

Sehr geehrte Leserin, sehr geehrter Leser,

für den vorliegenden Jahresbericht 2017 des Instituts für Experimentelle Physik (IEP) steht mein herzlicher Dank für die durch alle Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter geleistete Arbeit an erster Stelle. Die gemeinsam erzielten Ergebnisse haben in Qualität und Umfang das beachtliche Niveau der zurückliegenden Jahre weiter verstetigt. Die fachliche Positionierung des IEP wurde durch überblickende Publikationen, Graduierungsarbeiten und aktive Besuche nationaler und internationaler Fachtagungen umfassend sichtbar. Insgesamt wurden wieder zahlreiche Abschlüsse in verschiedenen Stufen der fachlich-wissenschaftlichen Qualifikation erreicht. Den erfolgreichen Weg dahin ebneten ganz maßgeblich die Betreuungsleistungen der wissenschaftlichen Mitarbeiter sowie eine sehr schöne Kultur gegenseitiger Unterstützung, für die ich sehr dankbar bin. Für das außerordentliche Engagement in allen Bereichen der Lehre und Selbstverwaltung bin ich zusätzlich dankbar. Beispielhaft möchte ich die deutliche Untersetzung der Lehrangebote in der Physik-Grundlagenausbildung nennen, womit zusätzliche Unterstützung für ein erfolgreiches Studieren insbesondere in der Startphase gegeben wird, was zugleich der Erlangung wichtiger Ziele der gesamten Universität auch in diesem Feld dient.

Im Juni dieses Jahres lud unser Institut inzwischen zum dritten Mal zur *International Freiberg Conference on Electrochemical Storage Materials* ein, die erneut sehr gute internationale Resonanz erweckte. Auch damit haben wir, zusätzlich zur Vermittlung von Themenschwerpunkten unseres Instituts, zur externen Wahrnehmung der Innovationskraft der gesamten Universität beigetragen. Die Ergebnisse der kreativen und intensiven Arbeit aller Mitarbeiter waren erneut die Grundlage für die Einwerbung unterschiedlicher Anschlussvorhaben sowie auch neuer Projekte, die uns den weiteren Ausbau unserer



Kompetenzen ermöglichen. Dies betrifft zuerst Themen der Energiewandlung und -speicherung sowie zu Funktionsmaterialien für unterschiedlichste Anwendungen. Für unsere Zielsetzung, durch kristallphysikalische und verwandte Methoden Materialeigenschaften mittels vielfältiger struktureller Modifizierungen hervorzubringen, existieren weitere eindrucksvolle Belege, wobei ich die Stärkung des Transfers in Produkte als ein sich im Jahr 2017 besonders entwickelndes Element sehe. Die Fortsetzung unseres langjährigen Engagements an Großforschungseinrichtungen hat uns wieder vorangebracht und es kamen zusätzliche internationale Kontakte bis hin zu persönlicher Aufnahme von Institutsangehörigen an internationalen Lehr- und Forschungseinrichtungen hinzu. Die Gastwissenschaftler, die sich zeitweise bei uns aufhielten, haben uns bereichert. Unsere Arbeitsschwerpunkte liegen zugleich im Fokus der Forschungsprogrammatik des nunmehr sichtbar im Bau befindlichen Zentrums für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung ZeHS, womit dessen fachliche Ausgestaltung bereits in dieser Phase maßgeblich gestützt wird. Das IEP ist damit aktuell die Heimstatt planerischer und auf die Gestaltung der Infrastruktur des ZeHS zielender Arbeiten, womit wir Ressourcen für eine universitätsweite Initiative zur Verfügung stellen.

Allen Partnern des IEP bin ich sehr dankbar und freue mich auf die weitere Zusammenarbeit im Jahr 2018 sowie auf neue Gelegenheiten gemeinsam weitere Perspektiven ins Auge zu fassen. Bis dahin verbleibe ich mit besten Grüßen und einem herzlichen Glückauf.

A handwritten signature in blue ink, reading "Dirk C. Meyer". The signature is fluid and cursive.

Direktor des IEP und des ZeHS

INHALT

Das Institut für Experimentelle Physik	4
Das Institut	5
Die Mitarbeiter des Instituts für Experimentelle Physik	7
Geräte am Institut für Experimentelle Physik	8
Bearbeitete Stoffsysteme	10
Arbeitsgruppen	12
Arbeitsgruppe „Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie“ Prof. Dirk C. Meyer	13
Arbeitsgruppe „Strukturforschung mit XFELs und Synchrotronstrahlung“ Prof. Serguei Molodtsov	18
Arbeitsgruppe „Kristallphysik“ Jun.-Prof. Roman Gumeniuk	26
Methodisches Kompetenzzentrum Elektronikmaterialien	28
Methodisches Kompetenzzentrum Energiematerialien	30
Freiberger Zentrum für Pyroelektrizität	36
Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung	38
Projekte	44
BMBF-Verbundprojekt R2RBattery	45
Silizium-basierte Anodenmaterialien für Sekundärbatterien mit hohen Energiedichten	48
BMBF-Verbundprojekt SyNeSteSia	50
Partnerschaft mit der Sibirischen Regionalabteilung der Russischen Akademie der Wissenschaften	52
ESF-Nachwuchsforschergruppe HALMA	54
BMBF-Verbundprojekt HyProS	56
Nutzung von Abwärme zur Erzeugung von Wasserstoff und Elektrizität mit Pyroelektrika	58
Pyroelektrische Polymere für die Abwärmenutzung	60
Pyro- und dielektrische Eigenschaften von Hochtemperaturpiezoelektrika der Oxoborat-Familie $RX_2Z_2O(BO_3)_3$	62
Resonante Röntgendiffraktion unter optimierter destruktiver Interferenz	64
Stipendien	67
Veranstaltungen	68
Lange Nacht der Wissenschaft und Wirtschaft	69
Dritte Internationale Freiburger Tagung zu Energiespeichermaterialien EStorM 2017	70
Lehre	74
Verbessertes Lehrangebot in den physikalischen Grundlagenkursen fördert den Klausurerfolg	75
Kennenlernen des Lehr- und Forschungsangebots des DESY und des European XFEL in Hamburg	78
Röntgenfluoreszenzanalyse an Objekten der Sammlung für Bergbaukunde	80
Junge Kristallographen	82
Physikalisches Grundpraktikum	83
Angebotene Lehrmodule	84
Publikationen	86
Wissenschaftliche Publikationen	87
Konferenzbeiträge	90
Graduierungen und studentische Arbeiten	94
Impressum	96

DAS INSTITUT FÜR EXPERIMENTELLE PHYSIK



DAS INSTITUT

Das Institut für Experimentelle Physik arbeitet an der Schnittstelle von Kristallographie und Festkörperphysik zur Entwicklung neuer und innovativer Funktionsmaterialien vorwiegend im Bereich der Energiewandlung und -speicherung. Mehrere interdisziplinäre Arbeitsgruppen befassen sich für die entsprechenden Substanzklassen mit der Synthese und der Aufklärung von Struktur-Eigenschaft-Beziehungen. Dazu beteiligt sich das Institut für Experimentelle Physik aktiv am Ausbau und Unterhalt des Zentralen Reinraumlabor der TU Bergakademie Freiberg und betreibt die Strukturaufklärung mittels Röntgenstrahlung mit besonderem methodischen Anspruch. Unter Leitung des Institutsdirektors Dirk C. Meyer befindet sich im Moment das Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung ZeHS im Bau. Darüber hinaus ist das Institut in ein aktives Kooperationsumfeld eingebunden und hat enge Verbindungen zu internationalen Großforschungseinrichtungen (in Deutschland sind dies u. a. European XFEL, DESY und BESSY).

In der Geschichte der TU Bergakademie Freiberg spielte die Physik als solche zunächst eine untergeordnete Rolle. In den ersten Jahrzehnten wurde die physikalische Ausbildung von Mathematikern, Chemikern und Kristallographen mit abgedeckt. Erst im Jahre 1826 wurde eine

von der Mathematik getrennte, ordentliche Professur für Physik eingerichtet, auf die Ferdinand Reich berufen wurde. Berühmt wurde er durch seine Fallversuche im Drei-Brüder-Schacht bei Brand-Erbisdorf und, zusammen mit Hieronymus Theodor Richter, durch die Entdeckung des chemischen Elements Indium. Außerdem sorgte er durch Beschaffung einer Kopie des Urmeters aus Paris für die Einführung des metrischen Systems in Sachsen.

Heimstätte der Physik in Freiberg war zunächst das Gebäude in der Silbermannstraße. Im Jahre 1956 wurde ein zweites physikalisches Institut eingerichtet, das mit den Vorlesungen zur Experimentalphysik und den seinerzeit „modernen“ Fachrichtungen wie Atom-, Kern- und Festkörperphysik betraut wurde. Es setzte damit die Tradition des im Jahr 1948 aufgelösten Radiuminstituts fort. Zusammen mit dem im Jahr 1940 geschaffenen Institut für Geophysik und dem im Jahr 1951 gegründeten Institut für Theoretische Physik gab es seitdem vier physikalische Institute an der Bergakademie. Im Jahr 2005 bezogen schließlich die drei in der Fakultät für Chemie und Physik angesiedelten Institute für Angewandte, Experimentelle und Theoretische Physik gemeinsam den sanierten Gellertbau in der Leipziger Straße 23 (im Bild der Blick von der Straße zum Haupteingang).

Institut für Experimentelle Physik

Anschrift

Institut für Experimentelle Physik
TU Bergakademie Freiberg
Leipziger Straße 23
09599 Freiberg

Institutsdirektor

Prof. Dr. Dirk C. Meyer
Tel.: 03731 39 2860
dirk-carl.meyer@physik.tu-freiberg.de

Geschäftsführung

Dr. Claudia Funke
Tel.: 03731 39 2084
claudia.funke@physik.tu-freiberg.de

Sekretariat

Stefanie Schmidt
Tel.: 03731 39 2892
Fax: 03731 39 4314
schmidt.stefanie@physik.tu-freiberg.de

Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie

Prof. Dr. Dirk C. Meyer
Tel.: 03731 39 2860
dirk-carl.meyer@physik.tu-freiberg.de

Strukturforschung mit XFELs und Synchrotronstrahlung

Prof. Dr. Serguei Molodtsov
Tel.: 03731 39 2892
serguei.molodtsov@physik.tu-freiberg.de

Juniorprofessor Kristallphysik

Jun.-Prof. Dr. Roman Gumeniuk
Tel.: 03731 39 4268
roman.gumeniuk@physik.tu-freiberg.de

Kompetenzzentren

Kompetenzzentrum

Elektronikmaterialien

Dr. Barbara Abendroth
Tel.: 03731 39 2773
barbara.abendroth@physik.tu-freiberg.de

Kompetenzzentrum

Energiematerialien

Dr. Tilmann Leisegang
Tel.: 03731 419 6169
tilmann.leisegang@physik.tu-freiberg.de

Freiberger Zentrum für

Pyroelektrizität

Dr. Hartmut Stöcker
Tel.: 03731 39 2773
hartmut.stoecker@physik.tu-freiberg.de

Zentrum für effiziente

Hochtemperatur-Stoffwandlung

Prof. Dr. Dirk C. Meyer
Tel.: 03731 39 2860
dirk-carl.meyer@physik.tu-freiberg.de

Infrastruktur

Chemielabore

Uta Fischer
Tel.: 03731 39 3228
uta.fischer@physik.tu-freiberg.de

Elektronische Werkstatt

Patrick Zill
Tel.: 03731 39 2646
patrick.zill@physik.tu-freiberg.de

Mechanische Werkstatt

Christoph Irmer
Tel.: 03731 39 2246
christoph.imer@physik.tu-freiberg.de

Physikalisches Praktikum

Dr. Hartmut Bergelt
Tel.: 03731 39 2861
hartmut.bergelt@physik.tu-freiberg.de

Gerätepools

Mikroskopie-Pool

Dr. Claudia Funke
Tel.: 03731 39 2084
claudia.funke@physik.tu-freiberg.de

Ofen-Pool

Dr. Hartmut Stöcker
Tel.: 03731 39 2773
hartmut.stoecker@physik.tu-freiberg.de

Spektroskopie-Pool

Dr. Günter Gärtner
Tel.: 03731 39 4087
gaertner@physik.tu-freiberg.de

Vorlesungstechnik

Dipl.-Ing. Dirk Prsa
Tel.: 03731 39 2195
dirk.prsa@physik.tu-freiberg.de



DIE MITARBEITER DES INSTITUTS FÜR EXPERIMENTELLE PHYSIK

Ein Teil der Mitarbeiter des IEP (von links oben nach rechts unten):

Max Stöber, Patrick Zill, Sandra Jankus, Christian Ludt, Dr. Matthias Zschornak, Thomas Köhler, Christian Radach, Björn Fritze, Humeres Gormaz, Esteban Zuniga Puelles, Dr. Erik Mehner,
 Dr. Barbara Abendroth, Dr. Hartmut Stöcker, Dr. Denise Kreißner-Kiel, Tatjana Suworow, Uta Fischer, Valentin Garbe, Dr. Friedrich Roth, Prof. Dr. Dirk C. Meyer, Falk Meutzner, Doreen Eger Passos, Diana Karsch, Dr. Günter Gärtner, Melanie Nentwich,
 Sven Jachalke, Carlos Gallego, Dr. Anastasia Vyalikh, Stefanie Schlesinger, Marco Herrmann, Dr. Wolfram Münchgesang, Dr. Claudia Funke, Dr. Mateo de Vivanco, Dr. Juliane Hanzig.



GERÄTE AM INSTITUT FÜR EXPERIMENTELLE PHYSIK

Beschichtung

- Edwards Auto 306, thermischer Verdampfer
- PVD Products Titan, Magnetronsputterquelle
- Savannah S100, *Atomic Layer Deposition*
- Savannah S200, *Atomic Layer Deposition*
- Senntech, Ätzcluster
- Quorum Technologies SC7620, *Mini Sputter Coater*

Elektrische Messungen

- BioLogic, Batterietester
- CAIC, *Current Analysis by Inductive Coils*
- Gamry Interface 5000, Potentiostat
- Gamry Reference 600, Potentiostat
- Hall-Messplatz mit Kryostat
- Keithley 4200, Vierspitzenmessplatz
- Neware BTS CT-4008, Batteriezyklierer
- Oriel SolIA, Sonnensimulator
- Polarisierungsaufbau bis 30 kV Spannung
- Pyroelektrischer Messplatz mit HV-Kammer
- Pyroelektrischer Messplatz mit UHV-Kammer
- Sinton WCT 120, Lebensdauermessung
- Vierpunkt-Messung im REM/FIB inkl. EBIC

Probenbehandlung

- Glovebox MBraun LABmaster dp
- Glovebox Sylatech
- Struers Accutom-5, Präparationssäge
- Struers RotoPol-35, Poliermaschine
- Struers Secotom-10, Präparationssäge
- Zwicki 2.5, Zugmaschine

Mikroskopie

- FEI Helios NanoLab 600i, Rasterelektronenmikroskop mit *Focussed Ion Beam*
- Hochgeschwindigkeitskamera pco 1200
- Jeol JSM 6400, Rasterelektronenmikroskop
- Leitz Ergolux AMC, Lichtmikroskop
- PIV-System, *Particle Image Velocimetry*
- Thermographiesystem VarioCAM basic
- Zeiss Axiotech, Lichtmikroskop
- Zeiss Jenapol, Polarisationsmikroskop

Röntgendiffraktometrie

- Bruker D8 Advance, Dünnschichtdiffraktometer
- Bruker D8 Advance, Pulverdiffraktometer

- Bruker D8 Discover, Hochauflösungsdiffraktometer mit Hochtemperaturkammer
- Bruker D8 Quest, Einkristalldiffraktometer mit Tieftemperaturzusatz
- Philips X'Pert PW1830, Dünnschichtgerät
- Seifert 3003TT, Pulverdiffraktometer
- Seifert HZG4, Pulverdiffraktometer

Spektroskopie

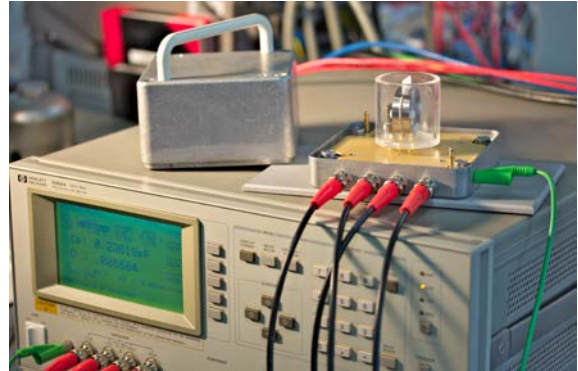
- Bruker IFS 113v, FTIR-Spektrometer
- Bruker SI Titan, Handspektrometer
- Bruker S8 Tiger, wellenlängendispersives Röntgenfluoreszenzspektrometer
- Bruker Tensor 27, FTIR-Spektrometer
- Bruker Tensor 37, FTIR-Spektrometer
- EDX und 3D-EDX am FIB/REM
- Hiden HPR20, Massenspektrometer
- J. A. Woollam M2000 DI, Ellipsometer
- MiniScope MS 5000, ESR-Spektrometer
- Specord S600, UV/Vis-Spektrometer
- Spektroskopie-Messplatz mit InGaAs-Kamera
- Thermo Fisher Escalab 250Xi, Röntgenphotoelektronenspektrometer

Temperaturbehandlung

- Carbolite, Rohrofen bis 1200 °C
- Gero, Zehnzonenofen bis 1200 °C
- Heraeus, Rohrofen bis 1100 °C
- Leco FRH-80/200/1300, Rohrofen bis 1300 °C
- Xerion RO, Rohrofen bis 1100 °C
- Xerion Xtube, Dreizonenofen bis 1200 °C

Topographie

- DI Dimension 3000, Rasterkraftmikroskop
- Olympus Lext, Konfokalmikroskop
- Tencor, mechanisches Profilometer
- UBM Microfocus Expert, Lasertopograph
- Veeco Multimode V, Rasterkraftmikroskop



Geöffnete Substitutionsmesszelle mit LCR-Meter



Demonstrator für die pyroelektrische Wasserstofferzeugung



BEARBEITETE STOFFSYSTEME

Verbindungshalbleiter

- oxidische Halbleiter (z. B. TiO_2 , SrTiO_3) in Form von Einkristallen oder dünnen Schichten
- Oxide in Perowskitstruktur und verwandten Strukturtypen, z. B. $\text{SrO}(\text{SrTiO}_3)_n$
- modulierte Strukturen, z. B. Ho_2PdSi_3
- oxidische Pyroelektrika, z. B. BaTiO_3 , LiNbO_3 und LiTaO_3
- pyroelektrische Polymere, z. B. PVDF
- Galliumnitrid (GaN)

Batteriematerialien

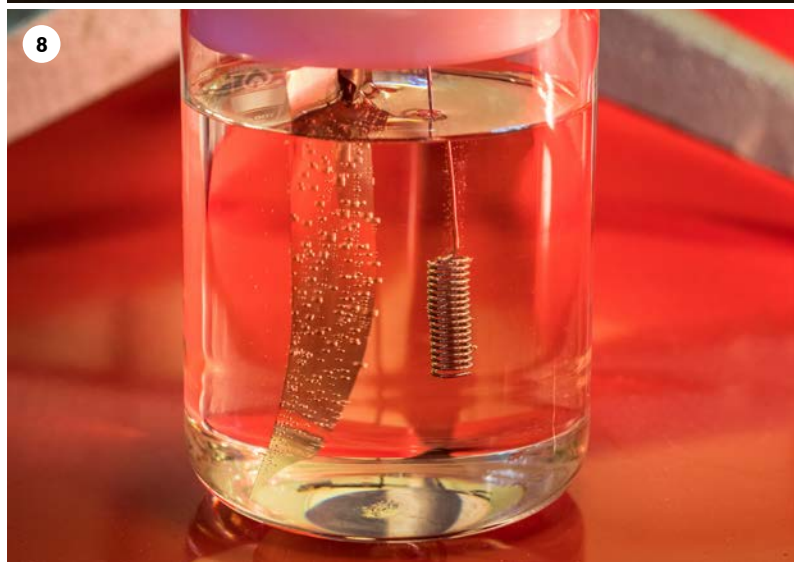
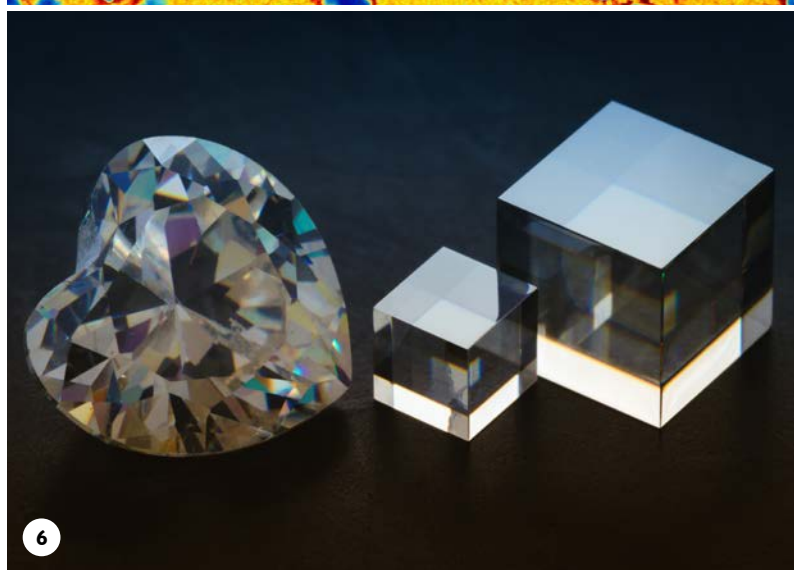
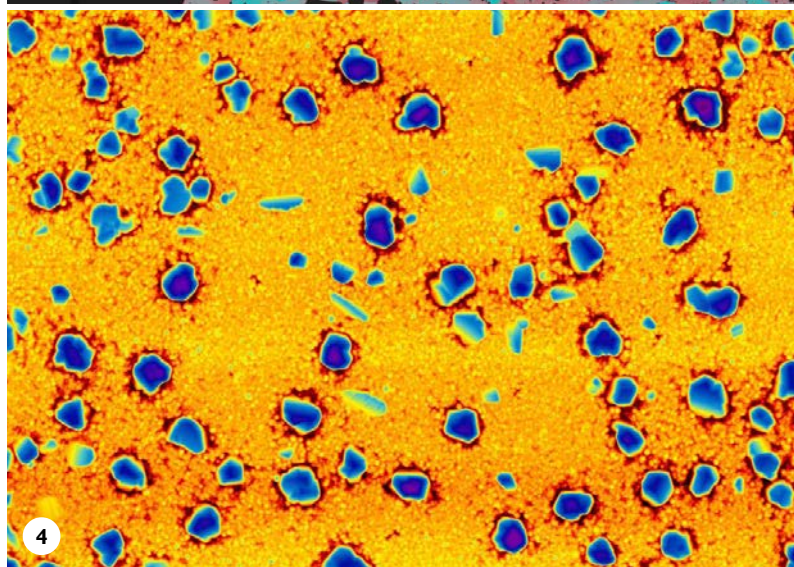
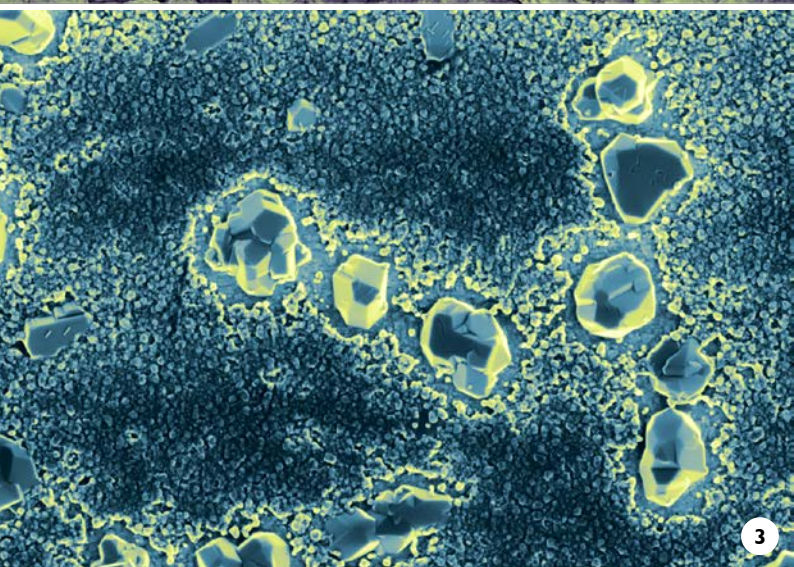
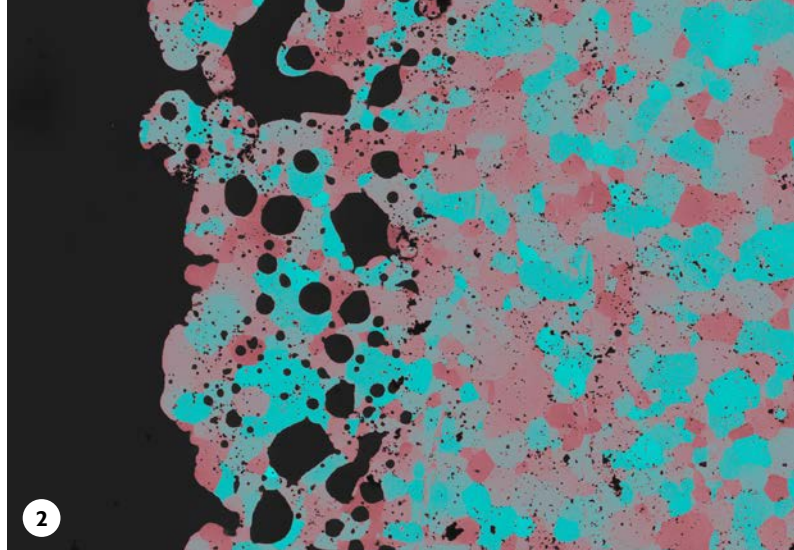
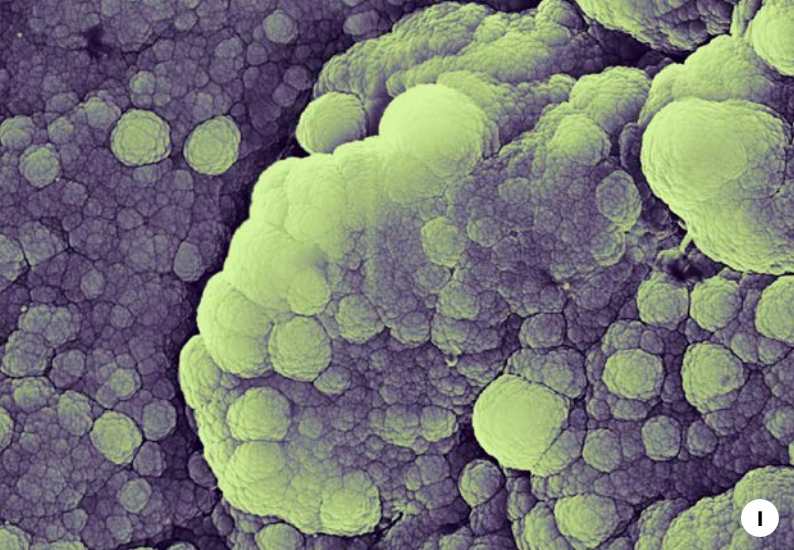
- Kathodenmaterialien: Al-, Li- und Na-basierte Systeme, u. a. Kohlenstoffnanoröhren
- Festelektrolyte: Al-, Li- und Na-Ionenleiter, Na-Y-Si-O-System, β -Aluminat, LAGP
- Anodenmaterialien: Al-, Li- und Na-Folien, Si-Verbindungen, Graphit

Kristallphysik

- ferromagnetische Legierungen
- Graphen und Graphenoxid
- intermetallische Phasen aus Übergangsmetallen und Seltenerdmetallen
- metallische binäre und ternäre Chalkogenide der Übergangsmetalle
- Molekulkristalle, Mott-Isolatoren
- Remeika-Phasen
- supraleitende Sulphide

Bilder auf der rechten Seite:

- 1 Fraktale Strukturen aus Cu-Si-O
- 2 Rand einer Platin-Sensor-Schicht
- 3 Rutil-Ausscheidung aus SrTiO_3 -Schicht auf SrTiO_3 -Einkristall
- 4 Rutil-Ausscheidung aus SrTiO_3 -Schicht auf SrTiO_3 -Einkristall
- 5 Verschiedene pyroelektrische Materialien
- 6 Verschieden zugeschnittene SrTiO_3 -Einkristalle
- 7 Frolyt-Batteriezelle mit Hydrat-Elektrolyt
- 8 Anodisches Oxidieren einer Ti-Folie



ARBEITSGRUPPEN



ARBEITSGRUPPE „VERBINDUNGSHALBLEITER UND FESTKÖRPERSPEKTROSKOPIE“ PROF. DIRK C. MEYER

Die Zielsetzung der Arbeitsgruppe „Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie“ folgt einem der wesentlichen Forschungsschwerpunkte der TU Bergakademie Freiberg und wurde hinsichtlich der zugeordneten Professur mit entsprechender thematischer Grundverankerung im Jahr 2009 durch Prof. Dirk C. Meyer besetzt. Für die Arbeit mit dem Schwerpunkt „Halbleitermaterialien“ steht als besondere Einheit seit dem Jahr 2008 das Zentrale Reinraumlabor der Bergakademie zur Verfügung. Es bietet verschiedenen Arbeitsgruppen aus den Bereichen Physik, Elektronik- und Sensormaterialien, Chemie und Werkstoffwissenschaft eine hervorragende Infrastruktur. Der seit der Übernahme der Professur vorangetriebene Ausbau der Infrastruktur des Instituts für Experimentelle Physik hinsichtlich röntgenbasierter Analytik sowie der Elektronenmikroskopie erlaubt eine umfassende Charakterisierung der im Reinraumlabor prozessierten Funktionselemente. Die Arbeitsgruppe „Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie“ ist aktuell vor allem durch ihre Forschung auf dem Gebiet der kristallphysikalischen

Analyse und Modifizierung von Materialien und deren Eigenschaften, insbesondere von Kopplungsphänomenen für die Energie- und Stoffwandlung, sichtbar.

Die Arbeitsgruppe von Prof. Dirk C. Meyer hat zurückliegend Halbleiter und Schichtsysteme für unterschiedliche Anwendungen mit strukturellem Akzent sowie hinsichtlich verschiedener Herstellungsprozesse bearbeitet. Zur Spektroskopie konnte auch umfassend methodisch – hier insbesondere unter Nutzung von Röntgenstrahlung – beigetragen werden. In der jüngeren Zeit haben oxidische Halbleiter sowie kristalline Materialien mit elektrisch polarer Achse einen besonderen Stellenwert der Arbeiten erlangt, wobei sich der Bogen von der Herstellung über die Modifizierung und Charakterisierung bis hin zu den Anwendungen erstreckt. Bezüglich der Synthese, Charakterisierung und Modellierung bestehen intensive Kooperationen, u.a. mit mehreren Fraunhofer-Instituten in Sachsen, dem Kurt-Schwabe-Institut Meinsberg und dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf und international beispielsweise mit dem

Samara Centre for Theoretical Materials Science. In besonderem Umfang wird die Arbeitsgruppe für die Charakterisierung der Strukturbildung auch zukünftig die Synchrotronstrahlung an Großforschungszentren nutzen, wozu aus der zurückliegenden Zeit umfangreiche Erfahrungen existieren. Methodisch liegt der Schwerpunkt dabei auf der Entwicklung einer elementspezifischen und atomlagensensitiven Variante der Röntgenspektroskopie.

Herkunft der Arbeitsgruppe

Prof. Dirk C. Meyer ist kristallographisch orientierter Festkörperphysiker. In seiner Promotion beschäftigte er sich mit der Struktur und den Anwendungen von Halbleitern und Nanometerschichtsystemen. Die Anwendungsgebiete lagen dabei vorwiegend in der Röntgenoptik und Sensorik sowie der Datenspeicherung. Enge Kooperationen – insbesondere im Rahmen des DFG-Sonderforschungsbereiches 422 „Strukturbildung und Eigenschaften in Grenzschichten“, des DFG-Sonderforschungsbereiches 463 „Seltenerd-Übergangsmetallverbindungen: Struktur, Magnetismus und Transport“ sowie der DFG-Forscherguppe 520 „Ferroische Funktionselemente: Physikalische Grundlagen und Konzepte“ – kennzeichneten seine Arbeit und das Bestreben, jeweils entlang einer geschlossenen Kette, ausgehend von der Synthese über die Kristallstruktur und Grenzflächenmorphologie bis hin zu den Eigenschaften und Anwendungen zu wirken.

Begleitend hat Prof. Dirk C. Meyer zur methodischen Entwicklung im Bereich der Röntgenanalysemethoden, hier insbesondere mit frühen Arbeiten zur quantitativen Ausarbeitung der Methode der *Diffraction anomalous fine structure* (DAFS) und der Kombination von *X-ray absorption fine structure* (XAFS) und *X-ray standing waves* (XSW) in einem Experiment, beigetragen. Diese Arbeiten wurden durch die Verleihung des Max-von-Laue-Preises der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie im Jahr 2004 gewürdigt. Hinzu kamen Beiträge zur Instrumentierung von Synchrotronexperimenten, wie die Entwicklung und der Bau spezifischer Halbleiterdetektoren und Arbeiten für die digitale Signalprozessierung zur Erweiterung des Dynamikbereichs dieser Systeme.

Während der Zeit als Leiter einer selbstständigen Nachwuchsgruppe und seiner Juniorprofessur für „Nanostrukturphysik“ baute Prof. Dirk C. Meyer an der TU



Dresden eine Gruppe von insgesamt über 15 Diplomanden, Doktoranden und wissenschaftlichen Mitarbeitern auf. In den Bereichen Lehre und Forschung widmete er sich u. a. der Kristallographie und den Röntgenmethoden mit besonderer Intensität. Neben der Fortführung der methodischen Arbeiten unter Nutzung von Synchrotronstrahlung lag ein besonderer Arbeitsschwerpunkt auf Kopplungsphänomenen zwischen elektromagnetischen Feldern und der Kristallstruktur sowie deren Anwendungen für Funktionselemente. Aus diesen Vorarbeiten leitet sich auch der Zugang zu den heute im Fokus stehenden Fragestellungen ab.

Nach einjähriger Wahrnehmung einer Vertretungsprofessur für „Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie“ am Institut für Experimentelle Physik folgte Prof. Dirk C. Meyer im Jahr 2009 dem Ruf zur Übernahme dieser Professur. Thematisch stehen seither oxidische Verbindungshalbleiter bzw. Dielektrika, die häufig strukturelle Verwandtschaft zur Perowskitstruktur aufweisen, im Fokus, wobei die in dieser Materialklasse auftretenden Kopplungsphänomene besonders gewürdigt werden. Durch Einwerbung von Drittmitteln wurde die Infrastruktur der Arbeitsgruppe und des Instituts insbesondere im Hinblick auf die Synthese und Charakterisierung dünner Schichten stark ausgebaut. Als neue Methoden konnten die ALD und die Plasmaätzung im Zentralen Reinraumlabor etabliert werden. Im Rahmen eines Großgeräteantrages wurden die Charakterisierungsmöglichkeiten um ein kombiniertes Rasterelektronenmikroskop mit Ionenstrahl (REM/FIB) erweitert.

Seit dem Jahr 2011 ist Prof. Dirk C. Meyer gleichzeitig Direktor des Instituts für Experimentelle Physik, seit 2016 auch Direktor des im Aufbau befindlichen Zentrums für effiziente Hochtemperaturstoffwandlung (ZeHS).

Forschungsschwerpunkte

Pyroelektrische Funktionsmaterialien

Pyroelektrizität beschreibt das Verhalten bestimmter Materialien, auf eine Temperaturvariation mit einer Änderung

der Oberflächenladung zu reagieren. Diese Eigenschaft, die bisher vorwiegend in der Sensorik Anwendung findet, wird innerhalb der Arbeitsgruppe hinsichtlich verschiedener neuartiger technischer Lösungen untersucht. Die bei Temperaturänderung auftretenden elektrischen Felder werden dabei nicht als Mess-, sondern als Prozessgröße erfasst.

Nach Schätzungen unterschiedlicher Energieagenturen und Institutionen gehen heutzutage weltweit mehr als 72 % des für die technische Nutzung gewandelten Energieaufkommens in Form von Abwärme verloren. Die anfallende Abwärme liegt dabei insbesondere im Nieder-temperaturbereich und damit als ungenutzte thermische Energie vor. Im Fokus der Arbeiten stehen die wissenschaftliche Untersuchung, Entwicklung und technische Erprobung innovativer Ansätze zur Nutzung von Nieder-temperaturabwärme für Energie- und Stoffwandlungsprozesse durch Anwendung neuartiger pyroelektrischer Funktionsmaterialien.

Die Herausforderung bei der Charakterisierung pyroelektrischer Materialien besteht in der Bereitstellung hoher Feldstärken und der gleichzeitigen Vermeidung von Durchschlägen sowie der Separation von pyroelektrischen und thermisch induzierten Beiträgen zum gemessenen Gesamtstrom. Der dafür im Institut entwickelte Präzisionsmessaufbau erlaubt die temperaturabhängige Charakterisierung von Materialien unter hohen Feldstärken. Er wird für alle Arten pyroelektrischer Materialien eingesetzt: Oxidmaterialien und Polymere in Form von Kristallen, Pulvern oder Schichten.

Neuartige Energiespeichermaterialien

Elektrochemische Energiespeicher sind, neben ihrer Bedeutung für die Elektromobilität, insbesondere für den Ausbau dezentraler stationärer Anwendungen im Zusammenhang mit regenerativer Stromerzeugung unerlässlich. Dies betrifft neben der Gewährleistung der Netzstabilität besonders den Ausbau regional autarker Energieversorgung. Es ist daher ein übergeordnetes Ziel der Arbeitsgruppe, einen Beitrag zur verstärkten Nutzung von erneuerbaren Energieträgern zu leisten sowie eine Erweiterung und Verbesserung des grundlegenden Verständnisses zur thermischen, elektrischen und stofflichen Speicherung von Energie zu erreichen.

Ziel des im September 2016 gestarteten BMBF-Verbundprojekts „R2RBattery“ ist es, ein Post-Lithium-

Energiespeichersystem auf Basis hochvalenter Ionen in Kooperation mit lokalen Industrie- und Forschungspartnern zu entwickeln und maßgeschneiderte Lösungen für deren potentielle großtechnische Produktion zu erarbeiten. Innerhalb der nächsten drei Jahre werden insgesamt vier Verbundpartner (Kurt-Schwabe-Institut für Mess- und Sensortechnik Meinsberg, Fraunhofer-Institut für Organische Elektronik, Elektronenstrahl- und Plasmatechnik Dresden, Vowalon GmbH Treuen) unter Leitung der TU Bergakademie Freiberg (Koordinator: Prof. Dr. Dirk C. Meyer, Projektmanager: Dr. Tilmann Leisegang) an der Umsetzung dieser neuen Post-Lithium-Ansätze für die elektrochemische Energiespeicherung arbeiten.

Als Teil des deutsch-russischen Ioffe-Röntgen-Instituts treibt die Arbeitsgruppe auf methodischer Seite die Entwicklung der Energiespeichertechnologien von morgen voran. Im wissenschaftlichen Fokus des von ihr koordinierten Verbundprojekts „SYNESTESIA – Synchrotron- und Neutronen-basierte Untersuchungen zur Energiespeicherung“ liegt die Entwicklung neuartiger Charakterisierungsmethoden, die auf dem Einsatz von Großgeräten wie Neutronenquellen und Elektronenspeicherringen basieren. Vorrangiges Ziel ist die Aufklärung chemischer Prozesse und von Strukturveränderungen an Grenzflächen während elektrochemischer Vorgänge. Dafür werden elektrochemische Zellen entwickelt, welche die Bestimmung der Strukturen an der Grenzfläche von metastabilen und reaktiven Phasen ermöglichen. Diese Zellen werden dann unter anderem für die Charakterisierung mittels Nuklear-Magnetresonanz-Spektroskopie, für die Röntgenanalytik und an beschleunigerbasierten Photonenquellen sowie Neutronenquellen eingesetzt, um die entscheidenden Prozesse in Brennstoffzellen und Batterien zu untersuchen. Der Einsatz der komplementären Methoden liefert ein tieferes Verständnis der Prozesse an elektrochemischen Grenzflächen, da spezifische Informationen über deren Struktur, die Ionenmobilität und den elektronischen Zustand erhalten werden.

Strukturelle Modifizierung von Dielektrika

In der Arbeitsgruppe „Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie“ wird intensiv an Oxiden in Perowskitstruktur und damit verwandten Strukturtypen gearbeitet. Generell besteht für diese Systeme eine ausgesprochen starke Korrelation zwischen dem kristallinen Phasenbestand, den Realstrukturparametern,



Außenstelle der Arbeitsgruppe im Gründer- und Innovationszentrum Freiberg (GIZeF): Schild am Eingang (links) und Ansicht des Hauptgebäudes (rechts)

der Grenzflächenstruktur und den elektronischen Eigenschaften. Hierbei ist durch Kontrolle der Defekte in unterschiedlichen Dimensionen ein direktes Design der elektronischen Eigenschaften möglich. Diese können bei gezielter Steuerung durch externe Felder auch schaltbar verändert werden. Für die Oxide haben Sauerstoffleerstellen als intrinsische Dotierzentren eine große Bedeutung. Infolge ihrer Ladung können sie im umgebenden Kristallgitter durch Anlegen elektrischer Felder kontrolliert bewegt werden. Diese Umverteilung kann sogar zu Phasenumwandlungen führen, die einen Übergang von einer dielektrischen in eine pyroelektrische Phase darstellen.

Weiterentwicklung von Röntgenmethoden

Die Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Materie umfasst unter anderem die Photoabsorption. Ist die Energie der Röntgenstrahlung größer als die element- und schalenspezifische Ionisierungsenergie eines gebundenen Elektrons, wird ein Photon absorbiert und das Elektron aus dem Atomverband herausgelöst. Die an diesen spezifischen Energien sprunghaft ansteigende Absorption wird als Absorptionskante bezeichnet. Röntgenographische Messungen im Bereich der Absorptionskanten der zu untersuchenden Verbindung werden als „resonante“ Streuveruche bezeichnet, falls auf den kausal verknüpften Kanal der Streuung gezielt wird. Diese Methoden können meist nur an einem Synchrotron angewendet werden, da dort die Energie der Photonen aus einem weiten Bereich gewählt werden kann.

Eine Besonderheit resonanter Röntgenstreuung ist die verstärkte Abhängigkeit der Intensität eines Bragg-Reflexes von der Polarisation der Röntgenstrahlung. Ändert

man die Polarisation der Photonen bezüglich der Probe – z. B. durch Rotation – erhält man, abhängig von der Symmetrie des resonanten Atoms, charakteristische sinusförmige Oszillationen der Intensität. Diese Anisotropie kann in manchen Fällen dazu genutzt werden, Phaseninformationen über die Atomstreuamplitude zu erhalten.

Eine Konsequenz der Anisotropie in resonanter Streuung (AAS) ist, dass die betreffenden Atome nicht mehr als kugelsymmetrisch angesehen werden können, wie es gewöhnlich in der Röntgenstreuung und Kristallographie geschieht. Dies hat insbesondere zur Folge, dass kristallographische Auslöschungsregeln nicht mehr greifen, wenn sie auf Translationssymmetrien beruhen, die mit einer Rotation kombiniert wurden, wie es bei den Symmetrielementen Schraubenachse und Gleitspiegelebene der Fall ist. Die so im resonanten Fall zusätzlich auftretenden Reflexe werden auch verbotene Reflexe genannt und zeigen eine starke Energieabhängigkeit.

Der methodische Schwerpunkt auf der Weiterentwicklung dieser elementspezifischen und atomlagensensitiven Variante der Röntgenspektroskopie wird in der Arbeitsgruppe insbesondere für die Charakterisierung struktureller Defekte vorangetrieben. Die im Rahmen eines BMBF-Verbundvorhabens am Synchrotron Petra III des DESY in Hamburg eingerichtete *Chemical Crystallography Beamline* wird 2018 in Betrieb gehen.

Außenstelle GIZeF

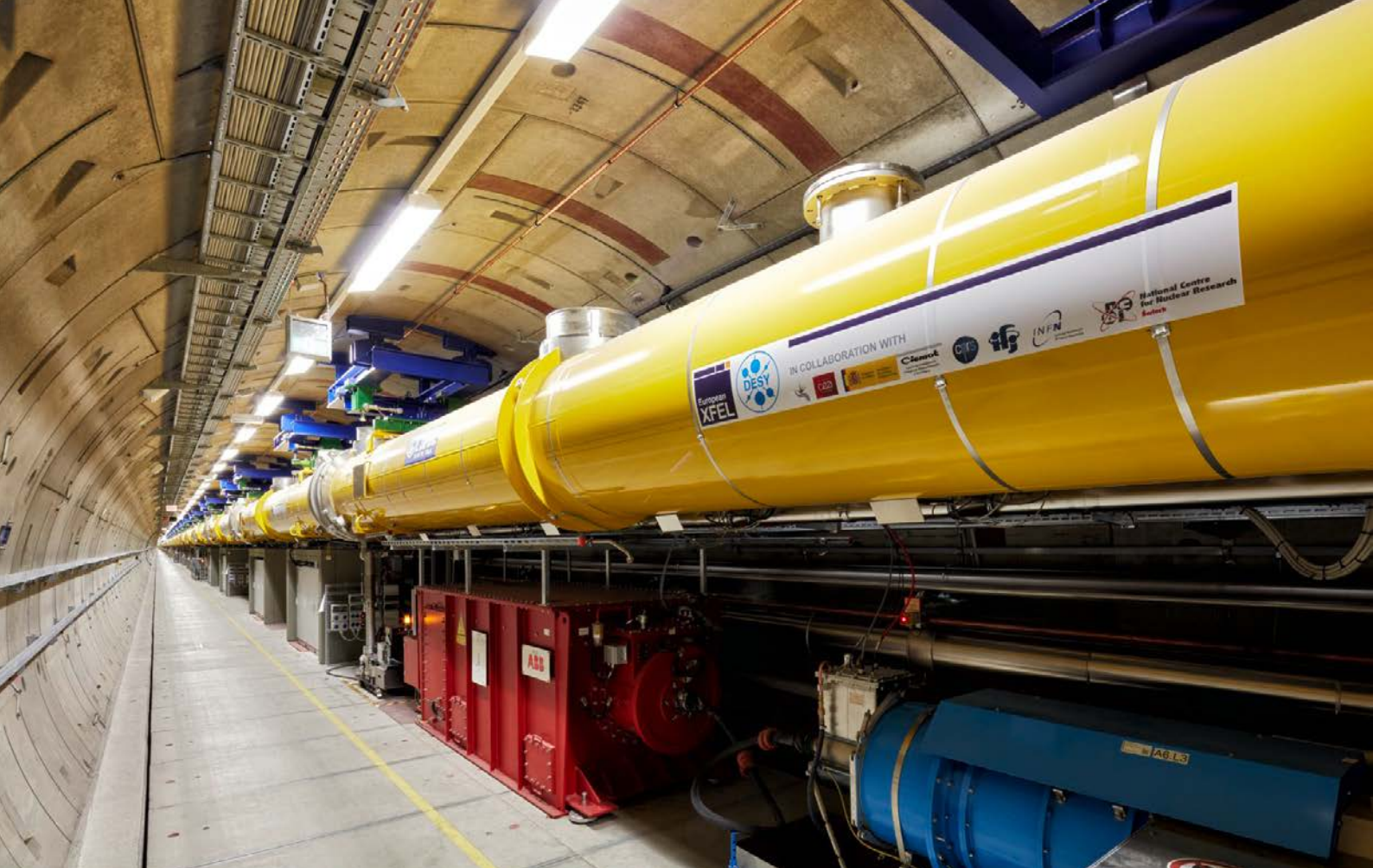
Seit dem Jahr 2012 besteht für die Arbeitsgruppe des Instituts für Experimentelle Physik eine Außenstelle im

Gründer- und Innovationszentrum Freiberg (GIZeF). Die Anmietung eines Gebäudeflügels erfolgt zur räumlichen und logistischen Konzentration einschlägig arbeitender Wissenschaftler sowie zur gemeinsamen Diskussion aktueller Themen, Forschungsaktivitäten und Forschungsergebnisse – auch zusammen mit externen Spezialisten und Wissenschaftlern aus Forschung und Industrie. Neben dem Erfahrungsaustausch mit weiteren Forschungsinstitutionen stehen auch aktuelle Probleme und Bedarfe regionaler und überregionaler Unternehmen im Zentrum der Diskussionen.

Die Aktivitäten am GIZeF konzentrieren sich auf die Untersuchung von Energie- und Stoffwandlungsphänomenen, die Systematisierung bestehenden Wissens, die Ableitung neuer Konzepte und schließlich die Ausarbeitung von Strategien für deren Realisierung. Dazu werden mittel- bis langfristig angelegte nationale und internationale Vorhaben geplant. So sind zurückliegend verschiedene Forschungsvorhaben initiiert, Patente verfasst, Labormuster entwickelt und Demonstratoren aufgebaut worden.

Ferner werden Aktivitäten zur Kommunikation der Forschungsergebnisse und Öffentlichkeitsarbeit organisiert, so u. a. die *International Freiberg Conference on Electrochemical Storage Materials* (EStorM), die zum dritten Mal 2017 stattfand und den Ausbau der nationalen und internationalen Vernetzung unterstützt. Herauszuheben sind die intensiven, nunmehr langjährigen Kooperationen mit dem *Samara Center for Theoretical Materials Science* (Direktor Prof. Vladislav A. Blatov) der *Samara State Technical University* (Russland) und der Arbeitsgruppe Prof. Doron Aurbach der *Bar-Ilan University*, Ramat Gan (Israel).

Insgesamt sind in der Außenstelle Arbeitsplätze für 15 Mitarbeiter und ein Beratungsraum vorhanden. Zudem besteht eine direkte Anbindung an den zentralen Rechencluster der TU Bergakademie Freiberg, wobei auch eigene Rechenkapazitäten geschaffen wurden. Diese werden durch Dr. Matthias Zschornak betreut. Wissenschaftlich begleitet werden die Arbeiten der Außenstelle durch Dr. Tilmann Leisegang.



ARBEITSGRUPPE „STRUKTURFORSCHUNG MIT XFELS UND SYNCHROTRONSTRAHLUNG“ PROF. SERGUEI MOLODTSOV

Die Arbeitsgruppe um Prof. Serguei Molodtsov, der die Position eines wissenschaftlichen Direktors am *European X-ray Free Electron Laser (XFEL)* in Hamburg (www.xfel.eu) innehat, beschäftigt sich mit Materialwissenschaft sowohl an der TU Bergakademie Freiberg als auch am *European XFEL* (siehe Abbildung oben). In beiden Fällen wird die Ausbildung der Studenten als wesentlicher Teil der Aktivitäten erachtet. Neben der unmittelbaren Einbindung der Studenten in die Forschung wurde die Spezialvorlesungsreihe „Materialforschung mit Freie-Elektronen-Röntgenlasern (XFELs)“ entwickelt, die in den Lehrplan der TU Bergakademie Freiberg aufgenommen wurde.

Forschungstätigkeiten am Institut für Experimentelle Physik

Das Labor der Gruppe ist mit einem aktuellen Photoemissionsspektrometer ausgestattet, welches die Untersuchung der elektronischen Struktur verschiedenster

Materialien zulässt. Das vorhandene Photoelektronenspektrometer ESCALAB 250Xi (siehe Abbildung 1) von Thermo Scientific (Großbritannien) verfügt über eine Röntgenquelle mit Aluminiumanode und Monochromator. Für die Analyse isolierender oder schlecht leitender Proben ist eine Elektronenquelle zur Ladungskompensation vorhanden. Die Kombination aus Linsensystem, Halbkugelanalysator und Detektor ermöglicht sowohl Kleinbereichs-XPS als auch bildgebende Messungen. Eine Besonderheit des Spektrometers stellt die Cluster-Ionenquelle MAGCIS dar, welche nicht nur zur Erstellung von Tiefenprofilen, sondern auch zum sanften Abtrag von Oberflächenverunreinigungen genutzt werden kann. Die Gerätebedienung, Datenerfassung und Datenauswertung erfolgen über die Software *Avantage*.

Im Rahmen der Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe „Biomining und Extreme Biomimetik“ von Prof. Hermann Ehrlich wurden unter anderem karbonisierte Skelette von Meeresschwämmen, welche mit Kupfer metallisiert wurden und somit die Grundlage für

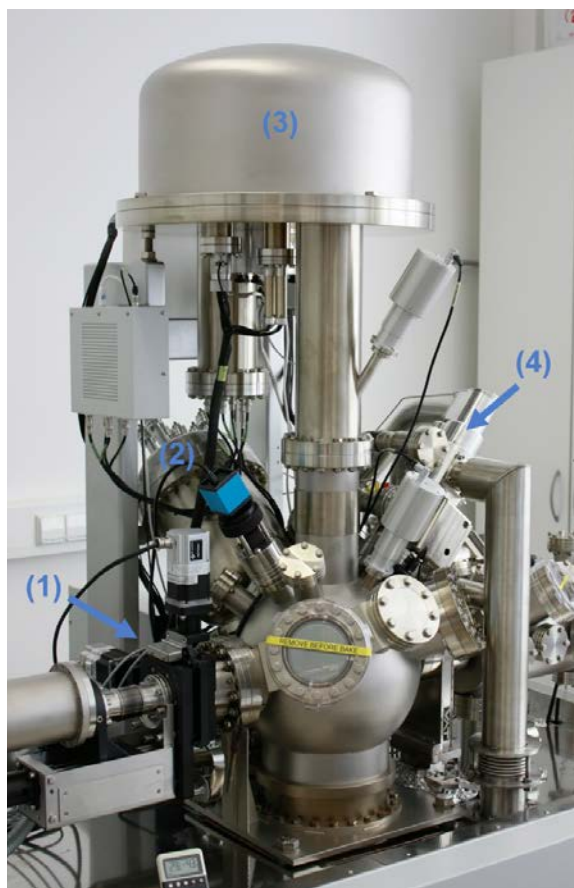


Abbildung 1: Photoelektronenspektrometer ESCALAB 250Xi von Thermo Scientific mit Al-Anode (1), Monochromator (2), Halbkugelanalysator (3) und Ionenquelle (4)

elektrochemische Anwendungen bilden, untersucht. Mittels der XPS-Messung konnte gezeigt werden, dass zum einen die Metallisierung erfolgreich war und der Oxidationszustand des sich an der Oberfläche befindlichen Kupfers Cu(I) – entsprechend Cu_2O – ist.

Bei einer weiteren Kooperation mit der AG Kanngießer vom Institut für Optik und Atomare Physik der TU Berlin wurde mit Hilfe des XPS-Spektrometers die elektronische Struktur von Cu-Chlorophyllin und dessen Zerfallsprodukten genauer untersucht. Wie in Abbildung 2 gezeigt, konnten Unterschiede zwischen einer aufgedampften, einer aus Lösung getrockneten sowie einer gepressten Probe gefunden werden. Die Unterschiede konnten durch ein Aufbrechen der schwachen ionischen Bindung zwischen dem Na^+ -Kation und dem O^{2-} -Anion erklärt werden.

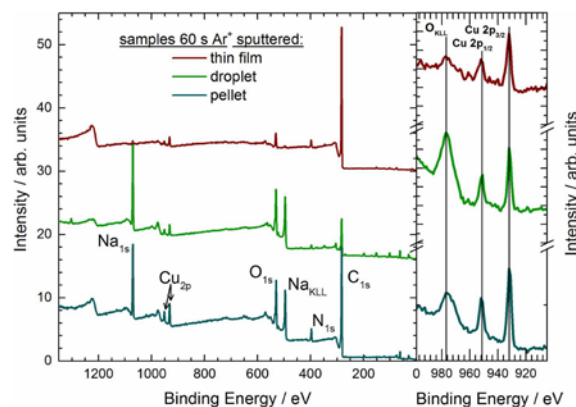


Abbildung 2: XPS-Übersichtsspektren von drei Chlorophyllin-Proben: Bei dem aufgedampften Film (*thin film*) ist das Na-1s-Signal nahezu verschwunden, was auf eine Strukturveränderung durch das Aufheizen hinweist (aus K. Witte et al., J. Phys. Chem. B 122, 1846).

Zusätzlich zu dem vorhandenen XPS-Spektrometer wird in naher Zukunft im Rahmen des Forschungsneubaus des „Zentrums für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung“ (ZeHS) ein neues Photoemissionsspektrometer angeschafft und in Betrieb genommen. Der Fokus liegt dabei zum einen auf Probencharakterisierung mittels XPS bei hohen Temperaturen und zum anderen auf Untersuchung der elektronischen Eigenschaften im Valenzbandbereich mittel UV-Photoelektronenspektroskopie (UPS). Des Weiteren wird mit dem neuen Spektrometer auch winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie möglich sein, um zum Beispiel die Bandstruktur der untersuchten Materialien zu charakterisieren.

Es wird generell sehr begrüßt, dass Studenten an den Experimenten teilnehmen und die Möglichkeit in Betracht ziehen, in der Arbeitsgruppe ihre Bachelor- oder Masterarbeit anzufertigen.

Weitere nationale und internationale Forschungstätigkeiten

Forschungsk Kooperation mit der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt

Zwischen der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt (PTB) und Herrn Dr. Friedrich Roth besteht seit bereits fünf Jahren eine enge Kooperation auf dem Gebiet der Erforschung der elektronischen Eigenschaften

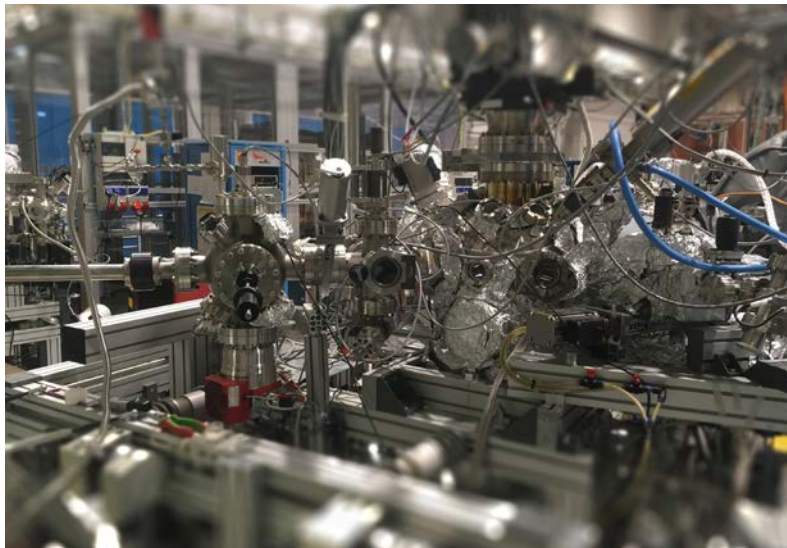
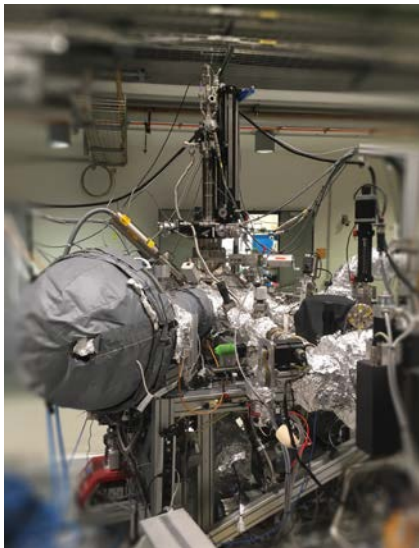
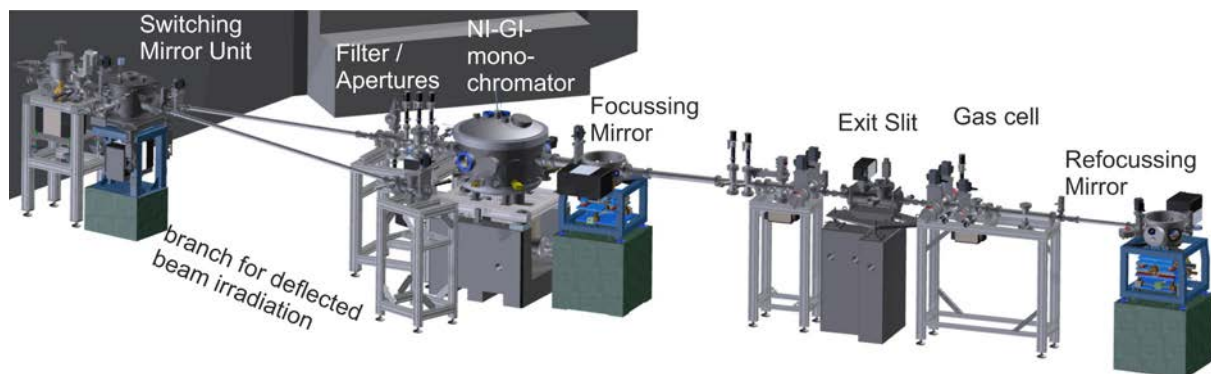


Abbildung 3: Layout des IDB-Strahlrohres an der MLS in Berlin (oben), Hauptkammer der iDEEAA-Endstation (links) sowie Detailaufnahme der Präparationskammer (rechts)

verschiedener Materialien mithilfe von Synchrotronstrahlung. Im Speziellen wurden in der Vergangenheit mithilfe der iDEEAA-Endstation die elektronische Struktur von organischen Heterostrukturen, welche Anwendung in der Photovoltaik finden, sowie deren Degradation bei Bestrahlung mit sichtbarem Licht untersucht. Darüber hinaus wurden intensive Untersuchungen des Einflusses der Endzustände auf den Photoemissionsprozess sowie die Bandstruktur durchgeführt.

Die PTB als nationales Metrologie-Institut mit wissenschaftlich-technischen Dienstleistungsaufgaben führt im Rahmen ihrer satzungsgemäßen Aufgaben u.a. Forschungs- und Entwicklungsarbeiten auf dem Gebiet der Radiometrie und Spektrometrie mit Synchrotronstrahlung durch. Die Forschungstätigkeit am Institut für Experimentelle Physik beinhaltet die methodische Weiterentwicklung

der grundlegenden und applikationsorientierten Elektronenspektroskopie mithilfe von Synchrotronstrahlung.

An der *Metrology Light Source* (MLS), speziell am IDB-Strahlrohr (siehe Abbildung 3), kann monochromatisierte Strahlung im Bereich von 1,5 eV bis 280 eV bei einem mittleren Photonenfluss von 10^{12} Photonen/s (Ringstrom von 100 mA) genutzt werden. Die iDEEAA-Endstation ist mit einem R4000-Analysator von Scienta ausgestattet, mit dem typische Energieauflösungen von 15 meV bei einer Passenergie von 20 eV erreicht werden. Ferner ist die Endstation mit einem Kryostaten ausgestattet, welcher es erlaubt, Proben sowohl zu kühlen (bis zu 20 K) als auch zu heizen (bis maximal 450 K). Zur Probenpräparation steht eine Präparationskammer zur Verfügung, welche mit unterschiedlichsten Werkzeugen (wie zum Beispiel Sputterquelle, Heiztisch und

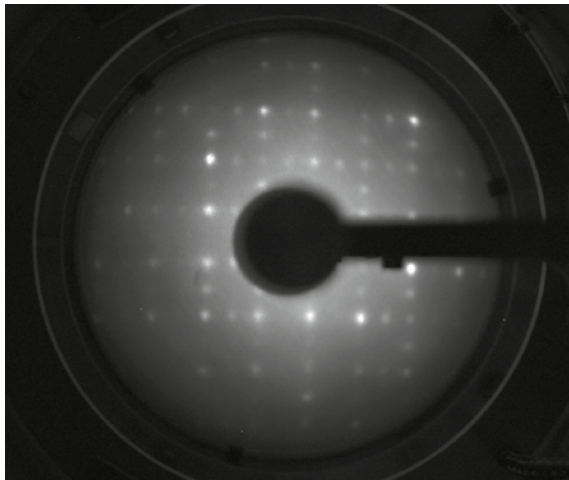


Abbildung 4: LEED-Muster (Low Energy Electron Diffraction) eines Si(100)-Einkristalls nach der Oberflächenreinigung bei 950 °C

Verdampfern) ausgestattet ist. Mit dem neu integrierten LEED kann nun die Oberflächenbeschaffenheit bzw. Sauberkeit der untersuchten Proben noch besser charakterisiert werden (siehe Abbildung 4).

Kooperation mit Lawrence Berkeley National Laboratory und Advanced Light Source

Seit 2014 besteht zwischen Herrn Dr. Friedrich Roth und Herrn Dr. Oliver Gessner, welcher eine Arbeitsgruppe am Lawrence Berkeley National Laboratory in Berkeley leitet, eine sich stetig weiterentwickelnde und vertiefende Kooperation. Grundlage ist der Aufbau sowie die Nutzung von zwei neuartigen Endstations an der Advanced Light Source (ALS). Beide Geräte befassen sich mit der Untersuchung der Dynamiken von Ladungstransferprozessen im Pikosekunden-Bereich, wobei der Fokus zum einen auf der Röntgenphotoelektronenspektroskopie und zum anderen auf Röntgenabsorptionsspektroskopie liegt. In beiden Fällen wird zur Anregung der Probe ein mit der ALS synchronisierter, externer Laser genutzt, mit dessen Hilfe die Proben wahlweise mit Photonen der Wellenlänge 1064 nm, 532 nm oder 355 nm bestrahlt werden. Im Anschluss wird die Probe mittels der Röntgenphotonen der ALS analysiert, wobei – begrenzt durch die zeitliche Auflösung des Synchrotrons (ca. 60 ps) – der zeitliche Versatz zwischen *Laser pump* und *X-ray probe* variabel eingestellt werden kann (siehe Abbildung 5).

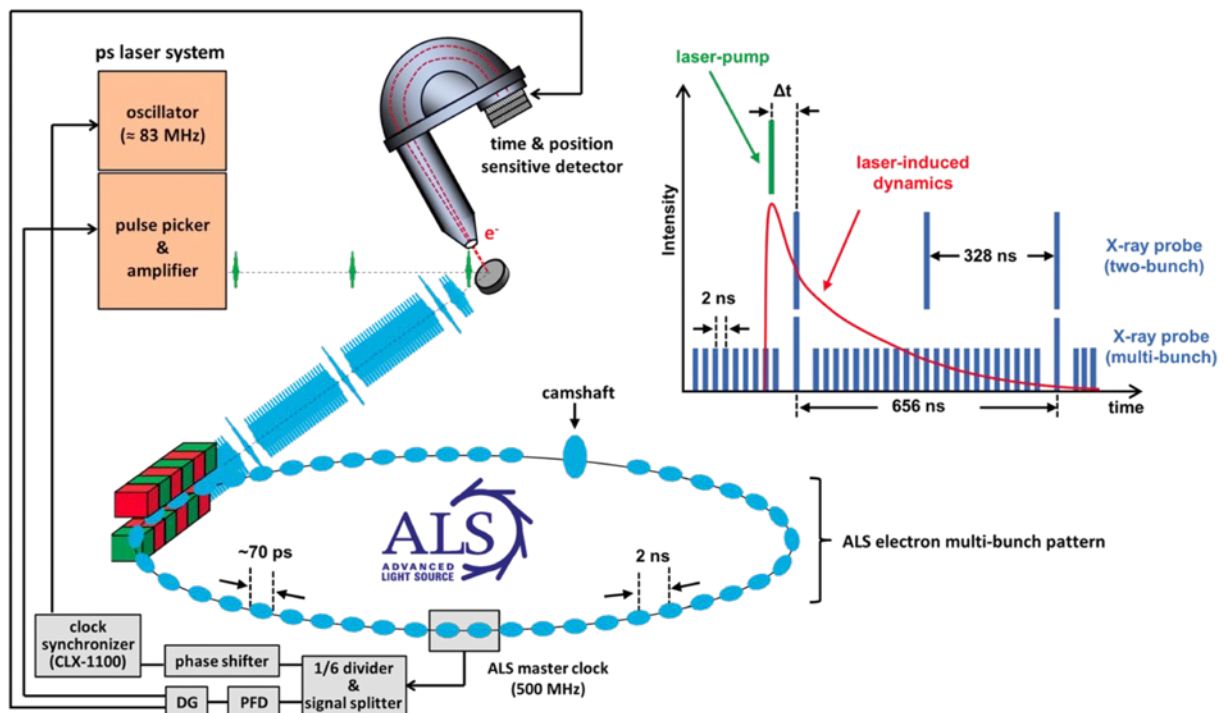


Abbildung 5: Funktionsskizze des Pikosekunden-zeitaufgelösten Pump/Probe-Experiments an der Advanced Light Source in Berkeley (USA), aus S. Nepple et al., Faraday Discussions 171 (2014) 219

In ersten Experimenten wurden die Dynamiken des Ladungstransfers zwischen Phthalocyanine- und C_{60} -Molekülen (ein Prototypsystem für organische Photovoltaik) untersucht. Dabei konnte eindrucksvoll gezeigt werden, dass induzierte Ladungstransferdynamiken ortsspezifisch mittels zeitaufgelöster XPS beobachtet werden konnten. Dabei wurde der Transfer eines Elektrons vom Donator (CuPc) zum Akzeptor (C_{60}) anhand der zeitlichen Veränderung des C-1s-Rumpfniveauspektrums nachgewiesen.

Auf Grundlage eines positiv bewerteten *ALS Approved Program (AP)* werden bei regelmäßigen Messzeiten in den kommenden Jahren beide Methoden (tr-XPS und tr-XAS) weiter verbessert und auf neue Stoffsysteme angewendet. Ein Ziel ist es dabei, den Probenmanipulator dahingehend zu verbessern, dass auch kondensierte Moleküle untersucht werden können.

Forschungsk Kooperation mit der AG Wurth bei FLASH in Hamburg

Nachdem die Arbeitsgruppe erfolgreich bei Messungen in Berkeley gezeigt hat, dass mittels zeitaufgelöster XPS Ladungstransfer-Dynamiken untersucht werden können, wurde im Jahr 2017 der Grundstein für eine Kooperation mit der Arbeitsgruppe Wurth der Universität Hamburg

gelegt. Grundlage dieser Kooperation ist es, zeitaufgelöste Photoemission an ähnlichen Ladungstransfer-Systemen auch bei kürzeren Zeitskalen (100 fs – 30 ps) unter Nutzung eines Freie-Elektronen-Lasers durchzuführen. Nach der erfolgreichen Begutachtung eines eingereichten *Proposals*, konnten im Oktober bei einer ersten Messzeit am Freie-Elektronen-Laser in Hamburg (FLASH) unter Nutzung der WESPE-Endstation erste Ergebnisse erzielt werden.

Forschungs- und Bautätigkeiten am European XFEL

In der Metropolregion Hamburg ist in den letzten Jahren eine internationale Forschungseinrichtung der Superlative (siehe Abbildung 6) entstanden. Der Röntgenlaser *European XFEL* wird 27.000 Lichtblitze pro Sekunde erzeugen, mit einer Leuchtstärke, die milliardenfach höher ist als die der besten Röntgenstrahlungsquellen herkömmlicher Art. Damit eröffnet er völlig neue Forschungsmöglichkeiten. Wissenschaftlerteams aus der ganzen Welt können am *European XFEL* Strukturen im Nanobereich, ultraschnelle Prozesse und extreme Materiezustände



Abbildung 6: *European XFEL* mit den drei Betriebsgeländen Schenefeld (Experimentierhalle), Osdorfer Born sowie DESY-Bahrenfeld: Die Gesamtlänge der Anlage beträgt 3,4 km (© *European XFEL*).

untersuchen. Die neue Forschungseinrichtung wird von der *European XFEL GmbH* gebaut und betrieben. Die eigenständige Gesellschaft ist gemeinnützig und kooperiert eng mit ihrem Hauptgesellschafter, dem Forschungszentrum DESY, und weiteren wissenschaftlichen Einrichtungen weltweit.

Von der neuen Forschungseinrichtung profitieren die unterschiedlichsten naturwissenschaftlichen Gebiete, darunter Biologie, Medizin, Pharmazie, Chemie, Materialwissenschaften, Physik, Astrophysik, Energieforschung, Umweltforschung, Elektronik, Nanotechnologie und Photonik.

Meilensteine 2017

Seit Januar 2017 ist Robert Feidenhans'l neuer Vorsitzender des *Management Board* des *European XFEL*. Mitte Januar wurden die ersten Elektronen vom Injektor zum supraleitenden Linearbeschleuniger geleitet. Damit wurde ein erster wichtiger Meilenstein – die Kühlung des Beschleunigermoduls auf -271 °C (2 K) – erfolgreich erreicht.

Im Mai konnte das erste Röntgen-Laser-Licht, mit einer Wellenlänge von 0,8 nm (ca. 500 Mal kürzer als sichtbares Licht) erzeugt werden. Dabei hatte der Laser eine Repetitionsrate von einem Puls pro Sekunde. Kurze Zeit später (Juni) konnten dann zum ersten Mal Laserpulse bis in die Experimentierhalle gebracht werden und erfolgreich am SPB/SFX- sowie FXE-Instrument nachgewiesen werden (siehe Abbildung 7). Im Juli startete dann der offizielle Betrieb des *European XFEL* und im August wurden die ersten Nutzerexperimente am XFEL durchgeführt.

Am 1. September wurde der *European XFEL* begleitet von einer Lichtinstallation mit sichtbarem Laserlicht offiziell eingeweiht (siehe Abbildung 8). Neben Bildungsministerin Prof. Dr. Johanna Wanka und Hamburgs ersten Bürgermeister Olaf Scholz kamen auch 800 Gäste zur Einweihungsfeier nach Hamburg.

Transnational Scientific and Education UniFEL Center for Advanced Methods of Material Research

Das internationale Wissenschafts- und Bildungszentrum UniFEL für neuartige Methoden der Materialforschung (*Transnational Scientific and Education UniFEL Center for Advanced Methods of Material Research*) wurde 2015 an der ITMO Universität in St. Petersburg, Russland gegründet. Das Hauptziel des *UniFEL Center* liegt in der Vorbereitung und Präparation von Experimenten an Freie-Elektronen-Röntgenlasern, vor allem am *European XFEL* in Hamburg. Weiterhin steht die (Weiter-)Entwicklung von neuen Forschungsmethoden mit hoher Orts-, Energie- und Zeitauflösung zur Untersuchung der strukturellen sowie funktionellen Eigenschaften von Nanoobjekten im Fokus.

Ein Kooperationsabkommen zwischen der ITMO Universität und der TU Bergakademie Freiberg wurde mit dem Ziel abgeschlossen, einerseits gemeinschaftlich zukünftige Experimente an XFELs vorzubereiten und durchzuführen sowie andererseits ein bilaterales Ausbildungsprogramm (sowohl Master als auch Ph.D.) anzubieten. Das *UniFEL Center* wird von Prof. Alexey Romanov (ITMO Universität) und Prof. Serguei Molodtsov (TU Bergakademie Freiberg, *European XFEL*) geführt. Zusätzlich werden Studien zur Untersuchung der strukturellen Eigenschaften von Nanoobjekten in einer engen Kooperation mit dem *Joint Research Center (JRC) „Materials Science and Diagnostics in Advanced Technologies“* (Ioffe Institut St. Petersburg) realisiert.

Im Rahmen der Aktivitäten des *UniFEL Centers* sind folgende Kernkompetenzen von besonderer Bedeutung:

- Charakterisierung und Erfassung der physikalischen und chemischen Parameter während der verschiedenen Entwicklungs- und Produktionsschritte von Nanostrukturen sowie Nanoobjekten (Element-, Phasen- und chemische Zusammensetzung, Parameter des



Abbildung 7: Erstes Röntgen-Laser-Licht in der Experimentierhalle (© European XFEL)

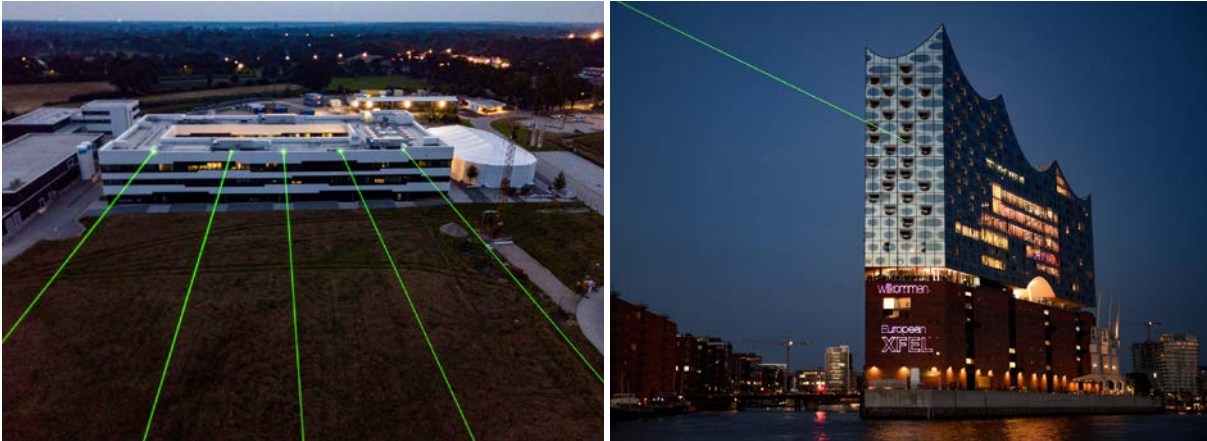


Abbildung 8: Lichtinstallation in Hamburg im Zuge der offiziellen Einweihung des European XFEL (© European XFEL)

realen Kristalls, elektronische Eigenschaften, Defektstrukturen),

- Erfassung der atomaren Strukturen, der geometrischen Größe/Form wie auch der elektronischen Struktur basierend auf Messungen der Interaktion von Nanoobjekten mit Elektronen und Röntgenlicht,
- Untersuchung der dynamischen Prozesse im Festkörper sowie an dessen Oberflächen mit hoher zeitlicher Auflösung,
- Organisation von internationalen Ausbildungsprogrammen.

Im Rahmen des Wissenschafts- und Bildungszentrums UniFEL verstärkt Dmitrii Potorochin als erster Doktorand seit dem 18.09.2017 die Arbeitsgruppe. Seine Arbeit trägt den Titel „Self-aligned systems of supported nano-objects: Synthesis and study of their atomic and electronic structure“ und befasst sich hauptsächlich mit spektroskopischen Messungen der elektronischen Struktur verschiedenster Systeme, sowohl in Hamburg (Petra III, FLASH) als auch in Berlin (MLS).

Weitere Informationen: <http://unifel.ifmo.ru/en>.

Lehre in Hamburg

Ankündigung Blockvorlesung 2018

Die nächste Blockvorlesung „Materialforschung mit Freie-Elektronen-Röntgenlasern (XFELs)“ ist vom 16. bis 21. September 2018 in Hamburg geplant (siehe Abbildung 9). Die Vorlesungsreihe zeigt die Darstellung von

konventionellen und ultrahoch-zeitaufgelösten spektroskopischen Methoden und Methoden zur Bestimmung der strukturellen Eigenschaften:

- Inelastische und resonante inelastische Röntgenstreuung,
- Röntgenemissionsspektroskopie,
- Röntgenabsorptionsspektroskopie,
- Photoelektronenspektroskopie,
- Röntgenmikroskopie,
- Kohärente Röntgendiffraktion,
- Photonenkorrelationsspektroskopie,
- Röntgenholographie.

Die Anwendung der genannten Methoden wird während mehrerer Führungen durch den ersten Freie-Elektronen-Röntgenlaser überhaupt, FLASH bei DESY, illustriert. Es wird außerdem einen Besuch der Baustellen des *European XFEL* geben. Die Studierenden erlangen vertiefte Kenntnisse des Aufbaus und der Anwendung der neuesten Generation von Röntgen-Lichtquellen, den Freie-Elektronen-Röntgenlasern. Die FELs erzeugen Röntgenstrahlung mit sehr hoher Brillanz.

Die Studierenden lernen Messmethoden kennen, bei denen ultrakurze Laserlichtblitze im Röntgenbereich bis zu hunderttausendmal in der Sekunde und mit einer Leuchtstärke, die milliardenfach höher ist als die der besten Röntgenstrahlungsquellen herkömmlicher Art, eingesetzt werden. Freie-Elektronen-Röntgenlaser werden in der Materialforschung und -entwicklung von katalytischen, magnetischen sowie biologischen Stoffen und Hybrid-Strukturen benutzt. Verschiedene experimentelle



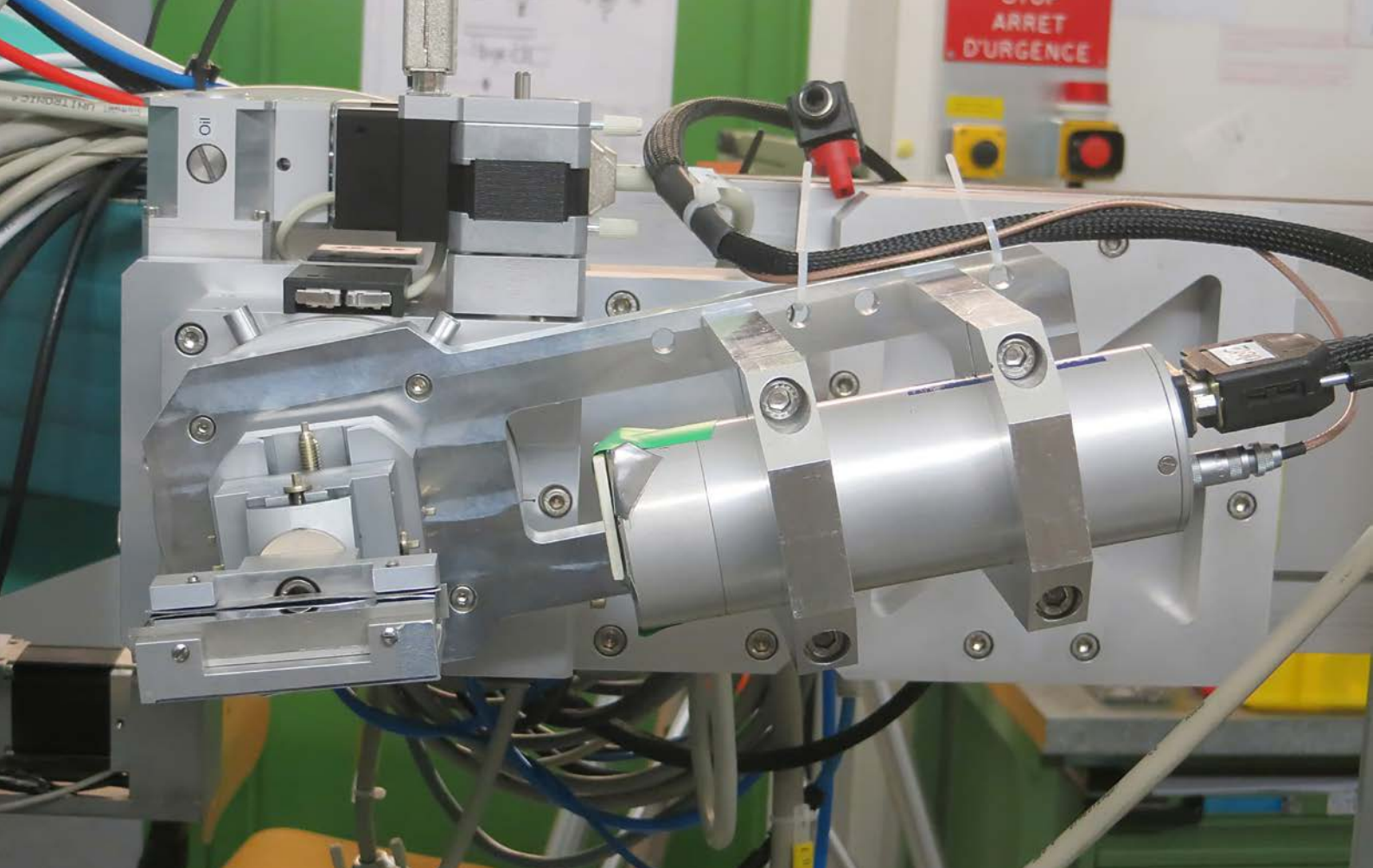
Abbildung 9: Ankündigung der Blockvorlesung 2018 am DESY in Hamburg

Methoden und ihre besonderen Möglichkeiten, die nur mit Freie-Elektronen-Röntgenlasern realisiert werden können, werden dargestellt und detailliert erläutert. Die Studierenden sollen mit Hilfe des Moduls in die Lage versetzt werden, die hier kennengelernten Methoden im späteren Berufsleben bei Bedarf mit zu berücksichtigen,

und gleichzeitig erste Erfahrungen an einer internationalen Großforschungseinrichtung zu sammeln.

Unterbringung im DESY-Gästehaus, Fahrt- und Übernachtungskosten werden übernommen.

Die Studenten können sich gerne anmelden bei:
friedrich.roth@physik.tu-freiberg.de



ARBEITSGRUPPE „KRISTALLPHYSIK“ JUN.-PROF. ROMAN GUMENIUK

Die Beugung von Röntgenstrahlen (Röntgendiffraktometrie) an einem Festkörper gehört zu den gebräuchlichsten Methoden der Strukturaufklärung. Da die Atome in einem kristallinen Feststoff periodisch angeordnet sind, bilden sie so genannte Netzebenenscharen mit spezifischen Abständen der Netzebenen. An diesen Netzebenenscharen können Röntgenstrahlen gebeugt werden. Dabei gilt die Bragg'sche Gleichung $n \lambda = 2 d \sin \theta$, wobei n die Beugungsordnung, λ die Wellenlänge der Röntgenstrahlung, d der Abstand zweier Netzebenen in einer Netzebenenschar und θ der Winkel zwischen dem einfallenden Strahl und der Netzebene sind. Gemessen wird mit einer definierten Wellenlänge bei verschiedenen Winkeln, sodass die Röntgenreflexe der einzelnen Netzebenenscharen in Abhängigkeit von d bei spezifischen Winkeln sichtbar werden. Diese Experimente können an Einkristallen und Pulvern mit einem Diffraktometer im Institutslabor durchgeführt werden. Kompliziertere Strukturen erfordern jedoch eine bessere Auflösung und deshalb einen komplexeren Experimentaufbau. An einem Synchrotron erzeugte Röntgenstrahlung bietet die Vorteile, dass ein deutlich größerer Bereich an Wellenlängen zur Verfügung

steht, die Strahlungsintensitäten größer sind und man die Winkelauflösung erheblich steigern kann. Ein Synchrotron ist ein Elektronenbeschleuniger, bei dem die Elektronen auf eine Kreisbahn gezwungen werden, sodass diese Röntgenstrahlung aussenden. Die *European Synchrotron Radiation Facility (ESRF)* in Grenoble ist ein Gemeinschaftsprojekt mehrerer europäischer Staaten und gehört mit etwa 50 Beamlines verteilt über einem Umfang von 844 m zu den weltweit größten Einrichtungen dieser Art.

Eine von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) unterstützte Kooperation der Juniorprofessur Kristallphysik mit der BM20 des ESRF (*Rossendorf Beamline*, Institut für Ressourcenökologie des Helmholtz-Zentrums Dresden-Rossendorf) verfolgt das Ziel, neue Röntgenbeugungsexperimente an dieser Beamline optimal einzurichten. Die Forschungsschwerpunkte Endlager- und Reaktorsicherheit erfordern den Umgang mit radioaktiven Substanzen. Seit 1998 steht ein Versuchsplatz für Röntgenabsorptionsspektroskopie (XAFS, XANES) zur Verfügung. Im Sommer 2018 wird ein weiterer Versuchsplatz für Röntgenemissionsspektroskopie und Röntgenbeugung an radioaktiven Stoffen gebaut. Für die optimale

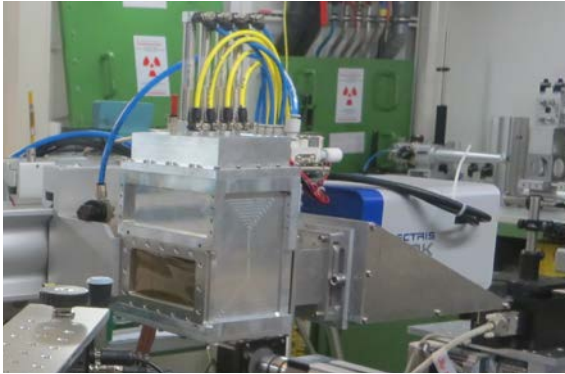


Abbildung 1: Der Pilatus-100k-Detektor

Planung der Baumaßnahmen und von Neuanschaffungen für die Röntgenbeugung werden intermetallische, supra-leitende Verbindungen der Freiburger Gruppe über einen Zeitraum von etwa einem Jahr in Grenoble mit hoher Auflösung, wie sie zu deren Strukturlösung benötigt wird, gemessen. Die genaue Kenntnis der Strukturen dieser Substanzen ist erforderlich, um die gemessenen physikalischen Eigenschaften verstehen und interpretieren zu können. Im Gegenzug wird der in Grenoble stationierten Gruppe ermöglicht, die neuen experimentellen Aufbauten zu testen und Erfahrungen zu sammeln.

An einem 6-Kreis-Diffraktometer kommen ein Szintillationszähler (SZ, siehe Abbildung auf S. 26) und ein Pilatus-100k-Detektor (siehe Abbildung 1) zum Einsatz. Mit dem SZ werden zusätzlich Tests mit Sekundärmonochromator zur Steigerung der Auflösung durchgeführt. Ein SZ ist ein 0D-Detektor bzw. Punktdetektor. Mit diesem wird nach und nach der Winkelbereich abgefahren und die gebeugte Röntgenstrahlung einzeln in jedem Winkel gemessen. Die Schrittweite für den Winkel θ beträgt typischerweise $0,001^\circ$. Der Pilatus 100k ist ein 2D-Detektor bzw. Flächendetektor der Schweizer Firma Dectris. Es kann ein größerer Winkelbereich gleichzeitig gemessen werden. Dies verkürzt die Messzeit deutlich. Weiterhin kann die Röntgenstrahlung durch die moderne Hybrid-Pixel-Technologie effektiver ausgelesen werden, sodass die Zählrate steigt. Ziel der Kooperation ist es, die Relation von Auflösung und Zählrate dieser drei Aufbauten zu vergleichen und ein geeignetes Konzept für hochauflösende Pulver-Diffraktometrie auszuarbeiten.

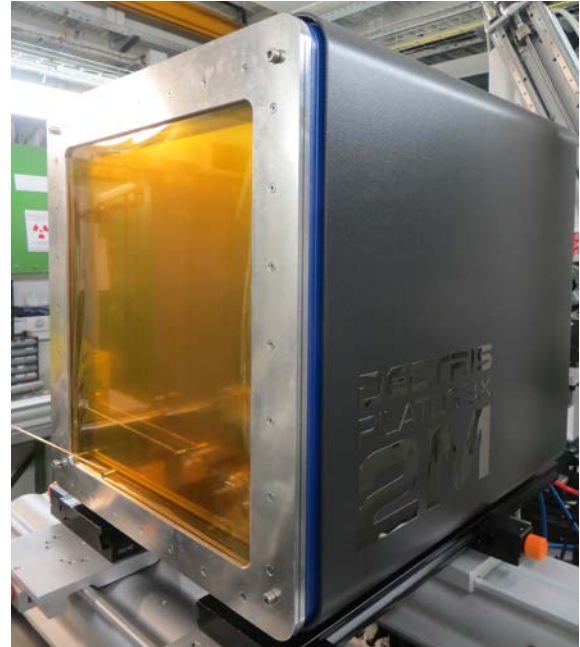


Abbildung 2: Der Pilatus-2M-Detektor

Optimiert werden die experimentellen Rahmenbedingungen, welche durch die vorhandene Optik vorgegeben sind. Weiterhin müssen kurze Umbau- und Justagezeiten garantiert werden.

An einem zweiten Diffraktionsmessplatz kommt ein Pilatus-2M-Detektor (siehe Abbildung 2) zum Einsatz. Während der Pilatus 100k aus rund 100.000 Pixeln besteht, setzt sich der Pilatus 2M aus 24 solcher Einheiten zusammen, sodass sich etwa 2,4 Millionen Pixel ergeben. Diese Größe ermöglicht es, ein vollständiges Diffraktogramm mit einer einzigen Belichtung ohne Bewegung des Detektors aufzunehmen. Der Detektor selbst ersetzt dadurch das Diffraktometer. Die erreichbare Auflösung ist zwar geringer, dafür ist es aber möglich, zeitabhängige Messungen durchzuführen. So können u. a. Heiz- und Abkühlprozesse oder auch Hydratationsprozesse untersucht werden. Weiterhin sind damit auch Experimente an Einkristallen möglich. Analog zum 6-Kreis-Diffraktometer werden hier ebenfalls die experimentellen Rahmenbedingungen (z. B. der Abstand der Probe zum Detektor) im Hinblick auf Auflösung, Zählrate sowie Umbau- und Justagezeiten optimiert.



METHODISCHES KOMPETENZZENTRUM ELEKTRONIKMATERIALIEN

Das Methodische Kompetenzzentrum Elektronikmaterialien (MKEM) wurde im Rahmen der Sächsischen Landesexzellenzinitiative „Funktionales Strukturdesign neuer Hochleistungswerkstoffe durch atomares Design und Defekt-Engineering“ (ADDE) im Jahr 2009 gegründet. Organisatorisch wurde das MKEM an die Institute Experimentelle Physik und Elektronik- und Sensormaterialien angegliedert. Seit Ablauf der Projektzeit der Landesexzellenzinitiative im Februar 2014 wird das MKEM als eigene Einheit im Institut für Experimentelle Physik unter persönlicher Förderung von Prof. Dr. Dirk C. Meyer fortgeführt. Seit dem Beginn in 2009 leitet Frau Dr. Barbara Abendroth das MKEM. Aufgaben, die sie als Leiterin des MKEM wahrnimmt, sind zum einen die Laborleitung des ZRL sowie die Vertretung des IEP im Leitungsgremium des Zentralen Reinraumlabor (ZRL). Zum anderen ist Frau Abendroth sowohl für das IEP als auch das ZRL Ansprechpartner für interne und externe Kooperationspartner.

Innerhalb der TU Bergakademie Freiberg koordiniert das MKEM den Zugang zu den Anlagen des Zentralen Reinraumlabor (ZRL) und bietet Unterstützung bei der Planung und Durchführung der Prozessierung dünner

Schichten und mikroelektronischer Bauelemente im ZRL. Zum anderen wirkt das MKEM als institutsübergreifende Schnittstelle zwischen den Betreibern einzelner Geräte – insbesondere im ZRL – und potenziellen Nutzern.

Für das 2015 vom Deutschen Wissenschaftsrat bewilligte Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung (ZeHS) dienen die Kompetenzzentren, die innerhalb der Landesexzellenzinitiative ADDE auf unterschiedlichen Fachgebieten für die gesamte TU Bergakademie eingerichtet wurden, als Vorbild für die Koordinationsstellen Materialien und Eigenschaften sowie Material- und Bauteil-Simulation des ZeHS. Seit August 2016 laufen die Planungen für den Forschungsneubau, der das ZeHS beherbergen soll, auf Hochtouren. Für diese Planungen, die Arbeitsgruppen aus allen Fakultäten involvieren, übernimmt Frau Abendroth den Austausch und die Koordination zwischen den zukünftigen Nutzern einerseits sowie dem Bauherren (SIB, Freistaat Sachsen) und Architekten und Fachplanern andererseits.

Das Zentrale Reinraumlabor wird an der TU Bergakademie Freiberg gemeinschaftlich von den Instituten Elektronik- und Sensormaterialien, Experimentelle Physik und

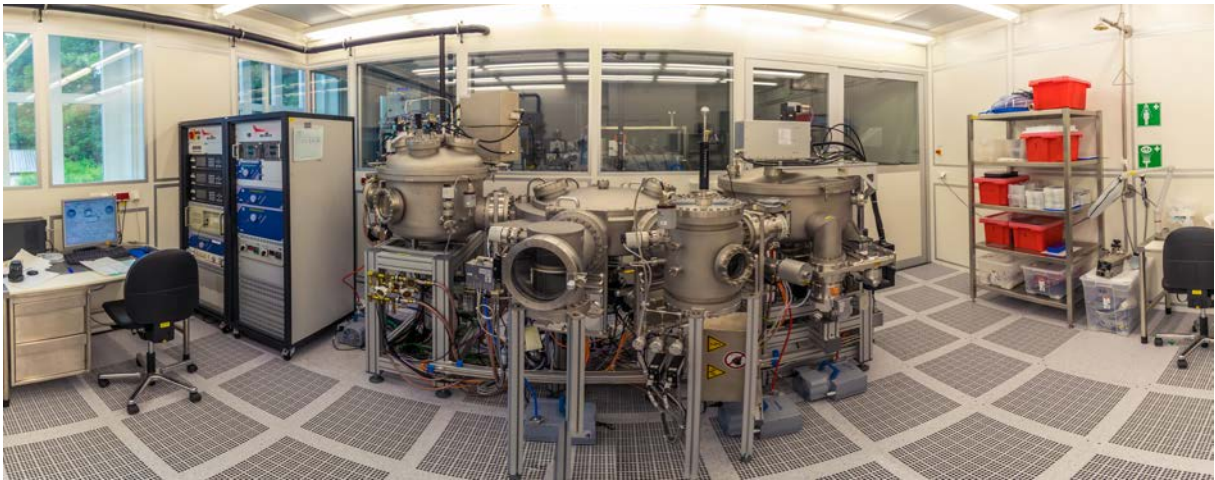


Abbildung 1: Blick auf die Magnetron-Sputteranlage im ZRL

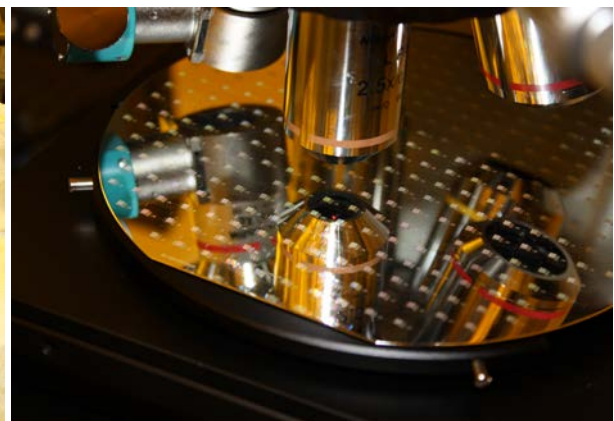


Abbildung 2: Die Resultate der Lithographie werden am Mikroskop im ZRL überprüft.

Angewandte Physik betrieben. Die Direktoren dieser Institute Prof. Yvonne Joseph, Prof. Dirk C. Meyer und Prof. Johannes Heitmann bilden zusammen mit der Leiterin des MKEM Dr. Barbara Abendroth das wissenschaftliche Leitungsgremium. Der Reinraum verfügt über 300 m² Reinraumfläche in den Klassen 5-7 (ISO EN DIN 14644). Alle relevanten Halbleiter-Fertigungsprozesse zur Herstellung von Teststrukturen stehen hier für die Materialentwicklung und Materialphysik zur Verfügung.

Neben den Forschungsarbeiten ist die studentische Ausbildung ein wichtiger Schwerpunkt des ZRL. Alle Studenten der Vertiefungsrichtungen Festkörperphysik und Halbleitertechnik und Photovoltaik der Angewandten Naturwissenschaft sowie die Studenten der Elektronik und Sensormaterialien absolvieren ein Praktikum im

ZRL. Das MKEM betreut zahlreiche Graduierungsarbeiten, während derer Studenten und Doktoranden weitere praktische Erfahrungen im Reinraum sammeln. Gerne nutzen auch Schülergruppen die Möglichkeit, sich das Arbeitsumfeld in einem Reinraum anzuschauen. Dieses Angebot des MKEM wird regelmäßig von sächsischen und überregionalen Schulen wahrgenommen, so z. B. auch im Rahmen des alljährlichen Girlsday. Impressionen von diesem Tag sind in den Abbildungen gezeigt. Die Schülerinnen absolvieren Versuche zur Herstellung von MOS-Kondensator-Strukturen. Dieses Schülerpraktikum entspricht einer Kurz-Version des Halbleiter-Praktikums, welches die Studenten der Angewandten Naturwissenschaft und der Nanotechnologie über ein volles Semester ablegen.



METHODISCHES KOMPETENZZENTRUM ENERGIEMATERIALIEN

Das Kompetenzzentrum Energiematerialien setzt etablierte und moderne Methoden der Kristallographie und Elektrochemie zur Schaffung neuer technologischer Ansätze und Lösungen im Bereich der Energiewandlung und -speicherung ein. Zudem bündelt es die Forschungsinfrastruktur zur Untersuchung der kristallographischen Struktur einkristalliner Materialien. Mit besonderem Schwerpunkt werden Materialien mit komplexen strukturellen Feinheiten auf atomarer Skala, modulierte Strukturen und aperiodische Kristalle bearbeitet, wobei die *N*-dimensionale Kristallographie und röntgenographisch bestimmte Elektronendichten einen besonderen Akzent setzen.

Vorhandene experimentelle und theoretische Kompetenzen beziehen sich auf die Kristallstrukturbestimmung (FIB-Präparation von Einkristallen, Kristallorientierungsbestimmung, Röntgeneinkristalldiffraktometrie, röntgenographische Elektronendichtebestimmung, *N*-dimensionale Kristallographie, *Maximum-Entropy*-Methode), die elektrochemische Charakterisierung (Glovebox, Impedanzspektroskopie, Tubandt-Methode, Cyclovoltammetrie, Zellzyklisierung) und die Anwendung theoretischer Methoden der Kristallchemie und Kristallphysik (geometrische

und topologische Methoden, z. B. Voronoi-Dirichlet-Partitionierung in ToposPro, Strukturmodellierung mittels Dichtefunktionaltheorie und *Bond-Valence*-Methode).

Insbesondere bilden experimentell bestimmte Elektronendichten die Schnittstelle zu theoretisch berechneten. Damit versteht sich das Kompetenzzentrum als Mittler zwischen den theoretischen und experimentellen Arbeiten des IEP, indem es den Zusammenhang zwischen der elektronischen Struktur und den chemischen bzw. physikalischen Eigenschaften herstellt. Im Fokus der Arbeiten stehen Materialien aus den Bereichen der Energie- und Stoffwandlung: Chalkogenide, intermetallische Phasen und organische Verbindungen. So wurden zurückliegend neben methodischen Arbeiten zur Röntgendiffraktometrie insbesondere Materialien für Elektroden und Festelektrolyte für neuartige Ansätze elektrochemischer Energiespeicher, pyroelektrische Kristalle und Farbstoffe für organische Solarzellen bearbeitet.

Topologische Untersuchungen

Zum Auffinden von Materialien für neue Konzepte elektrochemischer Energiespeicher werden seit 2014



verschiedene Methoden der Kristallchemie eingesetzt und erstmalig miteinander kombiniert. Ein leistungsstarker Ansatz ist die Voronoi-Dirichlet-Partitionierung. Diese ermöglicht die Untersuchung und Systematisierung von Kristallstrukturen und erlaubt die Durchführung von *Data-Mining*. Eine Kristallstruktur kann dadurch in atomare Domänen, sogenannte Voronoi-Dirichlet-Polyeder (VDP), zerlegt werden. Jeder VDP ist durch sein Volumen, seine Flächen, Ecken und Kanten charakterisiert, wobei diese als die chemischen Eigenschaften Atomgröße, Bindungsstärke, strukturimmanente Leerstellen und Kanäle interpretiert werden können. Das Programmpaket ToposPro (<http://topospro.com>) nutzt diesen Ansatz und erlaubt, ganze kristallographische Datenbanken damit zu bearbeiten. Eine Anwendung besteht beispielsweise im Auffinden charakteristischer Netzwerke, die im Falle von Ionenleitermaterialien das Ionenleitfähigkeitsnetzwerk darstellen. Entsprechende Untersuchungen erfolgten im Rahmen der BMBF-Verbundprojekte CryPhysConcept (03EK3029A) und R2RBattery (03SF0542A) zum Auffinden von Na- und Al-Ionenleitern. Falk Meutzner, der diese Methode insbesondere für die Bearbeitung von Ionenleitern einsetzt, ist seit 2016 offizieller ToposPro-Experte.

Neues SAB-Verbundprojekt SiNergy

Für das im Rahmen des bis 2016 bearbeiteten Verbundprojekts CryPhysConcept patentierte „Verfahren zur Herstellung von auf Silizium basierenden Anoden für Sekundärbatterien“ (Patent Nr. DE 10 2016 001 949.2) wurde unter Leitung von Dr. Charaf Cherkouk hierzu erfolgreich ein eigenständiges Forschungsvorhaben ausgearbeitet. Ziel des Vorhabens mit dem Titel „Entwicklung von Silizium-basierten Anodenmaterialien für Sekundärbatterien mit hohen Energiedichten – SiNergy“ (SAB 100256790) ist es, die in kommerziellen Lithium-Ionen-Batterien

bisher eingesetzten Kohlenstoff-basierten Materialien, insbesondere Graphit, durch Silizium zu ersetzen. Silizium weist bei Raumtemperatur eine mehr als zehnmal höhere Speicherkapazität auf und ist damit dem Graphit vorzuziehen. In dem vom Freistaat Sachsen über die Sächsische Aufbaubank geförderten Verbundprojekt arbeiten zwischen 2017 und 2019 insgesamt drei Verbundpartner (TU Bergakademie Freiberg, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Norafin Industries Germany GmbH) sowie die Rovak GmbH im Unterauftrag unter der Leitung des Instituts für Experimentelle Physik zusammen.

Förderung Institutspartnerschaft

Seit 2017 besteht eine Institutspartnerschaft mit der Sibirischen Regionalabteilung der Russischen Akademie der Wissenschaften in Nowosibirsk. Die Alexander von Humboldt-Stiftung fördert im Rahmen des Alumni-Programms bis 2019 die Forschungskooperation zum „Development of Phosphorus-Carbon Nanotube Materials for Energy Storage Devices – PhosCar“. Projektleiter auf deutscher Seite ist Professor Dr. Dirk C. Meyer, auf russischer Seite Professor Dr. Vladimir Fedin, Institutsdirektor des Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry in Nowosibirsk (NIIC), akademisches Mitglied der Russischen Akademie der Wissenschaften und Humboldt-Fellow in den Jahren 1992 und 1997. Projektkoordinatoren auf deutscher Seite sind Dr. Anastasia Vyalikh und Dr. Tilmann Leising. Im Fokus des Projekts stehen die Entwicklung und Untersuchung chemischer Prozesse und Strukturveränderungen an Phosphor-Kohlenstoff Nanohybrid-Elektrodenmaterialien für Li-, Na- und Al-Ionenbatterien. Für die *In-situ*-Charakterisierungen mittels NMR wurde ein Messaufbau am IEP entwickelt und an Li-Ionen-Akkumulatoren getestet, die das NIIC herstellt. Neben der Röntgenanalytik kommt ebenso die elektrochemische

Impedanz-Spektroskopie zum Einsatz, um ein tieferes Verständnis der Strukturveränderungen zu ermöglichen. Im Rahmen der EStorM2017 wurde ein Symposium zum Thema „*Advanced approaches for studying electrochemical energy storage and conversion*“ organisiert.

BMBF-Verbundprojekt R2RBattery

Im September 2016 wurden die Arbeiten im Rahmen des BMBF-Verbundprojekts R2RBattery begonnen. Ziel ist es, ein Post-Lithium-Energiespeichersystem auf Basis hochvalenter Ionen in Kooperation mit lokalen Industrie- und Forschungspartnern zu entwickeln und maßgeschneiderte Lösungen für deren potentielle großtechnische Produktion zu erarbeiten. Bis 2019 arbeiten insgesamt vier Verbundpartner unter Leitung der TU Bergakademie Freiberg (Koordinator: Professor Dr. Dirk C. Meyer, Projektmanager: Dr. Tilmann Leisegang) an der Umsetzung dieser neuen Post-Lithium-Ansätze für die elektrochemische Energiespeicherung und damit an der Ausarbeitung von Ergebnissen des Projekts CryPhysConcept.

EStorM2017

Das Kompetenzzentrum organisiert ebenso die mittlerweile überregional bekannte *International Freiberg Conference on Electrochemical Storage Materials (EStorM)*. Mit dem zentralen Thema „*Energy Storage Materials*“ greift die EStorM ein aktuelles, gesellschaftsrelevantes und für die Energiewende wichtiges Thema auf. Sie richtet sich an Forschungseinrichtungen und Unternehmen sowie an diejenigen, die an zukünftigen Lösungen für hochenergie-dichte Speicher im Bereich der stationären, aber auch

mobilen Energiespeicherung mitwirken oder interessiert sind. Die Konferenz trägt zudem zur Sichtbarkeit Freibergs, der Region Mittelsachsens und damit auch Deutschlands als wichtiger Batterieforschungsstandort bei und fördert so die Attraktivität für Investitionen.

Während die erste EStorM (2013) alle Komponenten einer Batterie beleuchtete, adressierte die zweite (2015) besonders Ressourcenaspekte der eingesetzten Materialien, das Batterierecycling und Post-Lithium-Konzepte. Im Rahmen der dritten EStorM (2017) standen Festkörperelektrolyte und Festkörperbatterien im Vordergrund, also Themen, die in den letzten Jahren nicht nur am IEP, sondern weltweit stark an Bedeutung gewonnen haben. Beispielsweise wurde der *Proceedings*-Beitrag von K. Takada zu „*Solid electrolytes and solid-state batteries*“ bisher mehr als 850 Mal gelesen. Methoden zur Charakterisierung von Batteriematerialien, insbesondere *In-situ*- und *Operando*-Methoden, bildeten den Abschluss der dreitägigen Veranstaltung. Ausgerichtet wurde die EStorM2017 unter der Leitung von Professor Dirk C. Meyer und den Tagungsvorsitzenden Dr. Anastasia Vyalikh und Dr. Tilmann Leisegang im Zeitraum 12. – 14. Juni 2017. Als Vortragende waren insgesamt 30 Experten aus neun Ländern vertreten, darunter Japan, Russland, Singapur, Südkorea und die USA. Das wissenschaftliche Programm wurde gemeinsam mit dem *Advisory Board*, dem namhafte Wissenschaftler wie Prof. Gerbrand Ceder von der *University of California* angehörten, mitgestaltet.

Im Anschluss an die bisherigen Konferenzen wurden zurückliegend zwei *Proceedings*-Bände herausgegeben. Artikel der ersten beiden Bände zählten mehrfach



Abbildung 1: Mit kristallographischen Methoden zu neuen Energiematerialien

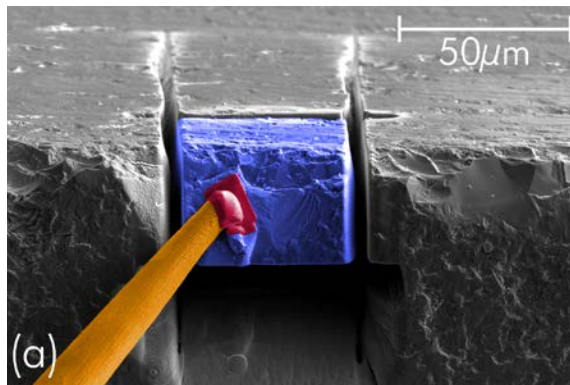


Abbildung 2: Mittels *Focussed Ion Beam (FIB)* zugeschnittener Lithiumniobat-Einkristall im REM

hintereinander zu den „Most read this month“. Insgesamt sind die Ausgaben bisher mehr als 73 Mal zitiert und mehr als 10.000 Mal gelesen worden (Stand: 05/2018). Aus diesem Grund wird der DeGruyter Verlag ein Buch mit dem Titel der Tagung herausgeben, deren Editoren Dirk C. Meyer, Tilmann Leisegang, Hartmut Stöcker und Matthias Zschornak sind. Dieses Buch reiht sich als dritter Band in die *Proceedings*-Reihe ein.

Finanziell wurde die EStorM2017 durch Mittel des BMBF und der Alexander-von-Humboldt-Stiftung (Projekt PhosCar) unterstützt. Anlässlich der Konferenz wurde eine Briefmarke in limitierter Auflage herausgegeben.

Vorträge und Konferenzbeiträge

Am 24.03.2017 nahmen Robert Schmid und Dr. Tilmann Leisegang am Energiedialog der Sächsischen Staatsregierung teil, um am „Masterplan Energieforschung“ für das Land Sachsen mitzuwirken. Im Rahmen eines *academia colloquium* der Sächsischen Akademie der Wissenschaften zu Leipzig am 19.05.2017 hielt Dr. Tilmann Leisegang einen Vortrag zu „Materialforschung im Kontext der Energiewende: Die Batterie von morgen“. Tina Nestler wurde als Vortragende auf die „21st International Conference of Solid State Ionics“ nach Padua, Italien eingeladen (18.–23. Juni 2017). Dort hielt sie einen Vortrag zu „Inorganic crystalline solids with utilizable Al^{3+} mobility“ und präsentierte den aktuellen Stand der Aluminium-Ionen-Batterie-forschung. Zum „Vernetzungstreffen Effiziente Mobilität Sachsen – Neue Wertschöpfung mit Elektromobilität und intelligenten Verkehrssystemen“ der Sächsischen Energieagentur SAENA GmbH am 13.11.2017 bewarb sich Dr. Tilmann Leisegang erfolgreich mit dem Vortrag „Aluminium-Ionen-Batterie als Post-Lithium-Technologie“. Im Rahmen der Nacht der Wissenschaften in Freiberg, am 17. Juni 2017, zeigten Tina Nestler und Robert Schmid, wie man mit einer Al-Luft-Batterie ein Elektrofahrzeug auf der Zentimeterskala erfolgreich ausrüsten kann.

Auszeichnungen von Mitarbeitern erfolgten durch verschiedene eingeworbene Stipendien für Tagungsbesuche und Auslandsaufenthalte von Mitarbeitern. Falk Meutzner erhielt auf dem Treffen der „Young Crystallographers“ (05./06.09.2017) für seinen Beitrag „Assessing Al-ion conductors from sulphides and selenides“ einen Posterpreis. Die in 2017 veröffentlichten Arbeiten im Journal *Crystal Research & Technology* zählen zu den „Most Accessed“ in diesem Jahr in dieser Zeitschrift (Rang 3 bzw. 6).

Zusammenarbeit mit dem Samara Center for Theoretical Materials Science

Die gemeinsam mit dem Samara Center for Theoretical Materials Science (SCTMS, Direktor: Prof. Vladislav A. Blatov) begonnen Arbeiten zur topologischen Analyse von geeigneten kristallinen Festkörperelektrolyten für Na^+ -Ionenleiter wurden in einer weiteren Publikation veröffentlicht sowie Arbeiten zu Al^{3+} -Ionenleitern intensiviert. Ferner konnten zwei G-RISC-Stipendien des DAAD eingeworben werden. Falk Meutzner führte damit einen einmonatigen Forschungsaufenthalt in Samara durch, der sich mit dem Aufenthalt von Dr. Tilmann Leisegang überschneidet. Im Mai 2018 wird Roman Eremin vom SCTMS einen einmonatigen Aufenthalt in Freiberg antreten, um sich mit Modellierungen von Röntgendaten zu Festelektrolyten mittels der Dichtefunktionaltheorie zu beschäftigen. Weiterhin wurden zwei Forschungsanträge im Rahmen der Ausschreibung „DFG-RFBR Cooperation: Possibility for Joint German-Russian Research Projects“ vorbereitet und eingereicht.

Kurzbericht zum Aufenthalt in Samara

Samara, zu Sowjetzeiten unter dem Namen Kuibyschew noch zweite Hauptstadt der Sowjetunion, ist die sechstgrößte Stadt Russlands, schmiegte sich einige Kilometer entlang an der Wolga und präsentiert einen zu

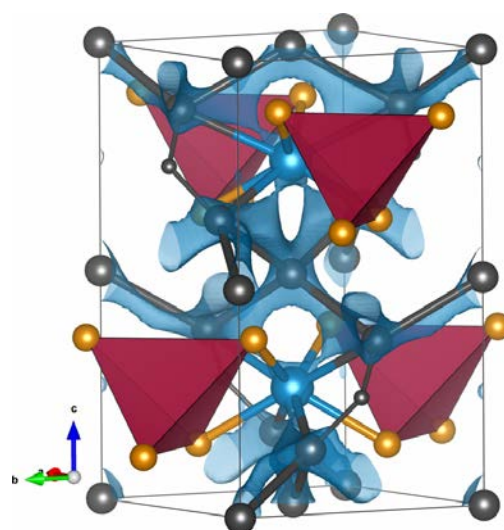


Abbildung 3: Graphische Darstellung der Voronoi-Dirichlet-Partitionierung und Bond-Valence-Site-Energy-Berechnung zum Auffinden von Leitfähigkeitsnetzwerken in Festelektrolytmaterialien



Abbildung 4: Dr. Tilmann Leisegang bei Arbeiten an einer Batteriezelle in der Glovebox

Sommerzeiten stets sehr reich bevölkerten Flussstrand, an dessen gegenüberliegender Seite sich Wälder und Hügel erheben. Die weiten Distanzen innerhalb der Stadt werden normalerweise mit der mittlerweile sicher als antik geltenden Straßenbahn zurückgelegt, mit der sich auch viele interessante Winkel innerhalb der Stadt erkunden lassen: riesige Plätze, Holzhäuser, eine Statue Lenins auf dem Platz der Revolution, aber auch Hochhäuser, Einkaufszentren und – das Wahrzeichen der Stadt – das Weltraummuseum inkl. originaler Sojusrakete. In Samara wurden zu Nachkriegszeiten die Turbinen und andere wichtige Bauteile für dieses Raketenmodell entwickelt und gefertigt. Die Universität besitzt daher auch den Beinamen „Sergei Koroljow“, nach dem russischen Pionier der Raumfahrt.

In der Arbeitsgruppe von Prof. Vladislav Blatov wird seit den späten 1980er Jahren das Programm ToposPro entwickelt, das kristallchemische Analysen auf Grundlage topologischer und geometrischer Berechnungen erlaubt. Weiterhin lassen sich leicht kristallographische Datenbanken durchsuchen und alle Rechnungen darauf anwenden, wodurch größte Datenmengen effizient und parallel bearbeitet werden können. Das damit einhergehende *Data-Mining* ist somit integraler Bestandteil der Forschung am *Samara Center for Theoretical Materials Science* geworden. Einer der Schwerpunkte befasst sich mit der geometrischen Vorhersage von Batteriematerialien mittels Voronoi-Dirichlet-Partitionierung und der Identifizierung von Leerstellennetzwerken in Kristallstrukturen.

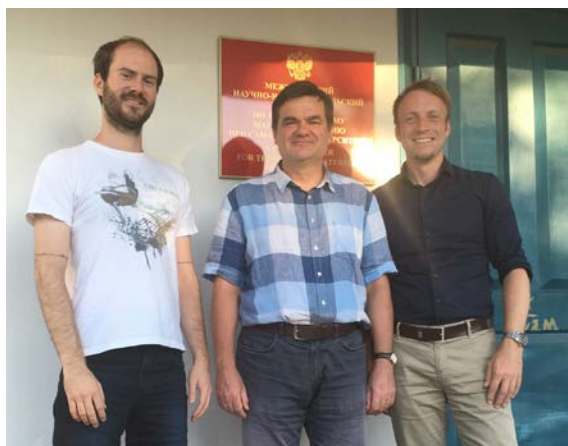


Abbildung 5: Falk Meutzner, Prof. Vladislav A. Blatov und Dr. Tilmann Leisegang während ihres Besuchs des *Samara Center for Theoretical Materials Science* (Russland)

Die Kooperation in den letzten Jahren war sehr fruchtbar, wodurch bisher zwei gemeinsame Veröffentlichungen entstanden. Während des Aufenthaltes am SCTMS wurden dichtefunktionaltheoretische Rechnungen zu aluminiumhaltigen Oxiden, Sulfiden und Seleniden durchgeführt, um damit eine Bewertungsgrundlage dieser Stoffklassen für die ionische Leitfähigkeit von Al^{3+} -Ionen zu schaffen. Durch die großen Elektronenhüllen von Schwefel und Selen vermuten wir eine zunehmende Abschirmung der hohen Ladung des mobilen Kations, die chemisch mithilfe des HSAB-Prinzips erklärt werden kann: Zunehmend weichere Basen interagieren schlechter mit der harten Säure des Al^{3+} . Mit den extrahierten Erkenntnissen konnten wir unter den Sulfiden und Seleniden nach interessanten Kandidaten mit potentieller Al-Ionenleitfähigkeit mithilfe von Voronoi-Dirichlet-Partitionierung suchen. Die Ergebnisse werden voraussichtlich im Jahr 2018 publiziert.

Internationale Vernetzung

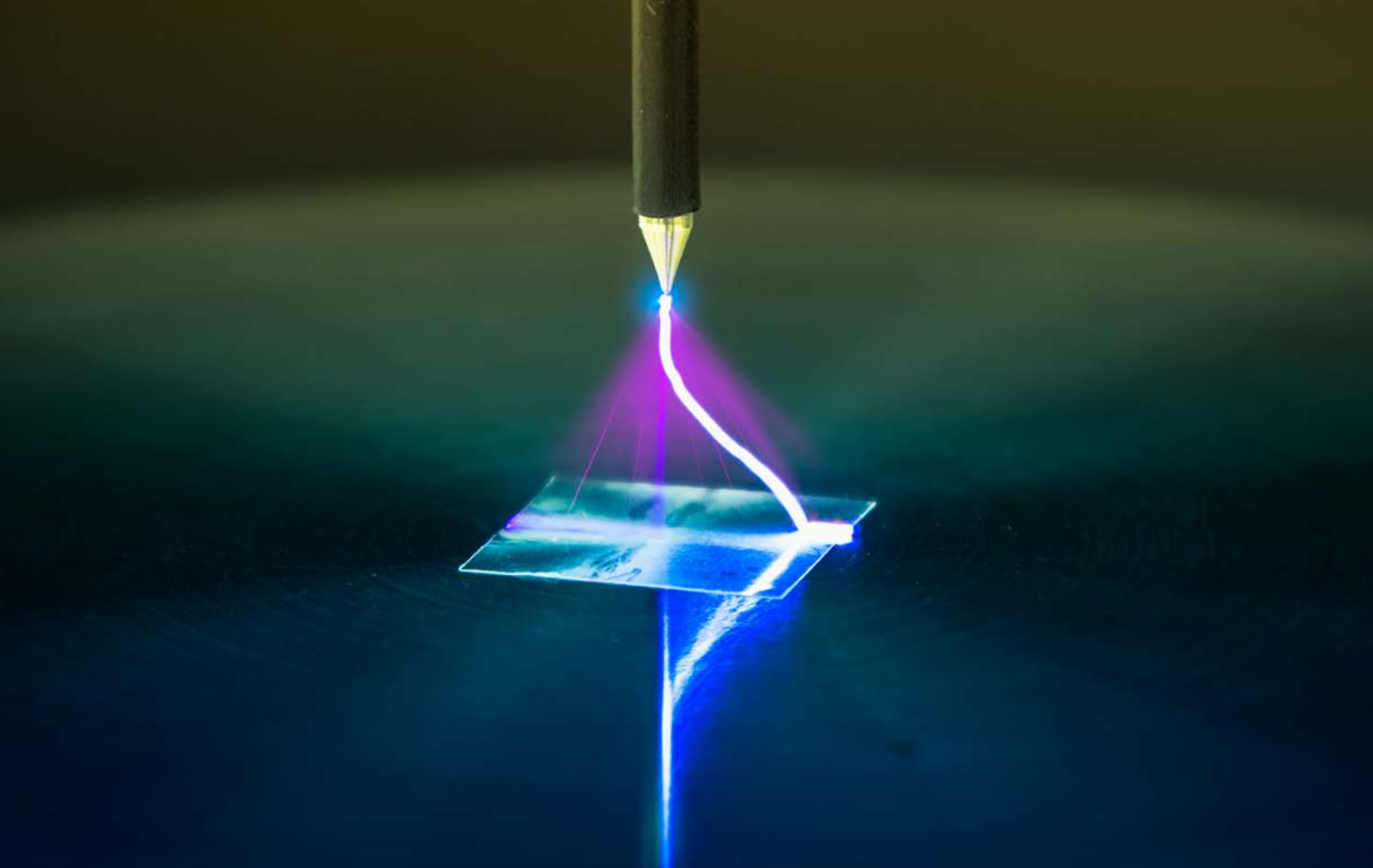
Die während der EStorM2017 ausgebauten Kontakte nach Singapur zum *Department of Materials Science and Engineering*, Gruppe Professor Stefan Adams, der *National University of Singapore* mündeten bereits in einem gemeinsamen Artikel, der 2018 erscheinen soll. Hier bezieht sich die Zusammenarbeit auf die Anwendung der dort entwickelten Software zur Berechnung von *Bond-Valence-Lagenenergien* (*Bond-Valence-Site-Energy* – BVSE) zum Auffinden potentieller Festkörperelektrolyte.

Während des Samara-Aufenthalts konnte Dr. Tilmann Leisegang gemeinsam mit Prof. Blatov verschiedene Projektanträge vorbereiten und ein gemeinsames Buchprojekt sowie eine gemeinsame Publikation bearbeiten. Mit Dr. Pavlo Solokha von der Università degli Studi di Genova, Genua, Italien und Roman Eremin vom SCTMS widmete er sich der Auswertung von Röntgeneinkristalldaten einer Al-Sc-Pd-Verbindung. Auch mit Professor Davide M. Proserpio der Università degli Studi di Milano, Dipartimento di Chimica, Mailand, Italien, der ebenfalls das SCTS besuchte, diskutierte Dr. Tilmann Leisegang topologische Aspekte von Festelektrolyten und ein gemeinsames EU-Vorhaben.

Die Masterarbeit von Tina Weigel bildete zudem die Grundlage für die erfolgreiche Einwerbung eines Federmann-Stipendiums, welches zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses und dem Ausbau der Zusammenarbeit mit wissenschaftlichen Institutionen in Israel verliehen wird. Tina Weigel konnte so einen sechsmonatigen Aufenthalt an der *Bar-Ilan-University* im *Department*

of Chemistry in der Arbeitsgruppe von Professor Doron Aurbach, einem weltweit führenden Wissenschaftler im Bereich der elektrochemischen Energiespeicher, bei röntgenographischen Untersuchungen neuartiger kristalliner Batteriematerialien sowie der Konzeption einer elektrochemischen Zelle für die *In-situ-/Operando*-Röntgendiffraktometrie mitwirken. Damit konnte zum zweiten Mal nach 2015 ein Mitarbeiter des IEP innerhalb der Arbeitsgruppe von Professor Doron Aurbach einschlägige Erfahrungen im Bereich der Elektrochemie sammeln. Falk Meutzner, der ebenfalls Federmann-Stipendiat war, besuchte die Arbeitsgruppe bereits im Rahmen seiner Doktorandentätigkeit und forschte an der Herstellung und Charakterisierung von Interkalationsmaterialien für Post-Lithium-Systeme.

Die finanzielle Unterstützung der Arbeiten des Kompetenzzentrums erfolgte im Rahmen der BMBF-Verbundprojekte CryPhysConcept (03EK3029A) und R2RBattery (03SF0542A) sowie PhosCar und dem DAAD.



FREIBERGER ZENTRUM FÜR PYROELEKTRIZITÄT

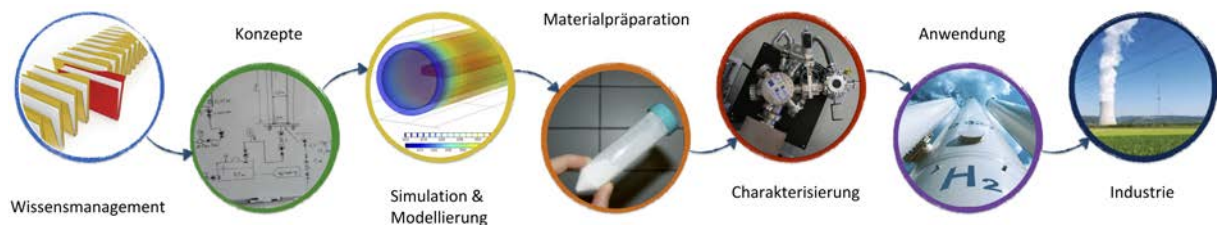
Nach Schätzungen unterschiedlicher Energieagenturen und Institutionen gehen heutzutage weltweit mehr als 72 % des für die technische Nutzung gewandelten Energieaufkommens in Form von Abwärme verloren. Das entspricht einer Energiemenge von 246 EJ oder 68 PWh und damit etwa dem Dreifachen des europäischen Primärenergiebedarfs. 63 % der Abwärme fällt bei Temperaturen unter 100 °C an. Diese thermische Energie geht ungenutzt als sogenannte Niedertemperaturabwärme verloren.

Das vom Institut für Experimentelle Physik initiierte und von Dr. Hartmut Stöcker geleitete „Freiberger Zentrum für Pyroelektrizität“ (FZP) hat sich zum Ziel gesetzt, diese sogenannte Niedertemperaturabwärme nutzbar zu machen. Im Fokus der Arbeiten stehen die wissenschaftliche Untersuchung, Entwicklung und technische Erprobung innovativer Ansätze zur Nutzung von Niedertemperaturabwärme für Energie- und Stoffwandlungsprozesse durch Anwendung neuartiger pyroelektrischer Funktionsmaterialien.

Wesentliches Know-how und eine breite Infrastruktur zu pyroelektrischen Materialien wurden im Rahmen

verschiedener Projekte und Kooperation mit lokalen und internationalen Partnern innerhalb der vergangenen zehn Jahre aufgebaut und im FZP gebündelt. Wichtige Meilensteine waren:

- 2007: Pyroelektrische Röntgenstrahlerzeugung mit Lithiumniobat.
- 2009–2011: BMBF-Verbundvorhaben „Biomimetische Mineralisation für die Technik (BIOMINT)“. Im Zentrum des Vorhabens stand die Nutzung der besonderen Eigenschaften pyroelektrischer kristalliner Materialien in Verbindung mit biotechnologischen und physiko-chemischen Prozessen. Mit diesem neuartigen technologischen Ansatz wurden vielversprechende Anwendungen im Bereich der Bioverfahrenstechnik, der Umwelttechnologie und der Lebenswissenschaften erarbeitet.
- 2009: Nachweis der desinfizierenden Wirkung pyroelektrischer Oberflächen.
- 2010: Nachweis der eisabweisenden Wirkung pyroelektrischer Oberflächen.
- 2010: Nachweis der Radikalerzeugung an pyroelektrischen Oberflächen.



- 2012–2014: ESF-Nachwuchsforschergruppe „Pyroelektrische Funktionsmaterialien für die Energie- und Stoffwandlung (PyroConvert)“. In der interdisziplinären Gruppe wurden auf Pyroelektrika basierende Konzepte für die Nutzung von Niedertemperaturabwärme für Energie- und Stoffwandlungsprozesse erarbeitet.
- 2013: Messaufbau zur Bestimmung pyroelektrischer Koeffizienten mit der Sharp-Garn-Methode im Temperaturbereich von 0 °C bis 170 °C.
- 2013–2015: VIP-Vorhaben „Pyroelektrisch funktionalisierte Schichten zur aktiven Schaltung von Oberflächeneigenschaften (PyroFunk)“. Ziel war die Entwicklung und Optimierung neuartiger eisabweisender Oberflächenbeschichtungen auf der Basis pyroelektrischer Materialien.
- 2013–2014: Bau eines Demonstrators zur Wasserstofferzeugung im Rahmen der ESF-Nachwuchsforschergruppe PyroConvert.
- 2014: Vakuumkammer zur Polarisierung pyroelektrischer Proben bei Spannungen bis zu 30 kV.
- 2015: Erstmaliger Nachweis von Pyroelektrizität der MFP-Phase von Strontiumtitanat mittels elektrischem Feld und Defektmigration.
- 2016: UHV-Vakuumkammer zur Bestimmung pyroelektrischer Koeffizienten bei hohen Temperaturen bis 1000 °C.
- 2017: Korona-Aufbau zur kontaklosen Polung von pyroelektrischen Polymerproben.

Demonstrator zur pyroelektrischen Wasserstofferzeugung

Zur Umwandlung von Niedertemperaturabwärme in chemische Energie wurde am IEP ein Demonstrator zur pyroelektrischen Wasserstofferzeugung entwickelt und in

Betrieb genommen. Dieser wurde erstmals öffentlich auf der Hannover Messe 2016 am Gemeinschaftsstand „Forschung für die Zukunft“ der Länder Sachsen, Sachsen-Anhalt und Thüringen präsentiert.

Die Pyroelektrizität ist eine kristallphysikalische Eigenschaft, die ausschließlich bei Materialien auftritt, die ein permanentes elektrisches Dipolmoment besitzen (wie z. B. Bariumtitanat). Durch eine zeitliche Temperaturänderung des Kristalls, beispielsweise durch zugeführte Abwärme, kommt es zu einer Ladungstrennung. Dabei entstehen auf den gegenüberliegenden Flächen des Kristalls unterschiedliche Potentiale und damit eine abgreifbare elektrische Spannung. Genutzt wird dies beispielsweise zur berührungslosen Temperaturmessung bei Infrarotthermometern oder in Bewegungsmeldern. Im Demonstrator kommen pyroelektrische Materialien nunmehr zum Einsatz, um mittels Niedertemperaturabwärme Wasser in Wasserstoff und Sauerstoff aufzuspalten.

Im Demonstrator wird die von außen zugeführte Abwärme zunächst durch einen Wärmeübertrager in einen Sekundärkreislauf überführt. Das darin zirkulierende Medium (z. B. Wasser) wird durch einen Reaktor geleitet, in dem sich das pyroelektrische Material befindet. Durch den zyklischen Wechsel von kaltem und warmem Zustrom wird das pyroelektrische Material aktiv und die Moleküle des Wassers reagieren an dessen Oberfläche. Sie werden dort in Sauerstoff und Wasserstoff aufgespalten. Die gelösten Gase werden vom Medium abgeführt, durch eine Membran abgetrennt und danach für die weitere Verwendung gespeichert. Mittels des pyroelektrischen Effekts lässt sich folglich bisher ungenutzte Abwärme (thermische Energie) in elektrische bzw. chemische Energie wandeln.

Weiterführende Informationen zum Demonstrator und zum FZP finden Sie unter <http://pyro.tu-freiberg.de>.



ZENTRUM FÜR EFFIZIENTE HOCHTEMPERATUR-STOFFWANDLUNG

Erfolgreicher Wettbewerb auf Bundesebene

Im Zeitraum der Jahre 2012 bis 2015 beteiligte sich die TU Bergakademie Freiberg (TU BAF) mit einem Antrag für ein „Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung“ (ZeHS) am Wettbewerb um eine Förderempfehlung für Forschungsbauten an Hochschulen gemäß Art. 91b GG. Nach der erfolgreichen Verteidigung vor dem Wissenschaftsrat und der Bestätigung durch die gemeinsame Wissenschaftskonferenz des Bundes und der Länder stehen der Universität in den Jahren 2015 bis 2020 41,5 Mio. Euro für die Baukosten und die Beschaffung ausgewählter Großgeräte zur Verfügung.

Im Rahmen des bundesweiten Wettbewerbs soll für exzellente und national bedeutsame Forschungsprogramme an Hochschulen die bauliche Infrastruktur mit einem Gesamtvolumen in Höhe von knapp 367 Mio. Euro bis 2020 gefördert werden, um so die Voraussetzungen der Hochschulen im nationalen und internationalen Vergleich weiter zu verbessern. Die Förderung der Vorhaben unterliegt strengen Kriterien. Wichtigste Voraussetzungen sind, dass sich diese durch herausragende wissenschaftliche Qualität auszeichnen und die

Forschungsprogrammatik von überregionaler und nationaler Bedeutung ist.

Zum mehrstufigen Antragsverfahren gehörten die Vorlage einer Antragskizze wie auch eines umfangreichen Vollertrags beim Wissenschaftsrat, wobei der TU BAF in allen Schritten vollste Unterstützung durch das Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst (SMWK) zu Teil wurde. Eine wichtige Rolle für die Auswahlentscheidung spielte die am 4. März 2015 von Professor Dirk C. Meyer als Sprecher des ZeHS und federführendem Verfasser der Antragsdokumente erfolgreich absolvierte Verteidigung des Vorhabens vor Vertretern des Wissenschaftsrats in Bonn. Am 24. April 2015 veröffentlichte der Wissenschaftsrat seine Förderempfehlung zugunsten des ZeHS, in deren Rahmen er der Forschungsprogrammatik sehr hohe nationale Bedeutung beimaß, da diese einen technologisch und wirtschaftlich sehr relevanten Beitrag zum Thema der Energiewende ermöglicht. Schließlich bestätigte die Gemeinsame Wissenschaftskonferenz aus Bund und Ländern diese Empfehlung am 19. Juni 2015. Eine wichtige Basis für die Forschungsprogrammatik bilden u. a. an der TU BAF bearbeitete Sonderforschungsbereiche

der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) und durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung sowie durch den Freistaat Sachsen finanzierte Verbundforschungsvorhaben. In erster Linie sind dies die DFG-Sonderforschungsbereiche 920 „Multifunktionale Filter für die Metallschmelzefiltration – ein Beitrag zu Zero Defect Materials“ (Sprecher Professor Christos Aneziris) bzw. 799 „TRIP-Matrix-Composite“ (Sprecher Professor Horst Biermann), das Innovationskompetenzzentrum „Virtuelle Hochtemperatur-Konversionsprozesse – VIRTUHCON“ (Sprecher Professor Bernd Meyer) sowie der Spitzentechnologiecluster ADDE des Freistaats Sachsen (Sprecher Professor David Rafaja).

Bündelung vorhandener Kompetenzen

Mit der Etablierung des ZeHS folgt die TU BAF ihrem Hochschulentwicklungsplan 2020, Forschung und Lehre über die gesamte Wertschöpfungskette weiter zu vernetzen. Dabei wird eine lückenlose Verknüpfung, ausgehend von der Theorie über den Laborversuch, die Technikums- und Pilotversuchsanlage bis hin zur Großversuchstechnik in einer für die industrielle Nutzung erforderlichen skalennmäßigen Auslegung, angestrebt. Der Forschungsbau ermöglicht die strukturelle Bündelung der an der TU BAF in den Bereichen Hochtemperatur-(HT)-Prozesse und -Materialien in einzigartiger Weise vorhandenen Kompetenzen. Die HT-Stoffwandlung umfasst dabei alle Prozesse, die bei Temperaturen oberhalb von etwa 500 °C ablaufen. Der Fokus des ZeHS liegt auf der Entwicklung innovativer, ressourcen- und energieeffizienter Technologien im Bereich der Grundstoffindustrie, wobei Prozess- und Materialanforderungen in der chemischen Industrie, der Metallurgie sowie der Keramik-, Glas- und Baustoffindustrie zusammenhängend betrachtet werden und die Ergebnisse auch auf andere Branchen übertragbar sind.

Maßgebliche Beiträge zur Energiewende

In seiner Empfehlung zur Förderung des Vorhabens unterstreicht der Wissenschaftsrat die erhebliche strategische Bedeutung der Steigerung von Ressourcen- und Energieeffizienz im Zusammenhang mit der Energiewende. Hier kommen der flexibleren Nutzung erneuerbarer Ressourcen und der Schaffung geschlossener Stoff- und Energiekreisläufe sowie der Ausrichtung von Industrieprozessen auf zeitlich fluktuierende Angebote an Überschussenergie – insbesondere aus Solar- und



Windkraft – unter Einbeziehung der Energiespeicherung besondere Bedeutung zu. Dabei stehen die Anforderungen an Prozesse und -Materialien im unmittelbaren Zusammenhang. Die Entwicklungs- und Prozessketten erstrecken sich von den Grundlagen bis zu den Anwendungen in industrieeskaligen Pilotanlagen. Das ZeHS soll im Ergebnis den Verbleib der ressourcen- und energieintensiven Grundstoffindustrie in Deutschland unterstützen; strategisch werden auch Neuansiedlungen angestrebt.

Strukturelle Kennzeichen

Das ZeHS ist im Rahmen der interdisziplinären Arbeitsgegenstände der Forschungsprogrammatik für alle Professuren der TU BAF offen, womit deren Mitarbeiter die mit dem Forschungsbau geschaffene Infrastruktur und die Zentrallabore kooperativ in Anspruch nehmen können. Die Professuren verbleiben an ihren Instituten, um die Verflechtung mit den Fakultäten zu erhalten. Die Forschungsinfrastruktur der TUBAF wird durch das Prozess- und Materialtechnikum des ZeHS abgerundet. Zur Umsetzung der Forschungsprogrammatik des ZeHS wurde eine gleichnamige Zentrale Einrichtung gegründet. Eingeschlossen ist die Unterstützung von Aufgaben in Lehre und Weiterbildung. Das Rektorat verabschiedete nach Anhörung des Senats eine entsprechende Ordnung, welche Einzelheiten zur Struktur und zur Arbeit des Zentrums regelt.

Kompetenzzentren

„Hochtemperaturprozesse“ und „-materialien“

Die Forschungsschwerpunkte des ZeHS werden durch die zwei komplementären Kompetenzzentren „HT-Prozesse – Vom Mechanismus zur Anwendung“ sowie „HT-Materialien – Vom Material zum Bauteil“ vertreten. Diese beiden Kompetenzzentren sollen die wissenschaftlichen Entwicklungslinien des ZeHS geschlossen bearbeiten. Sie umfassen jeweils mehrere Arbeitsgruppen; spezifische Quervernetzungen sind vorgesehen. Die angestrebte Gliederung des Forschungsbaus in ein

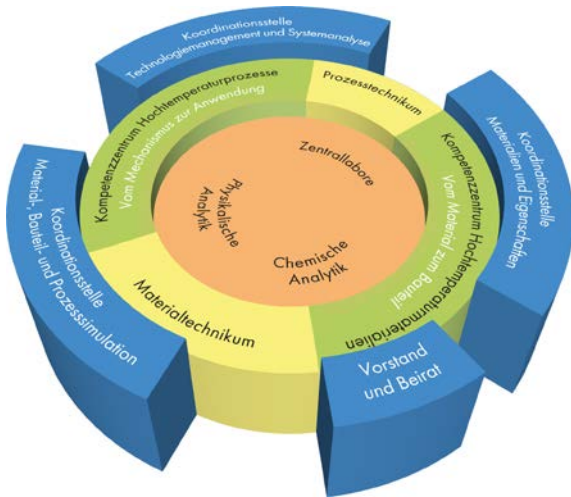


Abbildung 1: Teilbereiche des ZeHS

gemeinsames Büro- und Laborgebäude sowie die Hallen für das Prozess- und Materialtechnikum schaffen die infrastrukturellen Voraussetzungen für die Bearbeitung der übergreifenden wissenschaftlichen Fragestellung.

Im Kompetenzzentrum „HT-Prozesse“ werden die Forschungs- und Entwicklungsarbeiten des ZeHS zu Technologien für effiziente HT-Prozesse hin zu chemischen HT-Prozess-Reaktoren und allgemein HT-Prozess-Anlagen gebündelt, die für die Erzeugung der meisten industriellen Grundstoffe (z. B. Metalle, Keramik, Glas und Basischemikalien) von essentieller Bedeutung sind. Allgemein soll die HT-Prozesstechnik dahingehend weiterentwickelt werden, dass deren Ressourceneffizienz bei gleichzeitiger Erhöhung der Energiedichte entscheidend gesteigert werden kann. Mittel- bis langfristig soll die vorhandene Expertise zu chemischen Reaktoren und Öfen der Thermoprozesstechnik mit dem Ziel, ein umfassendes Stoff-, Prozess-, Material- und Modellierungswissen der beteiligten Fachdisziplinen für eine neue Generation von HT-Prozessen bereitzustellen, zusammengeführt werden.

Im Kompetenzzentrum „HT-Materialien“ werden die Forschungs- und Entwicklungsarbeiten des ZeHS für synthetische feuerfeste Materialien gebündelt. Diese bilden die Voraussetzung für den Aufbau der Prozessumgebung bei allen maßgeblichen HT-Prozessen. Die Forschungsprogrammatik des Kompetenzzentrums HT-Materialien folgt umfassend dem ausgesprochen



Abbildung 2: Symbolischer „erster Baggerbiss“ am 12.05.2017

breiten Anforderungsspektrum bezüglich der Eigenschaften der HT-Materialien für eine deutliche Verschiebung ihrer Belastungsgrenzen und neue Anwendungsfelder. Die Kategorie der HT-Materialien ist, außer durch eine hohe Schmelztemperatur, zugleich durch große, auch das dynamische Verhalten betreffende, mechanische Festigkeitsanforderungen im gesamten Temperaturbereich des Einsatzes charakterisiert. Es ist vorgesehen, alle Einzelbereiche von der Ressourcenverfügbarkeit über technologische Fragen, etwa zur Fügetechnik, bis hin zum Recycling, geschlossen abzubilden.

Koordinationsstellen

Die beiden Kompetenzzentren bilden zusammen mit drei Koordinationsstellen die fachliche Gliederung des ZeHS (siehe Abbildung 1). Die Koordinationsstellen „Materialien und Eigenschaften“, „Material-, Bauteil- und Prozesssimulation“ und „Technologiemanagement und Systemanalyse“ koordinieren einerseits die methodischen Kompetenzen sowie die Geräteinfrastruktur innerhalb des ZeHS,

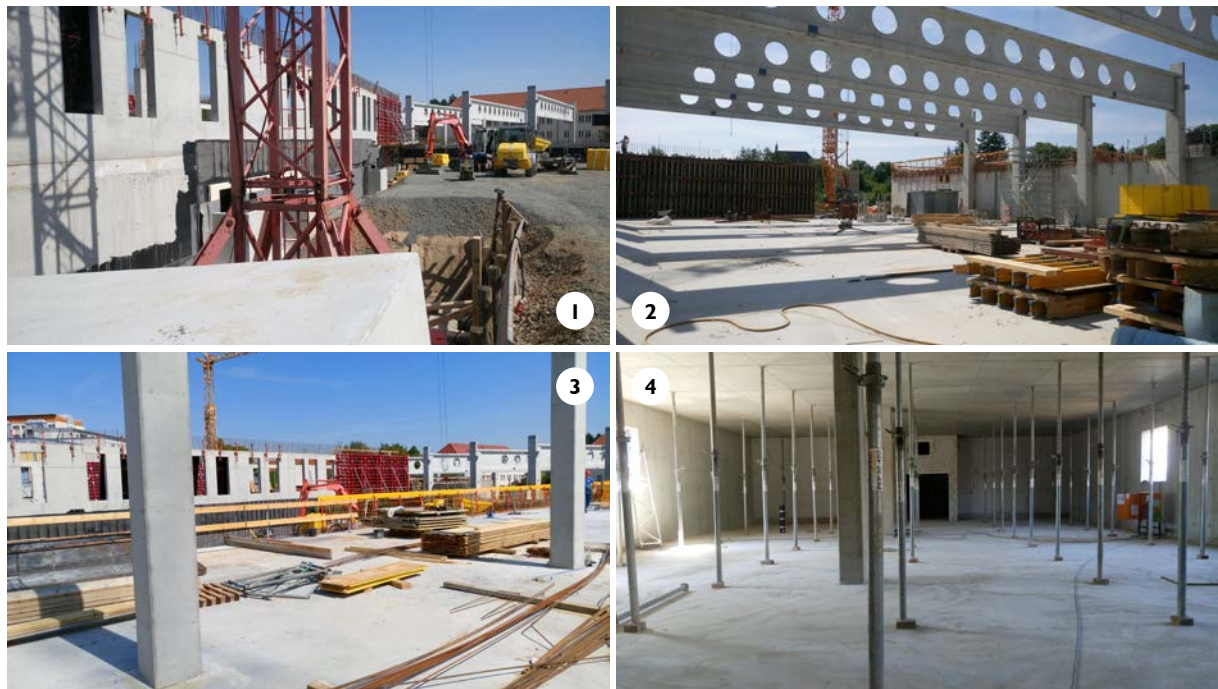


Abbildung 3: Baufortschritt im Mai 2018: (1) Blick vom Innenhof entlang der Laborspange Nord zur Technikumshalle, (2) in der Technikumshalle, (3) Blick vom Erdgeschoss der Laborspange Süd zur Laborspange Nord, (4) Kellerraum in der Laborspange Nord

insbesondere für die geplanten Zentrallabore „Physikalische und Chemische Analytik“. Außerdem begleiten sie Verbundforschungsvorhaben mittels betriebswirtschaftlicher Methoden. Sie fungieren andererseits als Schnittstellen für die Integration der an den Instituten der TU BAF vorhandenen Kompetenzen in der Materialanalytik, Synthese, Modellierung, Simulation wie auch in den Wirtschaftswissenschaften und fördern fakultätsübergreifend den interdisziplinären Austausch. Die Koordinationsstelle „Technologiemanagement und Systemanalyse“ hat neben der Planung, Durchführung und Kontrolle der Entwicklung ressourcen- und energieeffizienter HT-Prozesse Aufgaben im Innovationsmanagement und Wissenstransfer. Darüber hinaus sind die Koordinationsstellen logistische Ansprechpartner für Kontakte mit dem ZeHS und externen wissenschaftlichen Einrichtungen sowie für den Wissenstransfer in industrielle Anwendungen.

Prozess- und Materialtechnika

Darüber hinaus sollen zwei Hallen für ein Prozess- und ein Materialtechnikum als kooperativ genutzte Infrastrukturen gebaut werden. Durch die Großgeräte im Prozess- und Materialtechnikum kann die Forschungsinfrastruktur

der TU BAF zu geschlossenen Prozessketten integriert werden. Das Prozesstechnikum gliedert sich dabei in ein Synthese- und ein Ofentechnikum sowie ein Korrosions- und Nitrierlabor mit jeweils verschiedenen Geräten und Versuchsständen. Im Materialtechnikum soll das Kernstück einer pulvermetallurgischen Fertigungslinie für HT-Materialien bzw. refraktäre Verbundwerkstoffe abgebildet werden.

Ausbau der Studienangebote

Die TU BAF plant im Zusammenhang mit der Forschungsprogrammatik des ZeHS die Einrichtung interdisziplinärer Bachelor- und (internationaler) Masterstudiengänge. Damit soll die internationale Verankerung des ZeHS im Bereich der Lehre sowie die Entwicklung profilierten wissenschaftlichen Nachwuchses gewährleistet werden.

Bauliche Realisierung

Der Forschungsbau soll in den Jahren 2016 bis 2020 zentral auf dem Campus der TU BAF errichtet werden. Die Gesamtkosten von 41,51 Mio. € lassen sich in Baukosten (28,67 Mio. €), Kosten für die Anschaffung von

Großgeräten (9,75 Mio. €) und Kosten für die Erstaussstattung (3,09 Mio. €) einteilen. Das Gebäude soll eine Gesamtfläche von 6.011 m² aufweisen, welche u. a. Büroräume, Laborflächen, Versuchshallen und einen Computerpool umfasst. Die organisatorische Verantwortung für die inhaltliche Planung, Nutzung und den Betrieb des Forschungsbaus liegt beim Direktor/Sprecher und dem Vorstand des ZeHS. Der Forschungsbau schafft Platz für bis zu 145 wissenschaftliche und 33 nichtwissenschaftliche Mitarbeiter.

Aktivitäten

Mit einem symbolischen „Ersten Baggerbiss“ gab der amtierende Finanzminister Prof. Dr. Georg Unland am 12. Mai 2017 den Startschuss für die vorbereitenden Infrastrukturbauarbeiten für die Neubauten des ZeHS sowie für das Hörsaalzentrum und die Universitätsbibliothek der TU BAF am Messeplatz in Freiberg (siehe Abbildung 2). Bis zum Jahresende nahm das Bauvorhaben des ZeHS sichtbar Gestalt an. Neben der Erstellung der Fundamente wurde die Bodenplatte installiert. Die Errichtung des Rohbaus erfolgt entsprechend der hierfür vorgesehenen Zeitplanung und wird voraussichtlich Anfang des Jahres 2019 abgeschlossen sein (siehe Abbildung 3). Die Planung der Labore ist beendet, die Leistungen werden nunmehr ausgeschrieben. Die Installationsplanung der Hallen wird bis zum Sommer 2018 finalisiert. Damit kann der Innenausbau sowohl der Hallen als auch der Labore im August des Jahres 2018 aufgenommen werden. Mit dem Ende der Bauausführung ist Mitte des Jahres 2020 zu rechnen. Daneben begann die formal erforderliche Antragstellung bei der DFG für die im ZeHS vom Wissenschaftsrat empfohlenen Forschungsgroßgeräte. Es ist vorgesehen, die Großgeräte ab Januar 2020 in den Forschungsbau einzubringen.

Schriftenreihe zum ZeHS begründet

Im September des Jahres 2017 erschien der erste Band der Reihe „Schriften zum Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung (ZeHS)“. Diese begründet ein neues Format, das Aspekten der Forschungsprogrammatisierung des ZeHS gewidmet ist. Die Schriftenreihe bildet den Auftakt zur internen und externen Kommunikation der Entwicklung der Arbeitsgegenstände des ZeHS und deren



Abbildung 4: Deckblatt zum Heft 1 – 2017 der Schriften zum Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung (ISSN 2513-1192)

Einbindung in Systemzusammenhänge. Vorgesehen sind weitere Ausgaben in zunächst unregelmäßigen zeitlichen Abständen bereits während der Bauzeit des ZeHS. Im Laufe der nächsten Jahre sind im Zusammenhang mit dem ZeHS zusätzliche Kommunikationsinstrumente, so die Etablierung einer internationalen englischsprachigen Fachzeitschrift und zugeordneter Fachtagungen geplant. Neben einzelnen Gastbeiträgen wurden für den Startpunkt des im Jahr 2017 erschienenen ersten Bandes zunächst Mitglieder des Vorstands des ZeHS und Leiter eingeschlossener Struktureinheiten um Beiträge gebeten. Der Autoren- und Themenkreis soll nunmehr durch die Aufbereitung der Inhalte einschlägiger Projekt- oder Graduationsarbeiten für eine Publikation in diesem Rahmen erweitert werden. Als Anreiz und für eine dauerhafte Etablierung wurde auf die Vergabe einer ISSN Wert gelegt.

Weiterführende Informationen zum ZeHS finden Sie unter <http://www.zehs-freiberg.de>.

PROJEKTE



BMBF-VERBUNDPROJEKT R2RBATTERY

Die weltweite Nachfrage nach Energiespeichern steigt mit dem Ausbau erneuerbarer Energien und der wachsenden Anzahl an Elektrofahrzeugen und mobilen Endgeräten. Um den zukünftigen Bedarf decken sowie den stetig steigenden Anforderungen gerecht werden zu können, sind neue Speichertechnologien und Materialsysteme mit höchsten Energiedichten und gut verfügbaren Rohstoffen erforderlich. Das Institut für Experimentelle Physik entwickelt dafür im Verbundprojekt R2RBattery neuartige Post-Lithium-Energiespeicher.

Zieht man die gesamten weltweit verfügbaren Reserven von Lithium heran (ca. 14 Mio. Tonnen), so würden diese unter Nutzung der aktuellen Lithium-Ionen-Technologie für ca. 1 Mrd. PKW (mit jeweils ca. 500 km Reichweite) reichen, was dem heute bereits vorhandenem weltweiten Bestand entspricht. Diese Zahl veranschaulicht, dass die Umsetzung der Energiewende, die elektrochemische Energiespeicher nicht nur für die Elektromobilität, sondern auch für stationäre Anwendungen benötigt, allein mit der Lithium-Ionen-Technologie kaum möglich ist. Deshalb werden zusätzliche alternative Materialsysteme für eine Technologie-Diversifizierung benötigt, auch um Deutschland im Bereich der Energiespeicher wettbewerbsfähig zu halten.

Doch welche Materialien sind dafür sinnvoll? Die Auswahl und Bewertung geeigneter Materialien wurden zurückliegend mit einem in Freiberg entwickelten Bewertungsalgorithmus, der auf einem ausgedehnten Parameterfeld basiert, durchgeführt. Die Bewertungskriterien schließen neben elektrochemischen Parametern Ressourcenverfügbarkeit, Umweltverträglichkeit, Recycling, Materialkosten und Betriebssicherheit ein. Im Ergebnis erscheint das Konzept einer wiederaufladbaren Hochvalent-Ionen-Festkörperbatterie auf Aluminium-Basis als aussichtsreich. Hierbei dient reines Aluminium als Anodenmaterial. Das bietet einerseits den Vorteil einer viermal höheren theoretischen Ladungsdichte im Vergleich zu Lithium. Bei gleichem Volumen der Al-Ionen-Batterien würde ein Auto potentiell die doppelte bis sechsfache Reichweite im Vergleich zu kommerziellen Lithium-Ionen-Batterien aufweisen. Andererseits ist Aluminium das häufigste Metall der Erdkruste. Es existiert eine ausgereifte Produktionsindustrie und Recyclinginfrastruktur, sodass Aluminium folglich kostengünstig ist. Es ist ein Kostenreduzierungspotential gegenüber kommerziellen Lithium-Systemen um ein Fünftel bezogen auf den Preis pro Kilowattstunde zu erwarten. Darüber hinaus entzündet sich Aluminium nicht wie Lithium an Luft, wodurch eine

höhere Sicherheit entsprechender Zellen und vereinfachte Verarbeitbarkeit gewährleistet werden kann. Damit könnten die Aluminium-Ionen-Batterien einen wichtigen Beitrag zur Energiewende leisten.

Bisher war es nicht möglich, dieses technologische Potential zu nutzen, da geeignete Kathoden- und Elektrolytmaterialien fehlten. Das Auffinden von Materialien mit hoher Aluminiumionen-Mobilität – einsetzbar als Festelektrolyte oder Interkalationskathoden – kann einen Innovationssprung im Bereich der wiederaufladbaren Hochvalent-Ionen-Batterien ermöglichen. Hier setzt das Verbundvorhaben „Maßgeschneiderte Materialsysteme und Technologien für die Rolle-zu-Rolle-Fertigung elektrochemischer Energiespeicher auf flexiblen Trägern – Hochvalente Ionen für die Energiewende (R2RBattery)“ an (siehe Abbildung 1).

Ziel von R2RBattery ist es, ein Post-Lithium-Energiespeichersystem auf Basis hochvalenter Ionen in Kooperation mit lokalen Industrie- und Forschungspartnern zu entwickeln und maßgeschneiderte Lösungen für deren potentielle großtechnische Produktion zu erarbeiten. In dem vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderten Projekt arbeiten insgesamt vier Verbundpartner (KSI Meinsberg, Fraunhofer FEP Dresden,



Vowalon GmbH Treuen) unter Leitung der TU Bergakademie Freiberg (Koordinator: Prof. Dr. Dirk C. Meyer, Projektmanager: Dr. Tilmann Leisegang) an der Umsetzung dieser neuen Post-Lithium-Ansätze für die elektrochemische Energiespeicherung. Weitere Partner sind das Forschungsinstitut für Leder- und Kunststoffbahnen Freiberg, die Frolyt Kondensatoren und Bauelemente GmbH Freiberg, die Gesellschaft zur Förderung von Medizin-, Bio- und Umwelttechnologien Radeberg und die Cinecator GmbH Mittweida.

Im Vorhaben werden Synthesemethoden sowohl hinsichtlich der Strukturierung als auch der Phasenbildung unter der Randbedingung der Umsetzbarkeit Rolle-zu-Rolle in großer Breite untersucht und gehandhabt. Hinsichtlich des Aufbaus eines elektrochemischen Elements nicht unerwartet, haben sich besondere Erfolge durch die Nutzung galvanischer Oxidationsprozesse

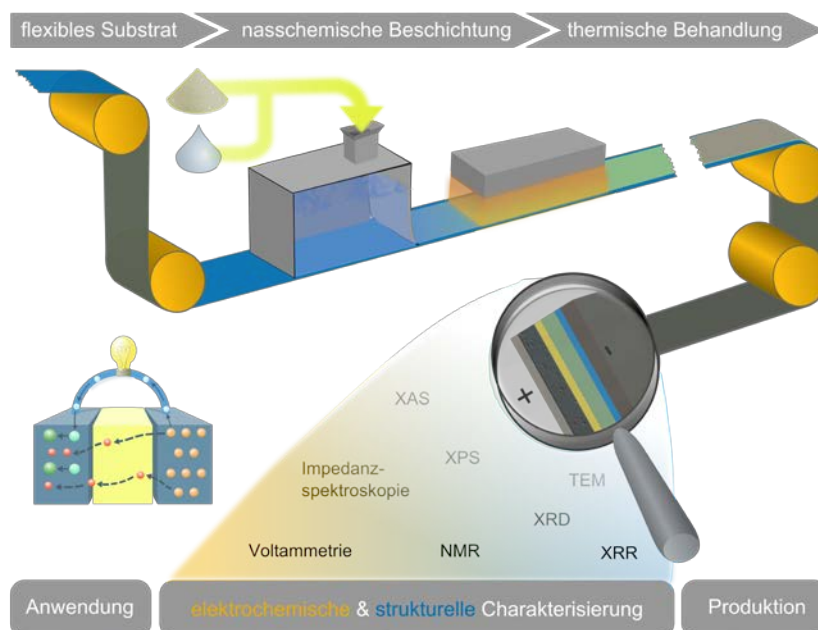


Abbildung 1: Schema zur Batterieherstellung innerhalb des Projekts R2RBattery im Rolle-zu-Rolle-Prozess inklusive der anschließenden Methoden zur Charakterisierung



Abbildung 2: Batteriezellen mit Hydrat-Elektrolyt, die vom Partner FROLYT im Rolle-zu-Rolle-Prozess hergestellt wurden.

ergeben. Neben der Einfachheit sind diese Prozesse durch die große Variabilität der Parameter der angestrebten Zielstrukturen gekennzeichnet.

Das Blitzlampen-Kurzzeittempern (*Flash-Lamp-Annealing* – FLA) ist ein innovatives Verfahren zur thermischen Vor- und -Nachbehandlung mittels Xe-Lampen im Zeitbereich von wenigen tausendstel Sekunden und daher besonders für die Ausheilung und Kristallisation dünner Schichten und zur Erzeugung von strukturierten Elektrodenmaterialien geeignet. FLA ermöglicht die Realisierung einzigartiger Elektrodenstrukturen. Durch die kurze Prozesszeit werden neben zeitlicher Flexibilität völlig neue technologische Möglichkeiten eröffnet, wozu auch eigene Schutzrechtsanmeldungen bestehen.

Der Partner Frolyt ist aktuell mit dem Wickeln umfangreicher Testserien von Batteriesystemen im Rolle-zu-Rolle-Prozess befasst (siehe Abbildung 2). Dabei bildet eine umfassende Parametrix, der verschiedene Elektrodenkombinationen (auch die mittels FLA strukturierten Elektroden) und Separator-Trägermaterialien zu Grunde liegen, die Basis für die im Ergebnis stehende

Bewertung der für die Rolle-zu-Rolle-Fertigung optimalen Batteriesysteme. Erste Testzellen liefern bereits Kapazitäten von über 20 mAh.

Im Rahmen des Projekts erfolgt der Ausbau der internationalen Vernetzung mit der Arbeitsgruppe von Prof. Doron Aurbach, an der *Bar-Ilan University, Department of Chemistry*, Ramat Gan, Israel. Durch ein Federmann-Stipendium gefördert hat Tina Weigel in der Zeit von Januar bis Juni 2017 in der Arbeitsgruppe Aurbach einen *In-situ/Operando*-Röntgendiffraktometriemessplatz für die Charakterisierung elektrochemischer Zellen aufgebaut.

Das Verbundvorhaben wird mit Mitteln des BMBF innerhalb der Maßnahme „Materialforschung für die Energiewende“ (Förderkennzeichen: 03SF0542A) gefördert und vom Projektträger Jülich betreut.



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



SILIZIUM-BASIERTE ANODENMATERIALIEN FÜR SEKUNDÄRBATTERIEN MIT HOHEN ENERGIEDICHTEN

Silizium ist nicht nur ein wichtiger Halbleiter, aus dem 90 % aller weltweit hergestellten Solarzellen gefertigt werden. Es ist ebenso ein besonders aussichtsreiches Material für künftige leistungsfähige elektrochemische Energiespeicher. In kommerziellen Lithium-Ionen-Batterien (LIB) stellen bisher kohlenstoffartige Materialien, insbesondere Graphit, die am häufigsten genutzten Anodenaktivmaterialien dar. Der gravierende Nachteil des Graphits besteht jedoch in der geringen Speicherkapazität. Silizium hingegen weist bei Raumtemperatur eine mehr als zehnmal höhere Speicherkapazität auf. Im Gegensatz zu Graphit erfährt Silizium jedoch eine enorme Volumenausdehnung von bis zu 300 % bei vollständiger Lithiierung, die zum Kontaktverlust zwischen der Elektrode und dem Stromableiter und anschließend zur Zelledegradation führen kann.

Abbildung 1 gibt einen Überblick über die Speicherkapazitäten herkömmlicher Anodenmaterialien und deren Potentiale (gemessen gegen eine Li-Referenzelektrode). Ein niedriges Potential und eine große Speicherkapazität



zeichnen ein gutes Anodenmaterial aus. Da moderne Kathodenmaterialien, z. B. $\text{Li}(\text{Ni}_{0.85}\text{Co}_{0.1}\text{Al}_{0.05})\text{O}_2$ (NCA) bzw. LiNiMnCoO_2 (NMC) ein Potential bis 5 V erreichen, ist eine Kapazität auf der Anodenseite im Kapazitätsbereich bis 1750 mAh/g für eine leistungsstarke Batterie vollkommen ausreichend.

Die höchste elektrochemische Leistung haben bisher Silizium-Nanostrukturen erreicht. Durch die Reduktion der Partikelgröße können die hohen mechanischen Spannungen so weit verringert werden, dass auch kristalline Siliziumpartikel eine zerstörungsfreie Volumenausdehnung aufweisen. Der kritische Durchmesser befindet sich bei etwa 150 nm. Durch Anwendung von Silizium-Nanostrukturen kann demnach die Degradation

durch Kontaktverlust infolge von Bruchstellen erfolgreich verhindert werden. Darüber hinaus ermöglichen Nanostrukturen kurze Diffusionswege und schnellen Ladungstransport – wichtige Voraussetzungen für Hochleistungsanwendungen.

In dem von Freistaat Sachsen geförderten FuE-Verbundprojekt SiNergy arbeiten bis August 2019 zwei Verbundpartner (Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf und Norafin Industries Germany GmbH) unter der Leitung des Instituts für Experimentelle Physik der TU Bergakademie Freiberg (Projektleiter Prof. Dirk C. Meyer und Projektkoordinator Dr. Charaf Cherkouk) an der Entwicklung von Silizium-basierten Anodenmaterialien für Sekundärbatterien mit hohen Energiedichten. Im Unterauftrag ist zudem die ROVAK GmbH in das Projekt integriert.

Im Rahmen dieses Vorhabens werden technologische Voraussetzungen für eine geschlossene Prozesskette für die Fertigung von Si-basierten Einlagerungselektroden für LIB geschaffen. Die Vorteile der LIB mit neuartigen Si-Metallelektroden hinsichtlich Herstellungskosten und Performance basieren auf dem kombinierten Einsatz der Sputtertechnologie und dem Kurzzeitemporen mit Blitzlampen (*Flash-Lamp-Annealing* – FLA, siehe Abbildungen 2 und 3), wodurch in kürzester Zeit besondere Elektrodenstrukturen hergestellt werden können. Dieses Materialsystem und deren Skalierung werden gemeinsam mit der Firma ROVAK GmbH bearbeitet.

Ein weiteres Materialsystem besteht aus mit Si-Partikeln beladenen elastischen 3D-Vliesträgermaterialien (Si-3D-Vliesstoff) des Textilienherstellers Norafin Industries GmbH. Das Vliesmaterial kann im Hinblick auf die freien Räume der Faserstrukturen eine Volumenänderung des Siliziums während der Ein- und Auslagerung des Lithiums abfedern. Eine derartige Materialsynthese wurde von mehreren Gruppen verfolgt und bestätigt. Die Norafin Industries GmbH will die Projektergebnisse direkt in die Produktion umsetzen und strebt damit an, für sich ein neues Marktsegment zur Herstellung und Ausrüstung von funktionalen Textilien, speziell auf dem Gebiet der textilen Leiterplatte, zu generieren.

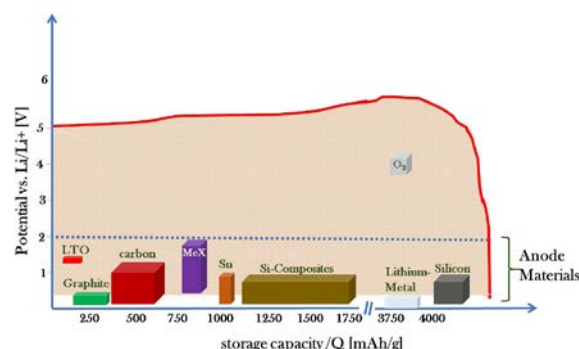


Abbildung 1: Graphische Darstellung des Potentials U gegen eine Li-Referenzelektrode über der Speicherkapazität von herkömmlichen Anoden- bzw. Kathodenmaterialien

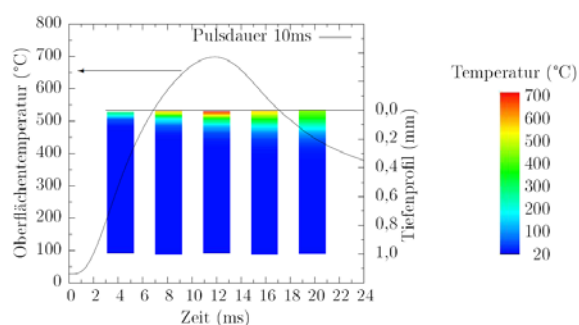
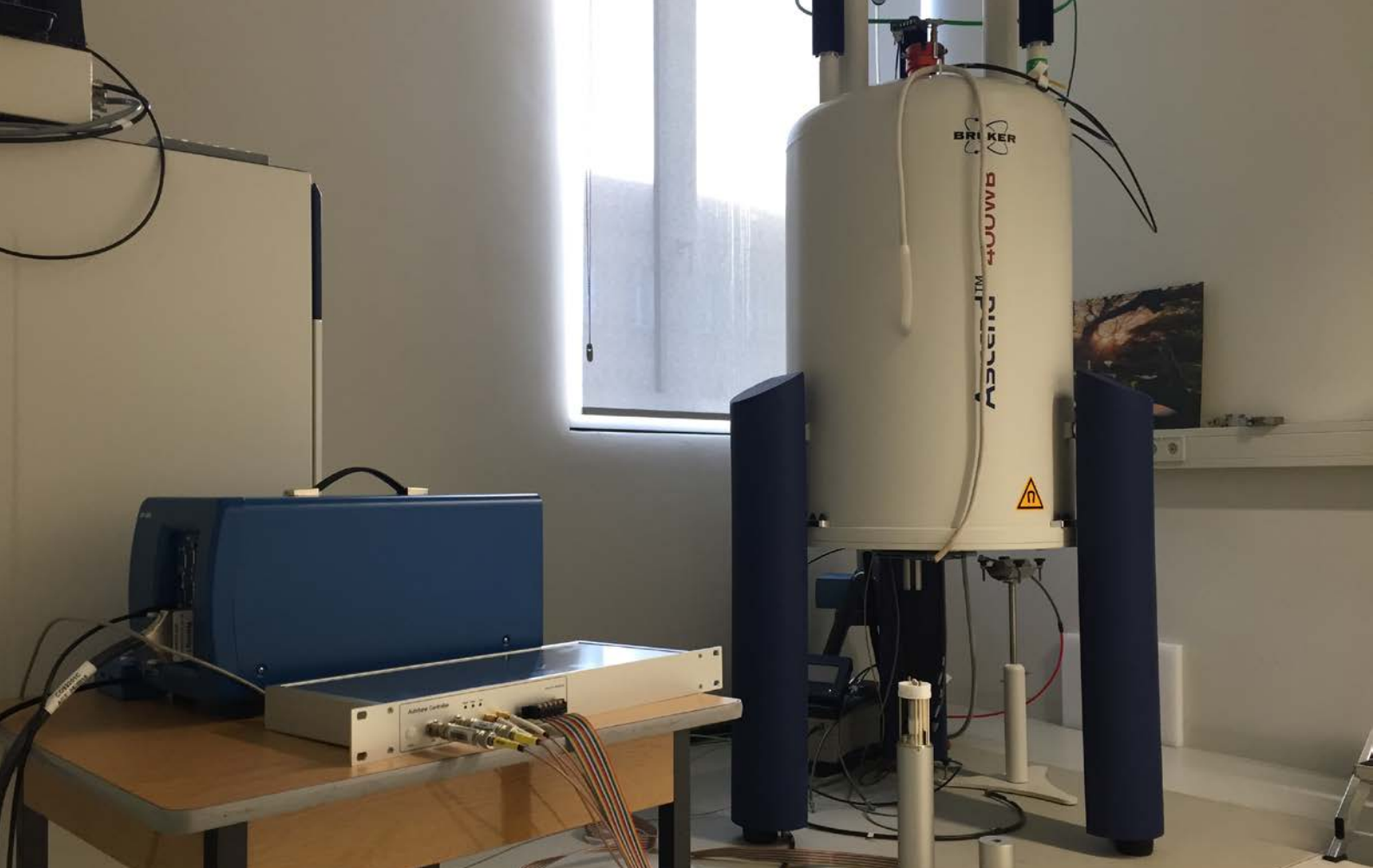


Abbildung 2: Simuliertes Temperaturtiefenprofil am Beispiel eines TiO_2 -Ta-beschichteten Glassubstrats während des FLA-Prozesses in Abhängigkeit der Zeit nach dem Beginn des Pulses; Pulsdauer 10 ms, Substratdicke 1 mm; die schwarze Kurve zeigt die Oberflächentemperatur (entnommen aus der Dissertation von Dr. Marcel Neubert, www.rovak-flash-lamp.com).



Abbildung 3: Beispiel für eine kommerziell erhältliche FLA-Anlage der Partnerfirma ROVAK, die für die Integration in bestehende Systeme zur Realisierung von Entwicklungsapplikationen sowie von Produktionsprozessen, z.B. Rolle-zu-Rolle, genutzt werden kann.



BMBF-VERBUNDPROJEKT SYNESTESIA

Das deutsch-russische Forschungsprojekt SyNeSteSia (engl. „Synchrotron and Neutron Studies for Energy Storage“) beschäftigt sich mit elektrochemischen Prozessen an Grenzschichten innerhalb elektrochemischer Energiespeicher. Zur Untersuchung dieser Prozesse kommen in SyNeSteSia überwiegend Synchrotron- und Neutronenbasierte sowie *Operando*-Methoden zum Einsatz.

Als Ergebnis der Forschungsarbeiten in SyNeSteSia sollen neuartige *Operando*-Charakterisierungsmethoden entwickelt und getestet werden, um einen Beitrag zur Aufklärung von elektrochemischen Vorgängen sowie Strukturveränderungen an elektrochemischen Grenzflächen zu leisten. Das Erreichen dieser herausfordernden Aufgaben wird insbesondere durch die sich ergänzenden Expertisen und Methoden der einzelnen Projektpartner und durch deren intensive Kooperation ermöglicht.

Am Verbundprojekt, das vom deutschen Bundesministerium für Bildung und Forschung und vom Ministerium für Bildung und Wissenschaft der Russischen Föderation im Rahmen der ersten Kooperationsinitiative des Ioffe-Röntgen-Instituts gefördert wird, sind die TU Bergakademie Freiberg, das Max-Planck-Institut für chemische Energiekonversion in Mülheim an der Ruhr, die *Lomonosov Moscow State University*, das *Joint Institute for Nuclear*

Research in Dubna und das *Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry* (NIIC) in Novosibirsk beteiligt. Das Projekt wird vom Institut für Experimentelle Physik koordiniert (Projektleiter: Prof. Dirk C. Meyer, Koordinatorin: Dr. Anastasia Vyalikh).

Ziel des Teilprojektes des IEP ist es, elektrochemische Prozesse an Grenzflächen von Batteriematerialien *in situ* und *operando* mittels der *Nuclear Magnetic Resonance* (NMR) zu charakterisieren und zusammen mit anderen Methoden der Verbundpartner diese Prozesse aufzuklären. Im Rahmen der bisherigen Aktivitäten wurden dafür systemspezifische Präparationsverfahren und ein experimenteller Aufbau entwickelt.

Der während des Projektes entwickelte und in die Infrastruktur der TUBAF integrierte *in situ* und *operando* arbeitende NMR-Messaufbau für elektrochemische Zellen und Batterien bietet vielfältige und neuartige Ansätze zur Untersuchung von elektrochemischen Vorgängen und Phasenumwandlungen während laufender elektrochemischer Vorgänge. Dieses Alleinstellungsmerkmal bietet großes Potenzial, um offene wissenschaftliche Fragestellungen, u. a. im Bereich der Energiespeicherung und -wandlung, aber auch im Bereich von katalytischen Reaktionen, aufzuklären.

Des Weiteren wurde im Rahmen der bestehenden Kooperation mit den Projektpartnern vom NIIC die NMR-Messempfindlichkeit für Kohlenstoff in Kohlenstoffkathoden durch die Anreicherung mit dem Isotop ^{13}C erhöht. Entsprechend wurden die ^{13}C -Isotopen-angereicherten Graphitmaterialien am NIIC synthetisiert und durch eine Kombination experimenteller und theoretischer Ansätze am IEP und NIIC untersucht. Die schematische Darstellung der chemischen und thermobarischen Modifizierung ^{13}C -Isotop-angereicherter Graphitmaterialien sowie ihre Anwendung im Elektrodenmaterial für die *Operando*-NMR-Messungen während eines Lade-Entlade-Zyklus der Batterie sind in Abbildung 1 gezeigt.

Teilergebnisse des Projektes konnten bisher in vier wissenschaftlichen Artikeln publiziert und auf mehreren Fachtagungen präsentiert werden. Des Weiteren ist es

durch die Vorarbeiten in SyNeSteSia gelungen, zusammen mit den NIIC ein Projekt im Rahmen des Alumni-Programms der Alexander von Humboldt-Stiftung zum Thema „Development of phosphorus-carbon nanotube material for energy storage devices“ (PhosCar) zu etablieren, das im Jahr 2017 startete und die gemeinsamen Aktivitäten weiter stärkt.

Für die Finanzierung danken wir dem Bundesministerium für Bildung und Forschung (Förderkennzeichen 05K14OFA).



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

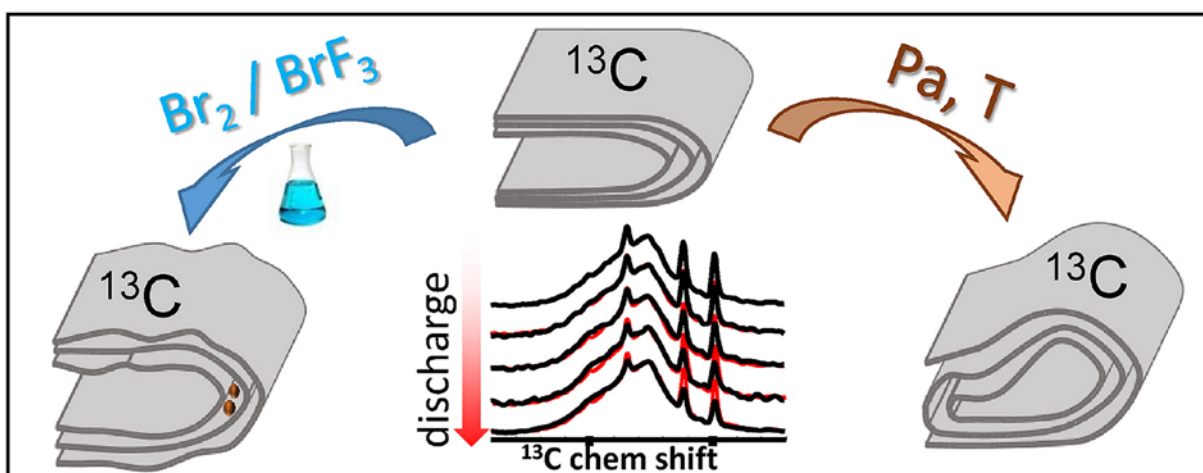


Abbildung 1: Modifizierung der ^{13}C -Isotop-angereicherten Graphitmaterialien durch chemische und thermobarische Ansätze sowie die *operando* erhaltenen ^{13}C -NMR-Spektren des entsprechenden Elektrodenmaterials



PARTNERSCHAFT MIT DER SIBIRISCHEN REGIONALABTEILUNG DER RUSSISCHEN AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN

Seit Januar 2017 fördert die Alexander von Humboldt-Stiftung im Rahmen des Alumni-Programms eine Forschungsk Kooperation zwischen dem Institut für Experimentelle Physik der TU Bergakademie Freiberg und dem Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry in Novosibirsk der Sibirischen Regionalabteilung der Russischen Akademie der Wissenschaften (NIIC). Mit dem NIIC besteht seit 2014 eine enge Zusammenarbeit bei der Erforschung von Kohlenstoff-basierten Energiematerialien, die vom interdisziplinären Exzellenzzentrum „German-Russian Interdisciplinary Science Center“ sowie durch die Forschungs- bzw. Wissenschaftsministerien beider Länder, im Rahmen der ersten Kooperationsinitiative des Ioffe-Röntgen-Instituts im Verbundprojekt SyNeSteSia gefördert wurde.

Projektkoordinatoren des Forschungsvorhabens „Development of phosphorus-carbon nanotube materials for energy storage devices“, kurz PhosCar, sind Dr. Anastasia Vyalikh (IEP) und Professor Dr. Vladimir Fedin (NIIC-Institutsdirektor).

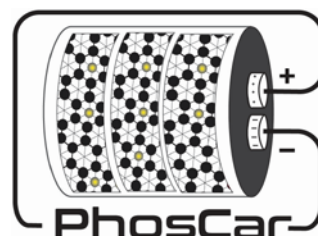
Die Heteroatom-Dotierung von Kohlenstoff-Nanoröhren ist sowohl für die Grundlagenforschung als auch für Anwendungen in Feldemissionsspitzen, Lithium-Ionen-Speichern, Kompositen und nanoelektronischen Bauelementen von großem Interesse. Dieses Projekt konzentriert sich auf die Herstellung und Untersuchung neuartiger Nanohybridmaterialien mit Phosphor-Nanostrukturen, die sich innerhalb der Kohlenstoff-Nanoröhren und an deren Oberfläche erzeugen lassen. Die Phosphordotierung bewirkt eine erhebliche Änderung der physikalisch-chemischen Eigenschaften der Nanokohlenstoffmaterialien. Im Fokus der Charakterisierung stehen die Struktur der Phosphor-Kohlenstoff-Nano-Materialien, insbesondere deren Änderung zum nicht modifizierten Fall, sowie die modifizierten chemischen und elektrochemischen Eigenschaften.

Hierfür werden Elektrodenmaterialien mit Phosphor-gefüllten Kohlenstoffnanoröhren von verschiedener Geometrie und variierendem Phosphorgehalt in Novosibirsk

hergestellt und mittels *In-situ*- und *Ex-situ*-Methoden in Freiberg untersucht.

Die Nanohybridarchitektur, -struktur und -morphologie der Phosphor-Kohlenstoff-Nanohybrid-Materialien wurde durch die Kombination experimenteller und theoretischer Ansätze bestimmt. Die Ergebnisse der hochauflösenden Elektronenmikroskopie, magnetischen Resonanzspektroskopie sowie Röntgenphotoelektronenspektroskopie, welche die erfolgreiche Verkapselung von Phosphor in den Kohlenstoff-Nanoröhren nachweisen, sind in Abbildung 1 dargestellt.

Die Förderung von PhosCar wurde für gegenseitige Forschungsbesuche sowie für die Organisation eines Symposiums am 14. Juni 2017 in Freiberg verwendet. Im Mittelpunkt des Symposiums, welches Teil der *3rd International Freiberg Conference on Electrochemical Energy Storage Materials* war, stand das Thema „Advanced approaches for studying electrochemical energy storage and conversion“. Ziel des Symposiums war die Etablierung einer Plattform für die Verbreitung und Kommunikation der Projektergebnisse in der wissenschaftlichen Gemeinschaft, wobei insbesondere jungen Nachwuchswissenschaftlern die Möglichkeit zur aktiven Diskussion mit Experten aus Deutschland, Russland und anderen europäischen Ländern angeboten wurde. Im Rahmen des Symposiums hat Professor Fedin, der auch in den Jahren 1992 und 1997 Humboldt-Fellow war, und akademisches Mitglied der Russischen Akademie der Wissenschaften ist, Freiberg besucht und den Beitrag des NICC im Projekt auf dem Symposium vorgestellt (siehe Abbildung auf S. 52).



Weitere Aktivitäten im Rahmen des akademischen Austauschs wurden durch junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler durchgeführt. So besuchten Dr. Yulia Fedoseeva und Dr. Victor Koroteev (beide NIIC) das IEP um Kohlenstoff-haltige Elektroden herzustellen und zu charakterisieren. Umgekehrt besuchte Dr. Wolfram Münchgesang (IEP) das NIIC, um die Präparationstechnik für die Hybridmaterialien zu lernen und deren elektrische Charakterisierung zu verbessern.

Im zweiten Jahr der Projektphase sollen Elektrodenmaterialien mit Phosphor-gefüllten Kohlenstoff-Nanoröhren beschichtet, deren Eigenschaften umfassend charakterisiert sowie ihre Eignung für effiziente Metallionenbatterien evaluiert werden.



Alexander von Humboldt
Stiftung / Foundation

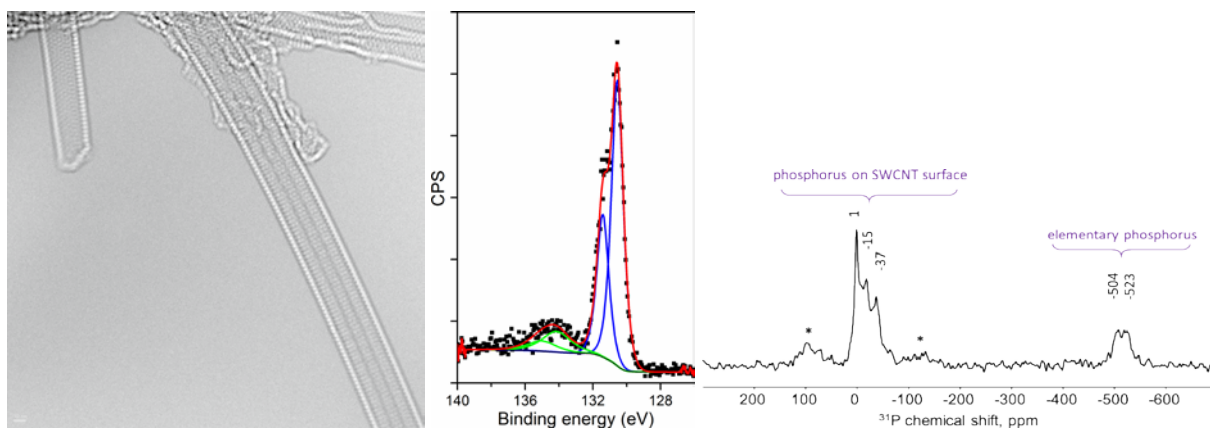


Abbildung 1: Hochauflösende elektronenmikroskopische Aufnahme (links), P-2p-Röntgen-Photoelektronenspektrum (Mitte) und ³¹P kernmagnetisches Resonanzspektrum (rechts) eines Phosphor-Kohlenstoff-Nanohybrid



ESF-NACHWUCHSFORSCHERGRUPPE HALMA

Die ESF-Nachwuchsforschergruppe „Defekt-Engineering in Wide-Bandgap-Halbleitermaterialien für Anwendungen in der Opto- und Leistungselektronik“ (HALMA) besteht seit Oktober 2015 und bündelt die an der TU Bergakademie Freiberg ansässigen Kompetenzen hinsichtlich Kristallzüchtung und Charakterisierung von Halbleitermaterialien und vernetzt diese mit Kooperationspartnern aus der Freiburger Halbleiterindustrie. Projektpartner sind neben dem Institut für Experimentelle Physik (IEP) die Institute für Angewandte Physik (IAP), Theoretische Physik (ITP), Allgemeine und Angewandte Mineralogie (IMIN), Nichteisen-Metallurgie und Reinstoffe (INEMET) sowie das Institut für Werkstoffwissenschaft (IWW) – siehe Abbildung 1.

Die Gruppe verfolgt das Ziel, eine Verbesserung der Verfügbarkeit sowie eine erhöhte Funktionalität des Verbindungshalbleiters Galliumnitrid (GaN) und verwandter (nitridischer) Halbleiter mit großer Bandlücke, wie z. B. Aluminiumnitrid (AlN), zu erreichen. Schwerpunkt ist dabei die fundierte und umfassende Charakterisierung der Proben als Grundlage für eine gezielte Weiterentwicklung des Herstellungsprozesses. Die Proben durchlaufen dafür einen definierten Charakterisierungsplan, dessen experimentelle Befunde in einer gruppeninternen Datenbank

festgehalten werden. So können Ergebnisse verschiedener Messmethoden miteinander korreliert und Abhängigkeiten zwischen den Kristallzüchtungs-Parametern sowie den mikrostrukturellen, optischen und elektrischen Eigenschaften identifiziert werden. Daraus erlangte Erkenntnisse der involvierten Prozesse wiederum sollen helfen, die Herstellungstechnologie zu optimieren und neue Messmethoden zu entwickeln.

Mittels Hochtemperatur-Gasphasenepitaxie (*High-Temperature Vapor Phase Epitaxy* – HTVPE) werden vom Institut für Nichteisen-Metallurgie und Reinstoffe einkristalline GaN-Schichten auf Saphir abgeschieden. Der HTVPE-Prozess kann dabei systematisch untersucht und beeinflusst werden, so dass ein gezieltes Defekt-Engineering möglich ist. Kernstück ist dabei eine induktiv beheizte Verdampfungszelle, die in Kooperation mit der Firma Freiburger Compound Materials GmbH (FCM) patentiert wurde.

Während des Wachstums von GaN auf fremden Substraten (typischerweise Saphir) entstehen Misfit-Versetzungen, die sich als Threading-Versetzungen von der Substrat-Grenzfläche bis zur Oberfläche des GaN-Kristalls ausdehnen und die Gitterfehlانpassung teilweise kompensieren. Die daraus resultierenden Defekte

können spätere Bauelemente beeinflussen und werden in der Gruppe deshalb charakterisiert. Die dafür verwendeten Methoden umfassen die Mikrostrukturaufklärung (IWW), elektrische Charakterisierung (IEP und IAP) sowie optische Charakterisierung (IAP und ITP).

Valentin Garbe hat im Bereich der elektrischen Charakterisierung den bestehenden Hall-Messplatz des IEP für temperaturabhängige Messungen mit einem Kryostaten aufgerüstet und die entsprechende Steuersoftware geschrieben (siehe Abbildung 2). So konnten die temperaturabhängigen elektrischen Eigenschaften, wie der spezifische Schichtwiderstand, die Ladungsträgerkonzentration und -mobilität, von einer großen Anzahl Proben aus dem GaN-HTVPE-Prozess sowie GaAs-Proben vom Kooperationspartner FCM untersucht werden, aber auch ZnO-Schichten auf Glas und Si. Als elektrischer Kontakt zu GaN wird eine im Zentralen Reinraumlabor entwickelte goldfreie Metallisierung verwendet.

Im Bereich der optischen Charakterisierung wurden mittels winkelvartierender spektroskopischer Ellipsometrie (VASE) die Schichtdicken, Rauigkeiten, Ladungsträgerkonzentrationen und Mobilitäten von mittels MOVPE gewachsenen GaN sowie GaN/AlGaIn Stapeln auf Saphir (Al_2O_3) des Fraunhofer IISB bestimmt (siehe Abbildung 3).

Valentin Garbe erhielt ein DAAD IPID4all Young GEOMATENUM International Reisestipendium für die Teilnahme am Workshop „Summer School of Information Engineering – Technologies for Energy Sustainability“ im Juli 2017 in Brixen, Italien.

Wir danken der Europäischen Union und dem Freistaat Sachsen für die Finanzierung des Projektes (Förderkennzeichen 100231954).

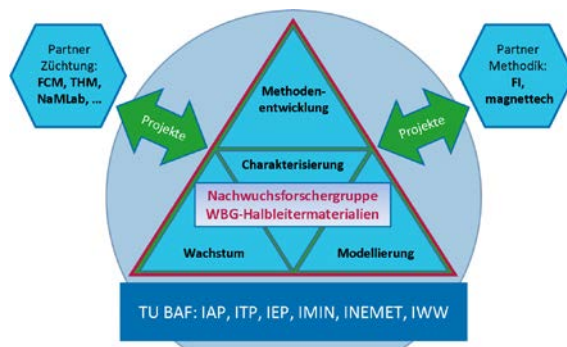


Abbildung 1: Struktur der institutsübergreifenden Nachwuchsforschungsgruppe HALMA. Die Gruppe arbeitet eng mit industriellen und außeruniversitären Forschungseinrichtungen zusammen.

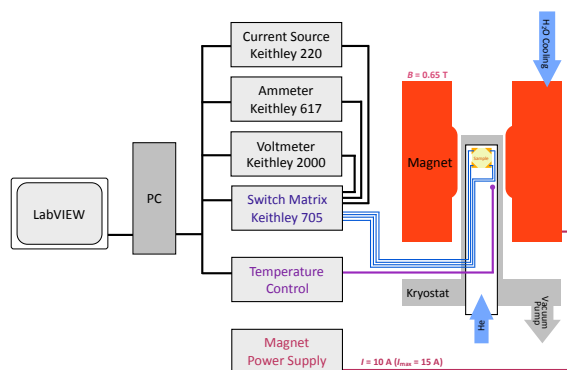


Abbildung 2: Schematischer Aufbau des Hall-Messplatzes inklusive Kryostat

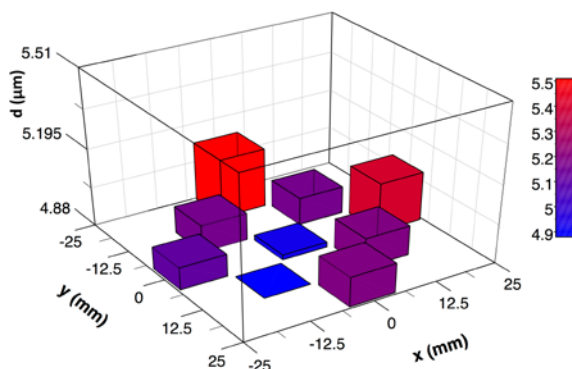


Abbildung 3: Mittels Ellipsometrie ermittelte Schichtdickenverteilung über einen 2" GaN-Wafer, gewachsen mittels MOVPE auf Saphir



BMBF-VERBUNDPROJEKT HYPROS

HyProS widmet sich innerhalb des HYPOS-Konsortiums der Entwicklung hochsensitiver Wasserstoffsensorik, welche für die Sicherheit und das Qualitätsmanagement in vorhandenen Erdgasversorgungssystemen und -netzen vom Erzeuger bis zum Verbraucher in einer Wasserstoffbasierten Energie-Wertschöpfungskette notwendig ist. Für den H_2 -Transport muss der H_2 -Gehalt im Konzentrationsbereich ≤ 20 Vol.-% bestimmt werden können. Außerdem müssen für die Prozessüberwachung in Elektrolyseuren und Speichersystemen Sensorsysteme entwickelt werden, mit denen der Wasserstoffgehalt bei Drücken bis 100 bar detektiert werden kann. Für Überwachungsaufgaben von Anlagen zur Speicherung, Verarbeitung und zum Transport von Wasserstoff beziehungsweise Methan wird weiterhin eine neuartige, hochselektive Sensorik für die Detektion von Leckagen für weite Konzentrationsbereiche ab 50 Vol.-ppb entwickelt.

Diese verschiedenen Anforderungsbereiche sollen dabei durch verschiedene spezialisierte Sensortypen abgedeckt werden, welche im Projekt neu- beziehungsweise weiterentwickelt werden.

Gefördert wird das HYPOS-Konsortium von der „Zwanzig-20-Partnerschaft für Innovation“, das vom Bundesministerium für Bildung und Forschung bis zum Jahr

2019 mit bis zu 500 Mio. Euro finanziert wird und dessen Ziel die Unterstützung der Innovationskompetenz kleiner und mittelständiger Unternehmen in Ostdeutschland ist. Eines der Hauptziele von HYPOS ist der Ausbau einer grünen Wasserstoffwirtschaft durch produktive Kooperation von Industrie und Wissenschaft.

Das Institut für Experimentelle Physik der TU Bergakademie Freiberg beteiligt sich mit dem Teilvorhaben „Aufklärung von festkörperphysikalischen und festkörperchemischen Prozessen an fortgeschrittener Wasserstoffsensorik“ (AProS) am Verbundprojekt HyProS, das im Jahr 2017 gestartet ist.

Die Schwerpunkte der Arbeiten am IEP im Rahmen des Projektes sind die Charakterisierung und Beurteilung spezifischer Sensormaterialien und Sensorkomponenten, die für die verschiedenen Einsatzbereiche konzipiert, hergestellt und optimiert werden, sowie die Herstellung dünner Schichten. In Zusammenarbeit mit den Projektpartnern aus Wissenschaft und Industrie werden die verfügbaren Ressourcen am IEP im Bereich Materialcharakterisierung, insbesondere der Charakterisierung von Schichtsystemen und Dünnschichttechnologien, auf die speziellen Problemstellungen der Wasserstoffsensorik übertragen. Aktuellste wissenschaftliche Erkenntnisse aus

den genannten Bereichen in einem hochaktuellen Themenfeld der Energiewirtschaft und Sicherheitsmesstechnik sollen so für industrielle Anwendungen verfügbar gemacht werden.

Zur Untersuchung der Sensormaterialien kommt verschiedenste Messtechnik zum Einsatz. Von besonderem Interesse sind unter anderem die Oberflächenmorphologie und die Elementzusammensetzung einiger Sensorkomponenten, die beispielsweise mit lokal hochaufgelösten Messungen am Rasterelektronenmikroskop (Abbildung 1) und am Laserkonfokalmikroskop (Abbildung 2) untersucht werden. Mit der *Atomic Layer Deposition* können oxidische Schichten von wenigen Nanometer Dicke auf Substrate abgeschieden werden, wodurch die Oberfläche entsprechend modifiziert wird.

Das Verbundprojekt wird koordiniert durch das Kurt-Schwabe-Institut für Mess- und Sensortechnik e. V. Meinsberg und die Umweltsensortechnik GmbH. Weiterhin sind folgende Partner beteiligt: die Analytical Control Instruments GmbH, das CiS Forschungsinstitut für Mikrosensorik GmbH, das Fraunhofer-Institut für Mikrostruktur von Werkstoffen und Systemen (Center für angewandte



Mikrostrukturdiagnostik), die Hochschule für Technik, Wirtschaft und Kultur Leipzig, das Leibniz-Institut für Katalyse e. V., das Leibniz-Institut für Photonische Technologien e. V., die Materion GmbH, die Sciospec Scientific Instruments GmbH und die Union Instruments GmbH.

Wir danken dem Bundesministerium für Bildung und Forschung für die Übernahme der Finanzierung des Projektes (Förderkennzeichen 03ZZ0724I) sowie dem Projektträger Jülich für die Betreuung.



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Abbildung 1: Untersuchung der Oberflächenmorphologie und der Elementzusammensetzung am Rasterelektronenmikroskop

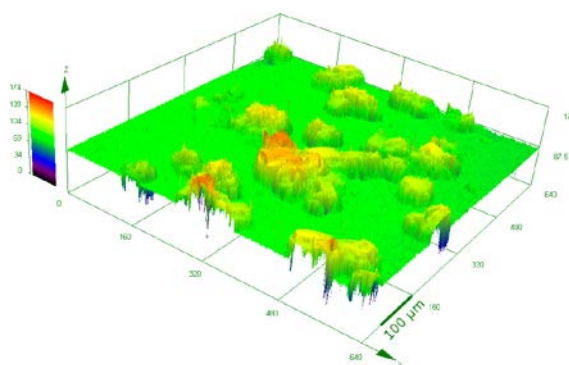
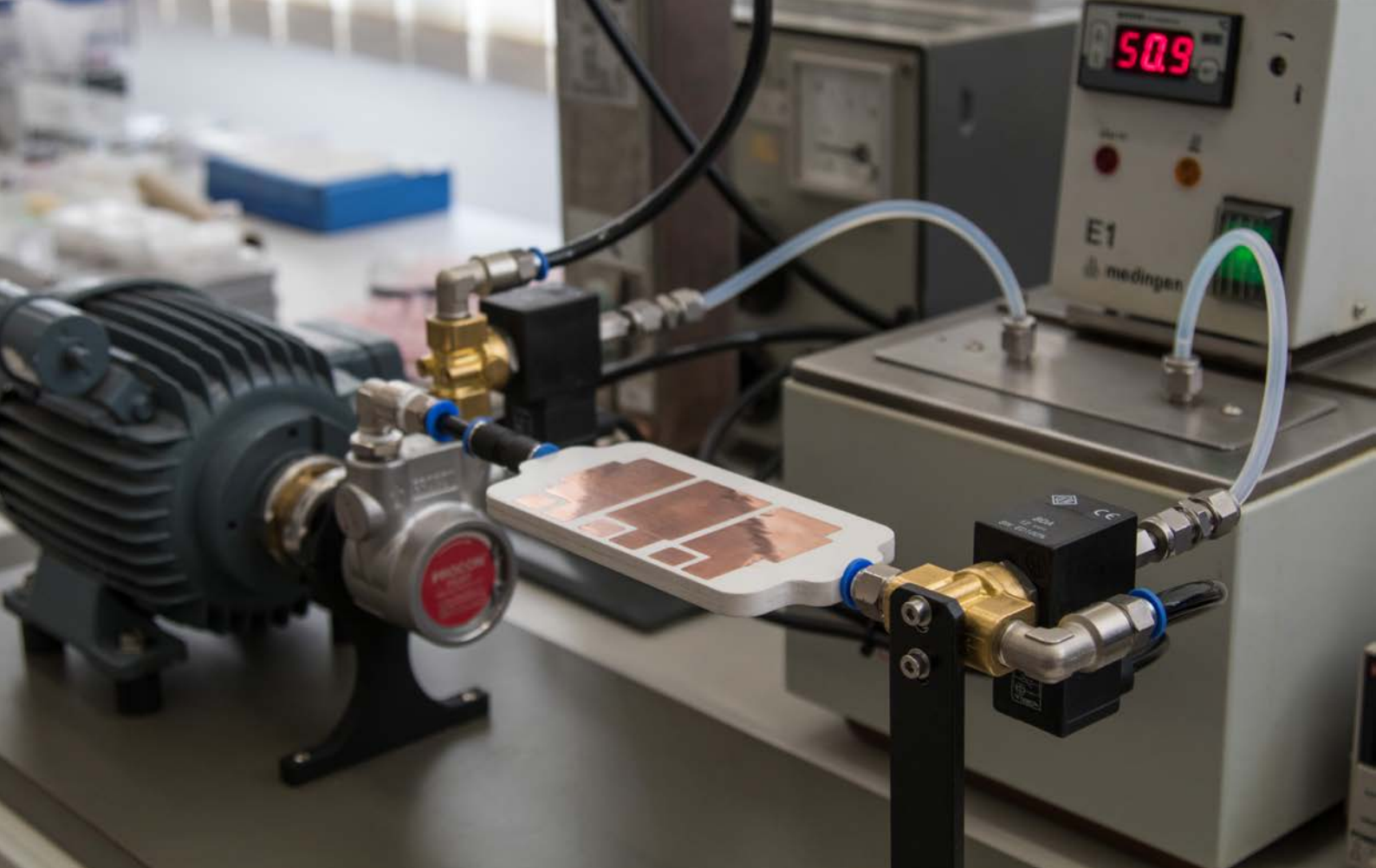


Abbildung 2: Mit dem Laserkonfokalmikroskop kann die Rauigkeit von Oberflächen anhand von Höhenkarten – wie hier beispielhaft gezeigt – untersucht werden.



NUTZUNG VON ABWÄRME ZUR ERZEUGUNG VON WASSERSTOFF UND ELEKTRIZITÄT MIT PYROELEKTRIKA

Das Forschungsvorhaben „Nutzung von Abwärme zur Erzeugung von Wasserstoff und Elektrizität mit pyroelektrischen Oxiden“ wird im Rahmen einer Initiative des Sächsischen Staatsministeriums für Wirtschaft, Arbeit und Verkehr gefördert. Ziele sind insbesondere die Steigerung der Energieeffizienz und die Erforschung innovativer Energietechniken. Das Vorhaben arbeitet zusammen mit den Projekten „Entwicklung innovativer Materialsysteme für die bidirektionale elektrochemische Wasserstoff-Strom-Transformation“, welches am KSI Meinsberg bearbeitet wird, und dem Thema „Katalysator- und Reaktorentwicklung für die selektive chemische Synthese von Olefinen mit regenerativ erzeugten H_2 und CO_2 “ am Fraunhofer IKTS in Dresden. Trotz der thematischen Vielfalt stehen die Partner in regem wissenschaftlichem Austausch und informieren sich auch in halbjährlich stattfindenden Doktorandentreffen über den erzielten Fortschritt. Am Institut für Experimentelle Physik forschen derzeit zwei Doktoranden unter der Leitung von Dr. Hartmut Stöcker an pyroelektrischen

Funktionsmaterialien, die zum einen in elektrischen Kreisprozessen und zum anderen auf ihre katalytische Wirksamkeit, am Beispiel der Wasserelektrolyse, getestet werden.

Gängige Verfahren zur Umwandlung von Restwärme in elektrische Energie, wie der organische Rankine-Zyklus oder thermoelektrische Generatoren, haben je nach Anwendungsgebiet merkliche Nachteile. Im Projekt gilt es nun die elektrischen Kreisprozesse auf Basis von Pyroelektrika zu untersuchen, darunter zählen Olsen- und Widerstandszyklus, die in der wissenschaftlichen Literatur bereits länger bekannt sind, deren Potential in der Technik aber noch nicht erschlossen ist. Ziel des Vorhabens ist die Evaluierung und Weiterentwicklung der bekannten elektrischen Kreisprozesse, um Wirkungsgrad und Wirtschaftlichkeit zu verbessern und eine technische Umsetzung vorzubereiten.

Bei den Redoxprozessen, welche durch Pyroelektrika aktivierbar sind, soll hier die Wasserspaltung im Vordergrund stehen. Die an der Oberfläche des pyroelektrischen

Aktivmaterials ablaufenden Ladungs- und Stofftransfers sind gegenwärtig unzureichend untersucht. Ein besseres Verständnis der Redoxaktivität der Oberfläche soll im Vorhaben erarbeitet werden, um die gewinnbare Menge an Wasserstoff voraussagen und steigern zu können. Mit dieser Voraussetzung für die Optimierung von Material und Verfahren wird somit auch die Grundlage für den Transfer und Einsatz auf der Industrieskala gelegt.

Im September fand die zweite Zwischenevaluierung des Projektes statt. Den Gutachtern wurde die Erarbeitung einer Bewertung der bisherig umgesetzten elektrischen Kreisprozesse vorgelegt. Grundlage war eine Literaturrecherche, um die für pyroelektrische Materialien optimale und zugleich wirtschaftlichste Kreisprozessführung zu bestimmen. Zudem wurden Möglichkeiten der entsprechenden Maschinenkonzepte auf Basis pyroelektrischer Funktionsmaterialien simuliert. Außerdem wurde eine Kostenabschätzung der potentiell einsetzbaren Aktivmaterialien durchgeführt. Hierbei stellte sich das in der Aktortechnik weit verbreitete Bleizirkonat-Titanat (PZT) als wirtschaftlich aussichtsreichster Kandidat heraus. Weiterhin wurden erste Prototypen (siehe Abbildung S. 58 und Abbildung 1) möglicher Restwärmeregeneratoren konzipiert und gefertigt, deren Leistungsfähigkeit im folgenden Projektverlauf evaluiert und verbessert werden.

Im zweiten Teil des Projektes, der pyroelektrisch getriebenen Wasserstofferzeugung, wurden an der angefertigten Messzelle (Abbildung 2) erste *In-situ*-Messungen vorgenommen. Diese Messmodi sollen den Nachweis der Pyroelektrolyse erlauben. Dabei stellten sich die Chronoamperometrie und Cyclovoltammetrie als vielversprechende Messmethoden heraus. Am Pyroelektrikum können mehr als 400 Volt Spannungsamplitude in der elektrochemischen Messzelle generiert werden, jedoch ist im Elektrolyten ein hoher Spannungsabfall zu verzeichnen. Dieser ist durch geeignete Wahl des Elektrolyten für das elektrochemische Fenster der Wasserspaltung einzustellen. Die bisherigen Untersuchungen (siehe Abbildung 3) zeigten, dass bei geeigneter Wahl des Elektrolyten eine Spaltung des Wassers prinzipiell gewährleistet werden kann.

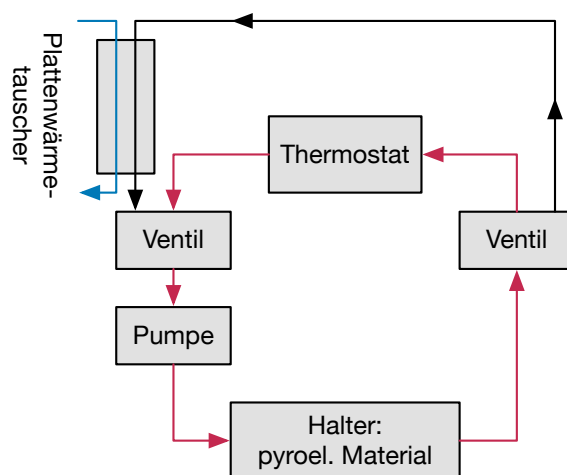


Abbildung 1: Konzeptskizze für einen definierten Temperaturwechsel am Pyroelektrikum

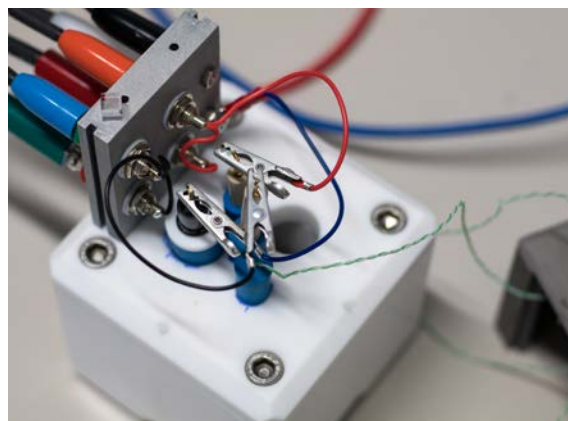


Abbildung 2: Elektrochemische Messzelle zum Nachweis der Pyroelektrolyse

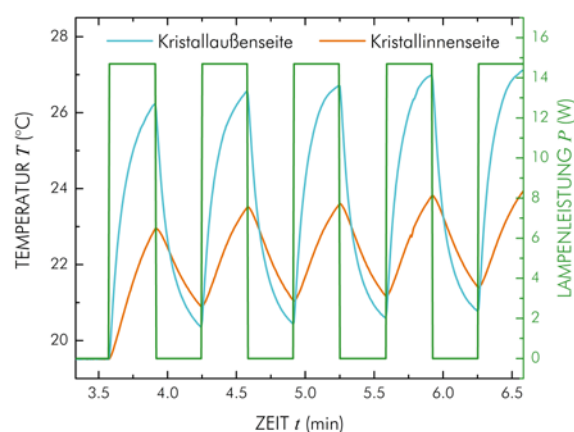


Abbildung 3: Temperaturverlauf auf den gegenüberliegenden Kristallseiten unter zyklischer Infrarotbestrahlung



PYROELEKTRISCHE POLYMERE FÜR DIE ABWÄRMENUTZUNG

Das Forschungsvorhaben „Pyroelektrische Polymere für die Abwärmenutzung – PyroFol“ wird im Rahmen der Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen „Otto von Guericke“ e. V. gefördert (AiF 19494N). Das Verbundprojekt befindet sich unter der Leitung des Forschungsinstituts für Leder und Kunststoffbahnen (FILK) Freiberg, mit dem Institut für Experimentelle Physik (IEP) und dem Fraunhofer Technologiezentrums Halbleitermaterialien (THM) als gleichberechtigte Partner.

Ziel des Projektes ist die Technologieentwicklung zur Herstellung einer pyroelektrisch wirksamen Folie für die Bereitstellung elektrischer Energie aus Restwärme sowie deren Verwendung in einem Demonstrator zur pyroelektrischen Energiewandlung. Dabei nutzt das Projekt das umfassende und langjährige Know-how bei der Entwicklung von Verbundfolien des FILK, die umfangreichen Kompetenzen zur Untersuchung von pyroelektrischen Materialien, sowohl strukturell als auch elektrisch, am IEP sowie die Erfahrungen des Fraunhofer THM in den Bereichen der Charakterisierung und Systemintegration.

Als Folienmaterial wird Polyvinylidenfluorid (PVDF) verwendet – ein teilkristallines, thermoplastisches Polymer

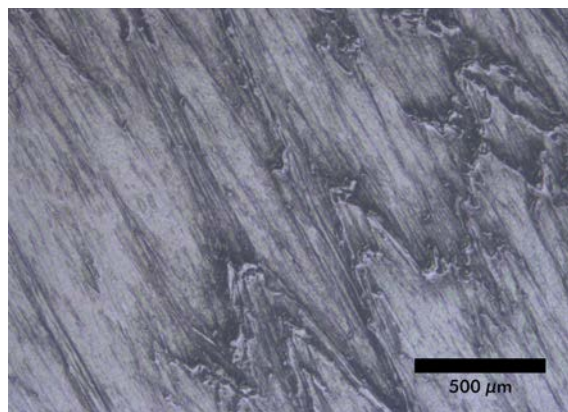
mit ferroelektrischen Eigenschaften. Das Homopolymer weist je nach Konformation der Monomere verschiedene kristalline Phasen auf. Die β -Phase gilt als die interessanteste, vor allem wegen ihrer polaren Eigenschaften, basierend auf der räumlichen Separation der Wasserstoff- und Fluorionen und dem daraus resultierenden Dipolmoment. Die Herstellung der β -Phase erfolgt zum Beispiel durch uniaxiales Recken der aus der Schmelze gewonnenen unpolaren α -Phase bei der Folienextrusion. Da die β -Phase polykristallin vorliegt, muss die Folie anschließend polarisiert werden, um den maximalen pyroelektrischen Koeffizienten von etwa $30 \mu\text{C}/\text{m}^2\text{K}$ zu erzielen.

Am Institut für Experimentelle Physik werden die optimalen Prozessparameter für die Folienextrusion und das anschließende Recken zur Ausprägung der pyroelektrischen β -Phase von PVDF sowie die Maximierung des kristallinen Anteils der hergestellten Folienmaterialien verifiziert. Dies geschieht zum einen strukturell durch Röntgenbeugung und zum anderen elektrisch mithilfe der Sharp-Garn-Methode zur Bestimmung des pyroelektrischen Koeffizienten. Bisher wurde die Optimierung



hinsichtlich der Verwendung verschiedener Polymertypen, welche sich in der Länge der PVDF-Polymerketten unterscheiden, und der Herstellungsspezifika Ziehgeschwindigkeit, Reckspalt, Reckspalttemperatur und die daraus resultierenden Verstreckungen untersucht. Des Weiteren wird ein Korona-Polungsaufbau zur Polarisierung der PVDF-Folien entwickelt und die Überführung der pyroelektrischen Messtechnik in ein Prüfinstrument zur Überwachung der zukünftigen Materialfertigung intensiviert.

Nachdem das Projekt im März 2017 gestartet ist, gab es bereits drei weitere Projekttreffen an den jeweiligen Forschungsstellen der beteiligten Partner, um die bisherigen Erkenntnisse zu diskutieren und das weitere Vorgehen zu besprechen. Aus diesem Grund befindet sich das Forschungsvorhaben auf einem vielversprechenden Weg das formulierte Projektziel, hinsichtlich der Fertigung einer pyroelektrischen Folie mit hohem pyroelektrischen Koeffizienten zur Nutzung in einem Demonstrator zur pyroelektrischen Energiewandlung, zu erreichen.



Oberflächenmorphologie einer PVDF-Folie

Aufgrund der Industrienähe des Projektes steht der Ergebnistransfer in die Wirtschaft ebenso im Vordergrund. So konnten bisher zwei Publikationen in Fachzeitschriften veröffentlicht werden.





PYRO- UND DIELEKTRISCHE EIGENSCHAFTEN VON HOCHTEMPERATURPIEZOELEKTRIKA DER OXOBORAT-FAMILIE $RX_2Z_2O(BO_3)_3$

Der DFG-Paketantrag 921 besteht aus insgesamt drei Forschungsvorhaben der Arbeitsgruppen Mineralogie der TU Bergakademie Freiberg (Prof. Jens Götze), Kristallphysik der Ruhr-Universität Bochum (Prof. Jürgen Schreuer) und der Arbeitsgruppe von Prof. Dirk C. Meyer am IEP. Dieser Verbund, der im September 2016 die Arbeit aufnahm, hat die Erarbeitung von Korrelationen zwischen Struktur und elektromechanischen Eigenschaften von Kristallen der Familie $RX_2Z_2O(BO_3)_3$ zum Ziel. Bei diesen Oxoboraten (kurz RCOB) bilden die Verbindungen mit $X, Z = Ca$ und $R = La, Y, Gd, Pr, Nd$ und Er den Schwerpunkt (siehe Abbildung 1). Motiviert wird das Vorhaben durch:

- die monokline Symmetrie dieser piezoelektrischen Materialien, wodurch sich mehr Freiheitsgrade für die Anisotropie der Eigenschaften und damit für Korrelationen zwischen Struktur und Eigenschaften ergeben als in höhersymmetrischen Kristallen,
- die in Vorarbeiten beobachteten Diskontinuitäten im temperaturabhängigen Verlauf verschiedener

Eigenschaften, die auf mögliche strukturelle Instabilitäten hindeuten,

- die zahlreichen Substitutionsmöglichkeiten auf den unterschiedlich koordinierten Kationenplätzen und die daraus resultierende große, nur teils erfasste chemische Variabilität,
- die zumindest für einige Vertreter nachgewiesene Möglichkeit der Züchtung großer Einkristalle aus der Schmelze und nicht zuletzt
- das große Potential für piezo- und pyroelektrische Anwendungen bei hohen Temperaturen.

Um die Eigenschaften auf atomarer Ebene mit denjenigen auf makroskopischer Ebene zu korrelieren, soll einerseits die Nah- und Fernordnung mittels spektroskopischer Verfahren sowie Beugungsmethoden studiert und andererseits die elektromechanischen Eigenschaften im weitesten Sinne untersucht werden. Dazu gehören Wärmeausdehnung und Wärmekapazität, elastische und piezoelektrische Eigenschaften, elektrische Leitfähigkeit, Permittivität und pyroelektrische Eigenschaften sowie ihre

Abhängigkeiten von chemischer Zusammensetzung und Temperatur.

Die Oxoborate der Familie $RX_2Z_2O(BO_3)_3$ wurden in den vergangenen Jahren vor allem im Hinblick auf ihre optischen Charakteristika erforscht. Durch ihre monoklin domatische Struktur (Raumgruppe Cm), weisen sie ebenfalls pyro- und piezoelektsche Eigenschaften auf, die weit weniger erforscht sind. Sowohl $Ca_4GdO(BO_3)_3$ (GdCOB) als auch $Ca_4YO(BO_3)_3$ (YCOB) werden in der Literatur bis 1200°C als unverändert piezoelektrisch beschrieben.

Pyroelektrische Materialien der Perowskitfamilie (z. B. $Pb(Zr,Ti)O_3$, $BaTiO_3$) oder auch verschiedene Niobate und Tantalate (z. B. $LiNbO_3$, $LiTaO_3$) sind durch die Curie-Temperatur, Relaxationsphänomene oder die mit der Temperatur steigende elektrische Leitfähigkeit in ihren pyro- und piezoelektrischen Eigenschaften auf weit unterhalb einer Temperatur von 1000°C eingeschränkt. Einzig sogenannte PLS (*Perovskite-like Layer Structures*) sind nach bisherigen Erkenntnissen in der Lage, bis etwa 1300°C piezoelektrisch zu arbeiten. Im Einkristallbereich zeigen die RCOB-Materialien damit den größten Temperaturbereich, in dem ein messbarer piezo- und eventuell auch pyroelektrischer Effekt zu erwarten ist.

Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die finanzielle Unterstützung (Projektnummer: ME 1433/14-1).

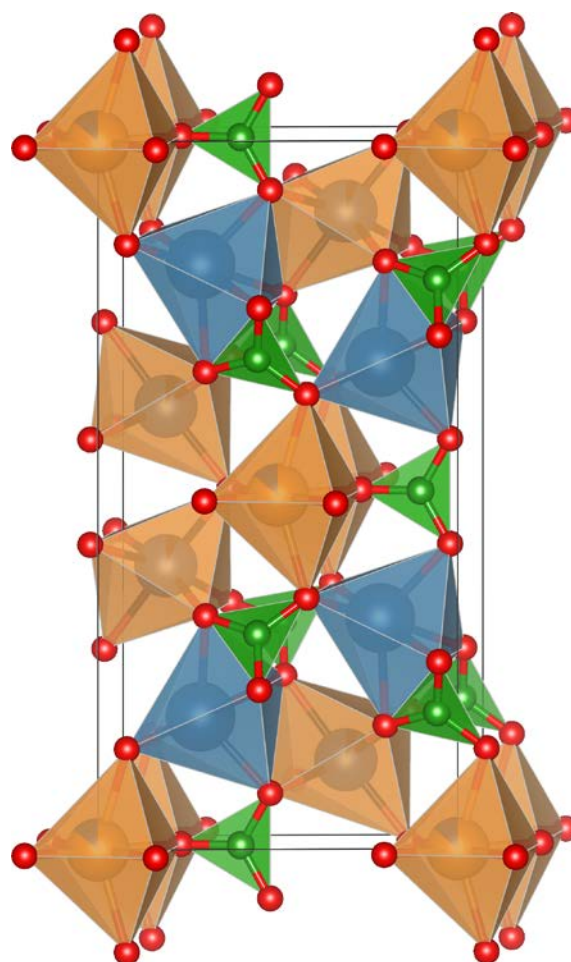


Abbildung 1: Strukturmodell von $RCa_4O(BO_3)_3$, in dem die b -Achse nach oben zeigt und die Atome in folgenden Farben dargestellt sind: R orange, Ca blau, O rot, B grün



RESONANTE RÖNTGENDIFFRAKTION UNTER OPTIMIERTER DESTRUKTIVER INTERFERENZ

Seit Oktober 2016 gibt es am Institut für Experimentelle Physik das durch die Deutsche Forschungsgesellschaft (DFG) geförderte Projekt „Resonante Röntgendiffraktion unter optimierter destruktiver Interferenz zur hochsensitiven Bestimmung phasenaufgelöster lagespezifischer Atomverrückungen in kristallinen Materialien“ (REXSuppress). Dieses Projekt zielt darauf ab, die Abweichung atomarer Atompositionen von der zugeordneten Idealstruktur in einem Kristall mit Hilfe von Röntgenstrahlung auf wenige Picometer genau zu quantifizieren. Diese Abweichungen von hochsymmetrischen Lagen können für die Ausprägung von physikalischen Eigenschaften wie Piezo- oder Pyroelektrizität maßgeblich sein.

Der hochinnovative Ansatz *Resonantly Suppressed Diffraction* (RSD) ist eine Methode im Bereich des *Resonant Elastic X-Ray Scattering* (REXS). Hierbei wird das lokale elektronische System einer atomaren Spezies resonant durch gezielt gewählte Wellenlängen des Röntgenspektrums angeregt. Die Besonderheit von RSD ist die Auswertung der gestreuten Intensität eines Bragg-Reflexes, bei dem durch destruktive Interferenz die Intensität gerade ausgelöscht wird. Dieses Intensitätsminimum

ist hochsensitiv auf kleinste Abweichungen der atomaren Ordnung und ermöglicht somit die Charakterisierung von dynamischen Prozessen und Phasenumwandlungen (siehe Abbildung 1). Die Strukturänderungen sollen insbesondere unter Einflüssen wie Temperatur, mechanischen Spannungen und elektrischen oder magnetischen Feldern analysiert werden. RSD bietet weiterhin auch eine einzigartige Möglichkeit zur Untersuchung von Defekten in kristallinen Festkörpern. Diese Defekte und ihre kristalline Nahordnung bestimmen eine Vielzahl technisch relevanter Eigenschaften. Genaue Kenntnisse und eine exakte Vermessung der Defekte tragen maßgeblich zu einem besseren Verständnis der Materialien bei und können durch gezielte Modifikation (*Defect Engineering*) bestehende Eigenschaften optimieren oder neue hervorgerufen. Somit hat die RSD-Methode auch im Bereich der Halbleiterindustrie bzw. Datenspeicherung und elektrochemische Energiespeicherung eine außerordentliche Bedeutung.

Der neuartige Ansatz wurde im Zuge der Doktorarbeit von Dr. Carsten Richter am Institut für Experimentelle Physik entwickelt und im renommierten

Wissenschaftsjournal *Nature Communications* veröffentlicht. RSD stellt eine Kopplung der Röntgenspektroskopie und -diffraktometrie auf Basis resonanter Effekte der Röntgenstrahlung mit der Materie dar und ermöglicht somit die Untersuchung von Fragestellungen aus der chemischen Kristallographie, aber auch aus den Material-, Geo-, Bio- und Umweltwissenschaften. Experimente unter resonanten Streubedingungen benötigen variable Röntgenenergien, deshalb können RSD-Untersuchungen nur an Synchrotronen, wie dem Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) in Hamburg oder der *European Synchrotron Radiation Facility* (ESRF) in Grenoble durchgeführt werden (siehe Abbildung auf S. 64).

Die RSD-Methode, die bereits erfolgreich am DESY und ESRF an Strontiumtitanat SrTiO_3 getestet wurde, soll nun auf weitere Materialsysteme und wissenschaftliche Fragestellungen ausgeweitet sowie methodisch weiterentwickelt werden. Konkrete Fragestellungen, die im Projekt REXSuppress behandelt werden, befassen sich mit dem Ursprung der Ferroelektrizität in Tieftemperaturphasen von Yttrium-Mangan-Oxid YMn_2O_5 und Strontiumtitanat SrTiO_3 sowie in epitaktisch gewachsenen dünnen Schichten. Aktuell wurde eine Strahlzeit zur Untersuchung von YMn_2O_5 am ESRF durchgeführt. Die Vorbereitung sowie Auswertung dieser Messzeit umfassen eine intensive Literaturrecherche, die Analyse von etwaigen gekoppelten atomaren Verrückungen und natürlich die Präparation der

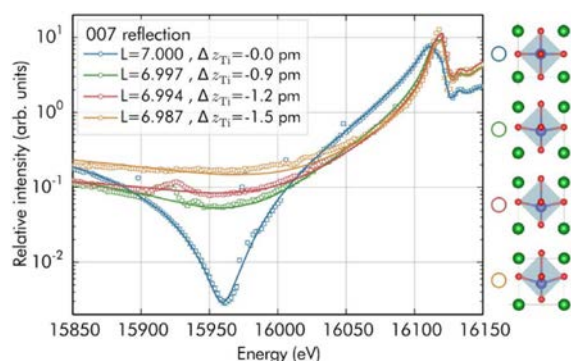


Abbildung 1: Antwort der RSD-Kurve in der Nähe des 007-Reflexes auf spannungsinduzierte atomare Verrückungen in elektroformiertem SrTiO_3 : Die Verrückungen bewirken in diesem Fall im Vergleich zum kubischen SrTiO_3 (blaue Kurve) eine Verschiebung des Intensitätsminimums und einen deutlichen Anstieg der Intensität. Die Position des Titan-Atoms relativ zum ungestörten SrTiO_3 ist in der Legende angegeben und zusätzlich rechts für eine bessere Visualisierung um den Faktor 10 verstärkt dargestellt.

REXSUPPRESS

Proben, inklusive Kristallorientierung und Kontaktierung (siehe Abbildung 2). Anträge auf Strahlzeiten zu weiteren Schwerpunkten von REXSuppress wurden gestellt oder befinden sich in Vorbereitung.

Die Projektleitung wird durch Dr. Matthias Zschornak wahrgenommen, der die Aktivitäten der Arbeitsgruppe am Synchrotron koordiniert und in seiner Promotion maßgeblich zur methodischen Weiterentwicklung der resonanten Röntgendiffraktometrie beigetragen hat. Bei den experimentellen Arbeiten, der Durchführung von Messreisen und den theoretischen Modellierungen wird er unterstützt durch die Doktorandinnen Dipl.-Math. Melanie Nentwich und M. Sc. Tina Weigel. Als externer Berater steht weiterhin Dr. Carsten Richter zur Verfügung, der aktuell als Postdoktorand am ESRF arbeitet. Hervorzuheben ist auch, dass Frau Nentwich 2017 eine von insgesamt 72 Teilnehmern an der fünfwöchigen *HERCULES European School* am ESRF war und dort ihr Wissen im Bereich der Synchrotronforschung erweitern und zusätzliche praktische Erfahrungen sammeln konnte.

Neben der methodischen Weiterentwicklung engagiert sich die Arbeitsgruppe um Prof. Dirk C. Meyer auch beim Aufbau der *Chemical Crystallographic Beamline* im Rahmen mehrerer vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderter Projekte mit dem Schwerpunkt „Erforschung kondensierter Materie an Großgeräten“. Die Beamline bildet eine der neuen Experimentierstationen des Speicherringes Petra III am DESY

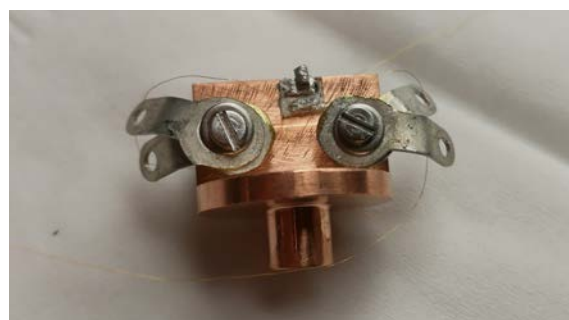


Abbildung 2: Elektrisch kontaktierter Kristall auf einem Kupferprobenhalter für temperaturabhängige Messungen

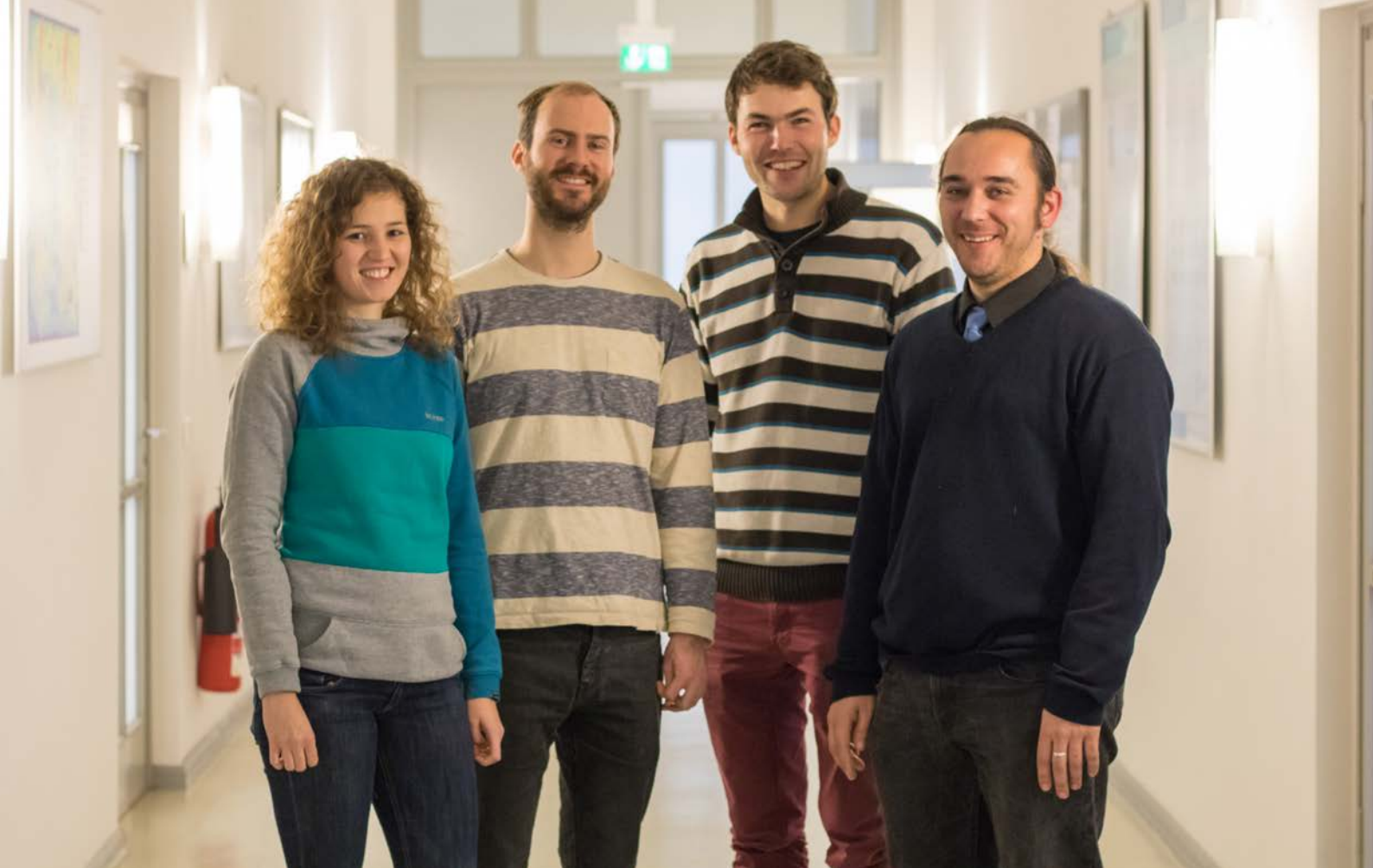
und startet in diesem Jahr den Nutzerbetrieb. Typische Fragestellungen, die an der Beamline untersucht werden sollen, umfassen die Analyse von Elektronendichten und die Aufklärung fehlgeordneter und modulierter Strukturen unter dem Einfluss von externen Feldern, bei hohen Drücken und tiefen bzw. hohen Temperaturen. Aktuell arbeiten die Verbundpartner an einem weiteren Antrag zur Fortführung des BMBF-Verbundvorhabens. Das Engagement beim Aufbau der Beamline ist von außerordentlicher Bedeutung vor allem im Hinblick auf das geplante Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffumwandlung (ZeHS), bei dem Strukturänderungen unter hohem Druck und extremen Temperaturen untersucht werden sollen.

Für die finanzielle Unterstützung danken wir der Deutschen Forschungsgemeinschaft (Projekt Nummer ME 1433/15-1) für die aktuelle Förderung sowie dem BMBF für die vergangenen Projekte (Projekt Nummern 05K10OF1 und 05K13OF1).

DFG Deutsche
Forschungsgemeinschaft



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



STIPENDIEN

Valentin Garbe: **DAAD IPID4all Young GEOMATENUM International Reisestipendium für die Teilnahme am Workshop „Summer School of Information Engineering – Technologies for Energy Sustainability“**, Brixen (Italien), Juli 2017

Diana Karsch: **SAB-Landesinnovationspromotion zu „Pyroelektrisch ablösbaren Schichten“**, Arbeitsgruppe Prof. Meyer, Oktober 2016 – September 2019

Falk Meutzner: **G-RISC-Stipendium für einen fünfwöchigen Aufenthalt am Samara Center for Theoretical Material Science (SCTMS)**, Arbeitsgruppe Prof. Vladislav A. Blatov, Samara (Russland), 16.07. – 19.08.2017

Falk Meutzner: **DGK-Reisestipendium für die Tagung der IUCr**, Hyderabad (Indien), 21. – 28. August 2017

Melanie Nentwich: **DAAD IPID4all Young GEOMATENUM Reisestipendium für die Teilnahme am fünfwöchigen HERCULES-Kurs**, Grenoble (Frankreich), 26. Februar – 30. März 2017

Melanie Nentwich: **DAAD IPID4all Young GEOMATENUM Reisestipendium für die Teilnahme am IUCr-Kongress**, Hyderabad (Indien), 21. – 28. August 2017

Melanie Nentwich: **Young Scientist Award der IUCr**, Hyderabad (Indien), 21. – 28. August 2017

Tina Weigel: **Federmann-Stipendium zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses und des Ausbaus der Zusammenarbeit mit wissenschaftlichen Institutionen in Israel**, Arbeitsgruppe Prof. Doron Aurbach, Ramat Gan (Israel), Januar bis Juni 2017

VERANSTALTUNGEN



LANGE NACHT DER WISSENSCHAFT UND WIRTSCHAFT

Am 17. Juni 2017 öffneten die Universität und auch das Institut für Experimentelle Physik die Türen zur langen Nacht der Wissenschaft und Wirtschaft.

Spannende Experimente im Foyer des Gellertbaus zeigten, dass man Physik braucht, um Strom aus Kristallen zu erzeugen, Licht in Farben zu zerlegen und vieles mehr.





DRITTE INTERNATIONALE FREIBERGER TAGUNG ZU ENERGIESPEICHERMATERIALIEN ESTORM 2017

Materialien für zukünftige, sichere, hochenergiegedichte elektrochemische Energiespeicher – zu diesem Thema trafen sich erneut international renommierte Experten aus Forschung und Industrie an der TU Bergakademie Freiberg.

Mit dem zentralen Thema „Energiespeicher“ greift die *International Freiberg Conference on Electrochemical Storage Materials (ESTORM 2017)* ein aktuelles, gesellschaftsrelevantes und für die Energiewende wichtiges Thema auf. Sie richtete sich damit an Forschungseinrichtungen und Unternehmen sowie an alle diejenigen, die an zukünftigen Lösungen für hoch-energiegedichte Speicher im Bereich der stationären aber auch mobilen Energiespeicherung mitwirken oder interessiert sind.

In Anknüpfung an die beiden vergangenen Konferenzen 2013 und 2015 fand die mittlerweile überregional bekannte ESTORM nun zum dritten Mal, dieses Jahr vom 12. bis 14. Juni 2017 in Freiberg statt. Sachsens älteste und bedeutendste Bergstadt mit ihrer forschungsstarken Ressourcenuniversität bietet hierfür einen hervorragend

passenden Standort. Während die erste ESTORM alle Komponenten einer Batterie beleuchtete, adressierte die zweite insbesondere Ressourcenaspekte der eingesetzten Materialien, das Batterierecycling und Post-Lithium-Konzepte. Dieses Jahr wurde die Tagung mit einer Schau zu Batterieaktivitäten in Freiberg, Sachsen, Deutschland und der EU eröffnet. Es standen dann hochvalente Ionen, Feststoffionenleiter und Feststoffbatterien (Tag 1 und 2) im Vordergrund und damit Themen, die in den letzten Jahren stark an Bedeutung gewonnen haben. Sichtbar wird dies beispielsweise durch den Kauf der amerikanischen Seeo Inc. durch die Robert Bosch GmbH im vergangenen Jahr; ein Start-up, welches auf die Fertigung von Feststoffbatterien spezialisiert ist. Methoden zur Charakterisierung von Batteriematerialien, insbesondere *In-situ*- und *Operando*-Methoden, bildeten den Abschluss der dreitägigen Veranstaltung.

Wichtige Fragen wie beispielsweise „Welche Post-Lithium-Batterie-Konzepte sind von hohem Interesse?“, „Lohnt es sich, Hochvalente-Ionen-Konzepte zu



3rd INTERNATIONAL FREIBERG CONFERENCE
on Electrochemical Storage Materials

Freiberg, from 12th to 14th June 2017



erforschen?“, „In welchem Umfang können Rechenmethoden zu hochenergiedichten Batterien beitragen?“, „Sind Aluminium-Ionen-Batterien eine nachhaltige Alternative zu Lithium-Ionen-Systemen?“, „Wie können Feststoff-Batterien produziert werden?“ und „Wie lassen sich elektrochemische Prozesse gezielt untersuchen?“ wurden erörtert.

International renommierte Experten aus Amerika, Asien und Europa präsentierten Highlights ihrer Arbeiten und ließen die Zuhörer in Freiberg von ihrem profunden Wissen profitieren. So waren neben Vortragenden aus den weltweit bekannten Forschungsstandorten *Lawrence Berkeley National Lab*, *National University of Singapore* und *Joint Institute for Nuclear Research Dubna* auch Referenten international agierender Unternehmen wie *Novelis Deutschland GmbH* und *ULVAC Technologies Inc.* Japan geladen. Insgesamt waren 30 Experten aus neun Ländern vertreten, darunter Japan, Russland, Singapur, Südkorea und die USA. Das wissenschaftliche Programm wurde gemeinsam mit dem *Advisory Board*, dem namhafte Wissenschaftler wie Prof. Gerbrand Ceder von der *University of California* angehören, mitgestaltet. Der Besuch des Forschungs- und Lehrbergwerkes der TU Bergakademie „Reiche Zeche“ sowie der *terra mineralia*, einer der größten und schönsten Mineralienausstellungen der Welt, gehörten zu den Höhepunkten des Rahmenprogramms, welches die 80 internationalen Teilnehmer erwartete.

Während der drei Tage trugen alle Teilnehmer zu einem spannenden, qualitativ hochwertigen Programm, aktiven und offenen wissenschaftlichen Diskussionen, einer freundlichen Atmosphäre und damit zu einer insgesamt

ereignisreichen Zeit bei. Die vielen Gespräche während der Pausen und der Abendveranstaltungen machten das *Networking* für alle zu einer einfachen, natürlichen und freudebringenden Aufgabe. In den Gesprächen wurde bestätigt, dass die gewählten Themen der EStorM und damit die Freiburger Bemühungen u. a. hinsichtlich neuer theoretischer Ansätze für die Ableitung von Hochvalente-Ionen-Festelektrolyten von hoher Relevanz für die mittelfristige nationale und internationale Forschung sind.

Ausgerichtet wurde die Tagung vom Institut für Experimentelle Physik der TU Bergakademie Freiberg, unter der Leitung von Professor Dirk C. Meyer und den Tagungsvorsitzenden Dr. Tilmann Leisegang und Dr. Anastasia Vyalikh. Das IEP, welches u. a. Koordinator für die beiden vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Verbundprojekte R2R-Battery und



Abbildung 1: Anlässlich der EStorM 2017 wurde eine Briefmarke in limitierter Auflage herausgegeben.

SYNESTESia ist, versteht sich hierbei als Multiplikator und Innovationsgeber im Bereich der elektrochemischen Energiespeicherung. Neben dem IEP waren als weitere Organisatoren das Fraunhofer-Institut für Organische Elektronik, Elektronenstrahl- und Plasmatechnik Dresden, das Kurt-Schwabe-Institut Meinsberg, das Forschungsinstitut für Leder- und Kunststoffbahnen Freiberg, das *Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry Novosibirsk* und die Vowalon GmbH eingebunden. Erneut trug auch das Netzwerk Energy Saxony e. V. zum Gelingen bei. Finanziell wurde die EStorM 2017 durch Mittel des BMBF und der Alexander-von-Humboldt-Stiftung (Projekt PhosCar) unterstützt, denen besonders gedankt sein soll.

Im Anschluss an die Konferenzen wurden zurückliegend zwei *Proceedings*-Bände herausgegeben. Artikel der ersten beiden Bände zählten mehrfach hintereinander zu den „*Most read this month*“. Insgesamt sind die Ausgaben bisher mehr als 73 Mal zitiert und mehr als 10.000 Mal gelesen worden (Stand: 05/2018). Aus diesem Grund wird auch der De Gruyter Verlag – Editoren sind Dirk C. Meyer, Tilmann Leisegang und Hartmut Stöcker – ein Buch mit dem Titel der Tagung herausgeben.

Die Konferenz trägt zur Sichtbarkeit Freibergs, der Region Mittelsachsen und damit auch Deutschlands als wichtige Batterieforschungsstandorte bei und fördert so die Attraktivität für Investitionen. So kann beispielsweise die Daimler AG, die eine zweite Batteriefabrik in Kamenz aufbaut, als finanzkräftiger Investor erwähnt werden. Die nächste Konferenz findet 2019 statt.

Abbildung 2 (nächste Seite): Impressionen von der Tagung in der Alten Mensa der TU Bergakademie Freiberg sowie vom Gemeinschaftsabend auf der Reichen Zeche, wo das Gruppenfoto aufgenommen wurde.



LEHRE



VERBESSERTES LEHRANGEBOT IN DEN PHYSIKALISCHEN GRUNDLAGENKURSEN FÖRDERT DEN KLAUSURERFOLG

Das durch den Europäischen Sozialfonds geförderte Projekt „Ausgleich unterschiedlicher fachlicher und nicht-fachlicher Qualifikationen in der Studieneingangsphase“ (Antragsnummer 100298803) brachte im Wintersemester 2017/18 seinen ersten Durchlauf mit Erfolg hinter sich. Das Projekt sieht die Implementierung didaktischer Maßnahmen vor, um die Zahl der Studienabbrecher im ersten Studienjahr wegen des Nichtbestehens der grundlegenden naturwissenschaftlichen Fächer zu reduzieren. So wurde das Lehrangebot der Übungen „Physik für Naturwissenschaftler I/II“ im Vergleich zum Vorjahr deutlich erweitert. Bereits vor Semesterbeginn erfreute sich der eintägige Vorbereitungskurs Physik eines großen Andrangs von ca. 260 Studenten aus naturwissenschaftlichen und ingenieurtechnischen Studiengängen. Dieser Kurs soll Defizite auffangen, die Studienanfänger im Bereich der Physik mitbringen. Semesterbegleitend wurden sowohl ein Tutorium für die Wiederholung der Inhalte als auch eine Zusatzübung mit anspruchsvolleren Aufgaben auf freiwilliger Basis angeboten, um an beiden

Enden des Kompetenzspektrums leistungsdifferenziert zu fördern. Zudem wurden die Übungsmaterialien überarbeitet. Das von uns entwickelte und 20 Kapitel zum Inhalt der Physik I umfassende Hausaufgabensystem (Onlinekurs) wurde über Antestate vor jeder Übung mit eingebunden. Über die Testate konnten Zusatzpunkte für die Klausur gesammelt werden, was für die Nutzung des Onlineangebots motivierte. Darüber hinaus wurden mehr aktivierende Methoden in den Übungsablauf implementiert, z. B. elektronische Abstimmungen mittels „Kahoot“ zur Wiederholung des Stoffes.

Welche Ergebnisse traten zu Tage?

Studenten, die regelmäßig (>75 %) Testate schrieben, sind aktive Teilnehmer der Maßnahme. Aktive Teilnehmer bekamen im Schnitt 1,4 Zusatzpunkte von maximal zwei erzielbaren für die Klausur, die aus insgesamt sieben Aufgaben mit 43 Klausurpunkten bestand. Der Schwierigkeitsgrad der Klausur lag im Sollwert bei 2,7 und im Istwert bei 3,5 auf einer Skala von 1 bis 5, wobei 1

Aufgaben darstellt, die in der Übung in identischer Form gerechnet wurden und somit am einfachsten sind, während die 5 Aufgaben darstellt, die bekannte Strukturen auf völlig neue Kontexte übertragen und somit am schwierigsten sind. Die minimale Punktzahl zum Bestehen betrug 15 (=35 %, diese Zahl wurde im Vergleich zu den Vorjahren nicht geändert) und insgesamt 163 Studenten nahmen an der Klausur teil.

Der Unterschied zwischen den aktiven und den nichtaktiven Teilnehmern zeigte sich sowohl in der Bestehensquote der Klausur als auch in der Punktzahl – siehe Abbildung 1. Das Diagramm zeigt, dass ungefähr die Hälfte der gesamten Studentenzahl (83, A) regelmäßig Testate schrieb, während die andere Hälfte (80, N) sich entweder nicht regelmäßig oder gar nicht beteiligte. Somit gab es eine Gruppe (A), die sich der Maßnahme unterzog, und eine Gruppe (N), die durch die Maßnahme nicht erreicht werden konnte. Letztere stellt eine Kontrollgruppe dar.

Die aktiven Teilnehmer erzielten eine Erfolgsquote von $74/(74+9) = 89\%$. Dem gegenüber stehen die nichtaktiven Teilnehmer mit $52/(52+28) = 65\%$.

Darüber hinaus hatten aktive Teilnehmer eine Klausurnote, die im Durchschnitt 1,1 über der der nichtaktiven Teilnehmer lag. Sie erreichten 2,7 (A) gegenüber 3,8 (N). Dieser Notenunterschied entspricht 9,3 Klausurpunkten mehr für jeden aktiven Teilnehmer.

Für die Testateilnahme mussten die Studenten nicht zwangsläufig das Hausaufgaben-system nutzen (siehe

Abbildung 2). Die aktive Nutzung (>80 % aller Einheiten) konnte lediglich bei 27 Personen (HA = Hausaufgaben-aktiven Teilnehmern) festgestellt werden und sie hat sich reichlich gelohnt: 96 % Erfolgsquote gegenüber 74 % bei Hausaufgaben-nichtaktiven (HN) Teilnehmern. Auch hier verbesserten sich die Noten deutlich (vgl. 2,3 mit 3,5).

Der didaktische Mehraufwand kam bei den Studenten in Form von Motivation (z.B. durch Zusatzpunkte) sowie Lernspaß (z.B. Teilnahme an Online-Quiz) gut an. Das zeigte die zu Semesterende durchgeführte Evaluation der Übung sowie die eindeutigen Ergebnisse der Klausurstatistik.

Ausblick

Nichtsdestoweniger gibt es bei den beiden grundlegenden Physikveranstaltungen noch Verbesserungspotential. Es wurde beispielsweise beobachtet, dass Studenten bestenfalls in der Lage sind, ihr Wissen in bekannten Aufgabemustern anzuwenden. Sie sind aber nicht unbedingt in der Lage, Gelerntes zu abstrahieren und auf leicht abgewandelte Situationen anzuwenden. Darum werden für die noch zu beantragende weitere Projektlaufzeit Maßnahmen vorgeschlagen, die z.B. durch Methodentraining die Abstraktion sowie Reflexion des Gelernten anregen. Die verschiedenen Themenkomplexe sollen dadurch miteinander vernetzt und verflochten werden. Das gute Vorbild der Physik für Naturwissenschaftler I mit Hausaufgaben-system, Testaten und Zusatzpunkten soll für

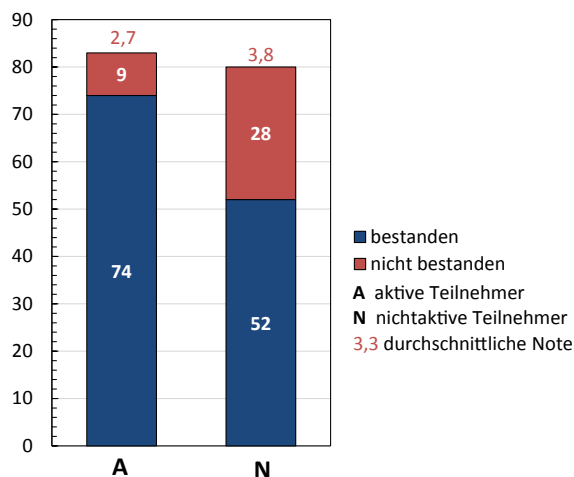


Abbildung 1: Erfolg nach Testateilnahme

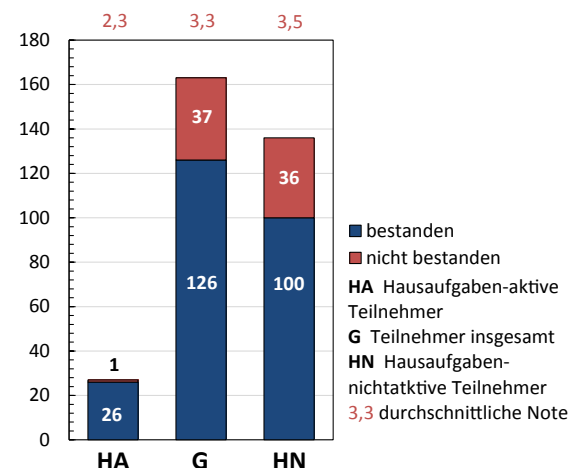


Abbildung 2: Erfolg nach Nutzung des Onlinekurses

die Physik für Naturwissenschaftler II erweitert und umgesetzt werden. Auch kleine didaktische Impulse für die Übungsgruppenleiter sind geplant.

Für den zweiten Durchlauf des Vorbereitungskurses vor dem Wintersemester 2018/19 stehen zwei Tage zur Verfügung, was eine Vertiefung sowie Erweiterung der Themen ermöglichen wird. Da dieser Kurs die allererste Universitätsveranstaltung der Studienanfänger darstellt, kann diese Gelegenheit für ein Kennenlernen der Studenten untereinander, auch im Hinblick auf künftige Lerngruppen, noch intensiver genutzt werden.

Durch die aktive Beteiligung an der Maßnahme hat sich gezeigt, dass das physikalische Verständnis verbessert wurde, mit der Folge, dass die Studenten bessere Noten erzielten. Mittelfristig wird eine allmähliche Anhebung des

Klausurmaßstabs angestrebt, der sich über einen Teufelskreis aus Verfehlen eines angemessenen Schwierigkeitsgrades und nachträglicher Anpassung der Durchfallgrenze mit 35 Prozentpunkten sehr tief verankert hat. Dies kann aber nur über eine gewisse Zeitspanne erfolgen, in der die Studenten Schritt für Schritt auf die erwünschte Schwierigkeit bzw. auf das erwünschte Verständnisniveau herangebracht werden.



Europäische Union

Europa fördert Sachsen.



Europäischer Sozialfonds



KENNENLERNEN DES LEHR- UND FORSCHUNGSANGEBOTS DES DESY UND DES EUROPEAN XFEL IN HAMBURG

Auch im Jahr 2017 konnte die Exkursion des Instituts für Experimentelle Physik zum Deutschen Elektronen-Synchrotron DESY und *European XFEL* (X-ray Free Electron Laser) in Hamburg durchgeführt werden. Die Organisation von Seiten des IEP erfolgte durch Falk Meutznier und Robert Schmid. Durch die großzügige finanzielle Unterstützung des *European XFEL* und der Freunde und Förderer der TU Bergakademie Freiberg wurde insgesamt 25 Studenten und Mitarbeitern verschiedener Fachrichtungen der Universität der Besuch dieser Forschungseinrichtungen ermöglicht. Das Hauptziel der Exkursion ist, wie auch in den Jahren zuvor, aktuelle Forschung an Großgeräten schon innerhalb der akademischen Ausbildung aktiv mitzerleben und selbst durchzuführen. Vor Ort führen erfahrene Wissenschaftler die Studenten durch alle Bereiche des Forschungszentrums und erläutern anhand konkreter Experimente die wissenschaftlichen Fragestellungen.

Das Helmholtz-Zentrum DESY ist gegenwärtig vor allem in der Wissenschaft mit Photonen eines der

führenden Zentren weltweit. Mit den DESY-Großgeräten erkunden Forscher den Mikrokosmos in seiner ganzen Vielfalt – vom Wechselspiel kleinster Elementarteilchen über das Verhalten neuartiger Nanowerkstoffe bis hin zu jenen lebenswichtigen Prozessen, die zwischen Biomolekülen ablaufen. Die dafür erforderlichen Beschleuniger wie auch die Nachweisinstrumente, die DESY entwickelt und baut, sind einzigartige Werkzeuge für die Forschung: Sie erzeugen das stärkste Röntgenlicht der Welt. Insbesondere durch das im Jahr 2009 in Betrieb gegangene Synchrotron Petra III wird hier Forschern aus vielen Bereichen die derzeit brillianteste Röntgenstrahlung weltweit bereitgestellt.

Das diesjährige 3-Tages-Programm der Freiburger startete mit einer Einführungsvorlesung durch Herrn Prof. Serguei Molodtsov, einem wissenschaftlichen Direktor und Mitglied der Geschäftsführung des *European XFEL*. In seinem Vortrag erklärte er prinzipielle Funktionsweisen der verschiedenen Beschleuniger und gab Einblicke in die zukünftige Forschung am XFEL. Im Anschluss erfolgte

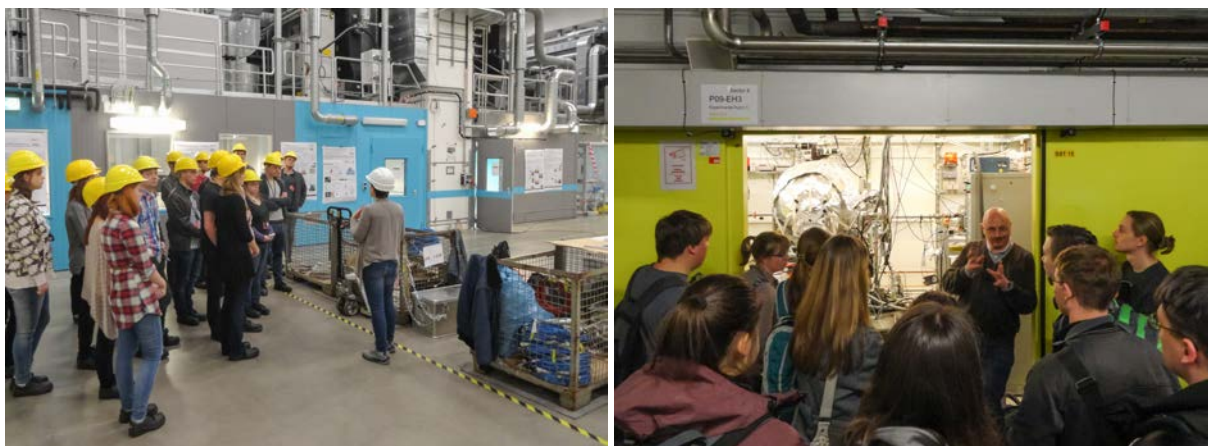


Abbildung 1: Verschiedene Ansichten der Beschleuniger und Nachweisinstrumente, die während des Programms gezeigt und vorgeführt wurden. Links: Im Aufbau befindliche Untersuchungshütten für XFEL-Experimente. Rechts: Dr. Novikov erklärt Synchrotronexperimente.

die Besichtigung der Fortschritte der im Bau befindlichen *European XFEL*-Anlage in Schenefeld. Die Inbetriebnahme des Linearbeschleunigers wird Mitte 2017 erfolgen. Professor Molodtsov leitet den Lehrstuhl für „Strukturforschung mit XFELs und Synchrotronstrahlung“ an der Bergakademie, wodurch zum einen die Anbindung Freibergs nach Hamburg gestärkt wird und zum anderen Freiburger Studenten jeweils Ende September die Möglichkeit haben, eine dediziert auf XFELs zugeschnittene Vorlesung von ausgewiesenen Experten im Feld zu besuchen.

Der darauf folgende Tag umfasste neben einer allgemeinen Führung über das DESY-Gelände und durch Teile des stillgelegten HERA-Beschleunigers speziell auch die Demonstration von Experimenten am Linearbeschleuniger FLASH (Dr. Stephan Klumpp) und am Speicherring Petra III (Dr. Dmitri Novikov). Die Bergakademie war beim Aufbau eines chemischen Kristallographieexperimentes maßgeblich beteiligt, welches in der neuen PETRA-Halle bereits aufgebaut wurde und zum ersten Mal durch die Freiburger Exkursionsgruppe besichtigt werden konnte. Hier werden in Zukunft Absorptions- und Diffraktionsmethoden so miteinander kombiniert, dass Parameter der lokalen atomaren Umgebung resonant angeregter Atome in einzigartiger Weise gewonnen werden können.

Unter den Freiburger Studenten und Mitarbeitern wurde die Exkursion sehr positiv aufgenommen und Verbindungen zu den Hamburger Kollegen wurden weiter



Abbildung 2: Freiburger Studenten bei der Führung zum aktuell in der Fertigstellung befindlichen Röntgen-Freie-Elektronen-Laser XFEL während der DESY-Exkursion im März 2017

ausgebaut. Wir hoffen, auch im folgenden Jahr unsere Exkursion durchführen zu können und freuen uns auf erneut zahlreiche Teilnehmer.



RÖNTGENFLUORESZENZANALYSE AN OBJEKTEN DER SAMMLUNG FÜR BERGBAUKUNDE

Im Rahmen eines Restaurierungsvorhabens, gefördert durch die Hermann Reemtsma-Stiftung im Rahmen der Initiative „Kunst auf Lager“, wurden mit Unterstützung des IEP Röntgenfluoreszenzmessungen zur Identifizierung von Holzschutzmitteln an Objekten der Sammlung für Bergbaukunde der TU Bergakademie Freiberg durchgeführt. Im Ergebnis dieses Vorhabens sind ausgewählte Objekte nun wieder vielfältig einsetzbar. Der Arbeitserfolg wurde projektbegleitend durch weitere Messungen belegt.

Die Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA) ist eine etablierte, zerstörungsfrei arbeitende Methode, bei der ein Untersuchungsgegenstand mithilfe primärer Röntgenstrahlung angeregt wird und sekundäre Röntgenstrahlung – Fluoreszenzstrahlung – emittiert. Über das Energiespektrum der Fluoreszenzstrahlung lässt sich auf die chemische Zusammensetzung des Gegenstands schließen. Die RFA findet in verschiedensten Bereichen wie Archäologie, Biologie, Chemie, Forensik und Umweltanalytik, aber auch in der Industrie eine breite Anwendung.

Erste kommerzielle (wellenlängendispersive) RFA-Geräte kamen in den 1950er und 1960er Jahren auf den Markt. Mit der Verbesserung der Detektoren wurden in den frühen 1970er Jahren die ersten energiedispersiven Geräte kommerzialisiert. Sie ermöglichten erstmalig die gleichzeitige Aufnahme eines großen Spektralbereichs. Damit waren die Voraussetzungen für portable RFA-Geräte (pRFA) geschaffen, die den Anwendungsbereich weiter vergrößerten. Neben Analysen von Böden und Gesteinen im freien Gelände zählt heute auch das Recycling zu wichtigen Anwendungsbereichen. In den 1980er Jahren erlangten ergonomisch geformte sogenannte Handheld-Geräte die Marktreife. Diese bestanden zunächst aus einer radioaktiven Röntgenquelle (z. B. das Isotop ^{55}Fe) und einem Si-PIN-Detektor mit einer Energieauflösung von etwa 1200 eV. Seitdem wurden die pRFA stetig weiterentwickelt. So finden sich heute neben klassischen Röntgenröhren im Miniaturformat auch Röntgengeneratoren, die den pyroelektrischen oder triboelektrischen Effekt nutzen. Diese Miniaturröntgenröhren benötigen eine

elektrische Leistung von weniger als 4 W. Zudem werden hochempfindliche Siliziumdriftdetektoren (SDD) mit einer Energieauflösung von besser als 140 eV eingesetzt. Mit diesen Systemen können auch ganz neue Einsatzbereiche erschlossen werden.

Die Sammlung für Bergbaukunde hat eine herausragende Stellung unter den historischen Sammlungen der Bergakademie. Sie besteht aus detailreichen Bergbau- und Hüttenmodellen, originären Werkzeugen und Hilfsmitteln, einmaligen Schriftstücken und Bildnissen sowie wertvollen archäologischen Grubenfunden. Jedoch ist der Erhaltungszustand vieler Objekte schlecht, die Modelle weisen zum Teil erhebliche und gesundheitlich bedenkliche Belastungen mit Holzschutzmitteln auf. Diese Objekte sind museal sowie in Forschung und Lehre nur stark eingeschränkt oder nicht nutzbar. Erste Untersuchungen erbrachten den Nachweis vielfältiger Belastungen des Bestands. Die Erkenntnisse waren jedoch nicht ausreichend, um Rückschlüsse auf den Belastungsgrad der gesamten Sammlung zu erhalten. Eine weitere, umfangreiche Untersuchung zur Feststellung der qualitativen und quantitativen Belastung der Modelle vervollständigte dann die Informationsbasis für erforderliche Restaurierungsmaßnahmen. Die dafür erforderlichen RFA-Messungen wurden vom IEP in enger Zusammenarbeit mit der Kustodie (Dipl.-Rest. Hendrik Naumann) und Dipl.-Rest. Karsten Püschner geplant und durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Messungen waren die Basis der Projektvorbereitung.

Nach Bewilligung der Förderung wurden im Frühjahr 2017 planmäßig arbeitsbegleitend weitere Messungen von Dr. Hartmut Stöcker und Dr. Tilmann Leisegang vorgenommen, um den Reinigungserfolg an belasteten Modellen *in situ* ermitteln zu können. An fünf ausgewählten Objekten und insgesamt 30 unterschiedlichen Messpositionen erfolgten spektroskopische Untersuchungen vor und nach Reinigungsversuchen. Dabei konnten beispielsweise die Elemente Arsen und Chlor (siehe Abbildung 2) mit signifikanten Anteilen vor sowie nahezu vollständiger Abwesenheit nach der Reinigung nachgewiesen werden. In der Regel wurden für Chlor Abreicherungsraten von 20 % erzielt. Dieses chemische Element gibt einen Hinweis auf Insektizide wie Dichlordiphenyltrichlorethan (DDT) und γ -Hexachlorcyclohexan (Lindan), die als Wirkstoffe im Holzschutzmittel Hylotox 59 eingesetzt wurden.

Die Messungen der Objekte „Trebeschachts König David zu Annaberg“ und das „Modell einer Wassersäulenmaschine“ ergaben, dass durch die Reinigung die Holzschutzmittel erheblich reduziert werden konnten. Damit konnten die Objekte auf der documenta 14 ausgestellt werden (siehe Abbildung auf S. 80). Der in Dresden geborene zeitgenössische Künstler, Olaf Holzapfel, nutzte die Modelle im Rahmen seines Projekts „Zaun“ das er auf der documenta präsentierte und damit Teile der Bergbausammlung einem breiten Publikum zur Schau stellte. Die Ausstellung von Olaf Holzapfel fand auf einer kompletten Etage des Palais Bellevue statt. Dem Thema „Grenze und Abgrenzung“ konnte sich aus verschiedenen Richtungen und Zeiten genähert werden. Hierzu wurden Arbeiten des Künstlers zusammen mit verschiedenen historischen Artefakten aus unterschiedlichen Kontexten wie Architektur, Stadtplanung, Geographie und angewandter Kunst gezeigt. Eine besondere Rolle nahmen dabei die beiden Freiburger Modelle ein. Gemeinsam mit den anderen historischen Artefakten sollten sie als Zwischenräume, Grenzen und Grenzlinien sowohl etwas Trennendes wie auch etwas Verbindendes darstellen. Sie sollten das Leben und die Arbeit unter schwierigen naturgegebenen Voraussetzungen in Vergangenheit und Gegenwart verdeutlichen.

Wir bedanken uns bei Herrn Dipl.-Rest. Hendrik Naumann für die interessante Zusammenarbeit.

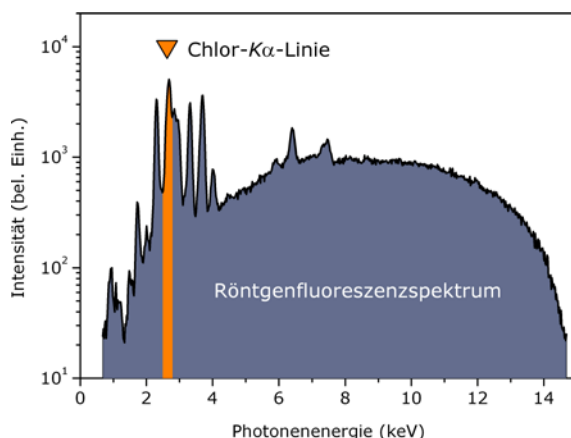


Abbildung 2: Röntgenfluoreszenzspektrum eines vermessenen Objekts vor der Restaurierungsbehandlung: Deutlich zu erkennen ist die Cl-K α -Linie, die auf chlorhaltige Holzschutzmittel hinweist, mit denen das Objekt behandelt wurde.



JUNGE KRISTALLOGRAPHEN

Die „Jungen Kristallographen“ (JK) sind ein Arbeitskreis der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK). Seit 2013 organisieren sie gemeinsame Veranstaltungen, mit dem Ziel junge Wissenschaftler zu vernetzen. Hierbei geht es nicht ausschließlich um Kristallographen und „jung“ ist eher ein Gefühl und keine Altersgrenze. Dadurch hat der Arbeitskreis mittlerweile 164 Mitglieder in 13 Ländern weltweit mit Vertretern aus allen verwandten Fachbereichen, wie Chemie, Physik, Materialwissenschaften, Biologie und Mineralogie. Seit 2016 ist Melanie Nentwich Leiterin der „Jungen Kristallographen“.

Der Arbeitskreis nutzt eine Website im Rahmen der DGK-Homepage (<http://dgk-home.de/aks/jkyc>), um über seine Aktivitäten zu informieren. Zusätzlich werden Tagungsberichte und interessante Mitglieder, wie Posterpreisgewinner, im eigenen Blog vorgestellt. Die JK treffen sich jedes Jahr im Herbst, d. h. außerhalb der DGK-Jahrestagungen, entweder an einer deutschen Hochschule oder zu einem *Lab Meeting*.

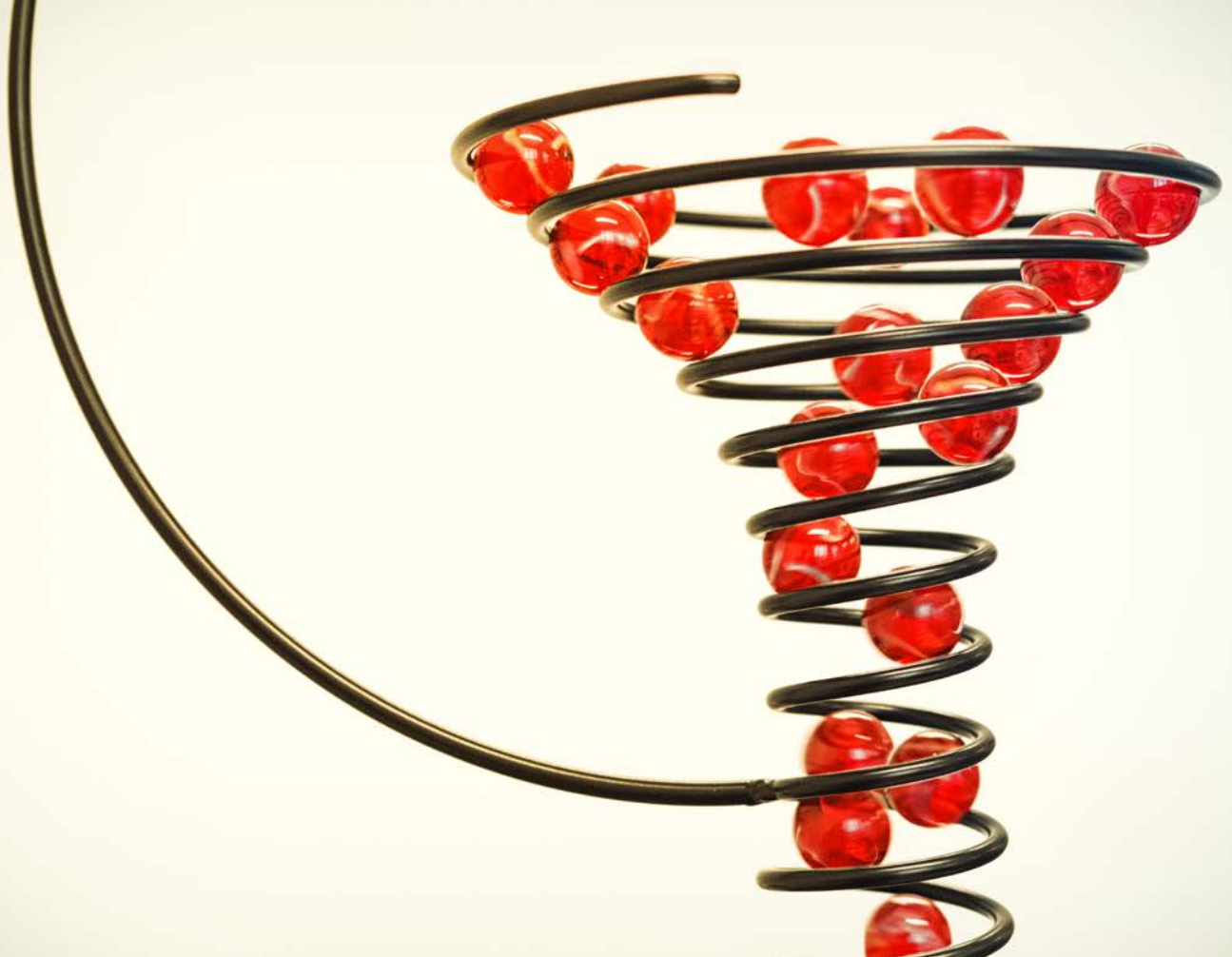
Im September 2017 fand das 2nd *Lab Meeting of the Young Crystallographers @ STOE* in Darmstadt statt. Finanziell wurde das Treffen großzügig durch die DGK, das FCI, STOE und Dectris unterstützt. 24 Masterstudenten, Doktoranden und junge Doktoren stellten ihre aktuelle

Forschung in der bewährten Mischung aus fünfminütigen *Lightning Talks* und zugehöriger Posterpräsentation vor. Drei von ihnen, darunter Falk Meutzner aus Freiberg, konnten einen Posterpreis gewinnen.

Für das Jahr 2018 ist das 3rd *Meeting of the Young Crystallographers* in Aachen geplant. Die Institute für Anorganische Chemie sowie Kristallographie arbeiten derzeit an einem dreitägigen Programm, das Führungen durch die Labore sowie Nähkästchen-Talks aus Industrie und Akademie beinhalten wird.



Posterpreisgewinner beim 2nd *Lab Meeting of the Young Crystallographers @ STOE* im September 2017



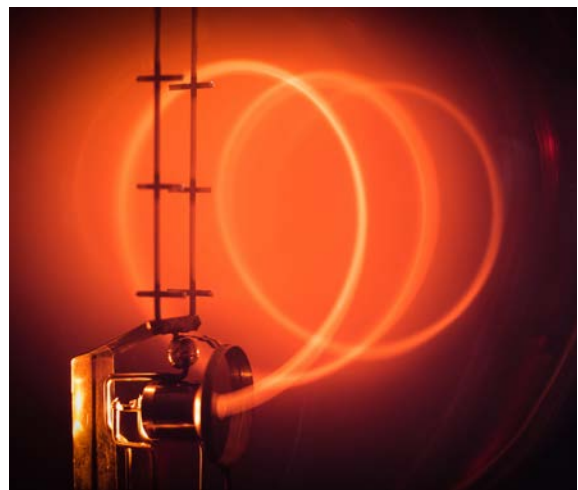
PHYSIKALISCHES GRUNDPRAKTIKUM

Das Praktikum zu den Vorlesungen „Physik für Naturwissenschaftler“ und „Physik für Ingenieure“ absolvieren ca. 600 Studierende pro Jahr. Für neun naturwissenschaftliche Studiengänge (z. B. Angewandte Naturwissenschaft, Chemie, Geologie/Mineralogie usw.) werden jeweils 12 Termine während des ersten Sommersemesters und für 17 ingenieurwissenschaftliche Studiengänge (z. B. Maschinenbau, Wirtschaftsingenieurwesen, Verfahrenstechnik usw.) werden jeweils sieben Termine während des ersten Wintersemesters dafür genutzt. Die Versuche dauern 3,5 Stunden und werden nach den besonderen Anforderungen der Studiengänge aus 20 verschiedenen Experimenten, die jeweils zweifach in den Räumen des IEP angeordnet sind, ausgewählt.

Das Praktikum zeichnet sich durch eine moderne Geräteausstattung aus, die auch Schülern zum Kennenlernen der Uni zur Verfügung steht. Das Praktikumsteam betreut spezielle Experimente für die „Schüleruniversität“, für das Schülerlabor „Science meets School“ und für das Herder-Gymnasien in Pirna, mit dem eine langjährige Partnerschaft besteht. Die Arbeitsunterlagen für die Versuche können die Studierenden und Schüler online abrufen.

Im Praktikum können Erfahrungen und Fertigkeiten zum Planen, Durchführen und Auswerten grundlegender

Experimente aus den Gebieten Mechanik, Elektrizitätslehre, Wärmelehre, Atomphysik und Optik erworben werden. Dies beinhaltet die Bedienung von Messgeräten, die Anfertigung von Versuchsprotokollen sowie die Nutzung von Computern zur grafischen Darstellung und Auswertung von Messreihen. Dabei werden grundlegende wissenschaftliche Arbeitsweisen trainiert.



Fadenstrahlröhre im Physikalischen Praktikum



ANGEBOTENE LEHRMODULE

Alternative Solarzellenkonzepte, Modulverantwortlicher: Prof. Johannes Heitmann,
beteiligte Vorlesende: Prof. Johannes Heitmann, Dr. Mateo de Vivanco,
Wintersemester, 3 SWS Vorlesung

Energiewandlung und Speicherung, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Florian Mertens,
beteiligte Vorlesende: zur Hälfte durch Dr. Holger Neuhaus,
Wintersemester, 4 SWS Vorlesung, 2 SWS Übung

Halbleiterphysik, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer,
beteiligte Vorlesende: Dr. Matthias Zschornak,
Wintersemester, 2 SWS Vorlesung, 2 SWS Übung

Materialforschung mit Freie-Elektronen-Röntgenlasern,
Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Serguei Molodtsov,
Sommersemester, 2 SWS Vorlesung als Blockveranstaltung am DESY in Hamburg

Moderne Methoden der Festkörperphysik: Magnetische Materialsysteme,
Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer, beteiligte Vorlesende: Dr. Kay Potzger,
Sommersemester, 2 SWS Vorlesung, 2 SWS Praktikum

Modultechnik, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer,
beteiligte Vorlesende: Prof. Dr. Ingo Schwirtlich,
Wintersemester und Sommersemester, 2×2 SWS Vorlesung

Physik für Ingenieure, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Johannes Heitmann,
Praktikumsplanung durch Dr. Hartmut Bergelt,
Wintersemester (Teil I): 2 SWS Vorlesung, 2 SWS Praktikum,
Sommersemester (Teil II): 2 SWS Vorlesung, 1 SWS Übung

Physik für Naturwissenschaftler I, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer,
beteiligte Vorlesende: Dr. Matthias Zschornak,
Wintersemester, 4 SWS Vorlesung, 2 SWS Übung

Physik für Naturwissenschaftler II, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer,
beteiligte Vorlesende: Dr. Matthias Zschornak,
Sommersemester, 2 SWS Vorlesung, 4 SWS Praktikum

Physik und Charakterisierung von Industriesolarzellen, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer,
beteiligte Vorlesende: Dr. Holger Neuhaus, Dr. Matthias Müller
Sommersemester, 2 SWS Vorlesung

Physik und Chemie stark korrelierter Materie,
Modulverantwortlicher: Jun.-Prof. Dr. Roman Gumeniuk,
Wintersemester, 2 SWS Vorlesung, 2 SWS Praktikum

Praktikum Energieanlagen, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Hartmut Krause,
Photovoltaik-Praktikum durch Dr. Wolfram Münchgesang,
Wintersemester, 1 SWS Vorlesung, 3 SWS Praktikum

Semiconductors (Englisch), Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer,
beteiligte Vorlesende: Dr. Hartmut Stöcker,
Wintersemester, 2 SWS Vorlesung

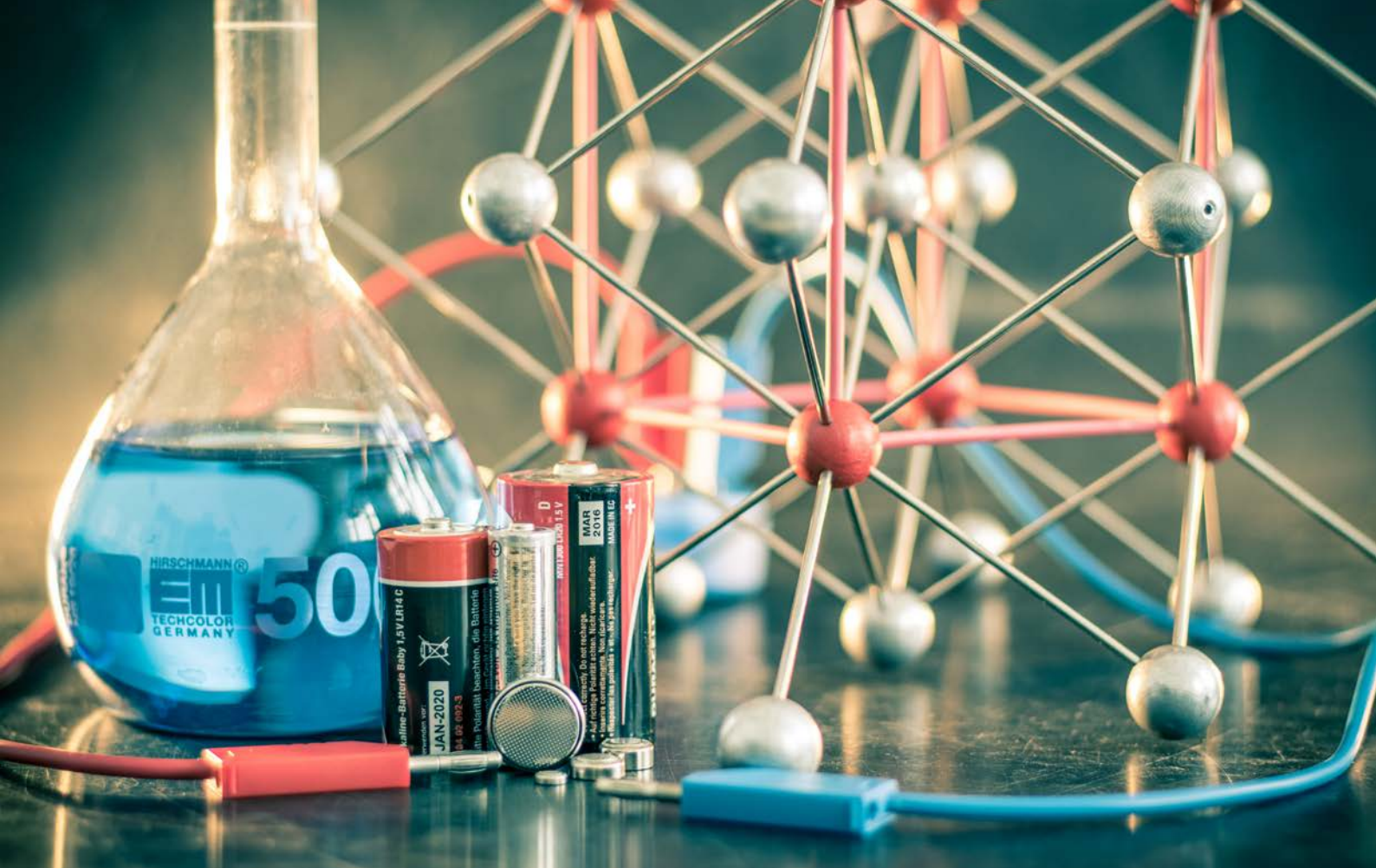
Solarzellen: Technologie und industrielle Produktion, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer,
beteiligte Vorlesende: Prof. Dr. Ralf Lüdemann,
Wintersemester, 2 SWS Vorlesung

Struktur der Materie I: Festkörper, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer,
beteiligte Vorlesende: Jun.-Prof. Dr. Roman Gumeniuk,
Wintersemester, 4 SWS Vorlesung, 2 SWS Übung

Struktur der Materie II: Elektronische Eigenschaften, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer,
beteiligte Vorlesende: Jun.-Prof. Dr. Roman Gumeniuk,
Sommersemester, 4 SWS Vorlesung, 2 SWS Übung

Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit kristallinen Materialien,
Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer, beteiligte Vorlesende: Dr. Tilmann Leisegang,
Wintersemester, 2 SWS Vorlesung, 1 SWS Übung, 2 SWS Praktikum

PUBLIKATIONEN



WISSENSCHAFTLICHE PUBLIKATIONEN

Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie

- F. Zimmermann, F. C. Beyer, G. Gärtner, C. Röder, N. T. Son, E. Janzen, D. Vesela, J. Lorincik, P. Hofmann, M. Krupinski, T. Mikolajick, F. Habel, G. Leibiger, J. Heitmann: **Origin of orange color in nominally undoped HVPE GaN crystals**, Optical Materials 70 (2017) 127–130
- R. Belitz, P. Meisner, M. Coeler, U. Wunderwald, J. Friedrich, J. Zosel, M. Schelter, S. Jachalke, E. Mehner: **Waste Heat Energy Harvesting by use of BaTiO₃ for Pyroelectric Hydrogen Generation**, Energy Harvesting and Systems 4 (2017) 107–113
- A. Vyalikh, C. Elschner, M. C. Schulz, R. Mai, U. Scheler: **Early Stages of Biomineral Formation—A Solid-State NMR Investigation of the Mandibles of Minipigs**, Magnetochemistry 3 (2017) 39
- V. O. Koroteev, W. Münchgesang, Yu. V. Shubin, Yu. N. Palyanov, P. E. Plyusnin, D. A. Smirnov, K. A. Kovalenko, M. Bobnar, R. Gumeniuk, E. Brendler, D. C. Meyer, L. G. Bulusheva, A. V. Okotrub, A. Vyalikh: **Multiscale characterization of ¹³C-enriched fine-grained graphitic materials for chemical and electrochemical applications**, Carbon 124 (2017) 161–169
- E. Mehner, S. Jachalke, J. Hanzig, T. Leisegang, H. Stöcker, D. C. Meyer: **Anomalous ferroelectricity in P(VDF₇₀-TrFE₃₀)**, Ferroelectrics 510 (2017) 132–151
- S. Jachalke, E. Mehner, H. Stöcker, J. Hanzig, M. Sonntag, T. Weigel, T. Leisegang, D. C. Meyer: **How to measure the pyroelectric coefficient?**, Applied Physics Reviews 4 (2017) 021303

- V. Garbe, J. Weise, M. Motylenko, W. Münchgesang, A. Schmid, D. Rafaja, B. Abendroth, D. C. Meyer: **Au-free ohmic Ti/Al/TiN contacts to UID n-GaN fabricated by sputter deposition**, Journal of Applied Physics 121 (2017) 065703
- S. V. Vegesna, D. Bürger, R. Patra, B. Abendroth, I. Skorupa, O. G. Schmidt, H. Schmidt: **Thouless length and valley degeneracy factor of ZnMnO thin films with anisotropic, highly conductive surface layers**, Journal of Applied Physics 121 (2017) 225105
- M. Rudolph, A. Salomon, A. Schmidt, M. Motylenko, T. Zienert, H. Stöcker, C. Himcinschi, L. Amirkhanyan, J. Kortus, C. G. Aneziris, D. Rafaja: **Thermally Induced Formation of Transition Aluminas from Boehmite**, Advanced Engineering Materials (2017) 1700141
- I. Petrenko, V. V. Bazhenov, R. Galli, M. Wysokowski, J. Fromont, P. J. Schupp, A. L. Stelling, E. Niederschlag, H. Stöcker, V. Z. Kutsova, T. Jesionowski, H. Ehrlich: **Chitin of poriferan origin and the bioelectrometallurgy of copper/copper oxide**, International Journal of Biological Macromolecules 104 (2017) 1626–1632
- L. Dreval, M. Zschornak, W. Münchgesang, O. Fabrichnaya, D. Rafaja, M. L. Martine, L. Giebel, M. Motylenko: **Thermodynamic assessment and first principle calculations of the Na–Sb–Sn system**, Journal of Alloys and Compounds 695 (2017) 1725–1742
- M. Wysokowski, M. Motylenko, D. Rafaja, I. Koltsov, H. Stöcker, T. J. Szalaty, V. V. Bazhenov, A. L. Stelling, J. Beyer, J. Heitmann, T. Jesionowski, S. Petovic, M. Đurovic, H. Ehrlich: **Extreme biomimetic approach for synthesis of nanocrystalline chitin-(Ti,Zr)O₂ multiphase composites**, Materials Chemistry and Physics 188 (2017) 115–124
- F. Meutzner, W. Münchgesang, T. Leisegang, R. Schmid, M. Zschornak, M. Ureña de Vivanco, A. P. Shevchenko, V. A. Blatov, D. C. Meyer: **Identification of solid oxygen-containing Na-electrolytes: An assessment based on crystallographic and economic parameters**, Crystal Research & Technology 52 (2017) 1600223
- H. Stöcker, J. Hanzig, M. Zschornak, E. Mehner, S. Jachalke, C. Richter, F. Hanzig, F. Meutzner, T. Leisegang, D. C. Meyer: **Strontium titanate: From symmetry changes to functionality**, Crystal Research & Technology 52 (2017) 1600222

Strukturforschung mit XFELs und Synchrotronstrahlung

- W. Laasch, S. Molodtsov: **Joint European XFEL and DESY Photon Science Users' Meeting 2017**, Synchrotron Radiation News 30 (2017) 46–50
- O. V. Petrova, S. V. Nekipelov, D. V. Sivkov, A. E. Mingaleva, A. Nikolaev, O. V. Frank-Kamenetskaya, V. V. Bazhenov, D. V. Vyalikh, S. L. Molodtsov, V. N. Sivkov, H. Ehrlich: **Comparative NEXAFS study of the selected icefish hard tissues and hydroxyapatite**, Journal of Physics: Conference Series 917 (2017) 042001
- V. V. Sikolenko, S. L. Molodtsov, M. Izquierdo, I. O. Troyanchuk, D. V. Karpinsky, S. I. Tiutiunnikov, E. Efimova, D. Prabhakaran, D. Novoselov, V. Efimov: **Correlated oxygen displacements and phonon mode changes in LaCoO₃ single crystal**, Physica B: Condensed Matter 536 (2017) 597–599

- S. Halilov, E. Gorelov, M. Izquierdo, A. Yaroslavtsev, V. Aristov, P. Moras, P. M. Sheverdyayeva, S. K. Mahatha, F. Roth, A. Lichtenstein, S. L. Molodtsov: **Surface, final state, and spin effects in the valence-band photoemission spectra of LaCoO_3 (001)**, Physical Review B 96 (2017) 205144
- G. S. Grebenyuk, O. Y. Vilkov, A. G. Rybkin, M. V. Gomoyunova, B. V. Senkovskiy, D. Y. Usachov, D. V. Vyalikh, S. L. Molodtsov, I. I. Pronin: **Intercalation synthesis of graphene-capped iron silicide atop Ni(111) : Evolution of electronic structure and ferromagnetic ordering**, Applied Surface Science 392 (2017) 715–722

Juniorprofessur Kristallphysik

- R. Gumeniuk, M. Kohout, W. Schnelle, U. Burkhardt, M. Zschornak, A. Leithe-Jasper: **$\text{ThPt}_{3+x}\text{Be}$ ($x = 0.08$): Crystal Structure and Physical Properties**, European Journal of Inorganic Chemistry 2017 (2017) 179–185
- M. B. Gamza, R. Gumeniuk, W. Schnelle, U. Burkhardt, H. Rosner, A. Leithe-Jasper, A. Slebarski: **Coexistence of magnetic order and valence fluctuations in the Kondo lattice system $\text{Ce}_2\text{Rh}_3\text{Sn}_5$** , Physical Review B 95 (2017) 165142



KONFERENZBEITRÄGE

Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie

T. Leisegang: **Aluminium-Ionen-Batterie als Post-Lithium-Technologie, Vernetzungstreffen Effiziente Mobilität Sachsen – Neue Wertschöpfung mit Elektromobilität und Intelligenten Verkehrssystemen**, Sächsische Energieagentur – SAENA GmbH, Dresden, 13.11.2017, eingeladener Vortrag

S. Jachalke, P. Hofmann, G. Leibiger, F. S. Habel, E. Mehner, T. Leisegang, D. C. Meyer, T. Mikolajick: **The pyroelectric coefficient of free standing GaN grown by HVPE**, Deutsche Gesellschaft für Kristallzüchtung und Kristallwachstum: Arbeitskreis Massive Halbleiter, Freiburg, 11.–12. Oktober 2017, Vortrag

Th. Köhler, M. Zschornak, A. Vyalikh, J. Hanzig, E. Mehner, G. Gärtner, E. Brendler, M. Jakšić, Z. Siketić, S. Gemming, T. Leisegang, H. Stöcker, D. C. Meyer: **Quantification of hydrogen in lithium metal oxides**, 39th FGMR Annual Discussion Meeting, Bayreuth, 25.–28. September 2017, Poster

A. Vyalikh, M. Zschornak, Th. Köhler, M. Nentwich, T. Weigel, J. Hanzig, R. Zaripov, E. Vavilova, S. Gemming, E. Brendler, D. C. Meyer: **Identification of the intrinsic defects in congruent lithium tantalate**, 39th FGMR Annual Discussion Meeting, Bayreuth, 25.–28. September 2017, Poster

W. Münchgesang, A. Vyalikh, D. C. Meyer: **Investigation of the conductivity– (micro-)structure correlation of rectorite**, Fall Meeting EMRS, 18.–21. September 2017, Warschau, Polen, Poster

F. Meutzner, M. Zschornak, A. A. Kabanov, T. Nestler, T. Leisegang, V. A. Blatov, D. C. Meyer: **Assessing Al-ion conductors from sulphides and selenides**, 2nd Lab Meeting of the Young Crystallographers @ STOE, Darmstadt, 5.–6. September 2017, Kurzvortrag und Poster

- M. Nentwich, M. Zschornak, M. Sonntag, R. Gumeniuk, S. Gemming, T. Leisegang, D. C. Meyer: **Structure variations in RSi_2 and R_2TSi_3 silicides**, 2nd Lab Meeting of the Young Crystallographers @ STOE, Darmstadt, 5.–6. September 2017, Kurzvortrag und Poster
- T. Weigel, D. C. Meyer: **Determination of structure-property-relations from single crystal X-ray diffraction data**, 2nd Lab Meeting of the Young Crystallographers @ STOE, Darmstadt, 5.–6. September 2017, Kurzvortrag und Poster
- T. Köhler, D. C. Meyer: **Quantification of hydrogen in lithium metal oxides**, 2nd Lab Meeting of the Young Crystallographers @ STOE, Darmstadt, 5.–6. September 2017, Kurzvortrag und Poster
- E. Mehner, J. Hanzig, M. Zschornak, S. Jachalke, H. Stöcker, T. Leisegang, D. C. Meyer: **Functionality from real-structure: the oxygen vacancy in strontium titanate**, 24th Congress and General Assembly of the IUCr, Hyderabad, Indien, 21.–28. August 2017, Poster
- F. Meutzner, T. Nestler, M. Zschornak, A. Kabanov, T. Leisegang, V. A. Blatov, D. C. Meyer: **Assessment of potential Al ion conductors from large crystallographic databases**, 24th Congress and General Assembly of the IUCr, Hyderabad, Indien, 21.–28. August 2017, Vortrag
- M. Nentwich, M. Zschornak, M. Sonntag, R. Gumeniuk, S. Gemming, T. Leisegang, D. C. Meyer: **Structure variations within certain rare earth-disilicides**, 24th Congress and General Assembly of the IUCr, Hyderabad, Indien, 21.–28. August 2017, Poster
- M. Zschornak, C. Richter, D. Novikov, E. Mehner, M. Nentwich, S. Gorfman, J. Hanzig, H. Stöcker, T. Leisegang, D. C. Meyer: **Probing structural distortions with new high-precision resonant X-ray diffraction approach**, 24th Congress and General Assembly of the IUCr, Hyderabad, Indien, 21.–28. August 2017, Vortrag
- A. Vyalikh: **Application of solid-state NMR for characterizing chemically modified graphites**, 2nd Russian Conference "Graphene: Molecule and 2D Crystal", Novosibirsk, Russland, 7.–11. August 2017, eingeladener Vortrag
- T. Leisegang: **Materialforschung im Kontext der Energiewende: Die Batterie von morgen**, academia colloquium der Sächsische Akademie der Wissenschaften zu Leipzig, Leipzig, 19. Mai 2017, eingeladener Vortrag
- S. Jachalke, E. Mehner, H. Stöcker, J. Hanzig, B. Abendroth, T. Leisegang, D. C. Meyer: **Stöchiometriebestimmung in polaren Dielektrika mittels RFA**, XRF-Anwendertreffen Bruker AXS, Essen, 27.–28. April 2017, Vortrag
- F. Meutzner, W. Münchgesang, T. Nestler, M. Zschornak, R. Schmid, A. A. Kabanov, M. Ureña de Vivanco, A. P. Shevchenko, T. Leisegang, V. A. Blatov, D. C. Meyer: **Assessment of solid electrolytes by Voronoi-Dirichlet partitioning: crystallographic, energetic, and economic parameters for Na and Al conductors**, 25. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Karlsruhe, 27.–30. März 2017, Vortrag MS03-04
- T. Leisegang, T. Weigel, M. Zschornak, T. Behm, C. Funke, S. Jachalke, E. Mehner, H. Stöcker, D. C. Meyer: **Accessing the pyroelectric coefficient – X-ray diffraction, density functional calculation, and electronic measurement**, 25. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Karlsruhe, 27.–30. März 2017, Poster P45

- T. Leisegang, F. Meutzner, V. A. Blatov, D. C. Meyer: **ICSD, Voronoi-Dirichlet partitioning, solid electrolytes: revealing synergies**, 25. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Karlsruhe, 27.–30. März 2017, eingeladener Vortrag FIZ Karlsruhe ICSD Lunchtime Symposium
- M. Nentwich, M. Zschornak, M. Sonntag, R. Gumenuik, T. Leisegang, S. Gemming, D. C. Meyer: **Structure variations within certain rare earth-disilicides**, 25. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Karlsruhe, 27.–30. März 2017, Poster P153
- M. Stöber, C. Cherkouk, J. Walter, M. Schelter, J. Zosel, S. Prucnal, T. Leisegang, D. C. Meyer, M. Mertig: **Investigations on oxygen exchange rate of ion implanted single crystalline strontium titanate for air electrode application**, 25. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Karlsruhe, 27.–30. März 2017, Vortrag MS06-03
- H. Stöcker, J. Hanzig, E. Mehner, S. Jachalke, C. Richter, M. Zschornak, B. Khanbabaei, S. Gorfman, D. C. Meyer: **Strontium titanate in the electric field: pyroelectric, piezoelectric and tetragonal**, 25. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Karlsruhe, 27.–30. März 2017, Vortrag MS04-01
- M. Zschornak, C. Richter, D. V. Novikov, E. Mehner, M. Nentwich, J. Hanzig, S. Gorfman, H. Stöcker, T. Leisegang, D. C. Meyer: **Probing structural distortions with high precision Resonant X-ray diffraction with photon energies tuned to destructive interference**, 25. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Karlsruhe, 27.–30. März 2017, Vortrag MS17-01
- S. Jachalke, P. Hofmann, G. Leibiger, F. S. Habel, E. Mehner, T. Leisegang, D. C. Meyer, T. Mikolajick: **The pyroelectric coefficient of free standing GaN grown by HVPE**, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Dresden, 20.–24. März 2017, Vortrag DF 2.7
- W. Münchgesang, V. Koroteev, T. Zakharchenko, D. M. Itkis, D. C. Meyer, A. Vyalikh: **Solid-state MAS and operando NMR spectroscopy for studying battery systems**, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Dresden, 20.–24. März 2017, Vortrag MM 26.2
- W. Münchgesang, A. Vyalikh, J. Weise, M. T. Atanasova, W. W. Focke, G. Mali, D. C. Meyer: **Investigation of the conductivity – (micro-)structure correlation in Rectorite**, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Dresden, 20.–24. März 2017, Vortrag MM 33.3
- A. Vyalikh: **Solid state NMR in the study of energy materials**, Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie, TU Darmstadt, 10.02.2017, eingeladener Vortrag
- A. Vyalikh: **Solid state NMR in the study of battery materials and cells**, Institut für Festkörperphysik, TU Darmstadt, 09.02.2017, eingeladener Vortrag

Strukturforschung mit XFELs und Synchrotronstrahlung

- S. L. Molodtsov: **Study of complex systems**, China-German Workshop „FEL Science and Technology“, Shanghai, China, 3.–5. Mai 2017, Vortrag

- S. L. Molodtsov: **Spectroscopy, imaging, and magnetic materials study at the European XFEL**, School of XFEL and Synchrotron Radiation Users 2017 (SFEL 2017), Liptovsky Jan, Slowakei, 9.–11. Mai 2017, Vortrag
- S. L. Molodtsov: **European XFEL: Novel tool to study ultrafast magnetic phenomena**, Moscow International Symposium on Magnetism (MISM-2017), Moskau, Russland, 1.–5. Juli 2017, Vortrag
- S. L. Molodtsov: **European XFEL: Superior tool for frontier science**, Turkish Physical Society 33rd International Physics Congress (TPS-33), Bodrum, Türkei, 6.–10. September 2017, Vortrag
- S. L. Molodtsov: **European XFEL: Excellent tool for multidimensional research**, Symposium on „Holography, Coherent Optics and Photonics“, Kaliningrad, Russland, 2.–6. Oktober 2017, Vortrag
- S. L. Molodtsov: **European XFEL: First experiments and participation of Russian users**, Users' Meeting of Kurchatov Institute, Moskau, Russland, 20.–23. November 2017, Vortrag
- S. L. Molodtsov: **Research at the European X-ray free-electron laser (XFEL) facility**, Joint annual meeting of Finnish Synchrotron Radiation User Organization (FSRUO) and Structural Biology Network (FINNBOX), Turku, Finnland, 4.–5. Dezember 2017, Vortrag
- S. L. Molodtsov: **From optical derivation with pocket mirrors to X-ray Free Electron Lasers**, Russian-German Workshop „15 Years of Russian-German Laboratory at BESSY II“, Berlin, 7.–8. Dezember 2017, Vortrag

Juniorprofessur Kristallphysik

- M. Feig, M. Bobnar, W. Schnelle, I. Veremchuk, S. Medvedev, A. Leithe-Jasper, R. Gumeniuk: **Superconductivity in TaSnS₂**, 81. Jahrestagung der DPG und DPG-Frühjahrstagung, Dresden, 19.–23. März 2017, Vortrag TT 2.9
- P. Wyzga, I. Veremchuk, M. Bobnar, T. Weigel, T. Leisegang, A. Leithe-Jasper, R. Gumeniuk: **Crystal structure and thermoelectric properties of some indium-based thiospinels**, 81. Jahrestagung der DPG und DPG-Frühjahrstagung, Dresden, 19.–23. März 2017, Poster HL 79.24
- A. Leithe-Jasper, R. Gumeniuk, Ju. Grin: **New actinide-based intermetallic compounds**, 47èmes Journées des Actinides (JdA 2017), Karpacz, Polen, 26.–30. März 2017, Vortrag
- C. Hennig, S. Weiss, A. Ikeda-Ohno, R. Gumeniuk, A. Scheinost: **XAFS and XRD studies on tetravalent actinides in zirconia- and zirconium-based ceramics**, 8th Workshop on Speciation, Techniques, and Facilities for Radioactive Materials at Synchrotron Light Sources (AnXAS 2017), Oxford, Großbritannien, 11.–13. April 2017, Vortrag C3
- A. Leithe-Jasper, R. Gumeniuk, W. Schnelle, H. Rosner, S. Wirth: **Lu₂Ni_{21-x}Co_xB₆: From Pauli Paramagnetism to Weak Ferromagnetism**, Intermag Europe 2017 (IEEE Magnetism), Dublin, Irland, 24.–28. April 2017, Vortrag
- R. Gumeniuk, W. Schnelle, L. Akselrud, Q. Zheng, U. Schwerz, A. Leithe-Jasper: **Are Remeika Phases simply cubic?**, 28th Rare Earth Research Conference, Ames, IA, USA, 18.–22. Juni 2017, Poster



GRADUIERUNGEN UND STUDENTISCHE ARBEITEN

Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie

Sandra Jankus: **Epitaktisches Wachstum von Strontiumtitanat auf Niob-dotiertem Strontiumtitanat und Aluminiumoxid auf Strontiumtitanat**, Problemorientierte Projektarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2017

Florian Alt: **Identifizierung von Optimierungspotentialen für einen Demonstrator zur pyroelektrischen Wasserstofferzeugung**, Bachelorarbeit, SciTec, Ernst-Abbe-Hochschule Jena & Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2017

Florian Hanzig: **Charakterisierung von funktionellen Metalloxidgrenzflächen mittels Röntgenmethoden und Elektronenmikroskopie**, Doktorarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2017

Erik Mehner: **Pyroelektrische Materialien: elektrisch induzierte Phasenumwandlungen, thermisch stimulierte Radikalerzeugung**, Doktorarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2017

Solveig Putzschke: **Resistives Speichervermögen des ALD-Systems SrO-TiO_2 – von der Herstellung bis zum ionenimplantierten Speichermedium**, Doktorarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2017

Carsten Richter: **Resonante Röntgenbeugung zur hochaufgelösten Charakterisierung atomarer Verrückungen in Kristallen**, Doktorarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2017

Photovoltaik

Denise Kreßner-Kiel: **Wechselwirkung von Kupfer mit ausgedehnten Defekten in multikristallinem Silicium und Einfluss auf die Rekombinationseigenschaften**, Doktorarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2017

Iven Kupka: **Beeinflussung der Gefügestruktur bei der gerichteten Erstarrung von multikristallinem Silicium und deren Auswirkungen auf die elektrischen Eigenschaften**, Doktorarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2017



IMPRESSUM

Herausgeber

Prof. Dr. Dirk C. Meyer
TU Bergakademie Freiberg
Direktor des Instituts für Experimentelle Physik
Leipziger Straße 23
09599 Freiberg

Kontakt

Telefon: 03731 39 2892
Fax: 03731 39 4314
Web: **tu-freiberg.de/exphys**

Redaktion

Dr. Hartmut Stöcker, Institut für Experimentelle Physik

Druck

Medienzentrum der TU Bergakademie Freiberg

ISSN

2567-157X

Copyright

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Für die Nutzung von Texten, Grafiken, Fotos oder anderen Inhalten bitten wir um Kontaktaufnahme.

Danksagung

Die Redaktion dankt allen Autoren, die mit Texten und Bildern zu diesem Bericht beigetragen haben (siehe nächste Seite).

Titelbild

Teflon-Messzelle zur Charakterisierung der elektrochemischen Wirksamkeit pyroelektrischer Kristalle bei Temperaturanregung, © Sven Jachalke.

Autoren

I	Dirk C. Meyer
5–10	Hartmut Stöcker
13–17	Dirk C. Meyer, Hartmut Stöcker, Tilman Leisegang
18–25	Serguei Molodtsov, Friedrich Roth
26–27	Manuel Feig, Christoph Hennig, Roman Gumeniuk
28–29	Barbara Abendroth
30–35	Tilman Leisegang, Falk Meutzner
36–37	Hartmut Stöcker, Tilman Leisegang
38–42	Dirk C. Meyer, Theresa Lemser
45–47	Dirk C. Meyer, Tilman Leisegang
48–49	Charaf Cherkouk, Max Stöber
50–51	Anastasia Vyalikh, Wolfram Münchgesang
52–53	Wolfram Münchgesang, Anastasia Vyalikh
54–55	Valentin Garbe
56–57	Denise Kreßner-Kiel
58–59	Thomas Köhler, Sven Jachalke
60–61	Juliane Hanzig
62–63	Hartmut Stöcker, Christoph Reuther
64–66	Melanie Nentwich, Matthias Zschornak, Tina Weigel
69	Hartmut Stöcker
70–72	Tilman Leisegang
75–77	Mateo de Vivanco, Claudia Funke
78–79	Falk Meutzner
80–81	Tilman Leisegang, Hartmut Stöcker
82	Melanie Nentwich, Khai-Nghi Truong
83	Hartmut Bergelt

Bildquellen

I	Medienzentrum
5–8	Sven Jachalke
9	Erik Mehner, Sven Jachalke
10	Sven Jachalke
11	Claudia Funke, Uta Fischer, Sven Jachalke
13	Erik Mehner
16	Tilman Leisegang
18	European XFEL GmbH
19	Sven Jachalke, Friedrich Roth
20–21	Friedrich Roth
22–24	European XFEL GmbH

25	Friedrich Roth
26–27	Manuel Feig
28–30	Sven Jachalke
31	Tilman Leisegang, Sven Jachalke
32	Sven Jachalke, Claudia Funke, Uta Fischer, Tina Weigel
33	Falk Meutzner
34	Sven Jachalke, Tilman Leisegang
36	Sven Jachalke
37	Tilman Leisegang, Sven Jachalke
38	Heinle, Wischer und Partner
40	Cinector GmbH, Sven Jachalke
41	Mandy Schön
42	Cinector GmbH
45	Tilman Leisegang
46	Tina Nestler
47–48	Sven Jachalke
49	Charaf Cherkouk, Max Stöber
50–51	Anastasia Vyalikh
52	Sven Jachalke
53	Anastasia Vyalikh
54	Sven Jachalke
55	Valentin Garbe
56	Sven Jachalke
57	Sven Jachalke, Denise Kreßner-Kiel
58	Sven Jachalke
59	Sven Jachalke, Thomas Köhler
60	Sven Jachalke
61	Juliane Hanzig
62	Christoph Reuther
63	Hartmut Stöcker
64	ESRF / P. Jayet
65	Carsten Richter, Tina Weigel
67–70	Sven Jachalke
71	Cinector GmbH, Tilman Leisegang
73–75	Sven Jachalke
76	Mateo de Vivanco
78–79	Falk Meutzner
80	documenta 14 / Fred Dott
81	Tilman Leisegang
82	Melanie Nentwich, Khai-Nghi Truong
83–96	Sven Jachalke

