB möglich.

#### \_ Abteilung Translationale Biospektroskopie

Die Planungen zur Einrichtung der Abteilung „Translationale Biospektroskopie“ sind demgegenüber bereits weitgehend konkretisiert. Die bestehende Zusammenarbeit des ISAS mit dem Inhaber der Bochumer Professur für Biophysik, der für den Aufbau und die Leitung der geplanten Abteilung „Translationale Biospektroskopie“ vorgesehen ist, bietet hierfür hervorragende Voraussetzungen. Im Zentrum der Aktivitäten steht die Entwicklung von bildgebenden spektroskopischen Verfahren, um mittels Infrarot-Absorption spektrale Histo-

| <sup>12</sup> CARS = *Coherent Anti-Stokes Raman Scattering*; MS = Massenspektrometrie.

pathologie an Geweben sowie die spektrale Zytopathologie an lebenden Zellen durchzuführen. Die Verfahren ermöglichen eine Multiparameteranalytik, die Art, Ort und Anzahl der Analyten zu definierten Zeiten bestimmt. Diese Ausrichtung gründet auf den erfolgreichen Vorarbeiten des Biophysikers der RUB. Auf der molekularen Ebene soll eine markerfreie zeitaufgelöste FTIR-Spektroskopie |<sup>13</sup> zum Einsatz kommen, um Reaktionsmechanismen und Interaktionen von Schlüsselproteinen auf atomarer Ebene mit hoher zeitlicher Auflösung zu bestimmen. FTIR-Bildgebung ist eine lang etablierte Technik, die vom Inhaber der Bochumer Professur für Biophysik in Zusammenarbeit mit Medizinerinnen und Medizinern hinsichtlich einer Anwendung auf Gewebepathologie evaluiert worden ist und das Potenzial hat, die Methoden der Gewebediagnostik deutlich zu verfeinern. Hier sind weitere technische Entwicklungen denkbar, mit dem Ziel die recht langen Messzeiten so weit zu verkürzen, dass die Methode kompetitiv wird. Um das Verfahren zum Einsatz in der Medizin weiter zu entwickeln, wird die Einbindung eines industriellen Partners empfohlen. Außerdem sollte das ISAS ein Konzept für den Zugang zu klinischen Gewebe-Biobanken entwickeln.

Darüber hinaus werden weitere Infrarotmethoden verwendet, bei denen der translationale Charakter allerdings deutlicher aufgezeigt werden sollte. |<sup>14</sup> Weiterzuführen sind auch die konzeptionellen Überlegungen zur Einbindung der Fluoreszenzmikroskopie in die Forschungsarbeiten. Die derzeit hochaktuellen bildgebenden Methoden mit Fluoreszenzmarkern spielen im Rahmen des Erweiterungskonzepts eine eher nachgeordnete Rolle. Lediglich der Technische Service wird mit einer Expertise hinsichtlich Fluoreszenzspektroskopie ausgestattet. Die Bedeutung dieser innovativen Methodik für das Forschungsprogramm sollte überprüft werden.

Die geplante Erweiterung der ISAS-Forschung um die translationale Biospektroskopie ist seitens des Bochumer Partners sehr gut herausgearbeitet. Nicht klar ist jedoch zum einen die Frage der (räumlichen) Anbindung von ISAS an die klinische Forschung im Rahmen des Forschungsbaus für molekulare Protein-Diagnostik (ProDi) und zum anderen, wie diese Aktivitäten nach Ausscheiden der designierten Abteilungsleitung „Translationale Biospektroskopie“ verstetigt werden können.

| <sup>13</sup> FTIR - Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer ist eine spezielle Variante eines Spektrometers, ein Messgerät für die Infrarotspektroskopie.

| <sup>14</sup> Beispielsweise wird die zeitaufgelöste Differenz-FTIR-Spektroskopie von der Bochumer Forschergruppe seit vielen Jahren erfolgreich zur Untersuchung von Reaktionsmechanismen diverser Proteine eingesetzt. Auch werden ATR-Methoden (*Attenuated Total Reflection*) verwendet, bei denen die Biomoleküle an Grenzflächen präpariert werden, um z. B. Faltungszustände zu detektieren.

Obgleich dem Beirat satzungsgemäß die Aufgabe zufällt, die Qualität der wissenschaftlichen Arbeiten und die Forschungsplanung des ISAS zu beurteilen, ist das Beratungsgremium bei der Konzeption der strategischen Erweiterung offenkundig nicht intensiv einbezogen worden. Es wird dringend empfohlen, das Instrument des Beirats künftig systematisch für eine kritisch-prüfende Begleitung zu nutzen. Qualitätssichernde Beratung ist bei einer so weitgehenden und substanziellen Entscheidung, wie sie die geplante Institutserweiterung darstellt, unabdingbar. Ferner sollte eine einschlägige biospektroskopische Expertise im Beirat vertreten sein.

#### *Organisation und Leitung*

Das ISAS plant, die Leitungsposition der Abteilung Biospektroskopie im Jahr 2018 auszuschreiben; mit Besetzung der Leitungsposition im Jahr 2020 soll die Abteilung aufgebaut werden. |<sup>15</sup> Es ist vorgesehen, dass der Inhaber der Bochumer Professur für Biophysik neben der Gründungsprofessur für die neue Abteilung „Translationale Biospektroskopie“ außerdem die kommissarische Leitung der entwicklungsorientierten Abteilung „Biospektroskopie“ bis zur Besetzung der Leitungsposition übernehmen soll. Der Wissenschaftsrat empfiehlt nachdrücklich, die Gründung und den Aufbau der Abteilung „Biospektroskopie“ eng mit der neu zu besetzenden Leitung zu verbinden und abzustimmen, ohne dass bereits Vorfestlegungen durch die Einrichtung einer kommissarischen Leitung getroffen werden. Für die Neubesetzung sollte eine herausragende Forscherpersönlichkeit gewonnen werden, die den Aufbau der entwicklungsorientierten Abteilung „Biospektroskopie“ mit grundlagenwissenschaftlicher Exzellenz und hoher Innovationskraft übernehmen und vorantreiben kann. Mit der Neuberufung sollte die Etablierung einer neuen innovativen Imaging-Methode verbunden werden.

Der Wissenschaftsrat begrüßt die Zusage der RUB, den derzeitigen Inhaber der Professur für Biophysik für die Einrichtung und Leitung der Abteilung Translationale Biospektroskopie ab 2018 teilweise freizustellen und bis zum Jahr 2024 über die reguläre Altersgrenze hinaus weiter zu beschäftigen. Allerdings ist fraglich, ob im Rahmen der veranschlagten zeitlichen Perspektive von sechs Jahren die angestrebte Methodenentwicklung und der Technologietransfer in die Praxis gelingen können. Das ISAS hat bislang keine Szenarien zur weiteren Entwicklung dieser Abteilung nach Ausscheiden der Leitung vorgestellt, was

|<sup>15</sup> Zum Zeitpunkt des Ortsbesuchs war die Abstimmung zwischen ISAS und RUB hinsichtlich einer kommissarischen Übernahme der Abteilungsleitung „Biospektroskopie“ durch den Inhaber der Professur für Biophysik und designierten Abteilungsleiter „Translationale Biospektroskopie“ bis zu einer erfolgreichen Neuberufung noch nicht abgeschlossen.

angesichts einer strategisch angelegten Erweiterung und der damit einhergehenden Investitionen jedoch dringend angeraten wird. Eine Planung für die Validierung und Zulassung von Verfahren und Instrumenten ist noch nicht konkretisiert, insbesondere mangelt es an der Sicherung von *Intellectual Property* (IP) und der Vereinbarung von Industriekooperationen. Ferner sind die Implikationen zu bedenken, die mit dem bis dahin am ISAS etablierten Schwerpunkt für die geplante Neuberufung der Abteilungsleitung „Translationale Biospektroskopie“ verbunden sind. Im Jahr 2022 sollen die Berufungsverhandlungen für die Nachfolge aufgenommen, im Jahr 2024 der Leitungswechsel vollzogen werden.

Eine Ergänzung der Leitungsgremien des ISAS um den Bereich der Biospektroskopie hält der Wissenschaftsrat bei einer entsprechenden Erweiterung für zwingend erforderlich. |<sup>16</sup>

#### *Personal und Kommunikation*

Die erfolgreiche Umsetzung der geplanten Erweiterung wird maßgeblich davon abhängen, inwieweit es gelingt, die vorgesehenen Stellen adäquat und zeitnah zu besetzen. Da zum Stichtag 31. Dezember 2015 von den insgesamt 112 Stellen (VZÄ) des ISAS knapp ein Viertel, von den Stellen für wissenschaftliches Personal gut ein Drittel nicht besetzt war, ist die Besetzung der zusätzlichen insgesamt 63 beantragten Stellen (davon 32 Stellen für wissenschaftliches Personal) außerordentlich ambitioniert. Dies gilt in besonderem Maße für die Besetzung der Leitungsstellen. Bislang ist nicht erkennbar, wie diese Herausforderung bewältigt werden soll. Vor diesem Hintergrund wird die Entwicklung einer Personalstrategie dringend angeraten.

Der wissenschaftliche Mehrwert einer methodischen Erweiterung scheint in vielen Fällen noch nicht bei den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des ISAS verankert und damit der Nutzen bzw. die Möglichkeiten für die jeweils eigenen Arbeiten nicht ersichtlich zu sein. Daher wird nachdrücklich empfohlen, die wissenschaftlichen Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter der verschiedenen Arbeitsbereiche aktiv in die weitere konzeptionelle Arbeit einzubinden. Mit dem Aufbau eines vierten Standorts in Bochum (neben zwei Standorten in Dortmund und einem Standort in Berlin) steht das ISAS vor der beträchtlichen Herausforderung, standortübergreifend eine reibungslose Kommunikation zu

|<sup>16</sup> Zum Zeitpunkt des Ortsbesuchs war die Frage der Eingliederung der neuen Abteilungsleitungen, vor allem der für den Standort Bochum verantwortlichen und designierten Abteilungsleitung „Translationale Biospektroskopie“, in den ISAS-Vorstand noch nicht abschließend beraten. Laut Stellungnahme vom 02.11.2016 strebt das ISAS nun für den Vorstand eine so genannte „Doppelspitze“ bestehend aus einem wissenschaftlichen und einem administrativen Vorstandsmitglied an. Darüber hinaus sollen die wissenschaftlichen Direktorinnen und Direktoren (Abteilungsleitungen) des ISAS gemeinsam das wissenschaftliche Leitungsgremium (Direktorium) bilden und in diesem Gremium die Gesamtverantwortung für die wissenschaftlich-strategische Weiterentwicklung des ISAS tragen.

18 etablieren. Dafür muss das ISAS dringend geeignete Austauschformate entwickeln.

#### *Infrastruktur und Finanzen*

Der Wissenschaftsrat unterstützt das Bestreben von ISAS und RUB, die an der RUB vorhandenen Forschungsinfrastrukturen sowie die mit der Erweiterung am Standort Bochum neu hinzukommenden Ressourcen abzustimmen und im Wege der Kooperation synergetisch zu nutzen. |<sup>17</sup> Eine belastbare Investitions- und Anschaffungsplanung setzt zunächst jedoch eine kohärente und abgestimmte Forschungsprogrammatik voraus. Dem ISAS wird mit Nachdruck empfohlen, der systematischen Integration der Biospektroskopie in die eigenen Forschungs- und Entwicklungsarbeiten einen grundlegenden und umfassenden Strategieprozess voranzustellen.

|<sup>17</sup> Zum Zeitpunkt des Ortsbesuchs stellten ISAS und RUB jeweils abweichende Investitionsplanungen und Priorisierungen für die Anschaffung von Großgeräten vor. Die Investitionsplanung ist zu diesem Zeitpunkt des fortgeschrittenen Antragsverfahrens offenkundig noch nicht Gegenstand intensiver Abstimmungen zwischen den Partnern gewesen. Es ist der Eindruck entstanden, dass es sich bei der von ISAS vorgelegten Investitionsplanung um eine Annäherung handelte.

---

## E. Stellungnahme zum Antrag auf eine strategische Erweiterung

Der Wissenschaftsrat bewertet die beantragte strategische Erweiterung des ISAS um die Biospektroskopie im Rahmen der gemeinsamen Förderung durch Bund und Länder nach Ausführungsvereinbarung WGL insgesamt als nicht hinreichend.

Der Wissenschaftsrat bewertet die wissenschaftliche Qualität der beantragten strategischen Erweiterung des ISAS als nicht hinreichend.

Der Wissenschaftsrat bewertet die überregionale Bedeutung der beantragten strategischen Erweiterung des ISAS als gut.

Der Wissenschaftsrat bewertet die strukturelle Relevanz für das Wissenschaftssystem der beantragten strategischen Erweiterung des ISAS als gut.



Anlage: Bewertungsbericht zum Antrag  
auf eine strategische Erweiterung des **Leibniz-Instituts  
für Analytische Wissenschaften – ISAS – e.V.**, Dortmund,  
großer strategischer Sondertatbestand im Rahmen  
der Ausführungsvereinbarung WGL

**2016**

Drs. 5492-16  
Köln 17 10 2016



	<b>Vorbemerkung</b>	<b>25</b>
	<b>A. Ausgangslage</b>	<b>26</b>
	<b>A.I Entwicklung und Aufgaben</b>	<b>26</b>
5	I.1 Entwicklung	26
	I.2 Aufgaben	27
	I.3 Positionierung im fachlichen Umfeld	28
	<b>A.II Strategische Erweiterung der Arbeitsschwerpunkte</b>	<b>29</b>
	II.1 Forschung	29
10	II.2 Beantragte Erweiterungsmaßnahme	34
	II.3 Publikationen, Tagungen und Drittmittel	39
	II.4 Drittmittel	40
	II.5 Wissenschaftlicher Nachwuchs und Beteiligung an der Hochschullehre	40
	II.6 Wissenschaftsbasierte Serviceleistungen	42
15	II.7 Kooperationen	43
	II.8 Qualitätssicherung	46
	<b>A.III Organisation und Ausstattung</b>	<b>48</b>
	III.1 Organisation	48
	III.2 Ausstattung	50
20	<b>A.IV Perspektiven für die beantragte Strategische Erweiterung</b>	<b>53</b>
	IV.1 Wissenschaftlicher Mehrwert	53
	IV.2 Organisatorische Umsetzung	55
	<b>B. Bewertungsbericht</b>	<b>59</b>
	<b>B.I Zur Bedeutung der Einrichtung und ihrer strategischen Erweiterung</b>	<b>59</b>
25	<b>B.II Zur Bedeutung der Strategischen Erweiterung für die bestehenden Arbeitsschwerpunkte und Aufgaben</b>	<b>61</b>
	II.1 Zur Forschung	61
	II.2 Zu Kooperationen	67
	II.3 Zur Qualitätssicherung	69
30	<b>B.III Zu Konzept und Perspektiven der strategischen Erweiterung</b>	<b>70</b>
	III.1 Zum wissenschaftlichen Mehrwert	70
	III.2 Zur organisatorischen Umsetzung	72
	<b>Anhang</b>	<b>75</b>



---

# Vorbemerkung

Der vorliegende Bewertungsbericht zum Antrag auf einen großen strategisch-inhaltlichen Sondertatbestand, die strategische Erweiterung des Leibniz-Instituts für Analytische Wissenschaften (ISAS), Dortmund, ist in zwei Teile gegliedert. Der darstellende Teil ist mit der Einrichtung und den Zuwendungsgebern abschließend auf die richtige Wiedergabe der Fakten abgestimmt worden. Der Bewertungsteil gibt die Einschätzung der wissenschaftlichen Leistungen, Strukturen und Organisationsmerkmale wieder.

---

# A. Ausgangslage

---

## A.1 ENTWICKLUNG UND AUFGABEN

---

### I.1 Entwicklung

Das Institut für Analytische Wissenschaften (ISAS) wurde 1952 als Institut für Spektrochemie und Angewandte Spektroskopie mit Sitz in Dortmund gegründet und wird seit 1953 von Bund und Ländern gemeinsam gefördert, seit 1980 im Rahmen der „Blauen Liste“. Das ISAS gehört zu den Gründungsmitgliedern der Arbeitsgemeinschaft Blaue Liste, der heutigen Leibniz-Gemeinschaft.

Das ISAS hat seit 1993 den Status eines An-Instituts der Universität Dortmund. Es verfügt auf Empfehlung des Wissenschaftsrates seit 1992 über eine Außenstelle in Berlin, die aus dem Labor für spektroskopische Methoden der Stoffanalyse des Zentralinstituts für Optik und Spektroskopie in Berlin-Adlershof hervorging. |<sup>18</sup> Mit der Einrichtung der Außenstelle in Berlin wurde das fachliche Spektrum des ISAS, in dessen Mittelpunkt zunächst die Spektrochemie als Teil der Analytischen Chemie stand, um Fragen der Umweltanalytik ergänzt.

Der Wissenschaftsrat evaluierte das Institut 1995 |<sup>19</sup> und 2001 |<sup>20</sup> und beurteilte das im Anschluss an die Evaluation vorgelegte Neustrukturierungskonzept als tragfähig. |<sup>21</sup> Die Neustrukturierung beinhaltete u. a. die Integration der Lebenswissenschaften in das interdisziplinäre Spektrum des Instituts.

|<sup>18</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Stellungnahmen zu den außeruniversitären Forschungseinrichtungen der ehemaligen Akademie der Wissenschaften der DDR auf dem Gebiet der Physik, Köln 1992, S. 33-38.

|<sup>19</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Stellungnahme zum Institut für Spektrochemie und angewandte Spektroskopie, Dortmund, vom Januar 1994, in: Stellungnahmen zu Naturwissenschaftlichen Forschungseinrichtungen der Blauen Liste, Köln 1995, S. 35-63.

|<sup>20</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Stellungnahme zum Institut für Spektrochemie und angewandte Spektroskopie (ISAS), Dortmund und Berlin, vom Januar 2001, in: Stellungnahmen zu Instituten der Blauen Liste sowie zum Aufnahmeantrag des Hans-Knöll-Instituts für Naturstoff-Forschung in die Blaue Liste, Bd. XI, Köln 2001, S. 321-374.

|<sup>21</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Stellungnahme zum Neustrukturierungskonzept des Instituts für Spektrochemie und Angewandte Spektroskopie (ISAS), Dortmund und Berlin, in: Empfehlungen und Stellungnahmen 2003, Bd. I, Köln 2004, S. 221-238.

Diese wurde 2008 durch eine gemeinsame Berufung mit der medizinischen Fakultät der Ruhr-Universität Bochum (W3-Professur für „Angewandte Proteomik und Bioanalytik“) umgesetzt. Seit 2009 verfügt das ISAS neben dem Dortmunder Standort „ISAS City“ und der Außenstelle „ISAS Berlin“ über einen weiteren Standort „ISAS Campus“ in einem Neubau auf dem Campus der Technischen Universität (TU) Dortmund, den die Abteilung Bioanalytik 2009 bezog.

In der Evaluation des ISAS durch die Leibniz-Gemeinschaft 2011 wurde die erfolgreiche Umsetzung des neuen Forschungskonzepts bestätigt und darauf hingewiesen, dass der Weiterentwicklung des Konzepts in den kommenden Jahren eine hohe Priorität zukommen müsse. |<sup>22</sup>

Der Empfehlung, die lebenswissenschaftlichen Bereiche durch klare Fragestellungen von gesamtgesellschaftlichem Interesse zu profilieren, kam das ISAS durch die Fokussierung auf Fragestellungen der Gesundheitsforschung und durch die Einrichtung der Abteilung „Biomedizinische Forschung“ nach, für die auf Antrag des Landes Nordrhein-Westfalen (NRW) die Bund-Länder-Finanzierung eines Sondertatbestandes erfolgte. Die gemeinsam mit der medizinischen Fakultät der Universität Duisburg-Essen (W3-Professur „Mechanismen kardiovaskulärer Erkrankungen“) berufene Abteilungsleitung nahm im Februar 2016 ihre Tätigkeit am ISAS auf.

Das ISAS strebt mit der Ausrichtung des Forschungs- und Anwendungsschwerpunkts „Analytik für die Gesundheitsforschung“ eine stärkere abteilungsübergreifende Vernetzung an. Zugleich sei diese auch richtungsweisend für die Festlegung der konzeptionellen Weiterentwicklung, die im Kern auf eine molekülklassenübergreifende Integration der neuartigen Messverfahren des ISAS ziele. Damit werde eine langfristig angelegte strategische Entwicklung fortgeführt, die bereits im Rahmen der letzten Evaluation durch die Leibniz-Gemeinschaft vorgestellt worden und auf positive Resonanz gestoßen sei.

## 1.2 Aufgaben

Die Aufnahme der Lebenswissenschaften in das Forschungsspektrum des ISAS kommt auch in seiner Satzung in der Fassung vom 4. Oktober 2012 zum Ausdruck. Der Vereinszweck besteht nach § 2 Abs. 1 in der Förderung der „Forschung auf dem Gebiet der analytischen Wissenschaften“, wozu „insbesondere die Entwicklung neuer und verbesserter analytischer Verfahren, Methoden und Geräte und die Anwendung der wissenschaftlichen Erkenntnisse als analy-

|<sup>22</sup> Vgl. Stellungnahme des Senats der Leibniz-Gemeinschaft zum Leibniz-Institut für Analytische Wissenschaften e.V. (ISAS), Dortmund/Berlin, vom 26. März 2011, S. 2.

tischer Beitrag zu Problemlösungen, vor allem auf den Gebieten der Material- und Lebenswissenschaften“ zählt.

Dies wird nach § 2 Abs. 2 der Satzung „insbesondere verwirklicht durch

- a) die Durchführung wissenschaftlicher Forschungs- und Entwicklungsvorhaben,
- b) die Kooperation mit anderen Forschungseinrichtungen, Universitäten und Unternehmen,
- c) die Aus- und Fortbildung wissenschaftlichen Nachwuchses,
- d) die Vergabe von Forschungsaufträgen,
- e) die Beteiligung an und Veranstaltung von wissenschaftlichen Fachtagungen, Vorträgen und Seminaren,
- f) die Herausgabe oder die Mitarbeit an wissenschaftlichen Publikationen.“

Das ISAS erklärt, dass sich seine satzungsgemäßen Aufgaben durch die vorgesehene Erweiterung nicht ändern werden. Vielmehr trage die strategische Erweiterung um die Biospektroskopie dazu bei, seine Aufgaben adäquat und dem gesellschaftlichen Bedarf in der Gesundheitsforschung entsprechend umfassender anzugehen und so auch langfristig wesentliche Beiträge zur Methodentwicklung für Wissenschaft, Forschung und Wirtschaft zu leisten.

### 1.3 Positionierung im fachlichen Umfeld

Als prominente Beispiele für Institute, die sich wie das ISAS die Aufklärung biologischer Systeme unterschiedlicher Komplexitätsgrade in der Biologie, der Chemie oder der Medizin zur Aufgabe gemacht haben, nennt das ISAS das *European Molecular Biology Laboratory* (EMBL), das *Institute of Molecular Systems Biology* (IMSB) an der Eidgenössisch Technischen Hochschule (ETH) Zürich und das Max-Planck-Institut für Biochemie in Martinsried.

Das ISAS betont, dass es hinsichtlich der Bereitstellung innovativer Techniken zur Beschreibung biologischer Systeme selbst im Vergleich zu deutlich größeren Einrichtungen im Forschungsfeld hochspezialisiert ist. Die methodische Interdisziplinarität und das Forschungskonzept begründen laut Selbstbericht ein internationales Alleinstellungsmerkmal. |<sup>23</sup> Dieses einzigartige Profil würde aus Sicht des Instituts durch die Erweiterungsmaßnahme signifikant gestärkt und zukunftsorientiert ausgebaut werden.

|<sup>23</sup> Das ISAS weist darauf hin, dass der Senat der Leibniz-Gemeinschaft im Ergebnis der Evaluation 2011 die methodische Interdisziplinarität und das Konzept des Instituts als internationales Alleinstellungsmerkmal bestätigt habe.

Innerhalb der Leibniz-Gemeinschaft ist das ISAS Mitglied der Sektion D „Mathematik, Natur- und Ingenieurwissenschaften“, deren Schwerpunkte Modellierung und Optische Technologien nach Angaben des ISAS durch eine Erweiterung um die Biospektroskopie gestärkt würden. Das ISAS weise aber auch eine starke Passung zum Profil der Sektion C „Lebenswissenschaften“ auf, insbesondere bezüglich der biomedizinischen Forschung und der Querschnittsbereiche Prävention, Alter(n)sforschung, Wirkstoffforschung und Toxikologie. Aus einer Erweiterung der Kompetenzen des ISAS um die Biospektroskopie könnten insbesondere Anwenderinnen und Anwender aus Leibniz-Instituten mit einem Schwerpunkt in den Lebens- und Umweltwissenschaften und die Forschungsverbünde „Gesundes Altern“, „Medizintechnik: Diagnose, Monitoring und Therapie“ und „Wirkstoffe und Biotechnologie“ profitieren.

Im Rahmen des Leibniz-Forschungsverbunds „Wirkstoffe und Biotechnologie“ besteht nach Angaben des ISAS u. a. eine Zusammenarbeit mit dem Leibniz-Institut für Molekulare Pharmakologie (FMP) in Berlin. Die Forschungsansätze der beiden Institute unterscheiden sich nach Auskunft des ISAS diametral. Während das ISAS, insbesondere mit der Erweiterung um die Biospektroskopie, einen systemorientierten Ansatz verfolge und Nachweismethoden, insbesondere für die Diagnostik, und deren Validierung im Vordergrund stünden, liege der Schwerpunkt beim FMP auf der Aufklärung molekularer Mechanismen und der Entwicklung so genannter *Compounds*. Thematisch konzentrierte die Abteilung Biomedizinische Forschung des ISAS sich auf Herz-Kreislauf-Erkrankungen, die Arbeiten des FMP fokussierten demgegenüber auf neuronale Mechanismen (Alzheimer, Influenza, Endokrinologie). Eine Intensivierung des Austauschs mit dem FMP biete sich über die Abteilung Biomedizinische Forschung des ISAS als Schnittstelle an und werde von der neuen Abteilungsleitung angestrebt. |<sup>24</sup>

## **A.II STRATEGISCHE ERWEITERUNG DER ARBEITSSCHWERPUNKTE**

---

### II.1 Forschung

Die Integration komplementärer analytischer Methoden in eine Messstrategie kennzeichnet den Forschungsansatz des ISAS. Für die Bearbeitung komplexer natur- und lebenswissenschaftlicher Herausforderungen ist es nach Darstellung des ISAS nicht ausreichend, analytische Methoden jeweils einzeln weiterzuentwickeln. Bereits um biologische, chemische und physikalische Prozesse

|<sup>24</sup> Biomarker und molekulare Targetstrukturen, die in der Bioanalytik über massenspektrometrische Methoden und Biospektroskopie identifiziert und in der Biomedizinischen Forschung validiert werden (Schwerpunkte des ISAS), könnten laut ISAS etwa in den Schwerpunkten Strukturbiologie und Chemische Biologie des FMP für so genannte *Compounds* zugänglich gemacht werden.

auf molekularer Ebene präzise beschreiben zu können, bedürfe es der Entwicklung von kombinierten Verfahren. Das Institut formuliert den Anspruch, diese jedoch nicht nur initial zu entwickeln. Durch deren Ausbau bzw. Vervollständigung sollen integrative Messverfahren entstehen, die auf der molekularen Ebene die Gewinnung von Informationen sowohl über die Art des zu detektierenden Stoffes (qualitative Analyse) und dessen Anzahl (quantitative Analyse) als auch über die Lokalisation des Analyten (ortsaufgelöste Analyse), bzw. von dessen Anteilen, in einer Probe zeitaufgelöst, d. h. zu verschiedenen Zeitpunkten während der Messung, erlauben. Analytische Messmethoden sollen damit zu effizienten Messprozessen verbunden werden, so dass „vierdimensionale“ Informationen (Art, Anzahl, Zeit und Ort eines Analyten) möglichst simultan und ressourcenschonend erhoben werden können.

Bei der Umsetzung dieser Zielvorstellung konzentriert das Institut sich auf die Entwicklung von analytischen Methoden für Anwendungen in der Gesundheitsforschung und angrenzenden Forschungsbereichen. Die Entwicklungen sollen dazu beitragen, die Prävention und Frühdiagnose von Krankheiten zu verbessern sowie deren schnellere und präzisere Therapie zu ermöglichen.

Das ISAS schätzt die auf Forschung und Entwicklung entfallenden Zeiteile der Tätigkeiten des wissenschaftlichen Personals auf 80 %. Seine Hauptarbeitsrichtungen bildet das Institut in seinen Forschungsprogrammen (Bio-)Grenzflächen und Molekulare Diagnostik ab, die innerhalb der Forschungsabteilungen übergreifend bearbeitet werden.

#### II.1.a Forschungsplanung und -koordinierung

Das ISAS hat zur abteilungsübergreifenden Planung seiner Forschungsprogramme einen jährlichen, strukturierten Prozess etabliert. Damit soll die interne Zusammenarbeit gefördert und die Komplementarität der Arbeiten der einzelnen Forschergruppen sichergestellt werden. Zum Ende eines Jahres werden die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler jeweils gebeten, ihre Forschungsergebnisse sowie die darauf aufbauende Forschungsplanung für die nächsten drei Jahre darzustellen; der Drei-Jahres-Zeitraum ist für die Erstellung des Programmbudgets des ISAS erforderlich. Die Planungen werden an zwei festen Terminen von den Direktorinnen und Direktoren, Gruppenleiterinnen und Gruppenleitern diskutiert. Dabei werden auch Folgeentscheidungen, wie z. B. Investitionsbedarf, erörtert. Die Unterlagen der Forschungsplanung werden dem wissenschaftlichen Beirat für die jährliche Begutachtung zur Verfügung gestellt.

Die Direktorinnen und Direktoren entwickeln in Abstimmung mit dem wissenschaftlichen Beirat und den Gruppenleitungen die strategische Gesamtausrichtung weiter und überprüfen die Zielerreichung in Bezug auf das Forschungsprogramm.

Diskussionen unter Beteiligung des gesamten wissenschaftlichen Personals finden im Rahmen interner Veranstaltungen wie dem jährlichen Retreat der Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler statt.

#### II.1.b Forschungsprogramme

Das Forschungsprogramm des ISAS umfasst die Leistungsziele „(Bio-)Grenzflächen“, „Molekulare Diagnostik“ und „Strategiefonds Wettbewerb“. Innerhalb der Programme werden abteilungsübergreifend die Forschungsthemen Systemanalyse, Diagnostische Verfahren und Bildgebende Verfahren sowie Bio-Hybrid-Grenzflächen und Biomolekulare Sensorik bearbeitet.

Im Rahmen des ISAS-Strategiefonds „Wettbewerb“ zur Förderung der interdisziplinären Zusammenarbeit erfolgte im Jahr 2013 erstmals eine Ausschreibung in der Förderlinie „*Integrative Research*“ zur gemeinsamen Bearbeitung eines Projekts aus dem Themenfeld „Biomolekül-Oberflächen-Interaktionen“ durch mindestens zwei Arbeits- oder Nachwuchsgruppen. Die beiden vom wissenschaftlichen Beirat ausgewählten Projekte starteten 2014 und haben eine Laufzeit von zunächst von drei Jahren, die bei positiver Begutachtung durch den wissenschaftlichen Beirat und erfolgreicher Einreichung eines Folgeantrags im Rahmen der zweiten Ausschreibung 2016 um maximal drei weitere Jahre verlängert werden kann. Nach der positiven Evaluierung des Instruments durch den wissenschaftlichen Beirat wurde der Strategiefonds 2014 um die Förderlinie „*Early Independence*“ zur Förderung der wissenschaftlichen Selbständigkeit junger Forscherinnen und Forscher ergänzt. Die Ausschreibungen im Rahmen des Strategiefonds „Wettbewerb“ sollen zukünftig abwechselnd für die Förderlinie „*Integrative Research*“ und die Förderlinie „*Early Independence*“ erfolgen.

#### II.1.c Forschungsabteilungen

Das ISAS verfügt derzeit (Stand 25. April 2016) über die drei Forschungsabteilungen „Grenzflächenanalytik“, „Bioanalytik“ und „Biomedizinische Forschung“ und plant seit längerem die Einrichtung zweier weiterer Abteilungen „Neue Materialien“ und „Datenanalyse und Modellierung“, deren Leitungspositionen bisher noch nicht besetzt sind (vgl. A.III.1). Im Rahmen der strategischen Erweiterung sollen zusätzlich zwei Abteilungen „Biospektroskopie“ und „Translationale Biospektroskopie“ eingerichtet werden (vgl. III.1.d).

##### *Abteilung Grenzflächenanalytik*

Im Zentrum der Arbeiten dieser Abteilung steht die Optische Analytik von Oberflächen und Grenzflächen. Hierbei werden verschiedene Methoden aus dem Bereich der optischen Spektroskopie eingesetzt und weiterentwickelt, die es ermöglichen, atomare bzw. molekulare Strukturen an Oberflächen und bio-funktionalen Grenzflächen in-situ und zerstörungsfrei zu analysieren.

Zur Abteilung gehören gegenwärtig die Arbeitsgruppen „In-Situ Spektroskopie“ und „Nanostrukturen“.

Die Arbeitsgruppe „In-Situ Spektroskopie“ beschäftigt sich mit der Weiterentwicklung von Methoden im Bereich der polarisationsoptischen Grenzflächenspektroskopie an funktionalen Schichten, Strukturen und Oberflächen, um organische, Hybrid- und Metamaterialien für optische, elektronische, sensorische und biotechnologische Anwendungen zu charakterisieren.

Der zentrale Forschungsgegenstand der Arbeitsgruppe „Nanostrukturen“ ist die Strukturanalytik mittels optischer Spektroskopie an Nanogrenzflächen sowie an Hybrid-Grenzflächen zwischen organischen Molekülen und anorganischen Materialien.

#### *Abteilung Bioanalytik*

Die Abteilung entwickelt analytische Methoden, die zum Verständnis der Signal- und Stoffwechselwege in Zellen und Zellverbänden im menschlichen Körper auf unterschiedlichen Ebenen, vom Lipid bis hin zu interzellulären Kommunikationsprozessen, und damit zur Verbesserung der Gesundheit der Bevölkerung beitragen sollen. Dabei arbeiten die Forscherinnen und Forscher an lebendigen Zellen und mit Mikrochips, auf denen die Transport- und Signalwege menschlicher Körperzellen simuliert werden.

In der Abteilung sind derzeit drei Arbeitsgruppen, eine Projektgruppe, drei Nachwuchsgruppen sowie seit kurzem eine internationale Forschergruppe „Quantitative Strukturproteomik“ angesiedelt (vgl. Anhang 1a, Organigramm).

Die Arbeitsgruppe „*Protein Dynamics*“ ging aus der Arbeitsgruppe „Systemanalyse“ hervor und entwickelt Methoden, mit denen Biomoleküle wie Proteine qualitativ und quantitativ erfasst werden können.

Die Ende 2014 eingerichtete Arbeitsgruppe „*Chemical Proteomics*“ entwickelt neue chemische Werkzeuge zur kovalenten Modifizierung von Proteinen. Mit deren Hilfe soll die Identifikation von mit Sonden modifizierten Proteinen vereinfacht werden, zudem soll die Regulierung der Proteaseaktivität untersucht werden.

Der Fokus der Arbeiten der Arbeitsgruppe „Miniaturisierung“ liegt auf der Entwicklung, Validierung und exemplarischen Anwendung von Ionisierungstechniken sowie auf der Probennahme und -aufbereitung über geeignete Trenntechniken, Zerstäuber und Desorption.

Die Projektgruppe „*Tissue Omics*“ wurde Anfang 2015 gegründet und befasst sich mit der Entwicklung, Optimierung und Anwendung von Verfahren, die die qualitative und quantitative Analyse von Proteinen in Geweben und repräsentativen Zelllinien gestatten. Dabei stehen insbesondere Untersuchungen zur Genese neurodegenerativer und neuromuskulärer Erkrankungen im Fokus.

Die Nachwuchsgruppe „Synthetische Biomoleküle“ beschäftigt sich vor allem mit der Entwicklung chemischer Werkzeuge, um posttranslationale Modifikationen untersuchen zu können. Dabei liegt der Schwerpunkt auf der Glykosylierung von Proteinen, die in Verbindung mit Tumorentwicklung und chronischen, inflammatorisch-infektiösen Erkrankungen gebracht werden können. Die Nachwuchsgruppe „Lipidomics“ wurde 2013 aus der Arbeitsgruppe „Systemanalyse“ (jetzt „*Protein Dynamics*“) ausgegliedert. Ihr Ziel ist die Etablierung neuer Methoden, die eine umfassende quantitative Analyse komplexer biologischer Systeme in gesunden und kranken Zuständen erlauben. Die Nachwuchsgruppe „CARS Mikroskopie“ wird über das vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderte Verbundvorhaben „*Leibniz Research Cluster (LRC) Bio/Synthetic multifunctional micro-production units – Novel ways in bioactive compound development*“ finanziert. Sie arbeitet seit Mitte 2015 an der Etablierung und Anwendung neuer Mess- und Auswertungsmethoden mit den Schwerpunkten mikroskopie-gekoppelte Spektroskopie und Fluoreszenz. Ein weiterer Fokus ist die Kopplung dieser Methoden mit Mikrofluidik sowie weiteren Trennmethoden sowie Massenspektrometrie.

Die internationale Forschergruppe „Quantitative Strukturproteomik“ wurde im April 2016 in Kooperation mit einem Lehrstuhlinhaber der *Mc Gill University*, Montreal, der gleichzeitig das *UVic-Genome BC Proteomics Centre* an der *University of Victoria* leitet, ins Leben gerufen, um gemeinsam Methoden für die Strukturklärung von Proteinen zu entwickeln und in die Anwendung der biomedizinischen und pharmazeutischen Forschung zu überführen.

#### *Abteilung Biomedizinische Forschung*

Die Abteilung Biomedizinische Forschung nahm im Sommer 2014 ihre Arbeit auf und verfügt seit dem 1. Februar 2016 über eine neue Leitung. In der Abteilung sind die Arbeitsgruppe „Biomedizinische Forschung“ und die zum 1. Februar 2016 eingerichtete Arbeitsgruppe „Kardiovaskuläre Pharmakologie“ angesiedelt sowie vorübergehend auch die Arbeitsgruppe „Grenzflächenprozesse“. |<sup>25</sup>

Die Arbeitsgruppe „Biomedizinische Forschung“ erforscht die molekularen Grundlagen von krankhaften Veränderungen, um diese möglichst ursächlich zu therapieren bzw. ihnen vorzubeugen. Insbesondere geht es um die Früherkennung von Tumoren sowie von neurodegenerativen Erkrankungen wie z. B. Alzheimer. In Folge des Wechsels der Abteilungsleitung ist eine Ausweitung des Schwerpunkts der Gruppe auf Molekulare Pharmakologie und Herzinsuffizienz vorgesehen.

|<sup>25</sup> Die Arbeitsgruppe „Grenzflächenprozesse“ war vorher Teil der mit der Pensionierung des Leiters aufgelösten Abteilung Materialanalytik am Dortmunder Standort ISAS City.

Die Arbeitsgruppe „Grenzflächenprozesse“ untersucht die Wechselwirkungen zwischen Molekülen (insbesondere Biomolekülen) und Oberflächen unter Einbeziehung von konkreten Umgebungsbedingungen wie der Anwesenheit von Wasser oder reaktiven Gasen. Diese Arbeitsgruppe trägt laut ISAS zur Ermittlung der Grundlagen bei, die für die Entwicklung neuer Materialien mit biologischer Funktionalität benötigt werden. Sie weist damit starke inhaltliche Anknüpfungspunkte zur neu einzurichtenden Abteilung „Neue Materialien“ (vgl. A.II.7) auf; diese konzentrierte sich auf die Entwicklung von Materialien, die geeignet sind, Interaktionen mit biologischen Systemen zu kontrollieren. |<sup>26</sup> Komplementär zur Abteilung Biomedizinische Forschung sollte die Abteilung Neue Materialien eine enge Verzahnung der analytischen Entwicklungen mit dem Bedarf der Anwendung in der Forschung sicherstellen und auch die diesbezüglichen Kooperationen in Wissenschaft und Wirtschaft ausbauen.

Die Arbeitsgruppe Grenzflächenprozesse war bis zur Etablierung der Abteilung Biomedizinische Forschung der in Berlin ansässigen Abteilung Grenzflächenanalytik zugeordnet. Im Zuge der Erarbeitung der neuen, abteilungsübergreifenden Programmbereiche „Molekulare Diagnostik“ und „Bio-Grenzflächen“ habe das ISAS seine Verfahren der Forschungsplanung entsprechend angepasst. Um institutsintern interdisziplinäre Kooperationen zu intensivieren und die Geschäftsprozesse zu vereinfachen, wurde die Arbeitsgruppe Grenzflächenprozesse nach Angaben des ISAS übergangsweise, d. h. bis zur Einrichtung der Abteilung „Neue Materialien“ der Abteilung „Biomedizinische Forschung“ und somit zugleich der Organisationsstruktur am Dortmunder Standort City wieder zugeordnet. Das ISAS betont, dass unabhängig von der organisatorischen Zuordnung die Gruppen der Abteilung Grenzflächenanalytik und die Gruppe Grenzflächenprozesse ihre Zusammenarbeit im Forschungsprogramm Bio-Grenzflächen fortsetzen. Abschließend soll über die organisatorische Eingliederung der Gruppe nach Besetzung der Leitungsstelle entschieden werden.

## II.2 Beantragte Erweiterungsmaßnahme

### II.2.a Ziel des strategischen Erweiterungsvorhabens

Vor dem Hintergrund des weltweiten Anstiegs der so genannten Volkskrankheiten gewinnt die Entwicklung analytischer Methoden zur Unterstützung einer frühzeitigen Diagnose und Prävention zunehmend an Bedeutung. Das ISAS konstatiert einen sich deutlich abzeichnenden zukünftigen Bedarf an analytischen Verfahren in Wissenschaft, (prä-klinischer) Forschung und Industrie: Um biochemische Veränderungen als Ursache oder Auswirkung einer Erkran-

| <sup>26</sup> Als Beispiele hierfür nennt das ISAS das zweidimensionale Zellwachstum auf synthetischen Fasern oder Wechselwirkungen mit Implantatmaterialien.

kung erklären zu können, werde nicht nur die Bereitstellung von Analysemethoden auf der Ebene einzelner Moleküle und kleiner Molekülverbände benötigt.

Für ein möglichst tiefgehendes Verständnis eines biologischen Systems ist nach Darstellung des ISAS idealerweise eine quantitative, orts- und zeitaufgelöste Analytik möglichst vieler Bausteine eines solchen Systems auf verschiedenen molekularen Skalen notwendig. Die Untersuchung biologischer Systeme auf Basis einzelner Zellen erlaubt grundlegende Aussagen über die Regulation von zellulären Funktionen in einer definierten Umgebung. Bei der Entstehung von Erkrankungen sind jedoch meist nicht nur einzelne Zellen „krankhaft“ verändert, sondern größere Gewebeareale bzw. ganze Organe erfahren eine Veränderung, die deren Funktion beeinflusst oder stark einschränkt. Das ISAS erklärt, dass für deren Untersuchung neben einer „mikroskopischen“ Analyse auf zellulärem Niveau die Integration der Prozesse in einem „makroskopischen“ Gesamtbild erforderlich sei. Damit könne die Kommunikation zwischen Zellen und deren Differenzierung und Organisation in einem Verband einbezogen werden. Als Beispiele führt das ISAS hier Krebserkrankungen und Herzinsuffizienz an. Diese Erkrankungen verliefen sehr individuell und oft schleichend, so dass sie in vielen Fällen erst spät erkannt würden.

Im Rahmen der strategischen Erweiterung des ISAS soll durch eine skalenübergreifende Analytik diese Brücke von den Zellen zum Gewebe geschlagen werden. Analysemethoden sollen zu umfassenden Messstrategien für die Beschreibung molekularer Prozesse über die Größenordnungen eines Systems hinweg verzahnt werden. Damit sollen „vierdimensionale“ Messverfahren (Art, Anzahl, Zeit und Ort eines Analyten) entwickelt und analytische Techniken bereitgestellt werden, die skalenübergreifend die Aufklärung komplexer molekularer Systeme ermöglichen.

Zur Umsetzung seines Konzepts hält das Institut einen signifikanten Ausbau seiner methodischen Kompetenzen zur orts aufgelösten Analytik und eine Ergänzung um das Fachgebiet der Biophysik mit dem Schwerpunkt auf Methoden der Biospektroskopie für erforderlich. Bereits heute optimiert und kombiniert das ISAS laut Selbstbericht ein breites Spektrum an analytischen Methoden zur Untersuchung biologischer Systeme auf molekularer Ebene. Um komplexe biologische Systeme jedoch in ihrer Gesamtheit zu untersuchen, sei eine mehrstufige Integration bioanalytischer Daten vom molekularen Niveau bis hin zum physiologischen Prozess notwendig. Für deren Entwicklung bedürfe das Institut einer biospektroskopischen Erweiterung, insbesondere um Verfahren der markerfreien Bildgebung, der ultra-hoch aufgelösten Mikroskopie und der zeitaufgelösten Biospektroskopie. Diese Techniken könnten für die zeit- und orts aufgelöste Detektion von Biomolekülen in lebenden Zellen und Gewebe genutzt und die Messverfahren auch auf andere Organismen angewendet werden.

Im Rahmen der strategischen Erweiterung beabsichtigt das ISAS, die Analytik molekularer Interaktionen auf ein neues Niveau zu heben. Die meisten derzeitigen Verfahren gehen, so ISAS, von einer seriellen Aufreinigung von Proteinkomplexen mittels geeigneter molekularer Tools (*Tags*, Antikörper etc.) aus, die eine schrittweise Zusammensetzung des Netzwerks erlauben. Im ISAS sollen mit Hilfe von (photo)chemischen „*Crosslinks*“ Strategien entwickelt werden, die erstmals quantitative Informationen über molekulare Interaktionen ergeben. Viele Proteine besitzen danach nicht nur einen Bindungspartner, sondern deren relative Zusammensetzung wird nach einem zellulären Stimulus geändert. Es sollen Technologien entwickelt werden, die eine Aussage darüber erlauben, wieviel Prozent eines Proteins mit den Bindungspartnern A und B interagieren. Die Integration molekularer Isoformen, Bindungspartner und hoher Orts- und Zeitauflösung soll zu einer neuen Generation von Datensätzen für die Erstellung von Modellen der Regulation zellulärer Prozessen ergeben.

Das ISAS erwartet hohe Synergien zwischen den geplanten grundlagenorientierten Arbeiten der Biospektroskopie und den Arbeiten der Abteilung Grenzflächenanalytik hinsichtlich technischer Weiterentwicklungen der optischen Spektroskopie. Infrarot- und Raman-Spektroskopie (einschließlich von abbildenden Spektroskopieverfahren) werden am ISAS bereits seit langem entwickelt und, so betont ISAS, auf höchstem Niveau zur Untersuchung von molekularen Strukturen und Grenzflächen (Festkörper-Modellsystemen) eingesetzt.

Zur Verwirklichung des mit der strategischen Erweiterung verfolgten Ziels der Beschreibung biologischer Systeme müssen aus Sicht des ISAS biospektroskopische Verfahren sowohl für ihre Nutzung zur Messung von Biomolekülen, als auch für die klinische Applikation weiterentwickelt werden. Eine so erzielte, orts aufgelöste Detektion von verschiedenen Molekülklassen komplettiere, neben der Quantifizierung und Identifikation der Analyten mittels anderer, am ISAS bereits etablierter Technologien, die Information über mögliche räumliche Verteilungen und Interaktionen von Molekülen in einem biologischen System. Dies werde die vom ISAS angestrebte 4D-Analytik komplementieren.

Zum anderen ist im Rahmen der strategischen Erweiterung auch die translational orientierte Weiterentwicklung und Optimierung biospektroskopischer Methoden geplant. Im Zentrum dieser Arbeiten soll die Anwendung markierungsfreier spektroskopischer Methoden in der Medizin stehen. Von Interesse sind hier vor allem bildgebende spektroskopische Verfahren zur schnellen Charakterisierung von Gewebeproben, die Detektion von löslichen Analyten in Körperflüssigkeiten und der Nachweis der Aktivität kleiner Moleküle, wie etwa von Wirkstoffen und Medikamenten, in Geweben und Zellen.

Auf der molekularen Ebene soll eine markerfreie zeitaufgelöste FTIR-Differenzspektroskopie |<sup>27</sup> zum Einsatz kommen, um Reaktionsmechanismen und Interaktionen von Schlüsselproteinen auf atomarer Ebene mit hoher zeitlicher Auflösung zu bestimmen. Es existieren zahlreiche Vorarbeiten am Lehrstuhl für Biophysik der Ruhr-Universität Bochum (RUB) zum Ras-Protein, ein Element bei der Entstehung von Tumoren. Das Ras-Protein fungiert als molekularer Schalter in einem wichtigen Signalweg und ist ein potenzielles Zielmolekül für das Monitoring einer Therapie. Mit Hilfe zeitaufgelöster Biospektroskopie sei es bereits gelungen, Markerbanden zu identifizieren, die den Zustand des molekularen Schalters („an“ oder „aus“) definieren. Diese Technologien sollen für andere Zielmoleküle adaptiert und langfristig angewendet werden. Methoden der Biospektroskopie sollen so weiterentwickelt werden, dass es ermöglicht wird, die Interaktionen bzw. Reaktionen von biologisch aktiven Substanzen mit ihren Zielstrukturen, zumeist Proteinen, zu untersuchen, z. B. ob ein Molekül das Anschalten von onkogen mutiertem Ras blockieren kann. Die Technologie soll es ermöglichen, die Wirkung von Medikamenten zeit- und orts aufgelöst in biologischen Modellsystemen detailliert zu untersuchen.

Zusätzlich soll die markerfreie „spektrale“ Histopathologie an Gewebe und die „spektrale“ Zytopathologie an lebenden Zellen implementiert werden. Diese Techniken werden nach Angaben des ISAS derzeit weltweit vorangetrieben. Umfangreiche Vorarbeiten am Lehrstuhl für Biophysik der RUB belegten, so ISAS, dass mit Hilfe des FTIR-Imaging bereits erfolgreich Tumore (z. B. Darm, Lunge) mit sehr hoher Sensitivität und Spezifität im Vergleich zu klinischen Standards nachgewiesen werden können. Die Technologie erlaube weiterhin eine Subklassifizierung von Tumoren, die zum einen als prädiktive differentielle Diagnostik Auswirkungen auf die Therapieauswahl haben könne und zum anderen eine feinere Vorauswahl von Patienten für klinische Studien erlaube.

Neben der markerfreien Bildgebung, ist die Zuordnung der Markerbanden zu einem definierten Molekül notwendig, um molekulare Zusammenhänge zuzuordnen und das Molekül ggf. als Biomarker in der Diagnostik einsetzen zu können. Über den am Lehrstuhl Biophysik in Zusammenarbeit mit den Arbeitsgruppen des PURE (*Protein research Unit Ruhr within Europe*) Konsortiums bereits etablierten Arbeitsprozess |<sup>28</sup> hinaus sollen zusätzliche Entwicklungen im Bereich der bildgebenden Massenspektrometrie geleistet werden. Das Ziel dabei ist, die Ortsauflösung weiter zu erhöhen, parallel dazu Signalsuppressionen zu minimieren und damit die parallele Detektion für einen breiteren Bereich

|<sup>27</sup> FTIR - Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer ist eine spezielle Variante eines Spektrometers, ein Messgerät für die Infrarotspektroskopie.

|<sup>28</sup> FTIR Imaging, Annotation von Markerbanden, Lasermikrodissektion ausgewählter Gewebeareale, Proteomanalyse zur Identifikation potenzieller Biomarker und anschließender Validierung dieser z. B. mit Gewebe Mikro Arrays.

von Biomolekülen zu ermöglichen. Gelingt dies, so wird nach Einschätzung des ISAS eine direkte Korrelation von FTIR bildgebenden Verfahren und molekular auflösender massenspektrometrischer Technologien möglich, die den etablierten Arbeitsprozess deutlich verkürzen könnte. Sind die Biomarker identifiziert, kann die FTIR Bildgebung idealerweise auf Markerbanden dieser Moleküle optimiert werden, was eine Bilderzeugung innerhalb weniger Sekunden, quasi Echtzeit, ermöglichen, und deutliche Vorteile für die Auswertung eines Schnellschnitts bedeuten würde.

Biomarker sollen nicht nur in Geweben detektiert werden, sondern auch in Körperflüssigkeiten wie Blut, Liquor etc. Das ISAS weist darauf hin, dass es bereits intensiv an der massenspektrometrischen Detektion solcher Marker in Blutproben arbeitet und eine Akkreditierung in diesem Bereich anstrebt. Optische Technologien sollen diesen Anwendungsbereich laut ISAS idealerweise ergänzen. |<sup>29</sup> Das Institut sieht hier zahlreiche Interaktionsmöglichkeiten mit dem Forschungsprogramm im Bereich der (Bio-)Grenzflächen. Chemische Funktionalisierung des ATR-Kristall |<sup>30</sup> ermöglicht die Bindung zahlreicher Moleküle die als Schnittstelle zu Proteinen und anderen Biomolekülen dienen können. In Vorarbeiten am Bochumer Lehrstuhl für Biophysik sei es bereits gelungen eine Immuno-ATR Zelle zur Bestimmung von Proteinfehlfaltungen zu entwickeln. Diese Technologie soll auf andere Biomarker adaptiert werden und hinsichtlich Multiplexing und Miniaturisierung weiterentwickelt werden, um eine Translation dieser Technologie in die Diagnostik zu ermöglichen.

Ein wesentlicher Aspekt der strategischen Erweiterung um die Biospektroskopie ist die interdisziplinäre Zusammenarbeit im Bereich der Dateninterpretation und Visualisierung von Vibrationsspektren. Diese sollen zukünftig nicht mehr auf Basis einzelner Banden analysiert werden, sondern das gesamte Spektrum als „Fingerprint“ für Gewebeareale dienen. Aktuelle Entwicklungen des maschinellen Lernens lassen eine erhebliche Verbesserung der Signalprozessierung zur Erkennung von Gewebearealen erwarten.

Zusätzlich zur technischen Entwicklung von Detektoren, Lichtquellen und experimentellen Aufbauten zur Kopplung von Infrarot- und Rasterkraftmikroskopie sowie der Etablierung der nicht linearen Breitband-Spektroskopie sollen neue Strategien zur Interpretation und Modellierung der spektroskopischen Daten im Zentrum der Forschungsaktivitäten stehen.

|<sup>29</sup> Nach den Ausführungen des ISAS soll die Oberflächen basierte ATR-Technik (ATR - *Attenuated Total Reflection* - abgeschwächte Totalreflexion) miniaturisiert und weiterentwickelt werden. Diese erlaube Infrarot-Messungen in flüssigen Proben trotz der starken Wasserabsorption, weil die evaneszierende Welle nur wenige Mikrometer in die den ATR-Kristall umspülende Flüssigkeit eindringe.

|<sup>30</sup> ATR-Infrarotspektroskopie ist eine Messtechnik der Infrarotspektroskopie (IR-Spektroskopie) für die Oberflächenuntersuchung von undurchsichtigen Stoffen und auch flüssigen Proben.

Im Rahmen der geplanten biospektroskopischen Entwicklungen rechnet das ISAS mit einer Vielzahl an Datensätzen, die neuartige Strategien zur Interpretation und Modellierung erfordern werden. Es ist daher geplant, in enger Kooperation mit der im Aufbau befindlichen Abteilung Datenanalyse die Integration, Simulation und Korrelation von Biospektroskopie-Daten mit mathematischen und statistischen Methoden zu optimieren, insbesondere in Bezug auf die Interpretation und Simulation der spektralen Daten bei optischen Verfahren und durch die Entwicklung von Algorithmen zur Auswertung und Bildverarbeitung von 2D-/3D-Infrarot-Spektren von Geweben.

### II.3 Publikationen, Tagungen und Drittmittel

#### II.3.a Publikationen und wissenschaftliche Tagungen

Auf den Zeitraum von 2013 bis 2015 entfallen insgesamt 559 Publikationen und Vorträge von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern des ISAS (vgl. Anhang 5). Das ISAS gibt an, dass seine Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler überwiegend in referierten Fachzeitschriften publizieren. Dabei werde, so das ISAS, Wert gelegt auf qualitativ hochwertige Veröffentlichungen in Publikationsorganen mit einem hohen Impact-Faktor und einer hohen Zitationsanzahl. Im Berichtszeitraum betrug die Anzahl der Aufsätze in referierten Zeitschriften 199.

Weitere Veröffentlichungsformen des ISAS sind Beiträge zu Sammelwerken (18 im Berichtszeitraum), Monographien (drei im Berichtszeitraum) und Vorträge auf wissenschaftlichen Fachveranstaltungen (338 im Berichtszeitraum).

Anreize für die Veröffentlichung der Forschungsergebnisse würden im Rahmen der leistungsorientierten Mittelvergabe gesetzt, die festlegt, wie der leistungsabhängige Anteil der Forschungsbudgets auf die Forschergruppen verteilt wird. Dabei werden neben den Drittmittelinwerbungen auch die Anzahl und Qualität der Publikationen einer Gruppe herangezogen.

Die Liste der vom Institut für den Berichtszeitraum benannten fünf wichtigsten Publikationen ist dem Anhang 6 zu entnehmen.

Die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des ISAS haben im Zeitraum von 2013 bis 2015 insgesamt 338 Vorträge gehalten, darunter 230 referierte Konferenzbeiträge.

Das ISAS hat in diesem Zeitraum 22 Tagungen und Workshops veranstaltet, darunter zwei im Ausland und zehn als Mitausrichter. Zu den regelmäßigen Veranstaltungen gehören das Anwendertreffen Röntgenfluoreszenz und die Arbeitstagung Mikromethoden in der Proteinchemie, die 2015 jeweils zum 22. Mal stattfanden.

Das ISAS vereinnahmte im Zeitraum von 2013 bis 2015 Drittmittel in Höhe von insgesamt rund 6,5 Mio. Euro (vgl. Anhang 7). Die im Jahr 2015 vereinnahmten Drittmittel in Höhe von rund 3,0 Mio. Euro entsprechen rund 24 % des Kernhaushalts, der sich auf rund 11,7 Mio. Euro belief; das Gesamtbudget lag bei rund 19,5 Mio. Euro.

41 % der Drittmiteleinnahmen im Zeitraum von 2013 bis 2015 (2,7 Mio. Euro) entfielen auf Drittmittel des Landes bzw. der Länder. An zweiter und dritter Stelle standen die Förderung durch den Bund (1,2 Mio. Euro bzw. 18 %) und die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) (1,1 Mio. Euro bzw. 17 %), während Stiftungsmittel 822 Tsd. Euro (13 %), EU-Mittel 482 Tsd. Euro (7 %) und Mittel der Wirtschaft 252 Tsd. Euro (4 %) der Drittmiteleinnahmen ausmachten.

Die von der Leibniz-Gemeinschaft eingesetzte Bewertungsgruppe empfahl dem ISAS 2011, die Drittmittelquote auf 30 % des Kernhaushalts zu steigern. |<sup>31</sup>

Das ISAS konzentriert sich laut Selbstbericht bei der Drittmiteleinwerbung auf Fragestellungen, die seine langfristig verfolgten Forschungsthemen bestmöglich ergänzen. Darüber hinaus versuche es auch, ursprünglich für die Biomedizin entwickelte Technologien drittmittelgefördert auf anderen Anwendungsfeldern zu erproben, wodurch es das Potenzial der methodischen Entwicklung besser einschätzen könne und wertvolle Impulse aus anderen Anwendungsbereichen erhalte.

#### II.5 Wissenschaftlicher Nachwuchs und Beteiligung an der Hochschullehre

Das ISAS sieht in der Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses eine seiner wesentlichen Aufgaben mit strategischer Bedeutung für den Erfolg seiner Forschung. Jedoch erschwere es die Situation auf dem wissenschaftlichen Arbeitsmarkt, passende Nachwuchsgruppenleitungen zu finden. Die Leitung der Nachwuchsgruppe „Lipidomics“ habe erst auf Umwegen besetzt werden können, indem auf Empfehlung des Wissenschaftlichen Beirats zunächst eine thematisch ähnliche Projektgruppe in der Arbeitsgruppe „Systemanalyse“ (heute *Protein Dynamics*) eingerichtet worden sei. Nach erfolgreicher Evaluation der Projektgruppe und ihres Forschungskonzepts durch den Wissenschaftlichen Beirat wurde sie aus der Arbeitsgruppe Systemanalyse ausgegliedert und ausgebaut; sie wird seit 2014 als selbständige Nachwuchsgruppe „Lipidomics“ fortgeführt.

|<sup>31</sup> Vgl. Stellungnahme des Senats der Leibniz-Gemeinschaft zum Leibniz-Institut für Analytische Wissenschaften e.V. (ISAS), Dortmund/Berlin, vom 26. März 2011, Anlage B: Bewertungsbericht zum Leibniz-Institut für Analytische Wissenschaften (ISAS), Dortmund/Berlin, vom 1. Dezember 2010, S. B-13.

Nachwuchsgruppen werden für die Dauer von vier bis sechs Jahren eingerichtet und nach der Hälfte und zum Ende der Laufzeit vom wissenschaftlichen Beirat begutachtet. Neben der Evaluation der wissenschaftlichen Leistungen gibt der Beirat auch eine Empfehlung zur langfristigen thematischen Passung in das Institutsportfolio ab, auf deren Basis der Vorstand über die Verstetigung der Nachwuchsgruppen nach Ende der Laufzeit entscheidet.

Programme zur Unterstützung des wissenschaftlichen Nachwuchses umfassen auch Angebote für Bachelor- und Masterstudierende sowie eine strukturierte Doktorandenausbildung und Weiterbildungsangebote für Postdoktorandinnen und -doktoranden. Im Rahmen der Doktorandenausbildung werden die Promovierenden auch an die disziplinübergreifende Zusammenarbeit von Lebens- und Materialwissenschaft zur Entwicklung neuartiger analytischer Plattformen im Sinne des Forschungskonzepts des ISAS herangeführt. Das ISAS ist an den Graduiertenschulen der Fakultät für Bio- und Chemieingenieurwesen der TU Dortmund sowie am Graduiertenprogramm SALSA – *School of Analytical Science* Adlershof der Humboldt-Universität zu Berlin (HU) beteiligt.

In allen wissenschaftlichen Arbeitsgruppen des ISAS, mit Ausnahme der erst im April 2016 initiierten internationalen Forschergruppe „Quantitative Strukturproteomik“, sind Doktorandinnen und Doktoranden tätig. In der Anfang 2016 eingerichteten Arbeitsgruppe „Kardiovaskuläre Pharmakologie“ wurde im April 2016 die erste Doktorandin eingestellt. Das ISAS beschäftigte zum 31. Dezember 2015 insgesamt 35 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, die eine Promotion anstreben. |<sup>32</sup> Hinzu kamen zehn externe Doktorandinnen und Doktoranden, darunter fünf aus dem Ausland.

Von 2013 bis 2015 haben 18 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des ISAS ihre Promotion abgeschlossen. Zwölf Promotionen wurden an der TU Dortmund abgeschlossen, |<sup>33</sup> drei an der TU Berlin und jeweils eine an der Universität Bielefeld, Universität Stuttgart sowie an der ETH Zürich.

Drei wissenschaftliche Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des ISAS streben eine Habilitation an. Auf den Berichtszeitraum entfielen keine abgeschlossenen Habilitationen.

Im Zeitraum von 2013 bis 2015 beteiligten sich insgesamt zwölf wissenschaftliche Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des ISAS an Lehrveranstaltungen der Universitäten, darunter sieben mit einem kontinuierlichen Engagement, das unverändert fortgesetzt wird. Der Umfang der einzelnen Veranstaltungen be-

|<sup>32</sup> Neben 19 Deutschen sind folgende Nationalitäten vertreten: Italien (3), Rumänien, Vietnam (je 2), Albanien, Armenien, Belgien, Brasilien, China, Georgien, Indien, Österreich, Türkei (jeweils eine Person).

|<sup>33</sup> Davon sieben an der Fakultät Bio- und Chemieingenieurwesen, jeweils zwei an der Fakultät Physik und der Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik sowie eine an der Fakultät Statistik.

trägt meist zwei Semesterwochenstunden (SWS), wobei einzelne Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter mehrere Veranstaltungen anbieten. Von den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern der Abteilung Grenzflächenanalytik wurden im Zeitraum von 2013 bis 2015 insgesamt 24 Lehrveranstaltungen an der TU Berlin angeboten, von der Abteilung Bioanalytik 19 an der TU Dortmund, sechs an der RUB, drei an der *University of Aberdeen* (UK) und eine an der Universität Gent in Belgien.

## II.6 Wissenschaftsbasierte Serviceleistungen

Das ISAS schätzt den zeitlichen Anteil der Bereitstellung von wissenschaftsbasierten Serviceleistungen, einschließlich der Trainings- und Workshop-Angebote für die wissenschaftliche Fachgemeinschaft, auf etwa 20 % gegenüber 80 % für eigene Forschung und Entwicklung.

Beispielsweise wurden zuletzt Workshops für Bioinformatik auf der Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Massenspektrometrie (DGMS) und für Lipidomics auf dem Lipidomicsforum durchgeführt. Außerdem ist das ISAS Mitorganisator einer *Summer School* für Doktorandinnen und Doktoranden, die 2016 im Rahmen des durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten *German Network for Bioinformatics Infrastructure* (de.NBI) durchgeführt wird.

Als wichtige Serviceleistungen für die wissenschaftliche Fachgemeinschaft nennt das ISAS auch die Bereitstellung von Software-Tools zur qualitativen und quantitativen Proteinanalyse. Mit der web-basierten Software PeptideShaker wird das ISAS erstmals eine Protein-Inferenz-Software als Open-Source-Plattform bereitstellen und so eine Alternative gegenüber lokalen Rechnern bieten, auf denen eine solche Software ein hohes Maß an Rechenleistung und Speicherplatz voraussetzt. Außerdem bietet das ISAS eine *quality standard database* (QSDB) an, die kurierte, validierte und hochauflösende Spektren enthält und fast alle Proteine für die wichtigsten metabolischen Netzwerke zur Lipidsynthese im Maus-Organismus abdeckt. Diese softwarebasierten Services möchte das ISAS mit der Etablierung der Abteilung Datenanalyse, Modellierung und Simulation und im Zuge der Erweiterungsmaßnahme ausbauen.

Das ISAS bietet zudem kostenpflichtig Analyseservices für seine Partner aus Wissenschaft und Wirtschaft an. Zu den regelmäßig angebotenen Services des ISAS gehören:

- \_ Ellipsometrie vom sichtbaren Spektrum bis zum Vakuum-Ultraviolettbereich,
- \_ Polarisationsabhängige Infrarot-Spektroskopie und Ellipsometrie,
- \_ Proteinanalyse und relative Proteinquantifizierung mittels LC-MS,
- \_ Peptidsynthese und Aminosäureanalyse.

Mit der Bereitstellung von Softwareentwicklungen für die Proteinanalytik und der Veröffentlichung der Serviceangebote des Technischen Service Bioanalytik

auf der Website des ISAS Ende 2015 habe sich die Nachfrage nach den Services des Instituts spürbar erhöht. Bereits im April 2016 lägen die aus den Auftrags-eingängen zu erwartenden Einnahmen aus diesen Leistungen um rund 20 % höher als im gesamten Vorjahr.

Die Services des ISAS werden überwiegend von Forscherinnen und Forschern aus den Anwendungsbereichen der Technologien des ISAS nachgefragt, z. B. aus der Zellbiologie, Pharmazie, Halbleitertechnik und aus den Polymerwissenschaften, außerdem von kommerziell tätigen Analyselaboren und Herstellern von analytischen Messgeräten oder deren Bauteilen/Komponenten.

Das ISAS plant, in Zukunft verstärkt Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus der klinischen Forschung zu erreichen, und sieht im Bereich der Medizinphysik und -technik ein hohes Kooperationspotenzial. Dazu hat das Institut den Bereich der Standardisierung von Messmethoden deutlich ausgebaut und mit dem vom Ministerium für Innovation, Wissenschaft und Forschung des Landes Nordrhein-Westfalen (MIWF) geförderten Vorhaben „Strategien zur personalisierten Frühdiagnose, Prävention und dem Monitoring von Therapien für kardiovaskuläre Erkrankungen (CVD-OMICS)“ |<sup>34</sup> ein Pilotprojekt eingeworben, dessen Strukturen und Ergebnisse langfristig auf weitere Entwicklungen übertragen werden sollen.

Das ISAS gibt an, dass im Rahmen der strategischen Erweiterung zusätzliche Serviceleistungen etwa im Bereich der markierungsfreien und massenspektrometrischen Bildgebung, der Charakterisierung von Geweben und der Detektion von Biomarkern in Körperflüssigkeiten möglich seien.

## II.7 Kooperationen

Das ISAS hat laut Selbstbericht im Berichtszeitraum vertraglich gefasste Kooperationsbeziehungen mit fünf deutschen Universitäten (TU Dortmund, TU Berlin, Universität Duisburg-Essen, Universität Bochum und HU Berlin), 46 Leibniz-Instituten und vier deutschen Firmen unterhalten. Hinzu kamen 39 Kooperationen im Rahmen von Verbundvorhaben im Inland. Ferner bestanden vertraglich festgelegte Kooperationsbeziehungen zu vier ausländischen Universitäten (*Universidade de São Paulo*, Keiō-Universität Tokio, Universität Kyōto, *University of Aberdeen*). In Vorbereitung sind Verträge mit der *McGill University Montreal* und der *University of Victoria*, mit denen das ISAS in der internationalen Forschergruppe Quantitative Strukturproteomik zusammenarbeitet. Im Rahmen von Verbundvorhaben unterhält das ISAS 35 vertraglich festgelegte Ko-

|<sup>34</sup> CVD = *cardiovascular disease*; das Suffix -OMICS macht Teilgebiete der modernen Biologie kenntlich, die sich mit der Analyse von Gesamtheiten ähnlicher Einzelelemente beschäftigen.

operationsbeziehungen mit ausländischen, meist universitären Partnern (u. a. fünf in Spanien und jeweils vier in Frankreich, Italien und Portugal).

Darüber hinaus kooperierte das ISAS im Inland im Rahmen informeller wissenschaftlicher Zusammenarbeit oder bei Publikationen mit 15 Universitäten, zehn (Universitäts-)Klinika und zwölf außeruniversitären Forschungseinrichtungen. Mit Partnern im Ausland bestanden 42 solcher Kooperationsbeziehungen.

Das ISAS führt aus, dass die geplante Ansiedelung des Erweiterungsvorhabens nahe des vom Land NRW und der Europäischen Union geförderten Gesundheitscampus NRW besonders gute Vernetzungsmöglichkeiten auf dem Gebiet der Gesundheitswissenschaften bietet. Auf dem Gesundheitscampus NRW, der seit einigen Jahren in Bochum-Querenburg aufgebaut wird, wird u. a. die von der RUB gegründete Initiative *Protein research Unit Ruhr within Europe* (PURE) angesiedelt. Das Europäische Proteinforschungskonsortium PURE wurde 2010 an der Universität Bochum mit Unterstützung des MIWF NRW gegründet. Proteinforscherinnen und -forscher der Universität Bochum und der Universität Duisburg-Essen arbeiten hier mit klinischen Forscherinnen und Forschern im Bereich der Früherkennung von Krankheiten wie Krebs, Parkinson oder Alzheimer zusammen und entwickeln neue diagnostische Methoden auf Basis von Proteinveränderungen mit dem langfristigen Ziel, Proteinbiomarker zu identifizieren, die frühe Stadien von Erkrankungen in Körperflüssigkeiten anzeigen können. Das ISAS arbeitet bereits heute komplementär zu PURE und stimmt sich mit PURE ab, sieht jedoch durch eine noch engere Verzahnung ein erhebliches Synergiepotenzial. Die enge räumliche Zusammenarbeit mit PURE würde es vor allem ermöglichen, die mit Kliniken und Pathologie in PURE entwickelten Arbeitsprozesse für Untersuchungen an Frischgewebe zu nutzen, das für die Biospektroskopie benötigt wird und rasch denaturiert.

Das ISAS verfügt nach eigenen Angaben derzeit über Kooperationen in folgenden für die geplante Erweiterung relevanten Bereichen:

- \_ Bio-Funktionalisierung von Oberflächen und in-situ optischer Spektroskopie (im Rahmen der Graduiertenschule SALSA mit der TU Berlin und dem Einsteincluster (Emc2));
- \_ Oberflächenfunktionalisierung, Biosensorik (mit dem Helmholtz-Zentrum Berlin, der HU Berlin und der ETH Zürich) hinsichtlich in-situ-optischer Grenzflächenanalytik, zum Teil auch gefördert im Rahmen von SALSA;
- \_ Absorptionsspektrometrische Analyse von Biomaterialien (mit der Bundesanstalt für Materialforschung (BAM), Berlin, und dem Universitätsklinikum Charité Berlin);
- \_ In-situ-optische Analytik von funktionalen Polymerschichten und der Protein-Polymerschicht-Wechselwirkung (mit dem Institut für Polymerforschung, Dresden, der *Clemson University* und der *Clarkson University*, NY, USA);

- \_ Spektrale Histopathologie mit CARS und Ramanspektroskopie (mit dem Lehrstuhl für Biophysik der RUB);
- \_ Wirkstoffforschung (mit der TU Dortmund);
- \_ Auswertung spektraler Daten (mit dem Institut für Energie- und Umwelttechnik Essen und der Universität Duisburg-Essen);
- \_ Weiterentwicklung der IR-Spektroskopie für klinische Anwendungen (mit dem Leibniz-Institut für Photonische Technologien (IPHT), Jena, im Rahmen des BMBF-Projektes EXASENS).

Im Ausbau bzw. in Vorbereitung befinden sich laut ISAS derzeit Kooperationen in folgenden Bereichen:

- \_ UV-Ramanspektroskopie an Proteinen zur Untersuchung der Wechselwirkung mit Nanoclustern (mit der HU Berlin);
- \_ Hoch-Ortsauflösende Spektroskopie an Nanomaterialien in Wechselwirkung mit Biomolekülen (mit der Universität Jena und dem IPHT, Jena);
- \_ Spektrale Histopathologie (mit der Frauenklinik der Universität Duisburg-Essen);
- \_ Antimikrobielle Oberflächen (BMBF-Cluster mit der FH Münster, der Universität Bonn, der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt (PTB), Berlin, und der TU Berlin);
- \_ Biomolekül-funktionalisierte Halbleiternanostrukturen für Sensoranwendungen (Forschergruppe mit der Universität Gießen, der Universität Paderborn, der TU Berlin und dem Max-Planck-Institut für Eisenforschung);
- \_ Zeitaufgelöste in-situ-optische Untersuchungen an Proteinen und Grenzflächen (mit der Freien Universität (FU) Berlin);
- \_ Terahertzspektroskopie an Biomolekülen (derzeit in Abstimmung mit der RUB).

Die laufenden und im Aufbau befindlichen Kooperationen will das ISAS mit der Erweiterung stärken. Insbesondere soll die Kooperation mit der RUB und dem IPHT, Jena, durch die Erweiterung deutlich vorangetrieben werden.

Mit der TU Dortmund ist das ISAS seit 1993 vertraglich als An-Institut verbunden. Zurzeit steht eine gemeinsame Berufung im Rahmen einer W1-Professur für Physik für die Leitung der Arbeitsgruppe „Neue Materialien“ am ISAS kurz vor dem Abschluss (vgl. A.II.1.c). Der Bereich Neue Materialien soll nach Auskunft des ISAS von Beginn an als selbständige Abteilung organisatorisch eingegliedert werden.

Ein weiteres gemeinsames Berufungsverfahren mit der TU Dortmund (W3-Professor für Datenanalyse und Modellierung, verbunden mit einer Abteilungsleitung am ISAS) konnte bisher nicht erfolgreich zum Abschluss gebracht werden. Das zweite Berufungsverfahren wird 2016 aufgenommen (vgl. A.III.1.c).

Weitere gemeinsame Berufungen bestehen mit der Universität Bochum, der TU Berlin und der Universität Duisburg-Essen (vgl. A.III.1.b).

Im Zeitraum von 2013 bis 2015 hat das ISAS insgesamt 154 Gastwissenschaftlerinnen und Gastwissenschaftler aufgenommen, meist mit längerer Aufenthaltsdauer (81 Personen blieben eine Woche bis drei Monate, 61 länger als drei Monate, lediglich zwölf weniger als eine Woche). 91 Gastwissenschaftlerinnen und Gastwissenschaftler kamen aus Deutschland, 63 aus dem Ausland. |<sup>35</sup>

Im gleichen Zeitraum waren 51 wissenschaftliche Beschäftigte des ISAS mit externer Finanzierung an anderen Forschungseinrichtungen tätig. In 41 Fällen handelte es sich um Aufenthalte an deutschen Einrichtungen von bis zu einer Woche, in zehn Fällen um Aufenthalte im Ausland, darunter jeweils fünf unter einer Woche bzw. mit einer Dauer von einer Woche bis drei Monaten.

Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des ISAS übten im Zeitraum seit 2013 insgesamt 49 Funktionen wie Herausgeberschaften/Mitgliedschaften in *Editorial Boards*, Funktionen in Fachverbänden, Organisationskomitees von wissenschaftlichen Konferenzen etc. aus.

Beschäftigte des ISAS haben im Berichtszeitraum 13 wissenschaftliche Auszeichnungen erhalten, darunter sechs Nachwuchspreise, zwei Posterpreise und sechs sonstige Auszeichnungen (u. a. wurde der Vorstandsvorsitzende zum Honorarprofessor an der *University of Aberdeen* ernannt, ein anderer Wissenschaftler erhielt den *Outstanding Career Award* der *European X-Ray Spectrometry Association*).

## II.8 Qualitätssicherung

Als Maßnahmen im Rahmen seiner Qualitätssicherung nennt das ISAS

- \_ die Protokollierung der Arbeiten im Labor und Entwicklung von *Standard Operating Procedures* für Arbeitsschritte und Messverfahren,
- \_ eine umfassende Validierung der entwickelten Methoden,
- \_ die regelmäßige Erfassung der Qualitätsindikatoren der Forschung des ISAS (Publikationen in referierten Fachzeitschriften, Drittmittelwerbungen) und deren Bewertung durch den Vorstand und das Aufsichtsgremium,
- \_ die jährliche Überprüfung der Qualität der Forschung durch den wissenschaftlichen Beirat,
- \_ die Verpflichtung der Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des ISAS auf die Einhaltung der Regeln guter wissenschaftlicher Praxis gemäß den Vorgaben der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG),
- \_ die alle sieben Jahre erfolgende externe Evaluation durch die Leibniz-Gemeinschaft.

|<sup>35</sup> Jordanien (13), Kroatien (9), Brasilien (7), UK (5), China (4), Griechenland, Italien, Österreich, Polen, Schweiz (jeweils 3), Australien, Russland, USA (jeweils 2), Japan, Rumänien, Spanien, Tschechien (jeweils 1).

Zur internen Qualitätskontrolle durch den wissenschaftlichen Beirat gehören die jährliche Beurteilung der Forschungsplanung und der Zielerreichung nach Maßgabe des Programmbudgets sowie die schwerpunktmäßige Evaluation einzelner Arbeitsgruppen des ISAS in einem fortlaufenden Turnus. Etwa in der Mitte zwischen zwei Evaluationen durch die Leibniz-Gemeinschaft führt der wissenschaftliche Beirat ein so genanntes großes Audit durch, bei dem das gesamte Institut evaluiert wird, zuletzt 2013.

Zur Sicherstellung des Anschlusses an die aktuellen theoretischen und methodischen Entwicklungen in der Wissenschaft hat das ISAS ein Konzept entwickelt, das die Instrumente gruppeninterne Seminare, wöchentliche bereichsübergreifende interne Seminare, Kolloquien mit eingeladenen externen Sprecherinnen und Sprechern, den Besuch von Fachtagungen der jeweiligen Forschungsthematik und die jährliche Strategiediskussion mit den Gruppenleitungen umfasst.

In den gruppeninternen Seminaren wird die aktuelle Forschungsliteratur vorgestellt und diskutiert. In den gruppeninternen und den bereichsübergreifenden Seminaren berichten die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter über den Fortschritt ihrer Arbeiten und diskutieren aktuelle wissenschaftliche und methodische Entwicklungen (in den bereichsübergreifenden Seminaren aus bereichsübergreifender Sicht). Zu den Kolloquien werden jährlich ca. 40 externe Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler eingeladen, neuartige methodische und theoretische Ansätze bzw. neue Anwendungsgebiete für bereits etablierte Technologien zu präsentieren. Durch den Besuch von Fachtagungen, bei denen die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des ISAS auch ihre eigenen wissenschaftlichen Erkenntnisse der Fachöffentlichkeit vorstellen, soll sichergestellt werden, dass neue Trends frühzeitig erkannt werden. In der jährlichen Strategiediskussion stehen die Weiterentwicklung der Forschungsprogramme und die Abstimmung der Arbeiten der Forschergruppen im Mittelpunkt.

Als Herausforderung für die Qualitätsentwicklung und -sicherung im Personalbereich nennt das ISAS die erhöhten Anforderungen an das Wissens- und Informationsmanagement aufgrund der Fluktuation, die sich durch den hohen Anteil von Nachwuchswissenschaftlerinnen und Nachwuchswissenschaftlern ergibt.

Für die im Rahmen der strategischen Erweiterung geplanten Organisationseinheiten sollen die gleichen Qualitätssicherungsmaßnahmen angewandt werden, wie sie bereits jetzt im ISAS etabliert sind.

Ferner weist das ISAS auf die Neuwahl der Mitglieder seines Wissenschaftlichen Beirates im Jahr 2018 hin. Somit könne im Erweiterungsfall das dann erweiterte interdisziplinäre Portfolio des Instituts durch die fachliche Expertise im Beirat entsprechend abgebildet werden. Zur Sicherstellung der Integration

der Strategischen Erweiterung in das Gesamtkonzept werde der Beirat in seinen jährlichen Sitzungen einen Schwerpunkt auf das Monitoring der strategischen und operativen Integration der geplanten Forschungsvorhaben in das Forschungskonzept setzen. Flankierend hierzu solle im Strategiefonds Wettbewerb des Vorstands die Förderlinie *Integrative Research* ausgebaut werden, um Vernetzung und Zusammenarbeit der Arbeitsgruppen zu fördern.

### **A.III ORGANISATION UND AUSSTATTUNG**

---

#### III.1 Organisation

##### III.1.a Organe des Vereins

Die Organe des ISAS e.V. sind die Mitgliederversammlung, das Kuratorium, der Vorstand und der wissenschaftliche Beirat.

Der Verein hat zwei Ehrenmitglieder und 26 ordentliche Mitglieder, darunter die Bundesrepublik Deutschland (vertreten durch das BMBF), die Bundesländer Nordrhein-Westfalen und Berlin (vertreten durch das MIWF NRW bzw. die Senatsverwaltung für Wirtschaft, Technologie und Forschung Berlin), die Stadt Dortmund, die TU Dortmund, die Universität Bochum und die Universität Münster. Die Mitglieder des Vereins nehmen ihre Gestaltungs- und Kontrollrechte in der Mitgliederversammlung wahr. Die Mitgliederversammlung wählt einen Teil der Mitglieder des Kuratoriums und die Rechnungsprüfer des Vereins, verabschiedet den Jahresabschluss und beschließt über die Entlastung des Vorstands.

Das Kuratorium bestellt u. a. die Mitglieder des Vorstands und des wissenschaftlichen Beirats und führt Aufsicht über diejenigen wissenschaftlichen, programmatischen und wirtschaftlichen Angelegenheiten des Vereins, die nicht der Mitgliederversammlung vorbehalten sind.

Die sieben berufenen Mitglieder des Kuratoriums sind die Bundesrepublik Deutschland (vertreten durch das BMBF), die Bundesländer Nordrhein-Westfalen und Berlin (vertreten durch das MIWF NRW, das derzeit die Vorsitzende des Kuratoriums stellt, und die Senatsverwaltung für Wirtschaft, Technologie und Forschung Berlin), die Stadt Dortmund, die TU Dortmund, die TU Berlin und die Universität Bochum. Außerdem gehören dem Kuratorium fünf gewählte Mitglieder aus dem Bereich der Wissenschaft bzw. Wissenschaftsverwaltung an.

Der Vorstand besteht aus ein bis zwei wissenschaftlichen Vorständen, von denen ein Mitglied den Vorsitz und ein weiteres Mitglied die Stellvertretung innehat, sowie einem kaufmännischen Vorstand. Die bzw. der Vorstandsvorsitzende ist Sprecherin bzw. Sprecher des Vereins. Der Verein wird gerichtlich und außergerichtlich durch zwei Mitglieder des Vorstands vertreten. Die Auf-

gaben des Vorstands werden durch eine Geschäftsordnung näher ausgestaltet. Die Mitglieder des Vorstands verantworten gemeinsam insbesondere die Festlegung der strategischen Ziele des ISAS und die Aufstellung des Jahresabschlusses.

Seitens des Vorstandes ist der derzeitige Vorsitzende für die lebenswissenschaftlich orientierten Abteilungen zuständig (Bioanalytik, Biomedizinische Forschung sowie zukünftig Datenanalyse und Modellierung) und sein Stellvertreter für die materialwissenschaftlich orientierten Abteilungen (Grenzflächenanalytik sowie zukünftig Neue Materialien).

Dem wissenschaftlichen Beirat gehören neun Mitglieder mit lebens- oder naturwissenschaftlichem Hintergrund an. Der wissenschaftliche Beirat berät den Vorstand und berichtet dem Kuratorium. Er begleitet die laufende wissenschaftliche Arbeit des Vereins und führt die Qualitätskontrolle entsprechend den Leitlinien der Leibniz-Gemeinschaft durch.

Die Zusammenarbeit mit den Zuwendungsgebern, den Ländern Nordrhein-Westfalen und Berlin sowie dem Bund, beschreibt das ISAS als positiv. Die Abstimmung im Tagesgeschäft, die vor allem über das zuständige Fachreferat des MIWF NRW erfolge, sei angenehm und professionell. Das Land Nordrhein-Westfalen sei bestrebt, den dort ansässigen Leibniz-Einrichtungen einen wissenschaftsadäquaten Rahmen zur Verfügung zu stellen.

### III.1.b Gegenwärtige Abteilungsstruktur

Das Institut verfügt derzeit über drei Forschungsabteilungen; zwei Abteilungen werden zurzeit von wissenschaftlichen Vorständen des ISAS geleitet. Die Abteilung „Bioanalytik“ wird vom Vorsitzenden des Vorstands des ISAS geleitet, der 2008 in gemeinsamer Berufung mit der Medizinischen Fakultät der RUB (W3-Professur für „Angewandte Proteomik und Bioanalytik“) besetzt wurde. Die Abteilung „Grenzflächenanalytik“ wird von seinem Stellvertreter geleitet, der seit 2006 in gemeinsamer Berufung mit der TU Berlin eine Sonderprofessur (S-Professur) |<sup>36</sup> für Grenz- und Oberflächenanalytik am Institut für Festkörperphysik innehat. Die Leitung der Abteilung „Biomedizinische Forschung“ wurde im Februar 2016 in gemeinsamer Berufung mit der medizini-

| <sup>36</sup> Dabei handelt es sich um ordentlich berufene Hochschullehrerinnen bzw. Hochschullehrer, die auch in einer außeruniversitären Forschungseinrichtung (meist in leitender Stellung) tätig sind. Diese Einrichtung ist mit der Universität über eine Kooperationsvereinbarung verbunden, in der auch eine Kostenregelung für die Professur enthalten ist. Die Lehrverpflichtungen der S-Professorin bzw. des S-Professors sind wegen der weiteren Aufgaben in der Regel reduziert.

schen Fakultät der Universität Duisburg-Essen (W3-Professur „Mechanismen kardiovaskulärer Erkrankungen“) nach dem Jülicher Modell |<sup>37</sup> besetzt.

Neben den Forschungsabteilungen verfügt das ISAS über einen vom Kaufmännischen Vorstand verantworteten Geschäftsbereich Administration, der in zwei Stabsstellen untergliedert ist.

### III.1.c Aktuell zu besetzende Abteilungen

Seit längerem geplant ist die Einrichtung zweier Abteilungen, „Datenanalyse und Modellierung“ und „Neue Materialien“, deren Leitungen in gemeinsamer Berufung mit der Fakultät für Statistik bzw. der Fakultät für Physik der TU Dortmund bestellt werden sollen. Die Leitung der Abteilung „Datenanalyse und Modellierung“ war im November 2013 als W3-Professur ausgeschrieben worden. Da das Besetzungsverfahren nicht erfolgreich abgeschlossen werden konnte, soll 2016 eine zweite Ausschreibung erfolgen. In dem seit Dezember 2014 laufenden Besetzungsverfahren für die Leitung der Abteilung „Neue Materialien“ (W1-Juniorprofessur für Physik; bei positiver Evaluierung durch die Gremien der TU Dortmund und des ISAS soll diese später zu einer W2-Professur verstetigt werden), die sich im Schwerpunkt mit der Entwicklung und Charakterisierung biohybrider Materialien beschäftigen soll, ist die Reihung der Kandidatinnen und Kandidaten bereits erfolgt. Die beiden Neubesetzungen sollen ebenfalls nach dem Jülicher Modell erfolgen. Das ISAS gibt an, die durch Pensionierungen und organisatorische Änderungen eintretenden Effekte genutzt zu haben, um die nötige Flexibilität für den Aufbau dieser beider Abteilungen zu gewinnen, |<sup>38</sup> habe damit aber seinen personellen Spielraum erschöpft.

## III.2 Ausstattung

### III.2.a Haushalt/Programmbudget

Das ISAS wird als Leibniz-Institut von Bund und Ländern jeweils hälftig institutionell gefördert. Das ISAS erhält die institutionelle Zuwendung in Form einer

|<sup>37</sup> Bei dem Jülicher Modell („Beurlaubungsmodell“) erfolgt nach den Empfehlungen „Gemeinsame Berufungen von leitenden Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern durch Hochschulen und außerhochschulischen Forschungseinrichtungen“ der Gemeinsamen Wissenschaftskonferenz (GWK), Bonn 2014, S. 7, „eine Berufung auf eine Professur an einer Hochschule bei gleichzeitiger Beurlaubung im dienstlichen Interesse unter Fortfall der Bezüge; zugleich übernimmt die gemeinsam berufene Person eine Lehrverpflichtung an der Hochschule von im Regelfall zwei Semesterwochenstunden (SWS). Im Haushalt der Hochschule wird die gemeinsam berufene Person auf einer Leerstelle geführt. Die Forschungseinrichtung schließt mit der berufenen Person einen privatrechtlichen Anstellungsvertrag, durch den die Forschungseinrichtung die Zahlung der Bezüge in entsprechender Anwendung der W-Besoldung (einschließlich der Leistungsbezüge) übernimmt. Zusätzlich entrichtet die Forschungseinrichtung einen Versorgungszuschlag an die Hochschule.“

|<sup>38</sup> Für die Arbeitsgruppe „Neue Materialien“ stehen neben der Leitungsstelle 3,3 VZÄ für wissenschaftliches Personal, die aus Mitteln der Zuwendung zum Kernhaushalt finanziert werden sollen, zur Verfügung.

Fehlbedarfsfinanzierung vom Land Nordrhein-Westfalen und wendet daher bei der Bewirtschaftung der Mittel nordrhein-westfälisches Haushaltsrecht an. Der Bund weist dem Land NRW entsprechende Mittel zur Finanzierung des ISAS zu.

Im Jahr 2014 (Ist) betrug die institutionelle Zuwendung insgesamt 12,05 Mio. Euro. Davon entfielen auf Personal 6,6 Mio. Euro, auf Sachmittel (einschließlich Investitionen bis 5 Tsd. Euro) rund 3,6 Mio. Euro, auf Investitionen rund 1,6 Mio. Euro, auf die DFG-Abgabe 0,30 Mio. Euro und auf die SAW-Abgabe 0,4 Mio. Euro. Hinzu kamen 1,50 Mio. Euro Selbstbewirtschaftungsmittel und 1,8 Mio. Euro Drittmittel, so dass sich das Budget 2014 auf insgesamt rund 16,2 Mio. Euro belief.

Das Institut beschreibt die derzeitige Ausstattung mit Personal-, Sach- und Investitionsmitteln als auskömmlich für die gegenwärtigen Aufgaben, einschließlich des Aufbaus der Abteilungen „Biomedizinische Forschung“, „Datenanalyse und Modellierung“ sowie „Neue Materialien“. Für eine Weiterentwicklung des ISAS würden jedoch zwingend zusätzliche Personal- und Investitionsmittel benötigt, um die Methodenentwicklung zu skalenübergreifenden Technologien ausbauen zu können (siehe A.IV.1).

### III.2.b Personal

Zum Stichtag (31.12.2015) standen dem ISAS 39 Stellen (Vollzeitäquivalente, VZÄ) für wissenschaftliches Personal und 73 VZÄ für nichtwissenschaftliches Personal aus der Grundfinanzierung zur Verfügung. Von den 112 Stellen waren 85,85 besetzt (vgl. Anhang 2). Aus Drittmitteln wurden 17,2 weitere VZÄ für wissenschaftliches Personal finanziert (vgl. Anhang 3). Insgesamt waren am ISAS 27 Wissenschaftlerinnen und 46 Wissenschaftler beschäftigt.

Um die Einrichtung der Abteilungen „Biomedizinische Forschung“, „Datenanalyse und Modellierung“ sowie „Neue Materialien“ zu ermöglichen, wurden dem ISAS durch das MIWF NRW als Zuwendungsgeber in den Jahren 2013 und 2014 insgesamt vier zusätzliche Stellen für außertarifliches Personal (AT-Stellen) gewährt, jedoch ohne eine Steigerung des Kernhaushalts des ISAS.

Kurzfristig wird vom MIWF als zuständigem Ministerium die Abschaffung der derzeit bestehenden Stellenplanbindung unter Einhaltung von einrichtungsspezifischen Quoten angestrebt, wobei bestehende Stellen für außertarifliche Beschäftigte im Rahmen finanzieller Obergrenzen bei der Nachbesetzung frei bewirtschaftet werden können und einzig Verträge für Vorstände sowie Änderungen bei AT-Stellen durch das Ministerium zustimmungspflichtig wären.

Die Abteilungen sind in Arbeitsgruppen untergliedert, die wissenschaftlichen Leitungsfunktionen sind jeweils unbefristet besetzt. Darüber hinaus sind die Arbeitsgruppen überwiegend mit Personalmitteln für zeitlich befristete Postdoktoranden- und Doktorandenstellen ausgestattet.

Die größte Altersgruppe der wissenschaftlichen Beschäftigten ist mit 32 Personen (44 %) die der 30- bis 40-jährigen, gefolgt von den unter 30-jährigen (22 Personen bzw. 30 %). Die 40- bis 50-jährigen sowie die 50- bis 60-jährigen stellen jeweils 12 % des wissenschaftlichen Personals. Drei Viertel der wissenschaftlichen Beschäftigten sind seit weniger als fünf Jahren am ISAS tätig. In disziplinärer Sicht sind die Chemie (19 Beschäftigte bzw. 26 %) und die Physik (18 Beschäftigte bzw. 25 %) am stärksten vertreten, gefolgt von der Biologie (14 Beschäftigte bzw. 19 %) und der Biochemie (7 Beschäftigte bzw. 10 %) (vgl. Anhang 4).

Von den drei Abteilungen und den zwölf Forschergruppen wird derzeit jeweils eine von einer Frau geleitet. Seit 2006 ist am ISAS ein Gleichstellungsförderplan mit dem Ziel implementiert, die Stellen auf allen Hierarchieebenen möglichst paritätisch durch Frauen und Männer zu besetzen. Zum Stichtag 31.12.2015 betrug der Frauenanteil am wissenschaftlichen Personal insgesamt bezogen auf Vollzeitäquivalente 35 %. Im Bereich des wissenschaftlichen Nachwuchses waren es 45 %.

Gleichstellung ist als Teil der Leitungsaufgaben verankert und wird gemäß Vorgabe der Ausführungsvereinbarung Gleichstellung auf allen Organisationsebenen berücksichtigt. Für Wissenschaftlerinnen des ISAS besteht die Möglichkeit der Teilnahme an einem Mentoring-Programm im Falle eines Habilitationsvorhabens. Das ISAS gibt an, die Vereinbarkeit von Beruf und Familie durch Unterstützung bei der Suche nach Betreuungsmöglichkeiten sowie durch flexible Arbeitszeitmodelle und Teilzeitbeschäftigung zu fördern.

Von den drei Wissenschaftlern, die im Erhebungszeitraum vom ISAS auf Positionen an ausländischen Universitäten gewechselt sind, setzen zwei ihre Tätigkeit am ISAS als Nebentätigkeit fort. Hauptkonkurrent um qualifiziertes Personal sind nach Angabe des ISAS jedoch Industrie und kommerzielle Forschung, die aktuell einen hohen Personalbedarf zeigten und oft attraktivere Bedingungen bieten könnten. Von vielen wissenschaftlichen Nachwuchskräften würden diese als zukünftige Arbeitsfelder avisiert.

### III.2.c Räumlichkeiten und Forschungsinfrastruktur

Das ISAS arbeitet derzeit an den beiden Dortmunder Standorten „ISAS City“ und „ISAS Campus“ sowie darüber hinaus am Standort „ISAS Berlin“.

Die im Eigentum des Vereins befindlichen Büro- und Laborgebäude am Standort City umfassen derzeit eine Hauptnutzfläche von 3.416 m<sup>2</sup> und werden bis Ende 2017 im Rahmen einer überwiegend außerhalb der institutionellen Förderung finanzierten Baumaßnahme auf 3.700 m<sup>2</sup> ausgebaut. Von diesem Standort aus wird auch die zentrale IT-Infrastruktur bereitgestellt.

Das vom Bau- und Liegenschaftsbetrieb NRW gemietete und spezifisch für das ISAS errichtete Büro- und Laborgebäude am Standort „ISAS Campus“ weist eine Nutzfläche von rund 2.120 m<sup>2</sup> auf.

Die Büro- und Laborräume des ISAS am Standort Berlin-Adlershof befinden sich auf zwei Etagen mit einer Hauptnutzfläche von 1.313 m<sup>2</sup> und wurden von einer Tochtergesellschaft des Landes Berlin, der WISTA-Management GmbH, |<sup>39</sup> gemietet.

Das ISAS hat seine Organisationsstrukturen auf die standortübergreifende Zusammenarbeit ausgerichtet und arbeitet gegenwärtig an der Modernisierung der internen Kommunikation über ein *Human Resources Management*-System, das auch Informationsprozesse und *Employee Self Services* unterstützt. Außerdem werden weitere digitale Workflows und ein zertifiziertes digitales Archivierungssystem eingerichtet. Eine Erhöhung des Verwaltungskostenanteils von derzeit 7 % ist nicht geplant.

#### **A.IV PERSPEKTIVEN FÜR DIE BEANTRAGTE STRATEGISCHE ERWEITERUNG**

---

##### IV.1 Wissenschaftlicher Mehrwert

Die Weiterentwicklung von Verfahren der Analytik ist aus Sicht des ISAS essentiell für den Fortschritt in Wissenschaft und Technik. Ohne eine stetige Verbesserung der Werkzeuge der Wissenschaft bleibe der Erkenntnisgewinn in den Material- und Lebenswissenschaften auf die mit heutigen Messverfahren zu erreichenden Erkenntnisse limitiert. Dies gelte in besonderem Maße für die weltweit großangelegten Vorhaben in der Gesundheitsforschung. Zugleich seien Lösungen für die hiermit verbundenen Herausforderungen so komplex, dass sie nur durch langfristige Forschung unter gemeinsamen Einsatz der weltweiten Wissenschaftsgemeinschaft erzielt werden können. *Non-communicable diseases* (nicht übertragbare Krankheiten) gehörten zu den häufigsten Todesursachen weltweit und nähmen weiter zu; gleichzeitig erhöhe dies signifikant die Kostenbelastung der Gesundheitssysteme. Verbesserte analytische Verfahren sollen die Aufklärung der molekularen Mechanismen dieser Erkrankungen erhöhen und so deren Prävention sowie frühe, nachweisorientierte Diagnose und Therapie ermöglichen. Hinzu komme, dass adäquate diagnostische Verfahren für einen Großteil der Bevölkerung in Entwicklungs- und Schwellenländern wegen der Entfernung zu medizinischen Behandlungsmöglichkeiten oder aus Kostengründen nicht erreichbar sind. Einfach anzuwendende, wenig invasive, zuverlässige und kostengünstige diagnostische Tests,

| <sup>39</sup> WISTA = Wissenschafts- und Wirtschaftsstandort Adlershof.

etwa für Diabetes, die auch außerhalb der Klinik einsetzbar seien, könnten hier zur Verbesserung der Gesundheit der Bevölkerung beitragen.

Vor dem Hintergrund dieses Bedarfs an der Entwicklung analytischer Methoden ist laut Selbstbericht auch die Integration der Biospektroskopie in das Konzept des ISAS zu sehen. Die Erweiterung soll die Möglichkeiten eines auf die Entwicklung dieser „Werkzeuge der Wissenschaft“ hochspezialisierten Instituts verbessern. Mit der Integration der Biospektroskopie möchte sich das ISAS zu einem Zentrum der Analytik in Deutschland entwickeln, das mit innovativer Methodenentwicklung nachweisorientierte und frühzeitige Diagnose und Therapieentscheidungen ermöglicht.

Aus Sicht des ISAS ist die strategische Erweiterung um die Biospektroskopie für die Implementierung der „Ortsauflösung“ in sein Forschungskonzept unabdingbar. Von der Erweiterung würden alle Abteilungen profitieren; sie sei darüber hinaus auch notwendig, um das internationale Alleinstellungsmerkmal des ISAS, seine interdisziplinäre Methodenentwicklung, auf lange Sicht zu erhalten.

Die strategische Erweiterung trage dazu bei, die Aspekte der Verfolgung eines langfristigen systembiologischen bzw. systemmedizinischen Ansatzes zur Beschreibung von Zellen und Zellverbänden auf Basis vierdimensionaler Daten sowie die Translation markerfreier, bildgebender Verfahren in Wissenschaft und Medizin umzusetzen, für die in den Lebenswissenschaften ein signifikanter Bedarf bestehe.

Der erste Aspekt erfordere die Integration zusätzlicher Forschungsthemen wie z. B. ultrahoch auflösende bildgebende Verfahren, neue Technologien zur quantitativen Analytik von Proteinkomplexen sowie Nahfeldspektroskopie. Langfristig rücke damit die Erzeugung einer „virtuellen Zelle“ in greifbare Nähe für das ISAS. Dadurch könnte die Funktion von genetischen Veränderungen vorhersagbar werden sowie der Einfluss der Menge bestimmter Biomoleküle auf die zelluläre Signalverarbeitung, idealerweise auch die Zielmoleküle von neuartigen Medikamenten bzw. die Wirkungen und Nebenwirkungen von vorhandenen Leitstrukturen.

Der Mehrwert des zweiten Aspekts, der Translation markerfreier, bildgebender Verfahren, liege in der Integration der Forschungsergebnisse vom zellulären Niveau bis hin zum Gewebe. Neben der Klassifikation von Geweben, die zu Diagnose und Therapie beitrage, trügen die Technologien zur Erforschung der Wirkweise von Medikamenten in Geweben bei und erlaubten Rückschlüsse auf deren Metabolisierung.

*Erweiterung der Organisationsstruktur*

Für die Erweiterung um die Biospektroskopie plant das ISAS die zusätzliche Einrichtung von zwei eng miteinander verzahnten Abteilungen. Die eine (Arbeitstitel „Biospektroskopie“) soll sich mit grundlegenden Entwicklungen im Bereich der zeit- und orts aufgelösten Spektroskopie an Proteinen befassen, während die andere (Arbeitstitel „Translationale Biospektroskopie“) ihren Schwerpunkt in der Anwendung markierungsfreier spektroskopischer Methoden setzt. Diese Abteilung soll die Entwicklungen aus der grundlagenorientierten Abteilung aufgreifen, sie in Richtung der klinischen Applikation optimieren und die Kombination und Integration mit den weiteren am ISAS verfolgten Entwicklungen gewährleisten.

Zusätzlich sollen drei weitere Forschungsthemen den thematisch verwandten Abteilungen „Grenzflächenspektroskopie“, „Bioanalytik“ und „Datenanalyse und Modellierung“ zugeordnet werden: In der Abteilung „Grenzflächenanalyse“ soll eine Arbeitsgruppe „Nahfeldspektroskopie“ angesiedelt werden, in der Abteilung „Bioanalytik“ eine Arbeitsgruppe „Molekulare Interaktionen“ und in der Abteilung „Datenanalyse und Modellierung“ eine Arbeitsgruppe „Datenintegration“.

Nach Auskunft des ISAS soll der Aufbau der Abteilung „Translationale Biospektroskopie“ in der Anfangsphase durch den Inhaber der Professur für Biophysik der Universität Bochum erfolgen, der zudem bis zur Besetzung der Leitungsposition der Abteilung „Biospektroskopie“ die kommissarische Leitung dieser Abteilung übernehmen soll. Parallel soll die Abteilungsleitung „Biospektroskopie“ in gemeinsamer Berufung mit der RUB nach dem Jülicher Modell ausgeschrieben werden. Nach Besetzung dieser Position soll dann die weitere Abteilungsleitung „Translationale Biospektroskopie“ in gemeinsamer Berufung mit der RUB ebenfalls nach dem Jülicher Modell ausgeschrieben werden.

Daneben sollen im Rahmen der strategischen Erweiterung auch insgesamt drei neue Arbeitsgruppen in bereits bestehenden bzw. aktuell zu besetzenden Abteilungen eingerichtet werden: eine Arbeitsgruppe „Nahfeldspektroskopie“ in der Abteilung „Grenzflächenanalytik“, eine Arbeitsgruppe „Molekulare Interaktionen“ in der Abteilung „Bioanalytik“ und eine Arbeitsgruppe „Datenintegration“ in der Abteilung „Datenanalyse und Modellierung“.

Das ISAS gibt an, dass neben der Integration der Biospektroskopie auch der Ausbau der Kompetenzen des Instituts um die geplanten Bereiche Datenanalyse und Neue Materialien erforderlich ist, um die strategische Fokussierung und die konzeptionelle Weiterentwicklung insgesamt wirksam umsetzen zu können.

Das ISAS geht in der mittelfristigen Budgetplanung von einem Bedarf von 6,2 Mio. Euro im Jahr 2018, rund 6,3 Mio. Euro im Jahr 2019 und rund 6,4 Mio. Euro im Jahr 2020 aus. |<sup>40</sup>

Davon entfallen auf die Erstausrüstung der Biospektroskopie, einschließlich der Bereiche Informationstechnik, Büro- und Gebäudeausstattung, 2018 rund 4 Mio. Euro, 2019 voraussichtlich 2 Mio. Euro und 2020 voraussichtlich 1 Mio. Euro.

In der endgültigen Ausbauphase ab dem Jahr 2021 stünden dem ISAS bei vollständiger Bewilligung des geplanten Volumens jährlich rund 4,1 Mio. Euro für Personal, 600 Tsd. Euro für Investitionen sowie rund 1,3 Mio. Euro Betriebsmittel zur Verfügung. Der für den Endausbau vorgesehene Stellenumfang ist dem folgenden Abschnitt sowie den Anhängen 2b und 3b zu entnehmen.

#### *Personalbedarf der Erweiterungsmaßnahme*

Nach den Vorstellungen des ISAS sollen auf die strategische Erweiterung in der endgültigen Ausbauphase ab dem Jahr 2021 63 Vollzeitäquivalente (VZÄ) entfallen, davon zwei W3-Stellen, 30 Stellen für wissenschaftliches Personal im höheren Dienst (einschließlich Annex-Personal) und 31 Stellen für nichtwissenschaftliches Personal. Im Bereich des wissenschaftlichen Personals im höheren Dienst sind 14 institutionelle Stellen und 16 aus Annex-Mitteln finanzierte Stellen geplant.

Dabei sind insgesamt zehn VZÄ für die Abteilung „Translationale Biospektroskopie“ vorgesehen, acht VZÄ für die Abteilung „Biospektroskopie“, 4,5 VZÄ für die Arbeitsgruppe „Molekulare Interaktionen“ in der Abteilung „Bioanalytik“, 4,0 VZÄ für die Arbeitsgruppe „Datenintegration“ in der Abteilung „Datenanalyse, Modellierung und Simulation“ sowie 3,5 VZÄ für die Arbeitsgruppe „Nahfeldspektroskopie“ in der Abteilung „Grenzflächenanalytik“ (vgl. Anhang 2b).

Das ISAS plant abhängig von den Möglichkeiten der Personalgewinnung pro Jahr zwei bis drei Arbeitsgruppen im Rahmen der strategischen Erweiterung einzurichten, so dass der Investitionsansatz gemäß III.2.b (siehe unten) sukzessive in den Personalhaushalt überführt werden soll. Im Endausbau sind insge-

|<sup>40</sup> Programmbudget 2017 (Entwurf vom 17.3.2016). Die Abgabe für das Leibniz-Wettbewerbsverfahren (SAW-Verfahren; SAW = Senatsausschuss Wettbewerb) ist hier bereits eingerechnet. Diese wird vom Ausschuss der Gemeinsamen Wissenschaftskonferenz jeweils als Rate der für das nächste Jahr festzustellenden gemeinsamen Zuwendung festgelegt. Hier noch nicht eingerechnet ist jedoch die so genannte DFG-Abgabe von 2,5 % des Kernhaushalts, durch die das ISAS die Möglichkeit erhält, Förderungen bei der DFG zu beantragen. Diese muss vom ISAS aus den genannten Beträgen eingespart werden.

samt acht wissenschaftliche Arbeitsgruppen und zwei wissenschaftlich-technische Gruppen geplant. Nach Auskunft des ISAS wird dabei angestrebt, den Leiter der translationalen Biospektroskopie, der für den Standort Bochum verantwortlich ist, entsprechend in die wissenschaftliche Leitung einzubinden.

#### *Standorterweiterung und Räumlichkeiten*

Das ISAS möchte mit der strategischen Erweiterung einen vierten Standort an der Universität Bochum etablieren, die im Einvernehmen mit dem Land Nordrhein-Westfalen ab dem Jahr 2018 Büro- und Laborräume für die strategische Erweiterung des ISAS zur Verfügung stellen kann. Diese umfassen eine Hauptnutzfläche von 2.200 m<sup>2</sup> und befinden sich in unmittelbarer Nähe des Gesundheitscampus NRW, auf dem u. a. die *Protein research Unit Ruhr within Europe* (PURE) angesiedelt ist (vgl. A.II.8) sowie der Medizinischen Fakultät.

Für die Erweiterung sollen nach Auskunft des ISAS keine Geräte oder Infrastrukturen der RUB übernommen werden. Das ISAS und die RUB beabsichtigen allerdings, die an der RUB vorhandenen Forschungsinfrastrukturen sowie die mit der Erweiterung am Standort Bochum neu hinzutretenden Ressourcen und Strukturen abzustimmen und im Wege der Kooperation synergistisch zu nutzen; dies kann auch eine Mitnutzung der an der RUB vorhandenen Geräte gegen Kostenerstattung (aus dem Betriebsmittelantrag) einschließen. Die Kosten für Erstinvestitionen von Geräten schätzt das ISAS auf rund 6,15 Mio. Euro.

Die Betriebsmittel werden auch zur Finanzierung der Bereitstellung von Bioproben, insbesondere von Frischgewebe und deren pathologische Charakterisierung und Biobanking benötigt. Hierbei strebt das ISAS nach eigenen Angaben ebenfalls eine enge Kooperation mit den Partnern im PURE-Verbund an.

Es ist geplant, dass das ISAS mit der Erweiterung Räumlichkeiten der RUB bezieht, die durch anstehende Baumaßnahmen der RUB in Zukunft frei werden sollen. Die RUB zahlt gegenwärtig Miete für ihre Räumlichkeiten an den Bau- und Liegenschaftsbetrieb (BLB) des Landes NRW. Werden die Räume für das ISAS bereitgestellt, soll der haushalterischen Praxis für Institute der außeruniversitären Forschung folgend das Land NRW die anteiligen Mietzahlungen direkt an den BLB zahlen.

Mietzahlungen für das Institut erfolgen direkt durch das Sitzland und außerhalb der Zuwendung zum Kernhaushalt; sie sind deshalb nicht in den Ansätzen der strategischen Erweiterung enthalten.

Sollte es bei den Bauvorhaben der RUB zu Verzögerungen kommen, besteht alternativ bzw. zusätzlich die Möglichkeit, die ISAS-Erweiterung auf dem Campus der RUB im Biomedizin Zentrum Bochum der Wirtschaftsentwicklungsgesellschaft Bochum GmbH unterzubringen.

Die anfallenden Renovierungs- und Herrichtungskosten schätzt das ISAS auf 1,5 Mio. Euro, orientiert an den Kosten, die das Institut für die Herrichtung von Räumen in einem vergleichbaren Gebäude in Berlin im Jahr 2014 aufgewendet hat.

Zusätzlich rechnet das ISAS mit einem Aufwand von 600 Tsd. Euro für die allgemeine Labor- und Büroausstattung.

Insgesamt beläuft sich die Kostenschätzung für die initiale Gebäude- und Geräteausstattung auf rund 8,25 Mio. Euro, wobei Teile auch aus Gründen der zeitlichen Realisierbarkeit nach dem Jahr 2019 aus dem geplanten regelmäßigen Investitionsansatz zu finanzieren sind, z. B. Anpassung der IT-Kapazität u. ä.

---

# B. Bewertungsbericht

## **B.1 ZUR BEDEUTUNG DER EINRICHTUNG UND IHRER STRATEGISCHEN ERWEITERUNG**

---

Das ISAS hat eine lange Tradition der Analytischen Wissenschaften und verfügt über eine breitgefächerte fundierte Methodenkompetenz überwiegend mit chemischem, physikochemischem und physikalischem Schwerpunkt. Das Institut leistet grundlegende Beiträge zur Entwicklung und Verbesserung analytischer Verfahren, Methoden und Instrumente auf den Gebieten der Material- und Lebenswissenschaften von insgesamt hoher Qualität. Die Arbeit des ISAS zeichnet sich besonders durch die Integration unterschiedlicher analytischer Methoden in eine Messstrategie und die Zusammenführung der so gewonnenen Ergebnisse aus. Ausdrücklich gewürdigt wird die positive wissenschaftliche Entwicklung, die das ISAS seit der zurückliegenden Evaluation des Wissenschaftsrates |<sup>41</sup> im Jahr 2000 und der Umsetzung des im Anschluss daran vorgelegten Neuordnungskonzepts |<sup>42</sup> vollzogen hat. Durch eine gemeinsame Berufung |<sup>43</sup> mit der Ruhr-Universität Bochum wurden u. a. die Lebenswissenschaften in das interdisziplinäre Spektrum des ISAS eingebunden und damit die Neuausrichtung auf einen guten Weg gebracht. Die Abteilung Bioanalytik unter Leitung des amtierenden Vorstandsvorsitzenden des ISAS leistet gute bis sehr gute, teilweise auch exzellente Arbeit. Das Institut kombiniert erfolgreich ein breites Spektrum an analytischen Methoden zur Untersuchung biologischer Systeme auf molekularer Ebene. Die proteinchemische Forschung des ISAS, beispielsweise im Bereich der quantitativen Phosphorylierung, ist auf nationaler und europäischer Ebene sichtbar und anerkannt. Durch erfolgreiche gemeinsame Berufungen besteht eine sehr gute wissenschaftliche Anbindung

|<sup>41</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Stellungnahme zum Institut für Spektrochemie und angewandte Spektroskopie (ISAS), Dortmund und Berlin, vom Januar 2001, in: Stellungnahmen zu Instituten der Blauen Liste sowie zum Aufnahmeantrag des Hans-Knöll-Instituts für Naturstoff-Forschung in die Blaue Liste, Bd. XI, Köln 2001, S. 321-374.

|<sup>42</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Stellungnahme zum Neustrukturierungskonzept des Instituts für Spektrochemie und Angewandte Spektroskopie (ISAS), Dortmund und Berlin, in: Empfehlungen und Stellungnahmen 2003, Bd. I, Köln 2004, S. 221-238.

|<sup>43</sup> Im Jahr 2008 wurde die Professur für Angewandte Proteomik und Bioanalytik gemeinsam mit der Medizinischen Fakultät der RUB berufen.

des ISAS an die universitäre Forschung vor allem der Region. Die jüngste gemeinsam mit der Medizinischen Fakultät der Universität Duisburg-Essen berufene Abteilungsleitung „Biomedizinische Forschung“ ist ein wichtiger und begrüßenswerter Schritt zur angestrebten stärkeren Fokussierung auf Fragestellungen der Gesundheitsforschung. Im Rahmen der Untersuchung von Mechanismen kardiovaskulärer Erkrankungen (Herz-Kreislauf-Erkrankungen) sollen diagnostische Marker identifiziert und therapeutische Interventionen eröffnet werden. Damit wird ein überzeugendes translationales Forschungsinteresse auf einem wissenschaftlich herausragenden Niveau am ISAS etabliert. Im Bereich der biomolekularen und biomedizinischen Forschung hat sich bereits ein sichtbarer, komplementärer und auch intern gut vernetzter Instituts- teil gebildet. Darüber hinaus ist das Institut sehr gut verbunden mit der universitären und außeruniversitären Forschung im In- und Ausland.

Angesichts der am ISAS existierenden Vielfalt an methodischen Ansätzen sollte das Institut allerdings insgesamt eine höhere programmatische Kohärenz anstreben, um neben der Breite auch eine qualitative Tiefe zu erreichen, die sich etwa in Spitzenpublikationen niederschlägt. Ratsam wäre die Formulierung konkreter, abteilungsübergreifender Forschungsziele als thematische Klammer, die für die Methodenentwicklung leitend ist und die an verschiedenen Standorten ansässigen Abteilungen inhaltlich verbindet.

Im Rahmen einer strategischen Erweiterung des Methodenspektrums um die Biospektroskopie plant das ISAS die zusätzliche Einrichtung von zwei eng miteinander verzahnten Abteilungen (vgl. B.III.1). Die Abteilung „Biospektroskopie“ soll sich danach mit grundlegenden Methodenentwicklungen im Bereich der zeit- und orts aufgelösten Spektroskopie an Proteinen befassen, während die Abteilung „Translationale Biospektroskopie“ ihren Schwerpunkt in der Anwendung markierungsfreier spektroskopischer Methoden setzt.

Das Vorhaben des ISAS, die Forschung verstärkt auf analytische Verfahren für die Lebenswissenschaften auszurichten und diese substantiell durch neue komplementäre Kompetenzen in der Biospektroskopie zu ergänzen, ist nachvollziehbar und sinnvoll. Perspektivisch kann das Ziel der übergreifenden Entwicklung einer möglichst simultanen Multiparameteranalyse für Applikationen in der Gesundheitsforschung (wie die Untersuchung und Aufbereitung von Gewebeproben für klinische Anwendungen) ein inhaltliches Bindeglied der Forschung am ISAS darstellen. Die Medizin benötigt dringend molekulare Anhaltspunkte für eine zielgerichtete Frühdiagnostik und -behandlung. Relevanz und Innovationspotenzial der übergeordneten Thematik sind daher grundsätzlich sehr hoch. Allerdings ist dieser Bedarf bereits seit Jahren erkannt und gerade auf diesem Forschungsgebiet wurden bzw. werden große Anstrengungen unternommen (vgl. B.III.1). In Anbetracht eines divergenten Gesamteindrucks wird das vorgelegte Konzept aus fachlicher Perspektive derzeit noch nicht als eine geeignete Basis für die beantragte strategische Erweiterung angesehen. Bei

einer Vielzahl von Fragen der Forschungsprogrammatisierung, der Organisationsstruktur und der Umsetzungsplanung steht der Klärungs- und Koordinierungsprozess erst am Anfang bzw. noch aus.

## **B.II ZUR BEDEUTUNG DER STRATEGISCHEN ERWEITERUNG FÜR DIE BESTEHENDEN ARBEITSSCHWERPUNKTE UND AUFGABEN**

---

### II.1 Zur Forschung

Am ISAS ist ein breites Methodenspektrum etabliert, das in Teilen allerdings nur mit einzelnen Forschungsaktivitäten ohne übergreifende programmatische Anbindung verknüpft ist. Ausgehend von den bestehenden Arbeitsbereichen wurden nur wenige Anknüpfungspunkte zur geplanten biospektroskopischen Methodenerweiterung aufgezeigt. Die notwendige systematische Analyse der wissenschaftlichen Bedeutung einer Methodenerweiterung für die Forschungs- und Anwendungsschwerpunkte des ISAS insgesamt steht erst am Anfang. Vor allem lässt das Erweiterungskonzept offen, in welcher Weise massenspektrometrische und biospektroskopische Forschungsinteressen verbunden werden sollen. Eine konsequente thematische Orientierung, die als Leitlinie die Forschungsinteressen der ISAS-Abteilungen verbindet, wird jedoch als unabdingbar für die Umsetzung des Erweiterungsvorhabens erachtet.

#### II.1.a Zu den Forschungsschwerpunkten

##### *Bioanalytik*

Die im Frühjahr 2016 neu eingerichtete Arbeitsgruppe für Quantitative Strukturproteomik untersucht die Dynamik der Proteinkonzentrationsänderungen, wobei die Ortsinformation über so genanntes Protein-Protein *Crosslinking* (chemisch und photoaktivierbar) gewonnen wird.<sup>|44</sup> Insgesamt sind die Forschungsleistungen sehr gut. Federführend vertreten wird diese Expertise zu *Crosslinks* durch einen Professor, der neben seinen Haupttätigkeiten an zwei kanadischen Universitäten in Nebentätigkeit zu 20 % am ISAS beschäftigt ist. Zudem ist ein Wissenschaftler (Postdoc) in Vollzeit am ISAS tätig, der dort diese Methodik etablieren soll. Das ISAS weist darauf hin, dass die Besetzung von Gruppenleitungen mit externen Wissenschaftlerinnen bzw. Wissenschaftlern gezielt zur Netzwerkbildung eingesetzt wird. Nicht schlüssig ist jedoch, dass die Forschungsarbeiten dieser Gruppenleitung kaum mit zusätzlicher Ko-Autorenschaft von weiteren ISAS-Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern erfolgten. Eine stärkere Vernetzung wird dringend empfohlen, um eine entsprechende

<sup>| 44</sup> Die Forschung der Arbeitsgruppe ist u. a. spezialisiert auf *Crosslinking* Algorithmen.

hochwertige Expertise im ISAS aufzubauen und dieses Forschungsgebiet am ISAS sichtbarer zu machen. Dies gilt umso mehr als der translationale Aspekt dieser Arbeiten, insbesondere Probenvorbereitungen, Anreicherungen (z. B. Phosphorylierungen), Auftrennungen, Datenanalysen (*Structural Proteomics* |<sup>45</sup>), eine Brückenfunktion zur beantragten Erweiterung übernehmen könnte. Es sind jedoch nur erste, nicht näher ausgearbeitete Hinweise gegeben worden, wie diese Vernetzung ausgestaltet werden soll.

Die Projektgruppe *Multi Omics/Tissue Omics* beschäftigt sich vor allem mit der Entstehung von neuromuskulären Erkrankungen und nutzt dabei aktuelle Verfahren wie die Hochdurchsatz-Massenspektrometrie. Etabliert ist am ISAS ein technisch aufwendiges Verfahren, Gewebsschnitte im Paraffin durch eine Dreierpipeline von Metabolomik, Proteomik und Lipidomik zu leiten. Die in diesem Bereich durchgeführte Spitzenforschung über Muskeldystrophien und deren verschiedene Ursachen erfolgt allerdings zu einem erheblichen Teil in Newcastle (UK). Dies ist darauf zurückzuführen, dass die vormalige Gruppenleitung vom ISAS zur *Newcastle University* gewechselt ist und ihre Aufgaben am ISAS aktuell im Rahmen einer Nebentätigkeit fortführt. Die Forschung des ISAS auf diesem Gebiet ist sehr translational ausgerichtet und bietet Anknüpfungspunkte für die geplante Erweiterung der translationalen Biospektroskopie; Potenzial für die Translation in die klinische Diagnostik ist grundsätzlich vorhanden. Allerdings ist eine medizinische Akkreditierung – die Grundvoraussetzung für den Einsatz des Verfahrens in der Diagnostik und bei klinischen Studien – nicht vorhanden und die hierfür maßgebliche DIN ISO 15189 |<sup>46</sup> wird erst in späterer Zukunft angestrebt.

Im Bereich Miniaturisierung ist das ISAS spezialisiert auf die Entwicklung und Charakterisierung von miniaturisierten Plasmen für die Analytische Chemie; die Arbeiten zielen beispielsweise auf die Optimierung von Arbeitsschritten in der Massenspektrometrie. Außerdem arbeitet die Gruppe daran, verschiedene Ionisierungsverfahren für die Massenspektrometrie zu kombinieren. Die Arbeiten auf diesem Gebiet sind sichtbar und die Gruppe etabliert.

In der Nachwuchsgruppe Synthetische Biomoleküle werden chemische Prozeduren und Werkzeuge entwickelt, um die vielfältigen Glykosylierungen von Proteinen im Detail zu analysieren. Grundsätzlich ist die Glykomforschung von hoher Aktualität und Relevanz. Allerdings sind diese Aktivitäten innerhalb des ISAS nur wenig vernetzt; eine direkte Verbindung zur strategischen Erweiterung erschließt sich nicht unmittelbar. Gerade für die Bildgebungstechniken

|<sup>45</sup> Gemeint sind hier nicht Proteinstrukturen, sondern die *Clustering* Algorithmen für ähnliche Proteinspektren.

|<sup>46</sup> DIN ISO 15189 definiert Anforderungen an die Qualität und Kompetenz von Medizinischen Laboratorien.

mit spezifischen Markern könnte die chemische Biologie (bzw. Konjugationschemie) jedoch eine wichtige unterstützende Rolle spielen.

Das ISAS hat Mitte 2015 die Nachwuchsgruppe CARS Mikroskopie im Rahmen eines Leibniz *Research Clusters* eingerichtet; ihre Aufgabe liegt darin, die in den Mikroreaktoren stattfindenden Prozesse zu analysieren und zu charakterisieren. Die Gruppe beschäftigt sich mit der CARS-Mikroskopie zur Identifizierung von chemischen Substanzen in Reaktionen und Organellen in Zellen. Diese soll innerhalb des Leibniz *Research Clusters* zur Analyse von Substanzgemischen verwendet werden. Da sich die Gruppe im Aufbau befindet, liegen substantielle Ergebnisse aber noch nicht vor. Insgesamt passt die Gruppe sehr gut in die Entwicklung des ISAS und sollte im Rahmen einer schlüssigen innovativen Gesamtstrategie eingebunden werden.

#### *Biomedizinische Forschung*

Die Arbeiten der Abteilung Biomedizinische Forschung wurden erst im Juli 2014 am ISAS aufgenommen. |<sup>47</sup> Die seither bereits etablierten Forschungsoperationen mit Klinika und weiteren Partnern, darunter auch der Industrie, werden als grundlegende Schritte zur Implementierung des biomedizinischen Schwerpunkts gewürdigt. Sehr begrüßenswert ist die im Februar 2016 neu besetzte Abteilungsleitung, die in gemeinsamer Berufung mit der Medizinischen Fakultät der Universität Duisburg-Essen erfolgt ist. Mit der Neuberufung wird das Institutsportfolio überzeugend ergänzt um den Schwerpunkt „Mechanismen kardiovaskulärer Erkrankung“, der in Kooperation mit der Medizinischen Fakultät der Universität Duisburg-Essen und dem Universitätsklinikum in Essen verfolgt wird. Es ist zu erwarten, dass die Forschungsarbeiten der neu berufenen Abteilungsleitung in hohem Maße von der am ISAS betriebenen Proteomik profitieren werden. Zudem hat das ISAS nachvollziehbar dargelegt, dass die molekularen Signalkaskaden bei Herzinsuffizienz durch ultrahochauflösendes Imaging noch gezielter entschlüsselt und auch räumlich bzw. zeitlich aufgelöst werden könnten. Für diese Forschung ist der Nutzen der beantragten strategischen Erweiterung erkennbar hoch.

Die biomedizinische Forschung zur Untersuchung von molekularen Grundlagen krankhafter Veränderungen hat ein hohes translationales Potenzial. Es geht darum, Verfahren für die Detektion von krankheitsspezifischen Biomarkern (Risikoindikatoren) zu entwickeln, um sie dann anwendungsnah bei der Bearbeitung klinischer Fragestellungen einzusetzen. Im Rahmen des Vorha-

|<sup>47</sup> Im Jahr 2012 beantragte das ISAS einen Sondertatbestand für die Ersteinrichtung der Abteilung Biomedizinische Forschung ab dem Jahr 2014. Den Aufbau der Abteilung übernahm der ehemalige Leiter des Medizinischen Proteom Centers (MPC) der RUB nach seiner Pensionierung. Bis zu seiner Pensionierung zugleich auch Leiter der Säule Proteomik im Rahmen des projektgeförderten Proteinforschungskonsortiums PURE.

bens *Human Brain Proteomics I* erforscht die Arbeitsgruppe seit Mitte 2014 die Progression der Alzheimer Erkrankung im humanen Hippocampus. Zusätzlich wird auch der potenzielle autoimmune Charakter der Erkrankung untersucht. |<sup>48</sup> Die Arbeiten zielen darauf, Autoantigene mittels hochauflösender Massenspektrometrie zu identifizieren, wobei die *State of the Art*-Technik der Laser-Mikrodissektion von Gewebe verwendet werde. Der Forschungsfokus des Vorhabens *Human Brain Proteomics II*, mit dem ebenfalls Mitte des Jahres 2014 begonnen wurde, liegt auf der Analyse der molekularen Funktionsmechanismen des menschlichen Gehirns. Dabei konzentriert sich ein Aspekt des Vorhabens auf die Analytik von Biomarkern und extrazellulären Vesikeln (EV) |<sup>49</sup> im Hinblick auf die Alzheimer Krankheit. Um extrazelluläre Vesikel zu charakterisieren, werden entsprechende Proben aus dem Blut von Morbus-Alzheimer-Patienten mit Kontrollproben mittels Protein-Massenspektrometrie und label-freier Quantifizierung verglichen. Hierzu beteiligt das ISAS sich an der klinischen Phase III der Studie von Roche mit dem „Alzheimer Medikament“. Da bislang kein Markerprotein identifiziert werden konnte, ist allerdings offen, inwieweit der verfolgte Ansatz zielführend ist. Außerdem bleiben eine Reihe, auch ethischer Fragen offen, etwa hinsichtlich des Umgangs mit dem hohen Anteil an Falschdiagnosen (insbesondere falsch positiv diagnostizierte Patientinnen und Patienten, die von einer Alzheimer Erkrankung ausgingen) oder der Einbeziehung alternativer methodischer Zugänge, z. B. CD-Spektroskopie. |<sup>50</sup> Wünschenswert für die weitere Entwicklung dieses Schwerpunkts ist die Durchführung klinischer Studien von hoher Qualität, um klinische Parameter für die Früherkennung von Alzheimer zu gewinnen und zu validieren.

Im Schwerpunkt Grenzflächenprozesse werden Wechselwirkungen zwischen Molekülen und Oberflächen untersucht. Die Techniken umfassen die Photoelektronenspektroskopie unter erhöhtem Druck (NAP-XPS), NMR-Spektroskopie |<sup>51</sup> sowie Oberflächenplasmonen-Resonanzspektroskopie. In der NMR beschreitet das ISAS neue Wege, um mithilfe von mikrostrukturierten Detektoren sehr kleine Proben zu untersuchen, die auch mit *Lab-on-the-chip* Ansätzen kombiniert werden können. Diese Analytik kann für metabolomische

|<sup>48</sup> Die Arbeiten basieren auf der Hypothese, dass bereits im Körper eines jungen Menschen erste biochemische Prozesse in Gang gesetzt werden, die der Alzheimer Erkrankung im Alter den Weg ebnen. Darüber hinaus werde laut ISAS die Hypothese verfolgt, dass es sich bei Morbus Alzheimer um eine so genannte Autoimmunerkrankung handele, deren Beginn wahrscheinlich 20 bis 30 Jahre vor dem Auftreten der ersten klinischen Symptome zu verorten ist. Das körpereigene Immunsystem unterscheide hierbei nicht mehr zwischen Freund und Feind und richte sich gegen den eigenen Körper. Dabei spielten so genannte Autoantikörper eine wichtige Rolle. Diese würden an Autoantigene binden, wobei schädliche Prozesse in Gang gesetzt würden.

|<sup>49</sup> Extrazelluläre Vesikel (EV) sind Membranpartikel, die ein komplexes Set an Informationen von einer Zelle zur anderen transferieren können.

|<sup>50</sup> Circular dichroismus (CD) ist eine spezielle Eigenschaft optisch aktiver (chiraler) Moleküle.

|<sup>51</sup> NMR = *Nuclear Magnetic Resonance* (Kernspinresonanz).

Studien an Einzelzellen oder synchronisierten Ensembles eingesetzt werden. Dies ist eine vielversprechende Ausrichtung, weil die NMR zwar eine eher wenig empfindliche, aber sehr spezifische Information über die Präsenz von kleinen Metaboliten liefern kann. In dieser Arbeitsgruppe wird die Miniaturisierung und Optimierung von Probenköpfen erfolgreich betrieben, die eine Verringerung der Probenvolumina bis hin zu einzelnen Zellen ermöglichen. Für die Forschung zu den Grenzflächenprozessen hätte die geplante biospektroskopische Erweiterung prinzipiell einen hohen wissenschaftlichen Mehrwert, wenn das Potenzial entsprechend genutzt wird.

#### *Grenzflächenanalytik*

Im Bereich „Nanostrukturen“ führt das ISAS grundlagenorientierte Forschung an Nanogrenzflächen sowie an Hybrid-Grenzflächen zwischen organischen Molekülen und anorganischen Materialien durch. Zudem beschäftigt sich die Gruppe mit der Weiterentwicklung und Optimierung von optischen Spektroskopiemethoden, um diese Materialien, Grenzflächen und Nanostrukturen besser und detaillierter analysieren zu können. Dabei kommen Verfahren wie Raman-Spektroskopie, Ellipsometrie oder Absorptionsspektroskopie zum Einsatz. Um das Potenzial der strategischen Erweiterung nutzen zu können, sollten die Arbeiten auf diesem Gebiet innerhalb des ISAS noch besser vernetzt werden.

Die Arbeitsgruppe In-Situ-Spektroskopie beschäftigt sich mit funktionalen Materialien wie Meta- und Hybridmaterialien. Dabei werden In-Situ-Untersuchungen an Fest-Flüssig-Grenzflächen durchgeführt; solche Grenzflächen spielen eine zentrale Rolle etwa für Flüssigkeitssensoren, mit denen man spezifische Moleküle in Flüssigkeiten nachweisen kann. Mit solchen Analysen soll untersucht werden, wie sich etwa die Oberfläche eines organischen oder biofunktionalen Films in einem Sensor verändert, wenn sie mit Substanzen in Kontakt kommt, und wie dies die Eigenschaften der Oberfläche beeinflusst. Dafür werden vor allem Infrarot-Ellipsometrie und -Spektroskopie eingesetzt. Diese Gruppe könnte der geplanten Erweiterung methodisch zuarbeiten, hier bestünde im Erweiterungsfall ein hohes Synergiepotenzial.

Festzustellen ist allerdings auch hier, dass diese vielversprechenden Ansätze nur punktuell und unzureichend in ein übergreifendes Forschungskonzept der Erweiterung eingebunden sind.

#### II.1.b Zu Publikationen und Drittmittel

Die Vielfalt an methodischen Ansätzen und Forschungsaktivitäten des ISAS schlägt sich in einem qualitativ heterogenen Publikationsspektrum nieder. In einzelnen Bereichen, beispielsweise der Biotechnologie, sind gute, teilweise auch sehr gute Publikationen entstanden. Ausbaufähig sind jedoch Spitzenpublikationen des Instituts. Dem ISAS wird empfohlen, seine derzeitige Publi-

kationspraxis zu überdenken. Qualitativ überzeugende Veröffentlichungen sind unabdingbar für die wissenschaftliche Sichtbarkeit einer Forschungseinrichtung. Das ISAS sollte seine Anstrengungen künftig konsequent auf die Erarbeitung qualitativ erstklassiger Publikationen konzentrieren. Förderlich hierfür wäre eine Fokussierung des Forschungsprogramms, die von einer institutsübergreifenden Publikationsstrategie begleitet wird. Die gute bis exzellente Leistungsfähigkeit der einzelnen Arbeitsgruppen tritt klar hervor, sie sollte aber komplementär durch eine übergreifende Institutsstrategie unterstützt und vernetzt werden. Im Falle der angestrebten Erweiterung wäre diese unverzichtbar.

Hinsichtlich der Einwerbung wettbewerblich vergebener Drittmittel hat das ISAS – wie bereits in der zurückliegenden Evaluation festgestellt – wichtige Schritte in die richtige Richtung unternommen. Ungeachtet der Empfehlungen seines Beirats und der Leibniz-Gemeinschaft ist es dem ISAS im Erhebungszeitraum allerdings nicht gelungen, sein Drittmittelvolumen weiter zu erhöhen. Die von der Leibniz-Gemeinschaft eingesetzte Bewertungsgruppe empfahl dem ISAS im Jahr 2011, die Drittmittelquote auf 30 % des Kernhaushalts zu steigern, |<sup>52</sup> erreicht wurde im Jahr 2015 eine Drittmittelquote von 24 % des Kernhaushalts bzw. 16 % des Gesamtbudgets. |<sup>53</sup> Das ISAS wird nachdrücklich darin bestärkt, seine Drittmittelinwerbungen künftig zu intensivieren, besonders auch auf europäischer Ebene. Die Zusammenarbeit in Drittmittelprojekten könnte das ISAS außerdem gezielt für seine wissenschaftliche Publikationstätigkeit nutzen und diese verstärkt im Rahmen der leistungsorientierten Mittelvergabe berücksichtigen.

#### II.1.c Zur wissenschaftlichen Nachwuchsförderung

Der hohe Stellenwert, den das ISAS der Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses einräumt, wird ausdrücklich gewürdigt. Gute Rahmenbedingungen hierfür schafft die enge universitäre Anbindung des ISAS durch gemeinsame Berufungen des Leitungspersonals und Beteiligung auch von Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Instituts an der Hochschullehre. Gleichwohl wird die Anzahl von Bachelor- und Masterstudierenden sowie von Promovierenden, die im Erhebungszeitraum am ISAS betreut wurden, im Verhältnis zur Institutsgröße als steigerungsfähig eingeschätzt. Das Institut sollte grundsätzlich, insbesondere jedoch im Fall der strategischen Erweiterung, eine Erhöhung der Anzahl der am ISAS betreuten Qualifikationsarbeiten anstreben.

|<sup>52</sup> Vgl. Stellungnahme des Senats der Leibniz-Gemeinschaft zum Leibniz-Institut für Analytische Wissenschaften e.V. (ISAS), Dortmund/Berlin, vom 26. März 2011, Anlage B: Bewertungsbericht zum Leibniz-Institut für Analytische Wissenschaften (ISAS), Dortmund/Berlin, vom 1. Dezember 2010, S. B-13.

|<sup>53</sup> Im Jahr 2015 vereinnahmte das ISAS Drittmittel in Höhe von rund 3,0 Mio. Euro.

Durch das strategische Erweiterungsvorhaben wird die institutionelle Verbindung des ISAS zur RUB noch weiter gestärkt; dabei verspricht die enge räumliche Anbindung positive Effekte hinsichtlich der Förderung und Rekrutierung von wissenschaftlichen Nachwuchskräften. Nachvollziehbar ist die auf dem wissenschaftlichen Arbeitsmarkt schwierige Situation für das ISAS, passende Nachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftler zu finden. Dies gilt vor allem für die Besetzung von Nachwuchsgruppenleitungen. Besonders positiv hervorzuheben sind daher die vom ISAS eingerichteten Nachwuchsgruppen mit bereits selbständigem Forschungsprofil und teilweise sehr innovativen Leistungen, beispielsweise in den Bereichen Lipidomics, *Labelling* und Synthetische Biomoleküle. Diese viel versprechenden zukunftsweisenden Ansätze sollten allerdings ebenfalls konsequent in eine übergreifende Forschungsprogrammatisierung eingebunden werden.

## II.2 Zu Kooperationen

Insgesamt ist das ISAS in der universitären und außeruniversitären Forschungslandschaft sehr gut vernetzt. Durch gemeinsame Berufungen ist das Institut mit den Universitäten der Universitätsallianz Ruhr (UAR) |<sup>54</sup> und darüber hinaus mit der TU Berlin eng verbunden. Sehr begrüßenswert ist, dass die Leitungspositionen für die zwei geplanten Abteilungen der strategischen Erweiterung ebenfalls in gemeinsamen Berufungsverfahren mit der RUB besetzt werden sollen. Das Erweiterungsvorhaben wird eindrucksvoll von den Partneruniversitäten der UAR befürwortet, die dem Vorhaben eine wichtige Rolle für die Entwicklung der Wissenschaftsregion Ruhr zusprechen.

Die RUB unterstützt den Antrag auf strategische Erweiterung mit großem Engagement. Vorgesehen ist eine Vernetzung der biospektroskopischen Arbeiten des ISAS mit dem an der RUB angesiedelten Forschungskonsortium *Protein research Unit Ruhr within Europe* (PURE), |<sup>55</sup> das von dem derzeitigen Bochumer Lehrstuhlinhaber für Biophysik und zugleich Sprecher von PURE gegründet wurde. Bei PURE handelt es sich um eine Drittmittelinitiative der klinischen Anwendungsforschung, deren Förderung durch das Land Nordrhein-Westfalen im Jahr 2017 auslaufen wird und daher ab dem Jahr 2018 in eine neue Förder-

|<sup>54</sup> In der Universitätsallianz Ruhr arbeiten die Ruhr-Universität Bochum, die Technische Universität Dortmund und die Universität Duisburg-Essen seit 2007 strategisch zusammen.

|<sup>55</sup> Aus dem proteinwissenschaftlich ausgerichteten Sonderforschungsbereich (SFB) 642 „GTP- und ATP-abhängige Membranprozesse“ (2004 bis 2016) und einem grundlagenwissenschaftlichen *Protein Research Department* (seit 2009) wurde im Jahr 2010 das stärker anwendungsorientierte Forschungskonsortium PURE gegründet, das rund 110 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter beschäftigt. Unter dem Dach von PURE bündeln Proteinforscherinnen und -forscher der RUB und der Universität Duisburg-Essen sowie klinische Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler ihre Forschungsaktivitäten zur Früherkennung von Krebs und neurodegenerativen Erkrankungen wie Alzheimer. In diesem Rahmen wurde u. a. auch ein Studienzentrum für die Gewinnung und Charakterisierung von Patienten- bzw. Probandenproben etabliert.

struktur überführt werden soll. Zur Fortführung und Stärkung der PURE-Initiative erhält die RUB einen neuen Forschungsbau für molekulare Protein-Diagnostik (ProDi). |<sup>56</sup>

Im Erweiterungsfall soll die Biophotonik (Lehrstuhl für Biophysik der RUB) aus dem PURE-Verbund herausgelöst und dem ISAS zugeordnet werden. Damit soll der Aufbau von methodischen Doppelstrukturen weitestgehend vermieden werden. Hinsichtlich der Methoden Infrarot- und Ramanspektroskopie wird zwar mit einem Überlapp gerechnet; es ist aber plausibel, dass die beteiligten Partner diese methodische Überschneidung für eine erfolgreiche disziplin- und einrichtungsübergreifende Kommunikation als notwendig erachten.

RUB und ISAS haben überzeugend dargelegt, dass durch die geplante enge Kooperation erhebliches Synergiepotenzial bei der Probengewinnung zu erwarten ist. Der Aufbau eines ISAS-Standorts in Bochum soll eine gemeinsame Nutzung der in PURE entwickelten Verfahren und Prozesse für die Untersuchungen an Frischgewebe |<sup>57</sup> ermöglichen; ferner soll die wissenschaftliche Zusammenarbeit, vor allem mit der klinischen Forschung, weiter ausgebaut werden. Eine enge Vernetzung ist für eine erfolgreiche Umsetzung des Erweiterungsvorhabens essenziell, da das ISAS diese Prozesse für die Einrichtung der Biospektroskopie erst neu etablieren muss. Auch ist die Forschung von PURE/ProDi zur geplanten biospektroskopischen Erweiterung nachvollziehbar komplementär ausgerichtet. Im Rahmen von PURE/ProDi ist die Forschung auf GTP- und ATP-abhängige |<sup>58</sup> Membranprozesse fokussiert, während das ISAS sich auf die Methodenentwicklung konzentriert. Aus wissenschaftlicher Perspektive ist die Standortwahl an der RUB mit einer engen, auch räumlichen Anbindung an PURE/ProDi für die Umsetzung der geplanten Erweiterung unabdingbar. Bemerkenswert ist, dass die mit ProDi verbundenen Geräteinfrastrukturen im Erweiterungskonzept nicht explizit angesprochen werden.

Die RUB hat zugesagt, den derzeitigen Lehrstuhlinhaber für Biophysik bis zum Jahr 2024 und damit über die reguläre Altersgrenze hinaus weiter zu beschäftigen. Dieser soll ab 2018 teilweise von seinen universitären Dienstaufgaben

|<sup>56</sup> Die Gemeinsame Wissenschaftskonferenz (GWK) bewilligte im Juni 2014 den Forschungsbau „ProDi“ mit insgesamt rund 48 Mio. Euro, nachdem der Wissenschaftsrat im April 2014 das Vorhaben zur gemeinsamen Bund-Länder-Förderung unter dem Vorbehalt der Finanzierbarkeit empfohlen hatte (Wissenschaftsrat: Empfehlungen zur Förderung von Forschungsbauten (2015), Drs. 3781-14. Darmstadt 2014, S. 87f.). Durch die Forschungsinfrastruktur und die Etablierung einer kritischen Masse wissenschaftlicher und klinischer Expertise sollen mit ProDi auch die Voraussetzungen geschaffen werden, um einen Nachfolge-SFB für den an der RUB bestehenden Sonderforschungsbereich 642 zu gründen. ProDi soll am Eingang des neuen Bochumer Gesundheitscampus entstehen und die Brücke zwischen der RUB, den Bochumer Universitätskliniken und Einrichtungen der Gesundheitswirtschaft schlagen.

|<sup>57</sup> Da die Arbeit mit Frischgewebe eine sehr enge, zeitkritische Abstimmung der Messungen erfordert, sei die räumliche Nähe zwingend erforderlich. Auch die unmittelbare Interaktion grundlagenorientierter und klinischer Forscher sei hierfür wesentlich.

|<sup>58</sup> GTP = Guanosintriphosphat, ATP = Adenosintriphosphat.

freigestellt werden, um den Bereich der Biospektroskopie am ISAS aufzubauen (vgl. B.III.1). Das nachdrückliche Interesse der RUB an einer Überführung der translationalen Biospektroskopie in einen außeruniversitären Kontext liegt nicht zuletzt darin begründet, dass eine universitäre Fortführung und Weiterentwicklung dieser stark anwendungsorientierten Forschung an ihre Grenzen stößt.

Als An-Institut und mit einem Standort auf dem Universitätscampus unterhält das ISAS traditionell enge institutionelle Beziehungen zur TU Dortmund. Insbesondere im Profilschwerpunkt „Chemische Biologie und Biotechnologie“ der TU besteht eine intensive Kooperation mit dem ISAS. Mittelfristig strebt die Universität hier die Etablierung eines Sonderforschungsbereichs gemeinsam mit den Partnern an. Die TU Dortmund hat im Jahr 2014 das „Zentrum für integrierte Wirkstoffforschung“ (ZIW) gegründet, um Wirkstoffforschung und Wirkstoffformulierung in Zusammenarbeit mit Pharmazeutischer Industrie durchzuführen. Das ISAS gilt als ein wichtiger Partner des ZIW, dessen Arbeiten von der biospektroskopischen Erweiterung in hohem Maße profitieren würden.

Positiv hervorzuheben ist die komplementäre Zusammenarbeit des ISAS mit dem Leibniz-Institut für Photonische Technologien (IPHT) in Jena, das ähnlich dem ISAS einen eher methodisch orientierten Forschungsansatz verfolgt. Während beim IPHT eine einzelne Methode und ihr Einsatzspektrum optimiert werden sollen, konzentriert das ISAS sich auf ein integratives Multimethodenkonzept unter Einbeziehung der neu zu etablierenden Biospektroskopie. Mit Nachdruck unterstützt wird ein arbeitsteiliges abgestimmtes Vorgehen im Fall der Erweiterung. Begrüßenswert ist daher die Ankündigung des IPHT, für viele Fragestellungen der orts- und zeitaufgelösten Analyse neue Technologien, u. a. auch bildgebende Verfahren, entwickeln und dem ISAS zur Verfügung stellen zu können.

Demgegenüber sind die Rolle und die Zusammenarbeit mit dem Leibniz-Institut für Molekulare Pharmakologie (FMP), Berlin, bei dem Erweiterungsvorhaben ISAS unter Hinweis auf sehr unterschiedliche Forschungsansätze nicht klar. Das ISAS sollte den Austausch und die Zusammenarbeit, wie von der neuen Leitung der Abteilung Biomedizinische Forschung angestrebt, intensivieren.

### II.3 Zur Qualitätssicherung

Ogleich dem Beirat satzungsgemäß die Aufgabe zufällt, die Qualität der wissenschaftlichen Arbeiten und die Forschungsplanung des ISAS zu beurteilen, ist das Beratungsgremium bei der Konzeption der strategischen Erweiterung offenkundig nicht ausreichend einbezogen worden. Der Beirat hat deutlich gemacht, dass bestehende Überlegungen zum Aufbau der grundlagenorientierten Abteilung „Biospektroskopie“ sowie zur Besetzung der entsprechenden Ab-

teilungsleitung nicht Gegenstand der Beratungen in diesem Gremium gewesen seien. Daher wird dringend empfohlen, das Instrument des Beirats künftig systematisch für eine kritisch-prüfende Begleitung zu nutzen. Qualitätssichernde Beratung ist bei einer so weitgehenden und substanziellen Entscheidung wie sie die geplante Institutserweiterung darstellt unabdingbar. Ferner sollte eine einschlägige biospektroskopische Expertise im Beirat vertreten sein.

### **B.III ZU KONZEPT UND PERSPEKTIVEN DER STRATEGISCHEN ERWEITERUNG**

---

#### III.1 Zum wissenschaftlichen Mehrwert

Der wissenschaftliche Mehrwert eines Ausbaus des am ISAS etablierten Methodenspektrums um bildgebende biospektroskopische Verfahren ist in der Forschungsprogrammatisierung nicht schlüssig begründet; eine systematische Verknüpfung der geplanten Methodenerweiterung mit den Forschungsarbeiten des ISAS ist, wie bereits dargelegt, noch nicht ausreichend substantiiert.

Ein zielführender Ausbau des Methodenspektrums um biospektroskopische Verfahren muss aber auf klare im Forschungsprogramm verankerte Leitlinien bezogen werden. Eine konsequente inhaltliche Fokussierung ist unabdingbar, um die erforderliche kritische Masse für innovative Spitzenforschung erreichen zu können. Dies ist insofern von besonderer Relevanz als deutschland- und europaweit eine Reihe von Initiativen <sup>59</sup> zu beobachten ist, die einen ähnlichen Ansatz wie das ISAS zur Probenstandardisierung von Gewebsproteomen verfolgen und dabei ebenfalls auf bildgebende Verfahren setzen. Unklar ist, wie das ISAS die kritische Größe für den Bereich der Biospektroskopie im Falle einer Erweiterung erreichen will. Für die angestrebte abteilungsübergreifende Einbindung der am ISAS vorhandenen Kompetenzen müssen zunächst gemeinsame inhaltliche Anknüpfungspunkte und Perspektiven in allen Arbeitsbereichen formuliert werden. Hierbei hat die inhaltliche Ausrichtung der beantragten Erweiterung auf die Analytik der Gesundheitsforschung grundsätzlich hohes Potenzial, eine übergreifende programmatische Klammer für die Forschungs- und Anwendungsschwerpunkte des ISAS zu bilden.

#### \_ Abteilung „Biospektroskopie“

Mit der Einrichtung einer neuen Abteilung Biospektroskopie wird das Ziel verfolgt, die Grundlagen biospektroskopischer Methoden (weiter) zu entwickeln. Profil und Struktur der geplanten Abteilung sind aber im Hinblick darauf nicht überzeugend konzipiert. Das zugeordnete Methodenspektrum (Raman-

<sup>59</sup> Zur Proteomstandardisierung beispielsweise am *European Molecular Biology Laboratory* – EMBL Heidelberg; zur Proteomstandardisierung plus Imaging oder andere Analysen beispielsweise am Max-Planck-Institut für Biochemie, Martinsried.

Spektroskopie einschließlich Breitband-CARS-Methoden und MS-Imaging) gründet nicht auf einer kohärenten und innovativen Forschungsprogrammatisierung. Während Raman-Spektroskopie zur Untersuchung von molekularen Strukturen und Grenzflächen bereits seit langem am ISAS entwickelt und eingesetzt wird, steht die Etablierung von Breitband CARS-Methoden (vgl. B.II.1.a) erst am Anfang. Vor allem aber sind die geplante Einrichtung einer Arbeitsgruppe „Nahfeldspektroskopie“ und ihre Rolle in diesem Zusammenhang nicht nachvollziehbar erklärt. Für das ISAS spielt die Einrichtung einer Professur für Nahfeldspektroskopie eine zentrale Rolle insbesondere für die Anbindung des Berliner Standorts und sollte im Erweiterungsfall sofort ausgeschrieben werden. Aus Bochumer Sicht soll diese Technologie aber erst im zweiten Schritt als Ergänzung zur Raman-Spektroskopie eingeführt werden. Die vorgesehene Anbindung der Arbeitsgruppe „Nahfeldspektroskopie“ zunächst an die Abteilung Grenzflächenanalytik am Standort Berlin und spätere Umsiedlung zur Abteilung Biospektroskopie am Standort Bochum ist ebenfalls nicht plausibel. Außerdem verfügt das ISAS derzeit nicht über die notwendige Expertise für eine tragfähige Investitionsplanung dieses Bereichs, da die Leitung der Forschungsgruppe „Nahfeldspektroskopie“ noch nicht besetzt ist.

Eine grundlagenorientierte Abteilung sollte sich konsequent auf die Entwicklung neuartiger Methoden der Biospektroskopie fokussieren. Eine erfolgreiche Umsetzung dieses ambitionierten Ziels ist nur in enger Kooperation mit der RUB möglich.

#### \_ Abteilung Translationale Biospektroskopie

Die Planungen zur Einrichtung der Abteilung „Translationale Biospektroskopie“ sind demgegenüber bereits weitgehend konkretisiert. Die bestehende Zusammenarbeit des ISAS mit dem Bochumer Lehrstuhlinhaber für Biophysik, der für den Aufbau und die Leitung der geplanten Abteilung „Translationale Biospektroskopie“ vorgesehen ist, bietet hierfür hervorragende Voraussetzungen. Im Zentrum der Aktivitäten steht die Entwicklung von bildgebenden spektroskopischen Verfahren, um mittels Infrarot-Absorption spektrale Histopathologie an Geweben sowie die spektrale Zytologie an lebenden Zellen durchzuführen. Die Verfahren ermöglichen eine Multiparameteranalytik, die Art, Ort und Anzahl der Analyten zu definierten Zeiten bestimmt. Diese Ausrichtung gründet auf den erfolgreichen Vorarbeiten des Biophysikers der RUB. Auf der molekularen Ebene soll eine markerfreie zeitaufgelöste FTIR-Spektroskopie |<sup>60</sup> zum Einsatz kommen, um Reaktionsmechanismen und Interaktionen von Schlüsselproteinen auf atomarer Ebene mit hoher zeitlicher Auflösung zu bestimmen. FTIR-Bildgebung ist eine lang etablierte Technik, die

| <sup>60</sup> FTIR - Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer ist eine spezielle Variante eines Spektrometers, ein Messgerät für die Infrarotspektroskopie.

am Bochumer Lehrstuhl für Biophysik in Zusammenarbeit mit Medizinerinnen und Medizinern hinsichtlich einer Anwendung auf Gewebepathologie evaluiert worden ist und das Potential hat, die Methoden der Gewebediagnostik deutlich zu verfeinern. Hier sind weitere technische Entwicklungen denkbar, mit dem Ziel die recht langen Messzeiten so weit zu verkürzen, dass die Methode kompetitiv wird. Um das Verfahren zum Einsatz in der Medizin weiter zu entwickeln, sollte ein industrieller Partner eingebunden werden.

Darüber hinaus werden weitere Infrarotmethoden verwendet, bei denen der translationale Charakter allerdings nicht ganz so deutlich herauskommt. Beispielsweise wird die zeitaufgelöste Differenz-FTIR-Spektroskopie von der Bochumer Forschergruppe seit vielen Jahren erfolgreich zur Untersuchung von Reaktionsmechanismen diverser Proteine eingesetzt. Auch werden ATR-Methoden verwendet, bei denen die Biomoleküle an Grenzflächen präpariert werden, um z. B. Faltungszustände zu detektieren. Weiterzuführen sind auch die konzeptionellen Überlegungen zur Einbindung der Fluoreszenzmikroskopie in die Forschungsarbeiten. Die derzeit hochaktuellen bildgebenden Methoden mit Fluoreszenzmarkern spielen im Rahmen des Erweiterungskonzepts eine eher nachgeordnete Rolle. Lediglich der Technische Service wird mit einer Expertise hinsichtlich Fluoreszenzspektroskopie ausgestattet. Die Bedeutung dieser innovativen Methodik für das Forschungsprogramm sollte überprüft werden.

Insgesamt sind die geplanten Erweiterungen der ISAS-Forschung seitens des Bochumer Partners sehr gut herausgearbeitet. Offen geblieben ist jedoch zum einen die Frage der (räumlichen) Anbindung von ISAS an die klinische Forschung im Rahmen von ProDi (vgl. B.II.2) und zum anderen, wie diese Aktivitäten nach Ausscheiden der designierten Abteilungsleitung „Translationale Biospektroskopie“ verstetigt werden kann.

### III.2 Zur organisatorischen Umsetzung

#### *Organisation und Leitung*

Das ISAS plant, die Leitungsposition der Abteilung Biospektroskopie im Jahr 2018 auszuschreiben. Aufgrund von Erfahrungen mit vorausgegangenen gescheiterten Berufungsverfahren beabsichtigt das ISAS, die Ausschreibung inhaltlich breiter zu fassen; mit Besetzung der Leitungsposition im Jahr 2019 soll die Abteilung aufgebaut werden. Zum Zeitpunkt des Ortsbesuchs war die Abstimmung zwischen ISAS und RUB hinsichtlich einer kommissarischen Übernahme der Abteilungsleitung „Biospektroskopie“ durch den Lehrstuhlinhaber für Biophysik und designierten Abteilungsleiter „Translationale Biospektroskopie“ bis zu einer erfolgreichen Neuberufung noch nicht abgeschlossen. Allerdings hat die RUB entschieden darauf hingewiesen, dass der Bochumer Biophysiker laut Antrag neben der Gründungsprofessur für die neue Abteilung

„Translationale Biospektroskopie“ auch für die kommissarische Leitung zum Aufbau der Abteilung „Biospektroskopie“ vorgesehen ist. Abweichend von der Antragstellung wird aber mit Nachdruck empfohlen, die Gründung der Abteilung „Biospektroskopie“ eng mit der neu zu besetzenden Leitung zu verbinden und abzustimmen. Hierfür sollte eine herausragende Forscherpersönlichkeit gewonnen werden, die den Aufbau der entwicklungsorientierten Abteilung „Biospektroskopie“ mit grundlagenwissenschaftlicher Exzellenz und hoher Innovationskraft übernehmen und vorantreiben kann. Im Zuge der Neuberufung sehr empfehlenswert ist die Etablierung einer neuen innovativen Imaging-Methode.

Sehr zu begrüßen ist die Zusage der RUB, den derzeitigen Inhaber des Lehrstuhls Biophysik für die Einrichtung und Leitung der Abteilung Translationale Biospektroskopie ab 2018 teilweise freizustellen und bis zum Jahr 2024 über die reguläre Altersgrenze hinaus weiter zu beschäftigen. Allerdings ist fraglich, ob im Rahmen der veranschlagten zeitlichen Perspektive von sechs Jahren (2018 bis 2024) die angestrebte Methodenentwicklung und der Technologietransfer in die Praxis gelingen können. Eine Planung für die Validierung und Zulassung von Verfahren und Instrumenten ist noch nicht konkretisiert, insbesondere mangelt es an der Sicherung von *Intellectual Property* (IP) und der Vereinbarung von Industriekooperationen. Ferner sind die Implikationen zu bedenken, die mit dem bis dahin am ISAS etablierten Schwerpunkt für die geplante Neuberufung der Abteilungsleitung „Translationale Biospektroskopie“ verbunden sind. Im Jahr 2022 sollen die Berufungsverhandlungen für die Nachfolge aufgenommen, im Jahr 2024 der Leitungswechsel vollzogen werden. Hierzu hat das ISAS bislang keine Szenarien vorgestellt, was angesichts einer strategisch angelegten Erweiterung und der damit verbundenen Investitionen jedoch dringend angeraten wird. Außerdem liegen unterschiedliche Auskünfte darüber vor, ob die mit dem Lehrstuhl verbundene Forschergruppe der künftigen Abteilungsleitung im Falle einer Erweiterung ebenfalls an das ISAS wechseln soll.

Zum Zeitpunkt des Ortsbesuchs war die Frage der Eingliederung der neuen Abteilungsleitungen, vor allem der für den Standort Bochum verantwortlichen und designierten Abteilungsleitung „Translationale Biospektroskopie“, in den ISAS-Vorstand noch nicht abschließend beraten. Während das ISAS explizit keine Vorstandsposition für den biospektroskopischen Bereich im Erweiterungsfall anstrebte, wäre eine Erweiterung des ISAS-Vorstands aus Sicht der RUB sinnvoll und wünschenswert. Eine Ergänzung des ISAS-Vorstands um den Bereich der Biospektroskopie ist bei einer entsprechenden Erweiterung aber zwingend erforderlich.

Die erfolgreiche Umsetzung der geplanten Erweiterung wird maßgeblich davon abhängen, inwieweit die vorgesehenen Stellen entsprechend adäquat und zeitnah besetzt werden können. Da zum Stichtag 31. Dezember 2015 von den insgesamt 112 Stellen (VZÄ) des ISAS knapp ein Viertel, von den Stellen für wissenschaftliches Personal (39 VZÄ) gut ein Drittel nicht besetzt war, ist die Besetzung der zusätzlichen insgesamt 63 beantragten Stellen (davon 32 Stellen für wissenschaftliches Personal) recht ambitioniert – besonders vor dem Hintergrund der standortspezifischen Rahmenbedingungen. Dies gilt in besonderem Maße für die Besetzung der Leitungsstellen.

Der wissenschaftliche Mehrwert einer methodischen Erweiterung scheint in vielen Fällen noch nicht bei den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des ISAS verankert und damit der Nutzen bzw. die Möglichkeiten für die jeweils eigenen Arbeiten nicht ersichtlich zu sein. Daher wird nachdrücklich empfohlen, die wissenschaftlichen Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter der verschiedenen Arbeitsbereiche aktiv in die weitere konzeptionelle Arbeit einzubinden. Mit dem Aufbau eines vierten Standorts in Bochum (neben zwei Standorten in Dortmund und einem Standort in Berlin) steht das ISAS vor der großen Herausforderung, standortübergreifend eine reibungslose Kommunikation zu etablieren. Dafür muss das ISAS dringend geeignete Austauschformate entwickeln.

#### *Infrastruktur und Finanzen*

Für die strategische Erweiterung sollen keine Geräte oder Infrastrukturen der RUB übernommen werden. ISAS und RUB beabsichtigen jedoch nach eigener Auskunft, die an der RUB vorhandenen Forschungsinfrastrukturen sowie die mit der Erweiterung am Standort Bochum neu hinzukommenden Ressourcen abzustimmen und im Wege der Kooperation synergetisch zu nutzen. Zum Zeitpunkt des Ortsbesuchs stellten ISAS und RUB jeweils abweichende Investitionsplanungen und Priorisierungen für die Anschaffung von Großgeräten vor. Die Investitionsplanung ist zu diesem Zeitpunkt des fortgeschrittenen Antragsverfahrens offenkundig noch nicht Gegenstand intensiver Abstimmungen zwischen den Partnern gewesen. Es ist der Eindruck entstanden, dass es sich bei der von ISAS vorgelegten Investitionsplanung um eine Annäherung handelte. Eine belastbare Investitions- und Anschaffungsplanung setzt jedoch zunächst eine kohärente und abgestimmte Forschungsprogrammatisierung voraus. Dem ISAS wird dringend empfohlen, für die systematische Integration der Biospektroskopie in die eigenen Forschungs- und Entwicklungsarbeiten einen grundlegenden Strategieprozess einzuleiten.

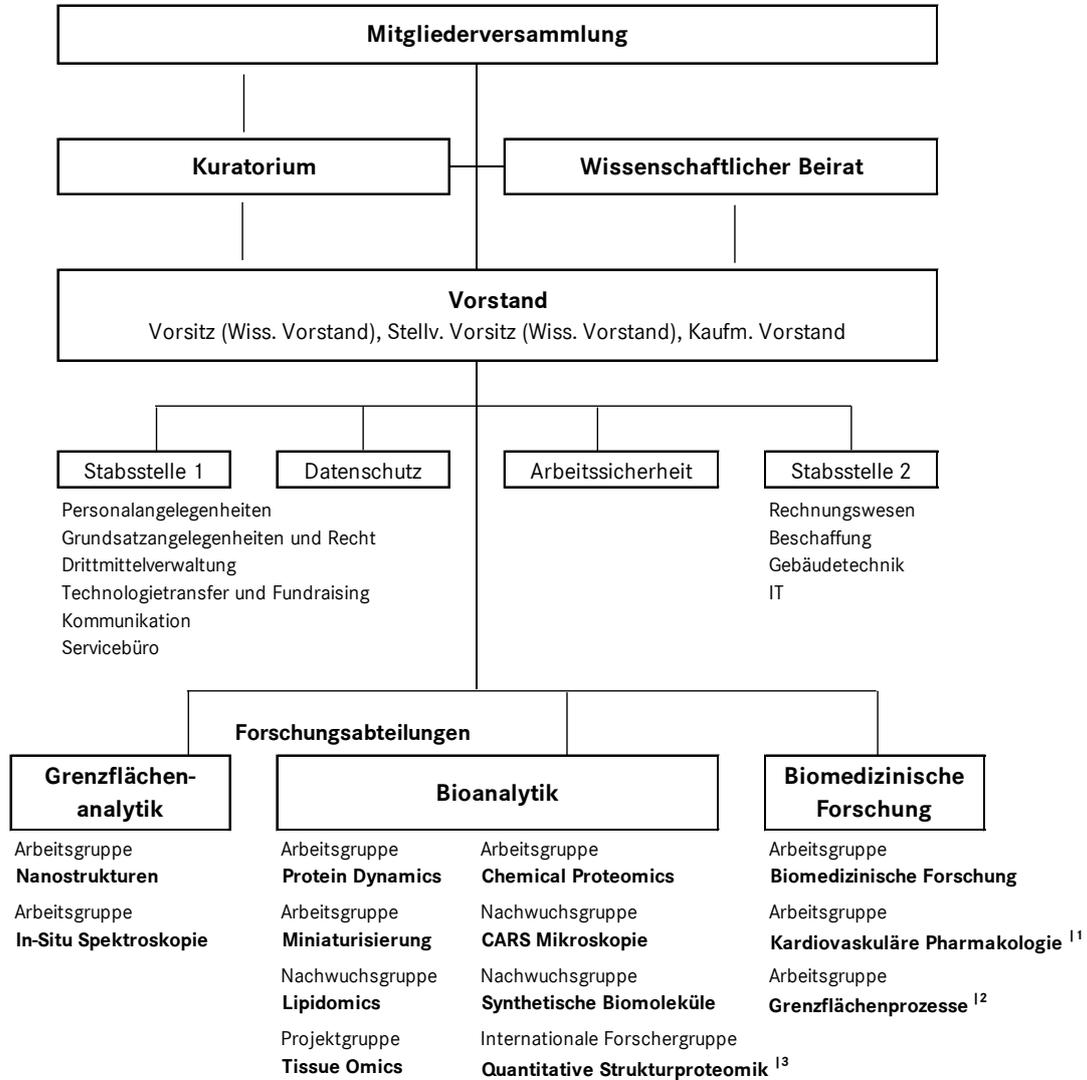
---

# Anhang



## Anhang 1a: Organigramm des ISAS (ohne Planungen und ohne strategische Erweiterung)

Stand: 11. Juli 2016



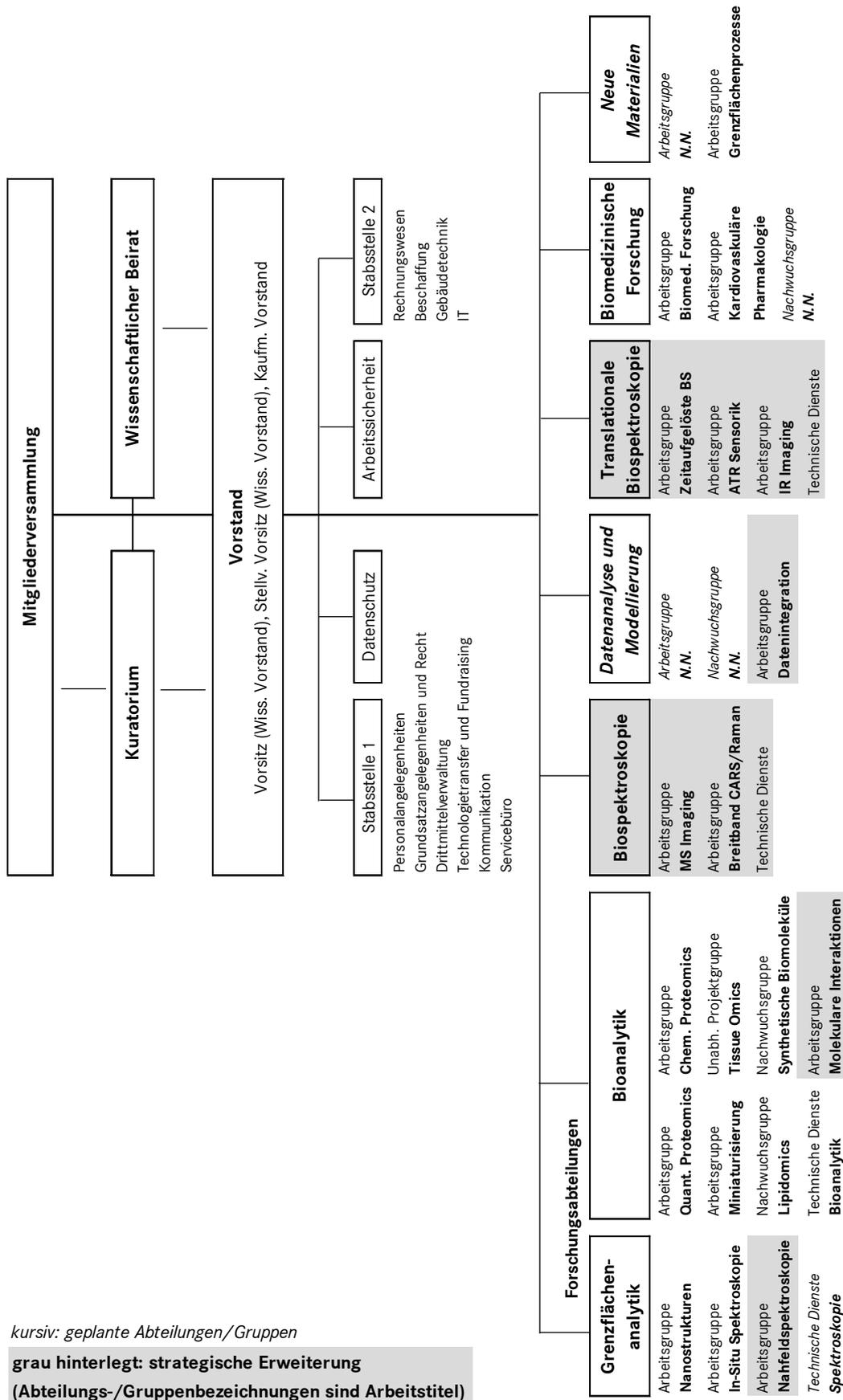
<sup>1</sup> Seit Februar 2016.

<sup>2</sup> Die Arbeitsgruppe Grenzflächenprozesse ist seit dem Jahr 2014 bis zur Einrichtung der Abteilung Neue Materialien der Abteilung Biomedizinische Forschung zugeordnet.

<sup>3</sup> Seit April 2016.

Quelle: ISAS

Anhang 1b: Organigramm des ISAS (einschließlich Planungen und strategische Erweiterung)



*kursiv: geplante Abteilungen/Gruppen*

**grau hinterlegt: strategische Erweiterung (Abteilungs-/Gruppenbezeichnungen sind Arbeitstitel)**

Anhang 2a: Übersicht der aus dem institutionellen Haushalt finanzierten Vollzeit-  
äquivalente (VZÄ) (ohne Drittmittel)

Stand: 31.12.2015

Stellenbezeichnung	Stellen insgesamt (VZÄ; Soll)		davon tatsächlich besetzt (VZÄ; Ist)	
	Wertigkeit	Anzahl	Wertigkeit	Anzahl
Stellen für wissenschaftliches Personal	Außer- tariflich <sup>1</sup>	7,0	W3	2,0
			W2	-
			W1	-
Höherer Dienst	32,0	E15	5,0	
		E14	9,25	
		E13	9,6	
<b>Zwischensumme</b>		<b>39,0</b>		<b>25,85</b>
Stellen für nichtwissenschaftliches Personal	Außer- tariflich	2,0	E15 <sup>2</sup>	2,0
	Höherer Dienst	3,0	E13	3,0
	Gehobener Dienst	42,5	E12	4,25
			E11	6,25
E10			6,25	
E9			14,75	
Mittlerer Dienst	25,5	E8	6,75	
		E7	5,5	
		E6	7,25	
		E5	4,0	
<b>Zwischensumme</b>		<b>73,0</b>		<b>60,0</b>
<b>Insgesamt</b>		<b>112,0</b>		<b>85,85</b>

<sup>1</sup> Bei den fünf zum 31.12.2015 nicht besetzten außertariflichen Stellen für wissenschaftliches Personal handelt es sich um zwei W3- und drei W1/W2-Stellen. Die W3-Stelle für die Leitung der Biomedizinischen Forschung wurde zum 1. Februar 2016 besetzt. Die zweite W3-Stelle ist für die Leitung der Datenanalyse vorgesehen. Von den drei W1/W2-Stellen ist eine für die Leitung Neue Materialien vorgesehen, zwei für die Neubesetzung von Nachwuchsgruppenleitungen in den Abteilungen Biomedizinische Forschung und Datenanalyse in gemeinsamen Berufungsverfahren.

<sup>2</sup> Mit Zulagen.

Quelle: ISAS

Stand: 25.4.2016

Stellenbezeichnung	Wertigkeit		Anzahl
Stellen für wissenschaftliches Personal	Außertariflich	W3	2,0
	Höherer Dienst	E 15	2,0
		E 14	8,0
		E 13	20,0
<b>Zwischensumme</b>			<b>32,0</b>
Stellen für nichtwissenschaftliches Personal	Höherer Dienst	E 13	2,0
	Gehobener Dienst	E 9 - E 12	20,0
	Mittlerer Dienst	E 5 - E 8	9,0
<b>Zwischensumme</b>			<b>31,0</b>
<b>I n s g e s a m t</b>			<b>63,0</b>

Quelle: ISAS

Stand: 31.12.2015

Abteilung	Institutionelle Stellen oder VZÄ für Wissen- schaftler/-innen		Drittmitelfinanzierte Beschäf- tigungsverhältnisse (VZÄ) für Wissenschaftler/-innen		Mit wissenschaftlichem Per- sonal besetzte, aus Aushilfs-/ Annex-Titeln finanzierte Beschäftigungsverhältnisse	
	insge- samt	darunter befristet besetzt	insge- samt	darunter befristet besetzt	insge- samt	darunter befristet besetzt
Grenzflächenanalytik	8,60	3,60	3,00	2,00	4,25	4,25
Bioanalytik	11,25	4,00	12,70	10,90	10,80	10,80
Biomedizinische Forschung	6,00	4,00	1,50	1,50	1,80	1,80
Ohne Abteilungszuordnung*	13,15	-	-	-	-	-
<b>Insgesamt</b>	<b>39,00</b>	<b>11,60</b>	<b>17,20</b>	<b>14,40</b>	<b>16,85</b>	<b>16,85</b>

\* Das ISAS erstellt gegenwärtig keinen Ansatz für einzelne Abteilungen (Globalhaushalt). Bei den Angaben zu den einzelnen Abteilungen handelt es sich daher um Angaben zu besetzten Stellen.

Quelle: ISAS

**Anhang 3b: Geplante Stellenverteilung für wissenschaftliches Personal auf die Abteilungen/Arbeitsgruppen der strategischen Erweiterung**

Stand: 25.4.2016

<b>Abteilung/Arbeitsgruppe</b>	<b>Institutionelle Stellen (VZÄ) für Wissenschaftler/-innen</b>	<b>Mit wissenschaftlichem Personal besetzte, aus Aushilfs-/Annex-Titeln zu finanzierende geplante Beschäftigungsverhältnisse</b>
Abteilung Translationale Biospektroskopie	5,00	5,00
Abteilung Biospektroskopie	4,00	4,00
Arbeitsgruppe Molekulare Interaktionen in der Abteilung Bioanalytik	2,00	2,50
Arbeitsgruppe Datenintegration in der Abteilung Datenanalyse, Modellierung und Simulation	2,00	2,00
Arbeitsgruppe Nahfeldspektroskopie in der Abteilung Grenzflächenanalytik	1,00	2,50
<b>Insgesamt</b>	<b>14,00</b>	<b>16,00</b>

Quelle: ISAS

Stand: 31.12.2015

<b>Zugehörigkeit</b>	<b>männlich</b>	<b>weiblich</b>	<b>insgesamt</b>
20 Jahre und mehr	7	-	7
15 bis unter 20 Jahre	1	-	1
10 bis unter 15 Jahre	1	-	1
5 bis unter 10 Jahre	9	1	10
unter 5 Jahre	28	26	54
<b>Personenzahl insgesamt</b>	<b>46</b>	<b>27</b>	<b>73</b>

<b>Alter</b>	<b>männlich</b>	<b>weiblich</b>	<b>insgesamt</b>
60 Jahre und älter	1	-	1
50 bis unter 60 Jahre	9	-	9
40 bis unter 50 Jahre	6	3	9
30 bis unter 40 Jahre	18	14	32
unter 30 Jahre	12	10	22
<b>Personenzahl insgesamt</b>	<b>46</b>	<b>27</b>	<b>73</b>

<b>Hochschulabschluss</b>	<b>männlich</b>	<b>weiblich</b>	<b>insgesamt</b>
Chemie	10	9	19
Physik	15	3	18
Biologie	7	7	14
Biochemie	5	2	7
Biotechnologie	3	2	5
Pharmazie	-	2	2
Sonstige*	6	2	8
<b>Personenzahl insgesamt</b>	<b>46</b>	<b>27</b>	<b>73</b>

\* Chemie-Ingenieurwesen, Chemische Biologie, Informatik, Material Science and Engineering, Meteorologie, Photo-Ingenieurwesen, Physik-Ingenieurwesen, Umweltwissenschaften.

Stand: 31.12.2015

Veröffentlichungsform	Abteilung Grenzflächenanalytik			Abteilung Bioanalytik			Abteilung Biomed. Forschung			Summe pro Jahr			Insgesamt
	2013	2014	2015	2013	2014	2015	2013	2014	2015	2013	2014	2015	
Monographien	1	1	1	-	-	-	-	-	-	1	1	1	3
in referierten Zeitschriften	19	23	18	36	32	31	-	15	25	55	70	74	199
Aufsätze	15	18	12	29	21	22	-	1	9	44	40	43	127
in nichtreferierten Zeitschriften	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	1	1
Beiträge zu Sammelwerken (im Fremdverlag)	2	10	-	3	1	2	-	-	-	5	11	2	18
Zwischensumme wissenschaftliche Publikationen	22	34	20	39	33	33	-	15	25	61	82	78	221
Vorträge	55	36	37	35	69	71	-	13	22	90	118	130	338
darunter: referierte Konferenzbeiträge	23	15	21	33	52	60	-	11	15	56	78	96	230
<b>Insgesamt</b>	<b>77</b>	<b>70</b>	<b>57</b>	<b>74</b>	<b>102</b>	<b>104</b>	<b>-</b>	<b>28</b>	<b>47</b>	<b>151</b>	<b>200</b>	<b>208</b>	<b>559</b>

Quelle: ISAS

Pollard B., Muller E. A., Hinrichs K., Raschke M. B. Vibrational nano-spectroscopic imaging correlating structure with intermolecular coupling and dynamics. *Nature Communications*, 5 (2014) 4587.

Kroning, A., Furchner, A., Aulich, D., Bittrich, E., Rauch, S. Uhlmann, P. Eichhorn, K.-J., Seeber, M., Luzinov, I., Kilbey, M.S., Lokitz, B.S., Minko, S., Hinrichs, K. In-situ infrared ellipsometry for protein adsorption studies on ultra-thin smart polymer brushes in aqueous environment. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 7(23) (2015) 12430-12439.

Vaudel M., Burkhart J.M., Zahedi R.P., Oveland E., Berven F.S., Sickmann A., Martens L., Barsnes H. PeptideShaker enables reanalysis of MS-derived proteomics data sets. *Nat Biotechnol*, 33, (2015) 22-24.

Burkhart J.M., Gambaryan S., Watson S.P., Jurk K., Walter U., Sickmann A., Heemskerk J.W., Zahedi R.P. What can proteomics tell us about platelets? *Circ Res.*, 114, (2014) 1204-1219.

Beck F., Geiger J., Gambaryan S., Veit J., Vaudel M., Nollau P., Kohlbacher O., Martens L., Walter U., Sickmann A., Zahedi R.P. Time-resolved characterization of cAMP/PKA-dependent signaling reveals that platelet inhibition is a concerted process involving multiple signaling pathways. *Blood*, 123 (2014) e1-e10.

| <sup>61</sup> Am ISAS beschäftigte Autorinnen und Autoren sind unterstrichen.

**Anhang 7: Drittmittel-einnahmen des ISAS in den Jahren 2013 bis 2015 nach  
Drittmittelgebern**

Abteilung	Drittmittel- geber	Tsd. Euro (gerundet)			Summe*
		2013	2014	2015	
Bioanalytik	DFG	129	101	171	401
	Bund	210	31	949	1.190
	Land/Länder	292	426	1.005	1.722
	EU	68	166	22	256
	Wirtschaft	-	-	-	-
	Stiftungen	-	441	300	741
<b>Summe*</b>		<b>700</b>	<b>1.165</b>	<b>2.446</b>	<b>4.310</b>
Biomedizinische Forschung	DFG	-	-	119	119
	Bund	-	-	-	-
	Land/Länder	-	145	130	275
	EU	-	-	41	41
	Wirtschaft	-	-	-	-
	Stiftungen	-	-	81	81
<b>Summe*</b>		<b>-</b>	<b>145</b>	<b>371</b>	<b>516</b>
Grenzflächen- analytik	DFG	288	185	95	567
	Bund	-	-	-	-
	Land/Länder	422	171	110	703
	EU	185	-	-	185
	Wirtschaft	98	154	-	252
	Stiftungen	-	-	-	-
<b>Summe*</b>		<b>992</b>	<b>509</b>	<b>205</b>	<b>1.706</b>
<b>ISAS Insgesamt</b>	DFG	<b>417</b>	<b>286</b>	<b>384</b>	<b>1.087</b>
	Bund	<b>210</b>	<b>31</b>	<b>949</b>	<b>1.190</b>
	Land/Länder	<b>714</b>	<b>741</b>	<b>1.245</b>	<b>2.700</b>
	EU	<b>253</b>	<b>166</b>	<b>63</b>	<b>482</b>
	Wirtschaft	<b>98</b>	<b>154</b>	<b>-</b>	<b>252</b>
	Stiftungen	<b>-</b>	<b>441</b>	<b>381</b>	<b>822</b>
<b>Insgesamt*</b>		<b>1.692</b>	<b>1.819</b>	<b>3.022</b>	<b>6.533</b>

\* Rundungsdifferenzen

Quelle: ISAS

- \_ Antworten auf den Fragebogen des Wissenschaftsrates
- \_ Kurzer Abriss der Entwicklungsgeschichte der Einrichtung
- \_ Bericht über Umsetzung der Empfehlungen des Wissenschaftsrates einschließlich Begründungen für nicht umgesetzte Empfehlungen
- \_ Umsetzung der Empfehlungen aus der Evaluierung des Instituts durch die Leibniz-Gemeinschaft im Jahr 2010/2011 einschließlich Verweis auf die vorhergehenden Empfehlungen des Wissenschaftsrates
- \_ Organigramm ISAS e.V. mit aktuell zu besetzenden Abteilungen
- \_ Organigramm ISAS e.V. mit aktuell zu besetzenden Abteilungen und geplanter organisatorischer Eingliederung der strategischen Erweiterung
- \_ Satzung des ISAS e.V.
- \_ Arbeits- und Forschungsprogramm
- \_ Jahresbericht 2014
- \_ Programmbudget 2017
- \_ Stellenplan und Übersicht über drittmittelfinanzierte Beschäftigungsverhältnisse (in Vollzeitäquivalenten [VZÄ]) sowie Doktorandenstellen (Ist-Zahl, Stichtag 31.12.2015)
- \_ Geplanter Aufwuchs an Planstellen für die strategische Erweiterung
- \_ Verteilung der Stellen für wissenschaftliches Personal auf die einzelnen Arbeitsbereiche
- \_ Verteilung der Stellen für wissenschaftliches Personal auf die einzelnen Arbeitsbereiche der beantragten strategischen Erweiterung
- \_ Kennzahlen zum wissenschaftlichen Personal, das in der Forschung und Entwicklung arbeitet, Stichtag 31.12.2015
- \_ Liste der Publikationen der Jahre 2013-2015 der Beschäftigten der Einrichtung
- \_ Liste der Patente/Schutzrechtsanmeldungen der Jahre 2013-2015 und Überblick über die Einnahmen aus Patent- und Lizenzgebühren (gesondert für jede Abteilung)
- \_ Drittmitteleinnahmen der Jahre 2013-2015
- \_ Liste der seit 2013 abgeschlossenen Promotions- und Habilitationsarbeiten (bzw. Berufungen auf eine Juniorprofessur) des wissenschaftlichen Personals
- \_ Liste der nationalen und internationalen Konferenzen, die die Einrichtung zwischen 2013 und 2015 veranstaltet hat
- \_ Liste der internationalen Konferenzen, an denen wissenschaftliches Personal der Einrichtung auf Einladung im Zeitraum von 2013 bis 2015 mit eigenem Vortrag teilgenommen hat
- \_ Liste der bisher durchgeführten gemeinsamen Berufungen von leitenden Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern mit einer Hochschule im Zeitraum von 2013 bis 2015

- \_ Listen der Mitglieder und Satzung des wissenschaftlichen Beirats sowie Protokolle der drei letzten Sitzungen des wissenschaftlichen Beirats
- \_ Listen der Mitglieder aller relevanten Gremien (z. B. Kuratorium, Aufsichtsrat) sowie kurze Beschreibung der Aufgaben und der Arbeitsweise dieser Gremien (sofern dies nicht aus der Satzung/dem Errichtungserlass o. ä. hervorgeht)
- \_ Interne und externe Bewertungsberichte der letzten fünf Jahre: Stellungnahme des Senats der Leibniz-Gemeinschaft zum Leibniz-Institut für Analytische Wissenschaften (ISAS), Dortmund/Berlin vom 16. März 2011 nebst Anlagen
- \_ Liste der Einrichtungen, mit denen die Einrichtung aktuell auf dem Gebiet der Forschung und Entwicklung zusammenarbeitet (Übersicht 7)
- \_ Liste der Forschungsinfrastrukturen, die die Einrichtung selbst betreibt oder an deren Betrieb sie beteiligt ist

---

AT	außertariflich
ATP	Adenosintriphosphat
ATR	<i>Attenuated Total Reflection</i> (abgeschwächte Totalreflexion)
AV	Ausführungsvereinbarung
BAM	Bundesanstalt für Materialforschung
BLB	Bau- und Liegenschaftsbetrieb
BMBF	Bundesministerium für Bildung und Forschung
CARS	<i>Coherent Anti-Stokes Raman Scattering</i>
CD	Circulardichroismus
CVD	<i>cardiovascular disease</i>
de.NBI	<i>German Network for Bioinformatics Infrastructure</i>
DFG	Deutsche Forschungsgemeinschaft
DGMS	Deutsche Gesellschaft für Massenspektrometrie
EMBL	<i>European Molecular Biology Laboratory</i>
ETH	Eidgenössisch Technische Hochschule
EV	Extrazelluläre Vesikel
FH	Fachhochschule
FMP	Forschungsinstitut für Molekulare Pharmakologie
FTIR	Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer
FU	Freie Universität
GG	Grundgesetz
GTP	Guanosintriphosphat
GWK	Gemeinsame Wissenschaftskonferenz
HU	Humboldt-Universität
IMSB	<i>Institute of Molecular Systems Biology</i>
IP	<i>Intellectual Property</i>
IPHT	Leibniz-Institut für Photonische Technologien, Jena

90	ISAS	Leibniz-Institut für Analytische Wissenschaften
	LRC	<i>Leibniz Research Cluster</i>
	MIWF	Ministerium für Innovation, Wissenschaft und Forschung des Landes Nordrhein-Westfalen
	MPC	Medizinisches Proteom Center
	MS	Massenspektrometrie
	NMR	<i>Nuclear Magnetic Resonance</i> (Kernspinresonanz)
	NRW	Nordrhein-Westfalen
	ProDi	Forschungsbau für molekulare Protein-Diagnostik
	PTB	Physikalisch-Technische Bundesanstalt
	PURE	<i>Protein research Unit Ruhr within Europe</i>
	QSDB	<i>quality standard database</i>
	RUB	Ruhr-Universität Bochum
	SALSA	<i>School of Analytical Sciences Adlershof</i>
	SAW	Senatsausschuss Wettbewerb
	SFB	Sonderforschungsbereich
	SWS	Semesterwochenstunde
	TU	Technische Universität
	UAR	Universitätsallianz Ruhr
	UK	<i>United Kingdom</i>
	VZÄ	Vollzeitäquivalent
	WGL	Wissenschaftsgemeinschaft Gottfried Wilhelm Leibniz (Leibniz-Gemeinschaft)
	WISTA	Wissenschafts- und Wirtschaftsstandort Adlershof
	WR	Wissenschaftsrat
	ZIW	Zentrum für integrierte Wirkstoffforschung