

Sehr geehrte Leserin, sehr geehrter Leser,

für den vorliegenden Jahresbericht 2018 des Instituts für Experimentelle Physik (IEP) steht mein herzlicher Dank für die durch alle Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter geleistete Arbeit an erster Stelle. Im Ergebnis können wir erneut auf gemeinsam erzielte Erfolge in Lehre und Forschung und einen weiteren Ausbau der wissenschaftlichen Ausstrahlung und die Konsolidierung der erreichten Positionierung des IEP blicken. Auch im Jahr 2018 wurden wieder zahlreiche Abschlüsse in verschiedenen Stufen der fachlich-wissenschaftlichen Qualifikation erreicht, was intensive Betreuungsleistungen voraussetzt. Auch für darüber hinaus gehendes Engagement, etwa zu Studieninformationstagen oder im Bereich der akademischen Selbstverwaltung bin ich dankbar.

Das Jahr 2018 sah für Viele wiederum die aktive Teilnahme an internationalen Fachkonferenzen und weiteren einschlägigen Veranstaltungen vor. Auch in diesem Rahmen wurden Angehörige unseres Instituts durch Preise gewürdigt. Unsere Publikationsaktivitäten in internationalen wissenschaftlichen Fachzeitschriften tragen zur Sichtbarkeit des IEP und der gesamten Universität bei. Hervorheben möchte ich, dass es wiederum gelang, in hochrangigen Journalen die Ergebnisse unserer Arbeiten zu kommunizieren. Dies betrifft zuerst Themen der Energiewandlung und -speicherung sowie zu Funktionsmaterialien für unterschiedlichste Anwendungen. In diesem Zusammenhang erforderte ein Buchprojekt des Verlags De Gruyter besondere Anstrengungen des gesamten Instituts. Am 17. Dezember 2018 ist das 425 Seiten umfassende Werk nun erschienen. Zur Verstetigung der laufenden Arbeiten wurden nach meiner Einschätzung



im Jahr 2018 besonders viele Forschungsanträge verfasst und auf den Weg gebracht.

Unser langjähriges Engagement an internationalen Großforschungseinrichtungen wurde in bewährter Weise fortgeführt. Dies, wie alle weiterhin erwähnten Aktivitäten, kann sich auf professionelle technische Unterstützung durch die Mitarbeiter im Bereich der Werkstätten, der chemischen Labore und der IT abstützen. Unsere Arbeitsschwerpunkte tragen auch maßgeblich zur Umsetzung der Forschungsprogrammatik des Zentrums für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung (ZeHS) bei, wofür ich in meiner Eigenschaft als Direktor dieser, im Aufbau befindlichen, zentralen Einrichtung dankbar bin. Inzwischen steht der Rohbau weithin sichtbar neben der Neuen Mensa und das Richtfest soll zu Beginn des Jahres 2019 gefeiert werden. Es ist offenbar, dass durch mich auch Ressourcen des IEP für den Aufschwung des ZeHS eingesetzt werden. Da dies zusätzliche Anstrengungen bedeutet, meinen Dank auch für die diesbezügliche Bereitschaft.

Allen Partnern des IEP bin ich sehr verbunden und freue mich auf die weitere Zusammenarbeit im Jahr 2019 sowie auf neue Gelegenheiten gemeinsam weitere Perspektiven ins Auge zu fassen. Entsprechend verbleibe ich mit besten Grüßen und einem herzlichen Glückauf.

A handwritten signature in blue ink that reads "Dirk C. Meyer". The signature is written in a cursive, flowing style.

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
<hr/>	
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	27
Methodisches Kompetenzzentrum Elektronikmaterialien	30
Methodisches Kompetenzzentrum Energiematerialien	32
Freiberger Zentrum für Pyroelektrizität	36
Resonante Röntgenmethoden und Kristallmodellierung	38
Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung	40
<hr/>	
Projekte	46
Entwicklung hochsensitiver Wasserstoffsensoren	47
Nutzung von Abwärme zur Erzeugung von Wasserstoff und Elektrizität mit Pyroelektrika	49
Phosphor-dotierte Kohlenstoff-Nanoröhren für neue Energiespeicher	52
Pyroelektrische Polymere für die Abwärmenutzung	54
Pyro- und dielektrische Eigenschaften von Hochtemperaturpiezoelektrika der Oxoborat-Familie $RX_2Z_2O(BO_3)_3$	56
Resonante Röntgendiffraktion unter optimierter destruktiver Interferenz	58
Rolle-zu-Rolle-Fertigung neuartiger Post-Lithium-Energiespeicher	61
Silizium-basierte Anodenmaterialien für Sekundärbatterien mit hohen Energiedichten	66
Synchrotron- und Neutronen-basierte Untersuchungen zur Energiespeicherung	69
Wide-Bandgap-Halbleiter für die Opto- und Leistungselektronik	71
Gastwissenschaftler am IEP	74
Stipendien und Preise	75
<hr/>	
Veranstaltungen	76
Gemeinschaftsstand „Forschung für die Zukunft“ auf der Hannover Messe	77
BHT Fachkolloquium 6: Materialforschung im Kontext der Energiewende	78
<hr/>	
Lehre	80
CampusTag 2018	81
ESF-Förderung der Didaktik steigert studentische Leistung bei Physikkursen	82
Physikalisches Grundpraktikum	84
Projekttag Gymnasium Erfurt	85
Angebotene Lehrmodule	86
<hr/>	
Publikationen	88
Wissenschaftliche Publikationen	89
Konferenzbeiträge	93
Graduierungen und studentische Arbeiten	98
Impressum	100

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 Festkörper- spektroskopie

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

Zentrum für effiziente Hochtemperatur- Stoffwandlung

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

Arbeitsgruppen

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

**Kompetenzzentrum
 Energiematerialien**
 Dr. Tilmann Leisegang
 Tel.: 03731 39 3341
 tilmann.leisegang@physik.tu-freiberg.de

**Freiberger Zentrum für
 Pyroelektrizität**
 Dr. Hartmut Stöcker
 Tel.: 03731 39 2773
 hartmut.stoecker@physik.tu-freiberg.de

**Resonante Röntgenmethoden
 und Kristallmodellierung**
 Dr. Matthias Zschornak
 Tel.: 03731 39 3333
 matthias.zschornak@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

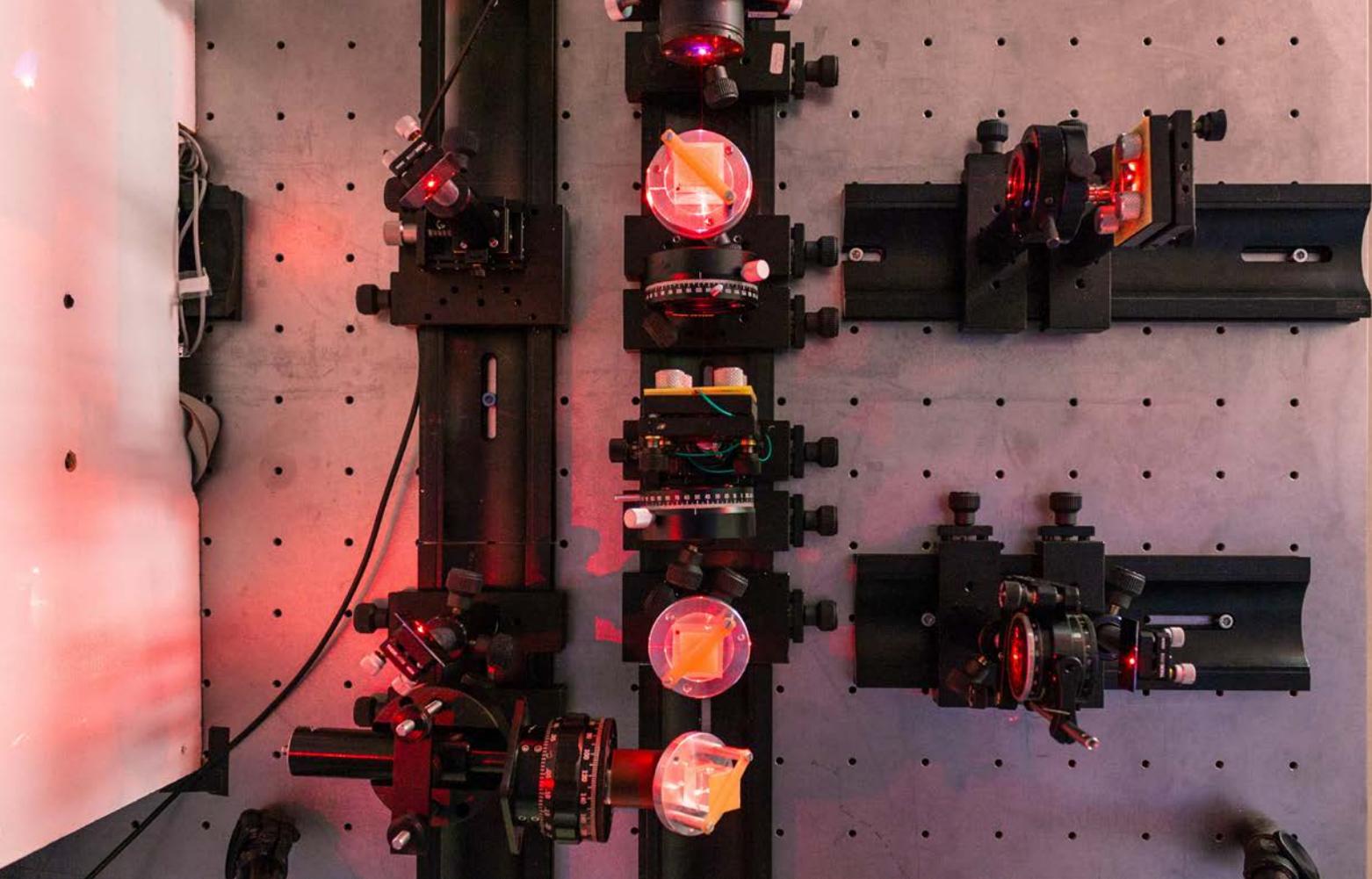
Vorlesungstechnik
 Dipl.-Ing. Dirk Prsa
 Tel.: 03731 39 2195
 dirk.prsa@physik.tu-freiberg.de



DIE MITARBEITER DES INSTITUTS FÜR EXPERIMENTELLE PHYSIK

Gruppenfoto 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 Kreßner-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

- Advance Riko ZEM-3, temperaturabhängige Bestimmung von Seebeck-Koeffizient und Widerstand
- BioLogic, Batterietester
- Doppelstrahl-Laser-Interferometer zur Messung piezoelektrischer Koeffizienten
- Gamry Interface 5000, Potentiostat
- Gamry Reference 600, Potentiostat
- Hall-Messplatz mit Kryostat
- Keithley 4200, Vierspitzenmessplatz
- Neware BTS CT-4008, Batteriezyklierer
- Oriol 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

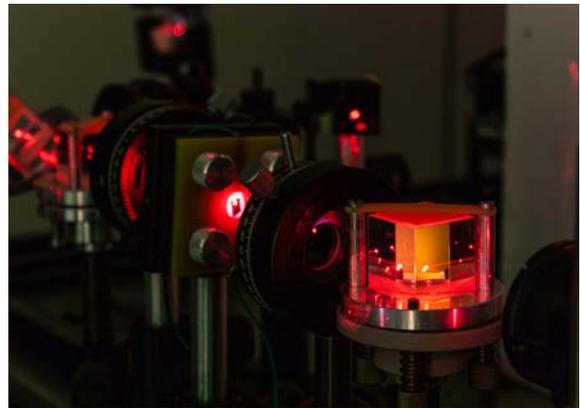
- Bruker IFS 113v, FTIR-Spektrometer
- Bruker SI Titan, Handspektrometer
- Bruker S8 Tiger, wellenlängendispersives Röntgenfluoreszenzspektrometer
- Bruker Tensor 27, FTIR-Spektrometer
- Bruker Tensor 37, FTIR-Spektrometer
- EDX und 3D-EDX am FIB/REM
- Hiden HPR20, Massenspektrometer
- J. A. Woollam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

Temperaturbehandlung

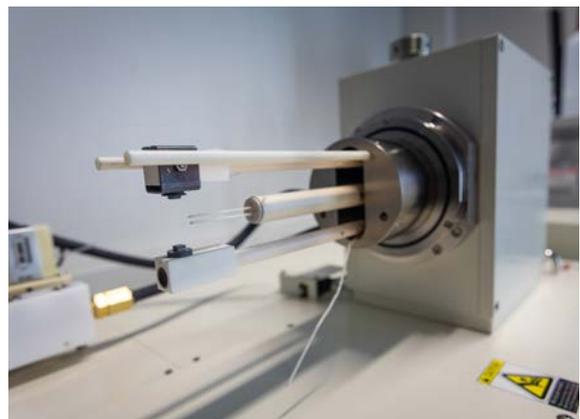
- Carbolite, Rohrofen bis 1200 °C
- Gero, Zehnzonenofen bis 1200 °C
- Heraeus, Rohrofen bis 1100 °C
- Leco FRH-80/200/1300, Rohrofen bis 1300 °C
- Xerion RO, Rohrofen bis 1100 °C
- Xerion Xtube, Dreizonenofen bis 1200 °C

Topographie

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



Strahlengang des Laserinterferometers (siehe auch Bild links)



Probenhalter des ZEM-3



BioLogic- und Neware-Batterietester



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

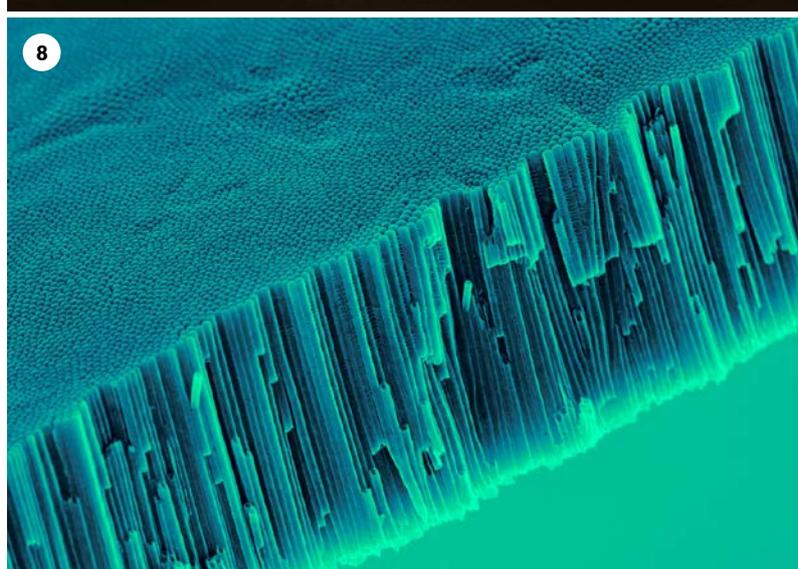
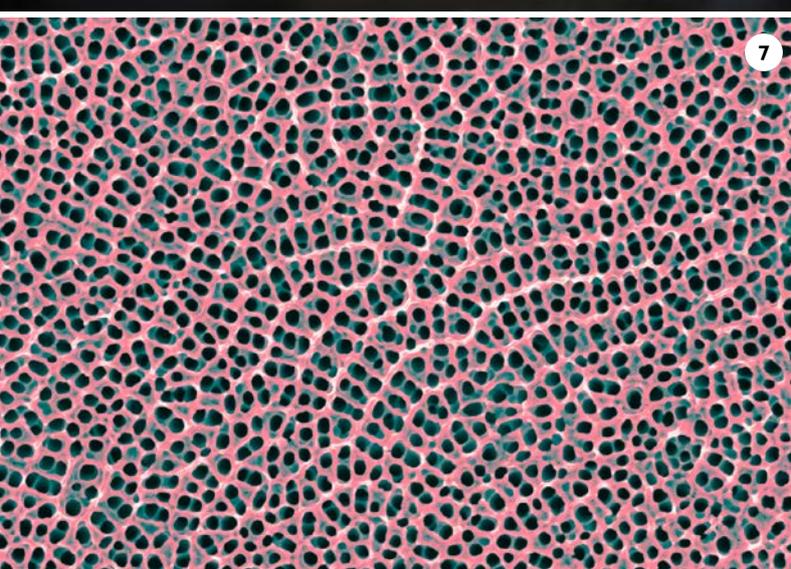
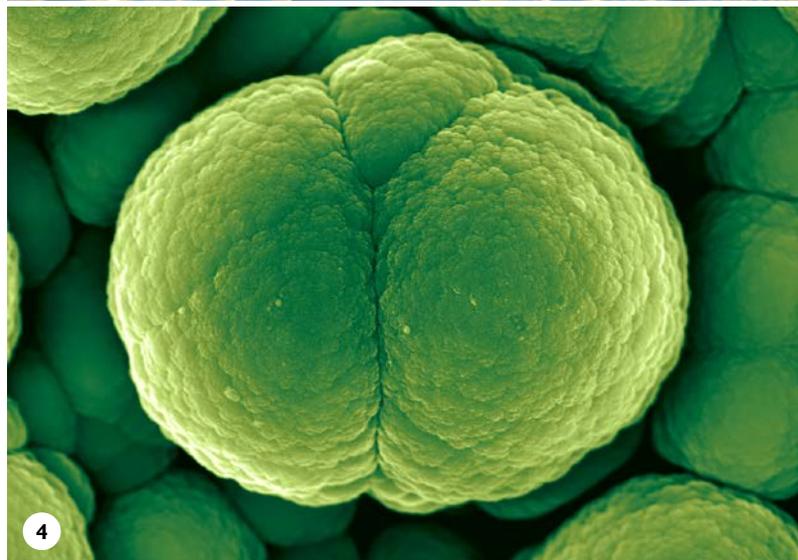
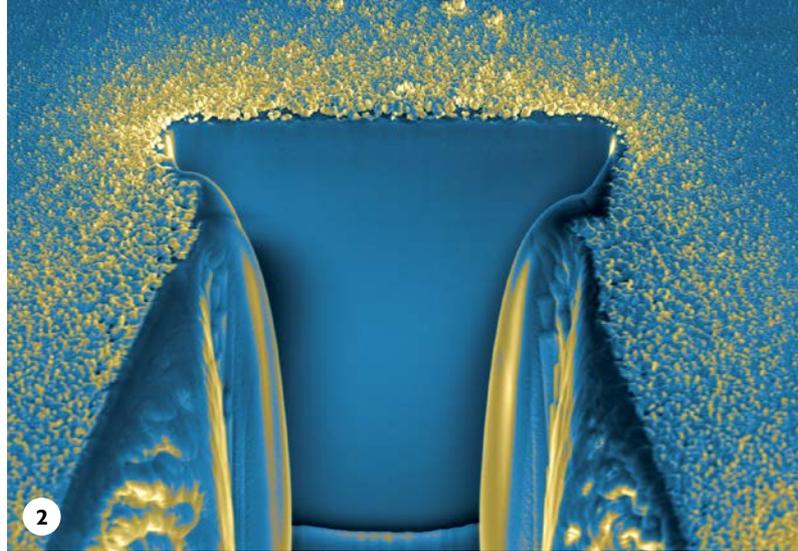
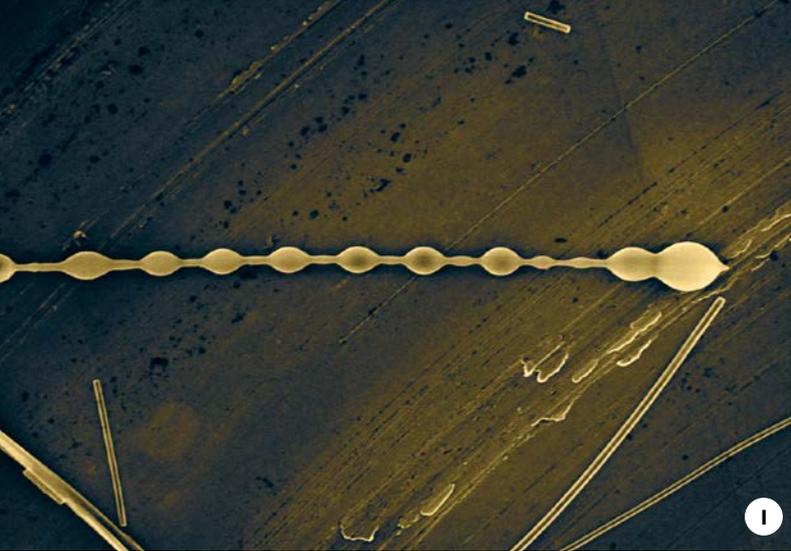
- Kathodenmaterialien: Al-, Li- und Na-basierte Systeme, u. a. Kohlenstoffnanoröhren
- Festelektrolyte: Al-, Li- und Na-Ionenleiter, Na-Y-Si-O-System, β -Aluminat, LAGP
- Anodenmaterialien: Al-, Li- und Na-Folien, Si-Verbindungen, Graphit

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 oxidierte SiC-Drähte
- 2 Ionenstrahl-Schnitt in einen SrTiO_3 -Einkristall
- 3 FLA-behandelte Si-Elektrode (Übersicht)
- 4 FLA-behandelte Si-Elektrode (Detail)
- 5 verschiedene pyroelektrische Materialien
- 6 verschieden zugeschnittene SrTiO_3 -Einkristalle
- 7 nanostrukturierte Titanoxidschicht (Draufsicht)
- 8 freie Titanoxidschicht mit regelmäßiger Röhrenstruktur



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 folgenden Partnern:

- Forschungsinstitut für Leder- und Kunststoffbahnen Freiberg,

- Fraunhofer-Institut für Keramische Technologien Dresden,
- Fraunhofer-Institut für Organische Elektronik, Elektronenstrahl- und Plasmatechnik Dresden,
- Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf,
- Kurt-Schwabe-Institut Meinsberg,
- Bar-Ilan-Universität Ramat Gan (Israel),
- Lomonossow-Universität Moskau (Russland),
- *National University of Singapore*,
- *Samara Centre for Theoretical Materials Science* (Russland),
- *Tel Aviv University* (Israel),
- *Università degli Studi di Genova* (Italien).

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.

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 Großgeräteeintrages wurden die Charakterisierungsmöglichkeiten um ein kombiniertes Rasterelektronenmikroskop mit Ionenstrahl (REM/FIB) erweitert.

Seit dem Jahr 2011 ist Prof. Dirk C. Meyer 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 Niedertemperaturbereich und damit als ungenutzte thermische Energie vor. Im Fokus der Arbeiten stehen die wissenschaftliche Untersuchung, Entwicklung und technische Erprobung innovativer Ansätze zur Nutzung von Niedertemperaturabwärme für Energie- und Stoffwandlungsprozesse durch Anwendung 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

Mit der zunehmenden Umwandlung erneuerbarer Energien aus Sonne, Wasser, Wind und Geothermie – in Deutschland wurden 2018 rund 42 % des Strombedarfs



aus erneuerbaren Energien erzeugt – wird die zeitliche Speicherung der erzeugten elektrischen Energie durch stationäre Speicher immer bedeutender. Diese werden eingesetzt, um sowohl das Überangebot elektrischer Energie, als auch deren Unterversorgung auf verschiedenen Zeitskalen von Millisekunden bis Wochen und Monaten abzufangen. Stationäre Speicher unterstützen die Frequenzregelung und dienen zur Verhinderung der Ausbreitung von Systemstörungen. Damit bieten sie zusätzliche Flexibilität bei der Verwaltung der elektrischen Energie, sichern den störungsfreien Betrieb des Stromnetzes ab, gewährleisten deren Schwarzstart-Fähigkeit und tragen letztlich zur Vermeidung wirtschaftlicher Kosten im Milliardenbereich durch Stromausfälle bei und minimieren die zunehmende Bedrohung und Verletzlichkeit moderner Gesellschaften.

Ein weiterer wichtiger, wenn nicht sogar der derzeit wichtigste Treiber für Innovationen im Energiespeicherbereich, ist die Absicht zum Austausch der mit einem Verbrennungsmotor betriebenen Fahrzeugflotte oder ihrer Ergänzung durch Elektrofahrzeuge (EV) in der nächsten Dekade. Deutsche und chinesische Autohersteller werden zusammen mehr als 90 % der weltweiten Investitionen im Bereich der Elektromobilität tätigen. Zur

Erhöhung der Marktakzeptanz von EV-Technologien sind die Senkung der Kosten von Energiespeichern und die Erhöhung der Reichweite der EV notwendig, was kontinuierliche Fortschritte in der Batterietechnologie erfordert. Neben den EV wird die Nachfrage nach Energiespeichern auch im maritimen Bereich ansteigen und neben dem *Internet of Things*, den *Power Tools* und mobilen Endgeräten als zusätzliche Treiber für Energiespeicher fungieren.

Der Batteriemarkt wird in den nächsten Jahren durch hohe Wachstumsraten gekennzeichnet sein. Neben den Blei-Säure-Batterien dominieren derzeit Lithium-Ionen-Batterien den Markt. Während erstere nur vergleichsweise geringe Energiedichten aufweisen, scheinen bei letzteren die physikalisch-chemischen Grenzen bald erreicht zu sein. Aus diesem Grund werden neue disruptive Technologien, sogenannte Post-Lithium-Ansätze, mit höherer Sicherheit und höherer theoretischer Energiedichte als bei bestehenden Lithium-Ionen-Batterien gefordert. Dies sind beispielsweise die sogenannten Hochvalente-Ionen- und Festkörperbatterien. Die enormen Nachfragesteigerungen hinsichtlich der Lithium-Ionen-Batterien werden zudem den Bedarf an Elementen wie Lithium, Kobalt, Phosphor und anderen in diesen Batterien verwendeten Metallen deutlich ansteigen lassen. So sorgen sich Unternehmen und Behörden zunehmend über das Versorgungsrisiko entsprechender Rohstoffe. Zusätzliche alternative Materialkonzepte mit gut verfügbaren Rohstoffen tragen zur Technologiediversifizierung bei und damit zur Minimierung des Rohstoffversorgungsrisikos.

Die Arbeiten am IEP zielen daher auf neue Batteriematerialkonzepte und auf die Identifizierung und Bewertung neuer Kathoden und Festelektrolyte für insbesondere Post-Lithium-Technologien auf Basis von Natrium- und Aluminium-Ionen. Damit möchte das IEP zur Erweiterung und Verbesserung des grundlegenden Verständnisses zur Speicherung von Energie und zur verstärkten Nutzung von erneuerbaren Energieträgern beitragen. Seit 2012 wird am IEP gezielt an Energiespeichermaterialien geforscht, wobei bisher drei BMBF-Vorhaben federführend sowie acht weitere Vorhaben bearbeitet worden sind und bearbeitet werden. Zurückliegend wurde so eine breite Wissensbasis und Infrastruktur angelegt sowie erstmals eine sogenannte *All-in-one-all-solid-state*-Batterie vorgestellt, Chitin in Superkondensatoren zur Verbesserung des elektrochemischen Verhaltens eingesetzt, ein Algorithmus zur Identifizierung neuer Batteriematerialien

entwickelt und neue Materialien im Bereich der Natrium- und Aluminium-Ionen-Batterien vorhergesagt. Ferner wurde ein Buch mit dem Titel *Electrochemical Storage Materials* herausgegeben und eine gleichnamige internationale Tagung etabliert.

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, 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 passend 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



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

– 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 Symmetrieelementen 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-Vorhabens am Synchrotron Petra III des DESY in Hamburg eingerichtete *Chemical Crystallography Beamline* ist 2018 in Betrieb gegangen.

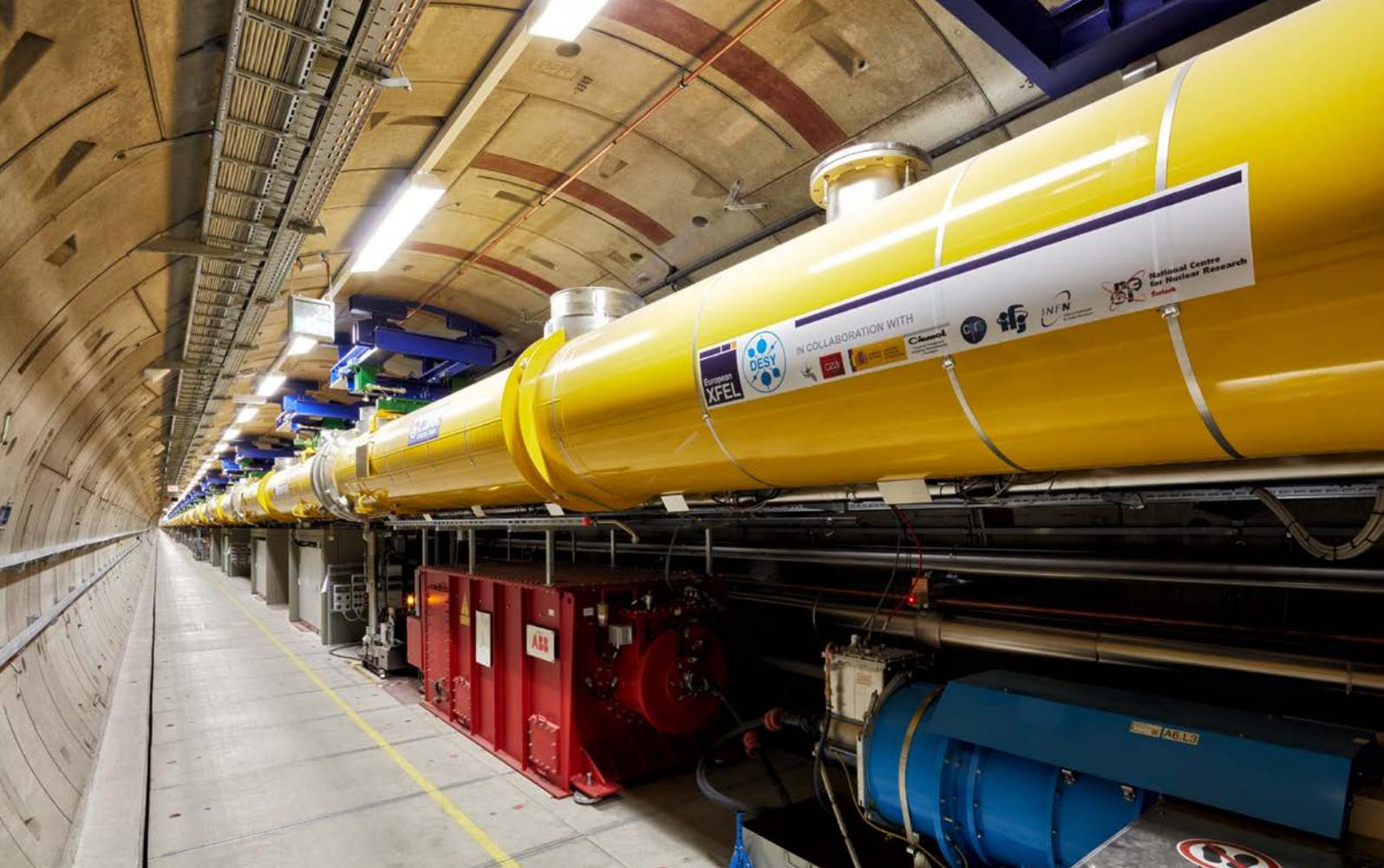
Außenstelle GIZeF

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 und Demonstratoren entwickelt worden. Ferner werden Aktivitäten zur Kommunikation der Forschungsergebnisse und Öffentlichkeitsarbeit organisiert, so u. a. die *International Freiberg Conference on Electrochemical Storage Materials (EStorM)*, die den Ausbau der nationalen und internationalen Vernetzung unterstützt.

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 innehat (www.xfel.eu), beschäftigt sich mit Materialwissenschaft sowohl an der TU Bergakademie Freiberg als auch am *European XFEL* (siehe Bild 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 im Lehrplan der TU Bergakademie Freiberg integriert ist.

Im Rahmen einer Sitzung des Rats der Fakultät für Chemie und Physik wurde durch Dr. Friedrich Roth am 11.12.2018 sein Habilitationskonzept mit dem Arbeitstitel „Time-Domain In-Situ X-ray Studies of Interfacial Charge Transfer“ vorgestellt. Nach anschließender Diskussion wurde der Antrag auf Abschluss einer Habilitationsvereinbarung zwischen Herrn Dr. Roth und der Fakultät 2 der TU Bergakademie Freiberg bestätigt und die Zustimmung

zur Anfertigung einer Habilitation durch den Rat der Fakultät 2 verkündet.

Forschungstätigkeiten am Institut für Experimentelle Physik

Das Labor der Gruppe ist mit einem Photoemissionspektrometer ausgestattet, welches die Untersuchung der elektronischen Struktur hochentwickelter Materialien mit Hochenergie und Lateralauflösung 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, Halbkugelanalytator und Detektor ermöglicht sowohl Kleinbereichs-XPS als auch bildgebende Messungen.

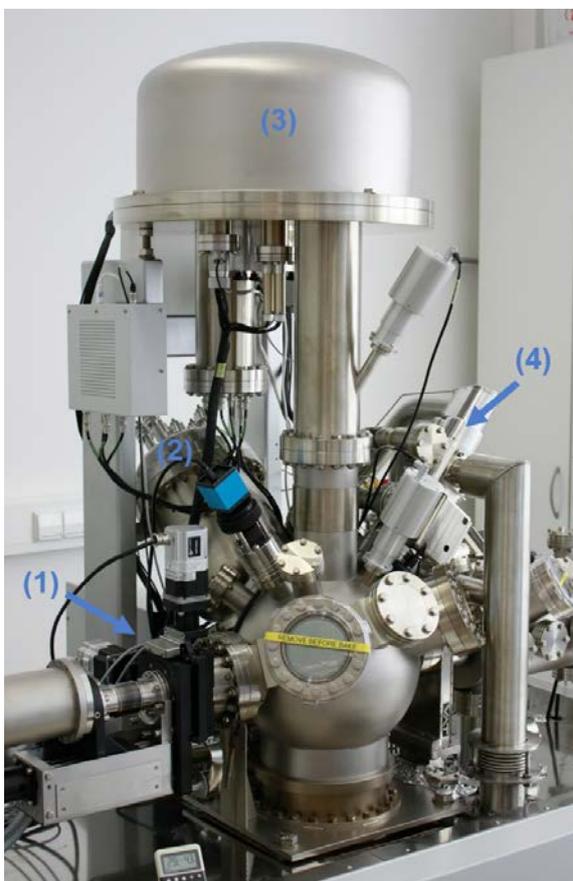


Abbildung 1: Photoelektronenspektrometer Escalab 250Xi von Thermo Scientific mit Al-Anode (1), Monochromator (2), Halbkugelanalysator (3) und Ionenquelle (4)

Im Rahmen der Zusammenarbeit mit Kooperationspartnern aus St. Petersburg (Ioffe-Institut und Universität ITMO) wurden XPS-Untersuchungen an Graphen-Oxid sowie reduziertem Graphen-Oxid durchgeführt (siehe Abbildung 2). Das Ziel dieser Untersuchungen war es, eine einfache, leicht skalierbare sowie nicht-toxische Methode zur Herstellung von Graphen aus Graphen-Oxid mittels Niedertemperatur-Heizen (80 °C) zu etablieren. Die chemische Zusammensetzung an der Oberfläche sowie die Qualität der erhaltenen reduzierten Graphen-Oxid-Proben in Abhängigkeit des verwendeten Substrates wurde mittels des PES-Spektrometers detailliert charakterisiert (vgl. Abbildung 2).

Zusätzlich zum vorhandenen XPS-Spektrometer wird in naher Zukunft im Rahmen des Forschungsneubaus des „Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung“

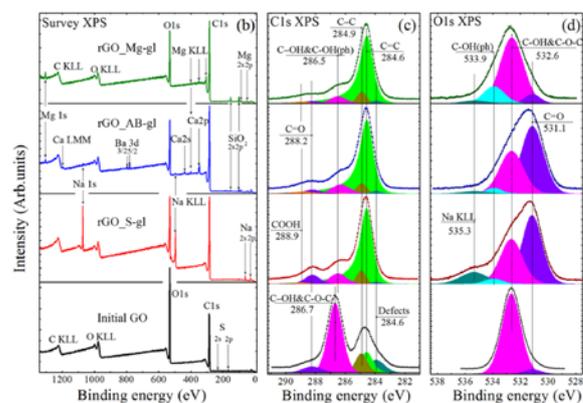


Abbildung 2: XPS-Übersichtsspektrum (links) sowie C 1s (Mitte) und O 1s (rechts) Rumpfniveau-Spektren des untersuchten Graphen-Oxides (GO, schwarze Kurve) sowie der unterschiedlichen reduzierten Graphen-Oxid-Proben (rGO, rotes, blaues und grünes Spektrum). Abbildung entnommen aus Rabchinskii et al.: Scientific Reports 8 (2018) 14154.

(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 studieren. Dieses Spektrometer stellt eine Erweiterung der bereits am IEP vorhandenen spektroskopischen Möglichkeiten dar und eröffnet im Rahmen der studentischen Ausbildung neue Optionen und Perspektiven.

Es wird sehr begrüßt, dass Studenten an verwandten Experimenten teilnehmen und die Möglichkeit in Betracht ziehen, hierzu ihre Bachelor- oder Master-Arbeit 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 bereits seit mehreren Jahren eine enge Kooperation auf dem Gebiet

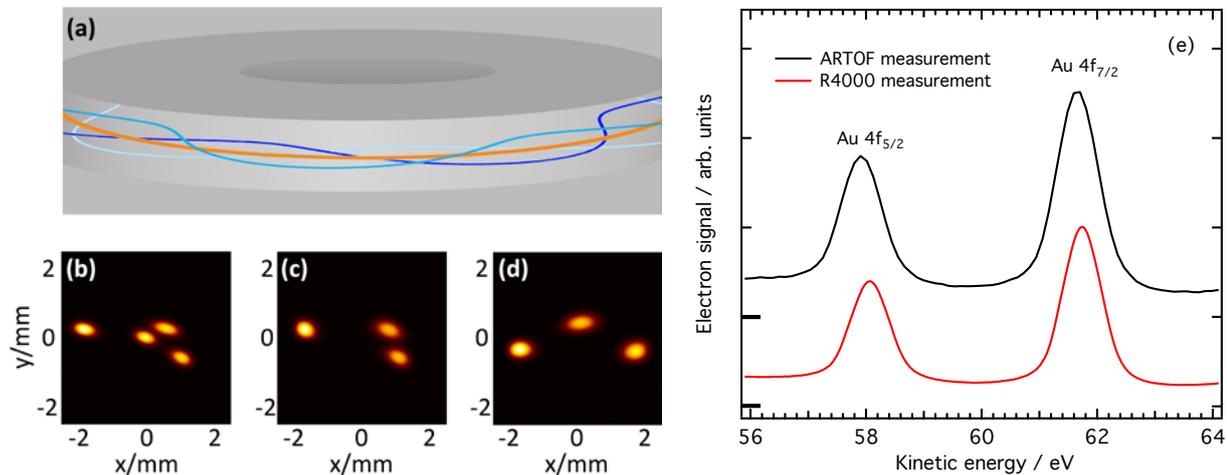


Abbildung 3: (a) Schematische Darstellung des Standard- (orange) sowie des TRIB-Orbits (blaue Töne). Letzteres schließt sich nach drei Umläufen im Speicherring und ist transversal sowohl im Ort als auch im Winkel vom Standardorbit separiert. (b, c, d) Querschnitt des Elektronenstrahls während des TRIB-Orbit-Single-Bunch-Betriebes, wobei bei (c) und (d) der zentrale Standard-Orbit nicht bevölkert ist. (e) Vergleich der beiden Au-4f-Rumpfniveau-Spektren gemessen zum einen mit einem ARTOF-Spektrometer während TRIB-Orbit-Single-Bunch-Betrieb (schwarze Kurve) sowie zum anderen einem R4000-Analysator bei Normal-Multibunch-Betrieb (rote Kurve). Abbildungen entnommen aus Arion et al.: *Review of Scientific Instruments* **89** (2018) 103114.

der Erforschung der elektronischen Eigenschaften verschiedener Materialien mit Hilfe von Synchrotronstrahlung. Im Speziellen wurden in der Vergangenheit mit Hilfe 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 Radiometrie und Spektrometrie mit Synchrotronstrahlung durch. Die Forschungstätigkeit am Institut für Experimentelle Physik der TU Freiberg im Rahmen der Professur für Strukturforschung mit Freie-Elektronen-Röntgenlasern (XFELs) und Synchrotronstrahlung beinhaltet die methodische Weiterentwicklung der grundlegenden und applikationsorientierten Elektronenspektroskopie mit Hilfe von Synchrotronstrahlung.

Im Jahre 2018 konnte ein gemeinsames Projekt mit Kollegen der Maschinengruppe des Helmholtz-Zentrums Berlin sowie der PTB mit einer Publikation in der Zeitschrift *Review of Scientific Instruments* abgeschlossen

werden. Mit Hilfe des iDEEAA-Spektrometers konnte erfolgreich ein neuartiger Betriebsmodus sowie die Nutzbarkeit für Elektron-Flugzeitspektroskopie gezeigt werden (siehe Abbildung 3). Hauptmerkmal dieses spezifischen Betriebsmodus ist die Füllung des Speicherrings mit Elektronen in zwei stabilen Orbits, wobei eines der beiden Orbits sich erst nach drei Umläufen schließt (*Transverse Resonance Island Bucket – TRIB*). Vorteil dabei ist, dass bei Nutzung des TRIB-Modus im *Single-Bunch*-Betrieb die Wiederholrate verkleinert wird (anstatt 160 ns im normalen Nutzerbetrieb jetzt 480 ns im TRIB-Modus) und somit auch an Speicherringen mit kleinerem Umfang Flugzeitspektroskopie durchgeführt werden kann. Weiterhin ist es denkbar, einen Orbit mit nur einem Elektronenpaket für zeitaufgelöste Messungen zu befüllen, während der zweite Orbit mit vielen Elektronenpaketen befüllt ist.

Forschungskooperation mit dem Lawrence Berkeley National Laboratory und der 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 Endstationen an der Advanced

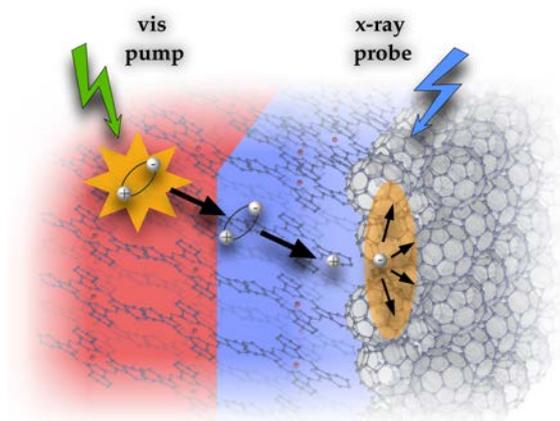


Abbildung 4: Funktionsskizze des optisch induzierten Ladungstransfers an der Grenzfläche zwischen CuPc und C₆₀

Light Source (ALS). Beide Methoden 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 können. 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.

In ersten Experimenten wurden die Dynamiken des Ladungstransfers zwischen Phthalocyanine- und C₆₀-Molekülen (ein Prototypsystem für organische Photovoltaik) untersucht. Dabei werden Licht im CuPc-Molekül absorbiert und sogenannte Exzitonen (gebundene Elektron-Lochpaare) erzeugt, welche sich durch den molekularen Festkörper zur Grenzfläche zum C₆₀ bewegen. Dort kommt es zum Ladungstransfer und zur Ladungstrennung. Exzitonen können in verschiedenen Arten vorkommen (Singlet- und Triplet-Exzitonen), welche sich vor allem durch unterschiedliche Möglichkeiten der Ladungserzeugung unterscheiden. Mit den tr-XPS-Messungen an der ALS hat unsere Arbeitsgruppe gemeinsam mit den Kollegen aus Berkeley erstmalig Effizienzen zur Ladungserzeugung aus Singlet- und Triplet-Exzitonen in CuPc-C₆₀-Heterostrukturen vermessen (siehe Abbildung 4). Entgegen

der allgemeinen Vorstellung konnte nachgewiesen werden, dass die sich langsam bewegenden Triplet-Exzitonen signifikant mehr zur Gesamtladung beitragen als die sich schnell bewegenden, aber kurzlebigen Singlet-Exzitonen. Diese Ergebnisse stellen einen wichtigen Fortschritt beim Verständnis der elektronischen Dynamiken dar, welche die Basis für neuartige, molekulare Elektronikkonzepte sind.

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 kondensierte Moleküle untersucht werden können.

Forschungskooperation 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 2017 der Grundstein für eine Kooperation mit der Arbeitsgruppe Wurth der Universität Hamburg sowie DESY gelegt. Grundlage dieser Kooperation ist, zeitaufgelöste Photoemission an ähnlichen Ladungstransfer-Systemen auch bei kürzeren Zeitskalen (100 fs – 10 ps) unter Nutzung eines Freie-Elektronen-Lasers durchzuführen. Nach der erfolgreichen Begutachtung eines weiteren *Proposals* konnten im Mai 2018 bei einer zweiten Messzeit am Freie-Elektronen-Laser in Hamburg (FLASH) unter Nutzung der *WESPE-Endstation* erfolgreich der Ladungstransfer zwischen Kupferphthalocyanine (CuPc) als Elektronendonator sowie C₆₀ als Elektronakzeptor auf Femtosekunden-Zeitskala vermessen werden. Diese Arbeiten stellen weltweit die ersten ihrer Art dar und bilden den Grundstein für weitere Messungen von Femtosekunden-Dynamiken an Systemen jeglicher Art, bei denen nach optischer Anregung ein Ladungstransfer stattfindet.

Forschungs- und Bautätigkeiten am European XFEL

In der Metropolregion Hamburg ist in den letzten Jahren eine internationale Forschungseinrichtung der Superlativ (siehe Abbildung 5) 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 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.

Der größte Röntgenlaser der Welt in Schenefeld bei Hamburg produziert extrem starkes Röntgenlicht, aber sehen konnte man den Strahl bislang nicht, denn Röntgenlicht ist für das Auge unsichtbar. Im Jahr 2018 haben Forscher gemeinsam mit einem Fotografen den *European XFEL*-Röntgenstrahl im Bild festgehalten (siehe

Abbildung 6). Möglich war das, weil der Röntgenstrahl den Stickstoff in der Luft zum Leuchten anregt, wenn die Moleküle seinen Weg kreuzen.

Die TU Bergakademie Freiberg hat im Juni unter maßgeblicher Beteiligung von Mitgliedern der Arbeitsgruppe eine bilaterale Kooperationsvereinbarung mit dem *European XFEL* in Hamburg abgeschlossen. Künftig sollen Freiburger Studenten ihre Master- und Bachelorarbeiten gemeinschaftlich in Freiberg und Hamburg anfertigen können. Dies eröffnet die einzigartige Möglichkeit, dass Studenten bereits in ihrer Ausbildungsphase direkten Zugang zu diesen weltweit einzigartigen Großgeräten haben und Spitzenforschung betreiben können.

Meilensteine und Highlights 2018

Im Februar 2018 erzeugte die Lichterzeugungstrecke SASE3 in einem der unterirdischen Tunnel erstmals Röntgen-Laserlichtblitze. SASE3 wird zwei weitere Experimentierstationen versorgen, wobei der erste Nutzerbetrieb für das Ende des Jahres 2018 geplant ist. Seit der Inbetriebnahme und der Aufnahme des Forschungsbetriebs am *European XFEL* im September 2017 haben bereits 340 Wissenschaftler aus aller Welt die Anlage für ihre Forschungsvorhaben genutzt. Die erfolgreiche



Abbildung 5: *European XFEL* mit den drei Betriebsgeländen Schenefeld (Experimentierhalle), Osdorfer Born sowie DESY-Bahrenfeld: Die Gesamtlänge der Anlage beträgt 3,4 km (© *European XFEL*).

Inbetriebnahme der neuen Röntgenlichtquelle ist eine Voraussetzung dafür, die Zahl der Nutzer im kommenden Jahr stark zu steigern.

Im März unterzeichneten Regierungsvertreter des Vereinigten Königreichs, Deutschlands und der anderen *European XFEL*-Vertragsparteien im Rahmen einer feierlichen Zeremonie in der britischen Botschaft in Berlin die Beitrittsdokumente. Somit wird Großbritannien das zwölfte Partnerland bei *European XFEL*.

Im Mai konnte schließlich die dritte Lichtquelle der Röntgenlaseranlage SASE2 wie geplant in Betrieb genommen werden. Die dritte Lichtquelle liefert Röntgenstrahlung für die Experimentierstationen MID (*Materials Imaging and Dynamics*) und HED (*High Energy Density Science*), die 2019 den Nutzerbetrieb aufnehmen sollen. Die insgesamt drei Lichtquellen der Anlage, die zum Jahrestag des ersten Lichts am *European XFEL* erstmals erfolgreich parallel betrieben wurden, werden mindestens sechs Instrumente mit Röntgenlicht versorgen. Jeweils drei der sechs Instrumente können gleichzeitig Röntgenstrahlen für Experimente erhalten.

Erstmals hat der *European XFEL* Elektronen auf eine Energie beschleunigt, die höher ist als in allen anderen Freie-Elektronen-Röntgenlasern der Welt. Der supraleitende Linearbeschleuniger brachte Mitte Juli Elektronen auf die Energie von 17,5 GeV (Giga-Elektronenvolt), das ist die vorgesehene Soll-Energie des Beschleunigers.

Ende Juli hieß es an zwei neuen *European XFEL*-Experimentierstationen „first light“: Nachdem der Strahlblocker geöffnet war, erreichten die Röntgenlichtblitze aus dem Tunnel die SQS (*Small Quantum Systems*) Experimentierstation in der Experimentierhalle in Schenefeld.

Kurze Zeit später leiteten die Wissenschaftler den Strahl auch zur benachbarten SCS (*Spectroscopy and Coherent Scattering*) Experimentierstation. Jede wissenschaftliche Experimentierstation am *European XFEL* dient bestimmten Forschungszwecken. Die SASE3-Experimentierstationen sind auf Forschung mit etwas langwelligerem „weichen“ Röntgenlicht ausgerichtet, während die bereits seit September im Nutzerbetrieb befindlichen SASE1-Stationen „hartes“ Röntgenlicht verwenden. Dabei konzentriert sich die neue SQS-Experimentierstation vor allem auf Prozesse, die auf atomarer Ebene ablaufen, zum Beispiel auf welche Weise und wie schnell Bindungen in Molekülen aufgebrochen werden oder was geschieht, wenn Materialien viele „Lichtteilchen“ (Photonen) gleichzeitig absorbieren. An der SCS-Experimentierstation werden dagegen unter anderem Forscher arbeiten, die sich für schnelle Änderungen von Materialeigenschaften interessieren, beispielsweise bei magnetischen Stoffen oder Supraleitern. Außerdem eröffnet SCS neue Einblicke in chemische Reaktionen oder in die Wechselwirkung von Materialien mit Licht.

Im Rahmen einer Kooperation mit dem *European XFEL*, der Universität Hamburg sowie der Universität Würzburg und der ITMO-Universität St. Petersburg konnte durch Mitglieder der Arbeitsgruppe eine Studie über ultraschnelle Metallisierung in LaCoO_3 im *Journal Communications Physics*, welches zur *Nature Publishing Group* gehört, veröffentlicht werden. Mittels *Soft-X-ray*-Spektroskopie an der O-K-Kante mit Femtosekunden-Auflösung konnte ein neues spektroskopisches Werkzeug etabliert werden, welches maßgeblich beim Verständnis der Eigenschaften von korrelierten Oxiden hilft.

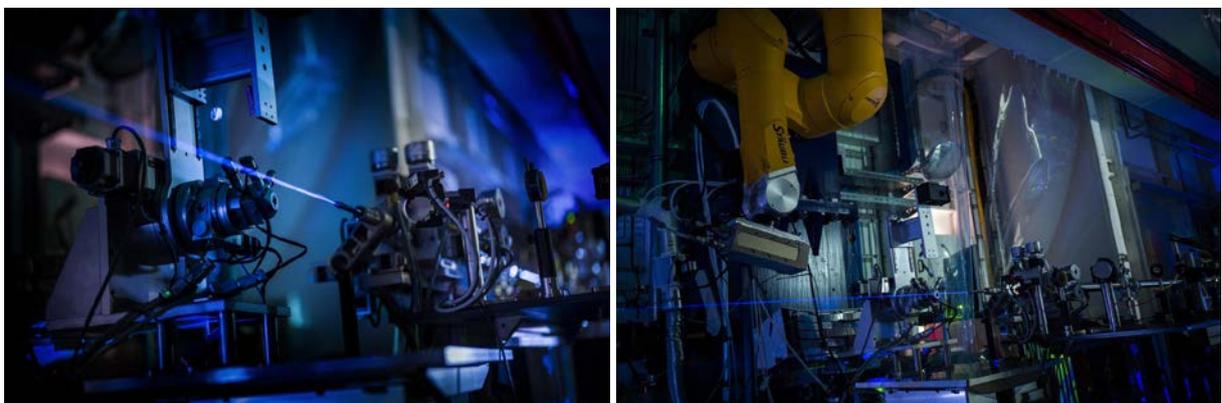


Abbildung 6: Der Röntgenstrahl des *European XFEL* (© *European XFEL* / Jan Hosan)

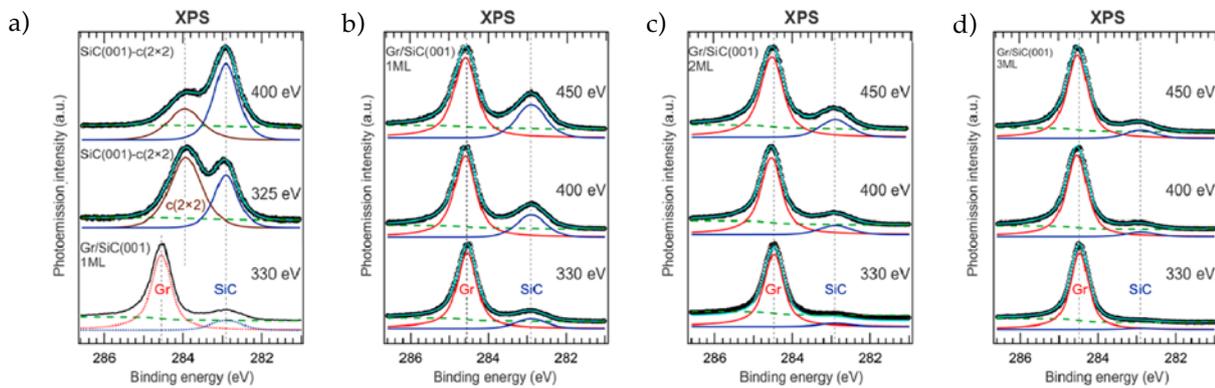


Abbildung 7: Photoelektronenspektren des C-1s-Rumpfniveaus für a) SiC(001)-c(2×2) Rekonstruktion sowie b) eine Monolage, c) zwei Monolagen und d) drei Monolagen von Graphen gewachsen auf 3C-SiC gemessen bei drei unterschiedlichen Photonenergien (siehe Aristov et al.: ACS nano 13 (2018) 526).

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

Das internationale Wissenschafts- und Bildungs-Zentrum UniFEL für neuartige Methoden der Materialforschung 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 aus 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.

Unter den Aktivitäten und Zielen des UniFEL-Centers sind folgende Kernkompetenzen von besonderer Bedeutung:

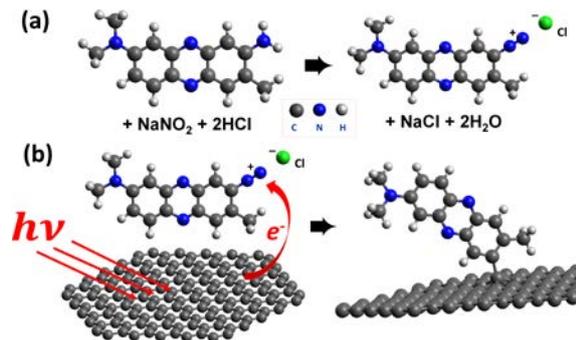


Abbildung 8: Schematische Darstellung der Bildung des Diazoniumsalzes (a) und der kovalenten Modifikation des Graphen unter Nutzung des erhaltenen Diazoniumsalzes (b).

- 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 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.



Abbildung 9: Ankündigung der Blockvorlesung 2019 am DESY in Hamburg

Im Rahmen des Wissenschafts- und Bildungs-Zentrums UniFEL verstärkt Dmitrii Potorochin als erster PhD-Student seit dem 18.09.2017 die Arbeitsgruppe. Seine Arbeit trägt den Titel „Self-aligned systems of supported nanoobjects: Synthesis and study of their atomic and electronic structure“ und befasst sich hauptsächlich mit spektroskopischen Messungen der elektronischen Struktur verschiedenster Systeme. Hauptsächlich führt er hierzu Messungen am Strahlrohr P04 des Petra III Speicherrings in Hamburg durch. Fokus seiner Forschung ist das epitaktische Wachstum von Graphen durch thermisches Zerlegen von kubischem Siliziumkarbid unter Ultra-Hochvakuumbedingungen. Bereits in seinem ersten Jahr als Doktorand war er maßgeblich an der Erstellung einer Publikation in einem *High-Impact*-Journal über das *Layer-by-Layer*-Wachstum von Graphen auf Siliziumkarbid beteiligt. Darin wurde mittels XPS, μ -LEED, PEEM, LEEM, ARPES und STM zu verschiedenen Zeitpunkten während der Herstellung des Graphens die Probe charakterisiert (vgl. Abbildung 7).

Ein weiteres Forschungsgebiet von Dmitrii Potorochin ist die kovalente Funktionalisierung von Graphen mittels Nutzung von organischen Farbstoffen, wobei das Ziel darauf liegt, Graphen mit untypischen Eigenschaften auszustatten. Ein Beispiel dafür ist die Änderung der Kohlenstoffhybridisierung im Graphen von sp^2 zu sp^3 nach Funktionalisierung. Diese Modifikation führt zum Auftreten einer Bandlücke („normales“ Graphen ist metallisch), was von Interesse bei der Nutzung von Graphen

für elektronische Anwendungen ist. Als Methode für das kovalente Anbinden von organischen Komponenten wurde aufgrund ihrer Einfachheit die Diazonium-Chemie gewählt. Diese Technik basiert auf der Transformation einer aromatischen Verbindung zu einem Diazoniumsalz, welches im Anschluss durch lichtangeregte Elektronen aus dem Graphen reduziert wird. Dieser Reduktionsprozess wird begleitet von der Bildung eines aktiven Radikales, welches die Fähigkeit besitzt, eine Bindung zum Kohlenstoffatom des Graphens einzugehen (siehe Abbildung 8).

Weitere Information finden sich auf der Webseite des UniFEL-Center: <http://unifel.ifmo.ru/en/>

Lehre in Hamburg

Ankündigung Blockvorlesung 2019

Die nächste Blockvorlesung „Materialforschung mit Freie-Elektronen-Röntgenlasern (XFELs)“ ist vom 22. bis 27. September 2019 in Hamburg geplant (siehe Abbildung 9). Die Vorlesungsreihe führt ein in die konventionellen und ultrahoch-zeitaufgelösten spektroskopischen Methoden und Methoden zur Bestimmung der strukturellen Eigenschaften:

- Inelastische und resonante Röntgenstreuung,
- Röntgenemissionsspektroskopie,
- Röntgenabsorptionsspektroskopie,
- Photoelektronenspektroskopie,
- Röntgenmikroskopie,

- Kohärente Röntgendiffraktion,
- Photonenkorrelationsspektroskopie,
- Röntgenholographie.

Die Anwendung der genannten Methoden wird während den Führungen durch den weltweiten Freie-Elektronen-Röntgenlaser FLASH bei DESY illustriert. Es wird außerdem einen Besuch des *European XFEL* geben. Die Studierenden erlangen vertiefte Kenntnisse des Aufbaus und der Anwendung der neuesten Generation von Röntgen-Lichtquellen, den Freie-Elektronen-Röntgenlasern. Diese 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 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 in einer internationalen Großforschungseinrichtung sammeln.

Unterbringung im DESY-Gästehaus, Fahrt- und Übernachtungskosten werden übernommen. Die Studenten können sich gerne bis zum 16.08.19 registrieren bei: friedrich.roth@physik.tu-freiberg.de



ARBEITSGRUPPE „KRISTALLPHYSIK“ JUN.-PROF. ROMAN GUMENIUK

Die Aufmerksamkeit der modernen Gesellschaft ist immer mehr auf Technologien, welche die Entstehung von Ozon, die Emission von Treibhausgasen und die Verwendung fossiler Brennstoffe reduzieren, konzentriert. Thermoelektrische (TE) Geräte (TEG) sind Halbleitersysteme, die Abwärme in elektrische Energie umwandeln. Sie haben das Potenzial, wichtige Beiträge zur Reduzierung der CO₂- und Treibhausgasemissionen zu leisten. Festkörperenergieumwandlung hat ein großes technologisches Potenzial hinsichtlich ihrer Einfachheit im Vergleich zu Systemen, die zweiphasige (Gas/Flüssigkeit) Arbeitsfluide komprimieren und expandieren müssen. Der Vorteil von TEG gegenüber herkömmlichen Systemen basiert auf ihren kleinen Dimensionen, ihrer Robustheit und den kurzen Reaktionszeiten. Zwei wichtige Wege führen zur erfolgreichen Anwendung der TEG: (i) die Verbesserung der intrinsischen Effizienz von TE-Materialien, (ii) ihre Einsatzoptimierung [1].

Der Seebeck-Effekt wurde 1821 entdeckt. Auf ihm beruht thermoelektrische Stromerzeugung. In Abbildung 1 ist ein thermoelektrisches Modul dargestellt. Wird die obere Anschlussstelle des p/n-Überganges

aufgewärmt und die untere abgekühlt (somit wird ein Temperaturgradient erzeugt), entstehen Elektron/Loch-Paare am warmen Ende des Systems. Sie absorbieren die Wärme, geben sie am kalten Teil des Moduls ab und rekombinieren dabei. Ein Spannungspotenzial (Seebeckspannung), das den Loch-/Elektronenfluss treibt, ist durch die Temperaturdifferenz zwischen den heißen und kalten Enden des TE-Moduls erzeugt.

Um die Effizienz des Prozesses zu erhöhen braucht man Materialien, die: (i) gute elektrische Leiter, (ii) aber schlechte Wärmeleiter sind (der Temperaturgradient muss stabil aufrechterhalten bleiben) und (iii) vor allem einen großen Seebeck-Effekt aufweisen. Die gleichzeitige Optimierung dieser drei Parameter ist durch ihre wechselseitige Abhängigkeit von den elektronischen Eigenschaften des Materials erschwert: Das Arbeitsfluid (Elektronen) leitet elektrischen Strom sowie „unerwünscht“ auch Wärme, der Seebeck-Effekt nimmt hingegen mit zunehmender elektrischer Leitfähigkeit ab [2].

Die Leistung eines TE-Materials ist durch einen dimensionslosen Gütefaktor $zT = S^2T/\rho\kappa$ beschrieben, wobei S , ρ , κ und T die Thermokraft, der elektrische

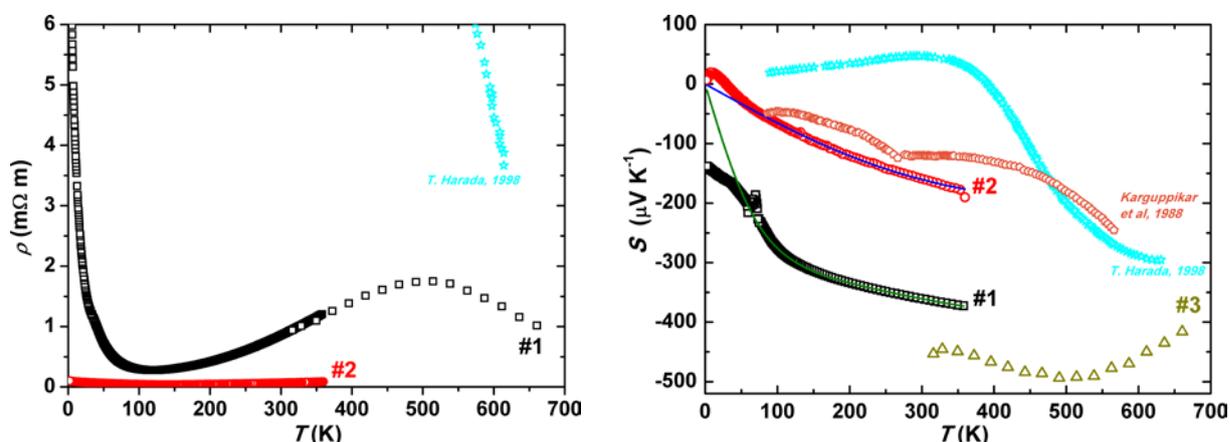


Abbildung 3: Links: Eigene Messungen des elektrischen Widerstandes bei hohen Temperaturen (#1) sowie Messungen am MPI CPFS (#2) und Literaturdaten. Rechts: Eigene Messungen des Seebeck-Effekts (#3) zusammen mit Tieftemperaturdaten vom MPI CPFS (#1 und #2) sowie Literaturdaten.

Chalkosin (Cu_{2-x}S , $zT = 1,6$ bei 700°C [12]) oder modifiziertem Tetraedrit ($\text{Cu}_{12-x}\text{MxSb}_4\text{S}_{13}$, $zT = 0,9$ bei 400°C [13]) erreicht werden können.

Nach langjähriger Zusammenarbeit mit dem Max-Planck-Institut für chemische Physik fester Stoffe in Dresden, besitzt die AG Kristallphysik seit dem Frühjahr 2018 ein ZEM-3 Messgerät (siehe großes Bild auf S. 27) zur Messung des elektrischen Widerstands und des Seebeck-Effekts bei hohen Temperaturen, welches die Charakterisierung selbstsynthetisierter Materialien hinsichtlich ihrer thermoelektrischen Eigenschaften und technischen Potenziale ermöglicht. Erste Untersuchungen an Pyriten (FeS_2) sind in Abbildung 3 dargestellt.

Referenzen

- 1 L. E. Bell: *Science* 321 (2008) 1457.
- 2 S. W. Angrist: *Direct Energy Conversion* (Allyn and Bacon, Boston, MA, 1965), S. 144–150.
- 3 T. M. Tritt, M. A. Subramanian: *MRS Bulletin* 31 (2006) 188.
- 4 C. B. Satterthwaite, R. W. Ure Jr.: *Physical Review* 108 (1957) 1164.
- 5 H. J. Goldsmid, A. R. Sheard, D. A. Wright: *British Journal of Applied Physics* 9 (1958) 365.
- 6 L.-D. Zhao, S.-H. Lo, Y. Zhang, H. San, G. Tan, C. Uher, C. Wolverton, V. P. Dravid, M. G. Kanatzidis: *Nature* 508 (2014) 373.
- 7 G. A. Slack: in *CRC Handbook of Thermoelectrics*, Ed. D. M. Rowe (CRC Press, USA, 1995).
- 8 L. D. Hicks, M. S. Dresselhaus: *Physical Review B* 47 (1993) 12727.
- 9 T. C. Harman, P. J. Taylor, M. P. Walsh, B. E. La Forge: *Science* 297 (2002) 2229.
- 10 K. Kato, Y. Okamoto, J. Morimoto, T. Miyakawa: *Journal of Materials Science Letters* 16 (1997) 914.
- 11 L.-D. Zhao, J. He, S. Hao, C. Wu, T. P. Hogan, C. Wolverton, V. P. Dravid, M. G. Kanatzidis: *Journal of the American Chemical Society* 134 (2012) 16327.
- 12 Y. He, T. Day, T. Zhang, H. Liu, X. Shi, L. Chen, G. J. Snyder: *Advanced Materials* 26 (2014) 3974.
- 13 X. Lu, D. T. Morelli, Y. Xia, F. Zhou, V. Ozolins, H. Chi, X. Zhou, C. Uher: *Advanced Energy Materials* 3 (2013) 342.



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

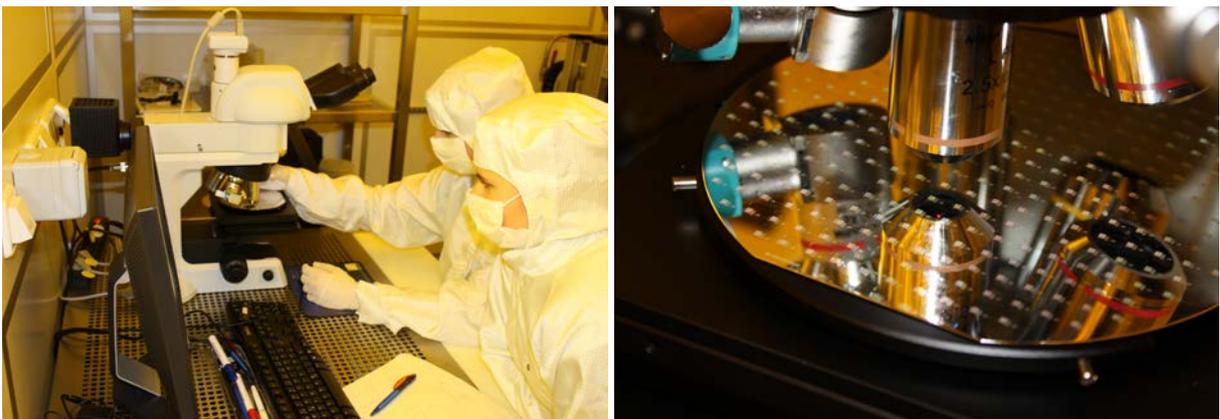


Abbildung 2: Die Resultate der Lithographie werden am Mikroskop im ZRL überprüft.

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, der Kristallochemie 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 besondere Akzente setzen.

Vorhandene experimentelle und theoretische Kompetenzen beziehen sich auf:

- die Kristallstrukturbestimmung (FIB-Präparation von Einkristallen, Orientierungsbestimmung, Röntgendiffraktometrie, röntgenographische Elektronendichtebestimmung, N -dimensionale Kristallographie, *Maximum-Entropy*-Methode),
- die elektrochemische Charakterisierung (mehrere Gloveboxen, Tubandt-Methode bei einstellbarer

Temperatur, Impedanzspektroskopie, Cyclovoltammetrie, Zellzyklisierung) und

- die Anwendung theoretischer Methoden der Kristallochemie und Kristallphysik (geometrische und topologische Methoden, z. B. Voronoi-Dirichlet-Partitionierung in ToposPro, *Bond-Valence*-Methode und Strukturmodellierung mittels Dichtefunktionaltheorie). 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 Kristallochemie eingesetzt und miteinander kombiniert (Nestler, et al. Chem. Mater. 31 (2019) 737). 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.

Aktuelle Projekte

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 Prof. Dr. Dirk C. Meyer, auf russischer Seite Prof. 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 Leisegang. 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 September 2016 wurden die Arbeiten im Rahmen des BMBF-Verbundprojekt 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 potenzielle großtechnische Produktion zu erarbeiten. Bis 2019 arbeiten insgesamt vier Verbundpartner unter Leitung der TU Bergakademie Freiberg (Kordinator: Prof. 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.

Kolloquien und Konferenzen

Das Kompetenzzentrum organisiert ebenso Kolloquien, Workshops und Tagungen zu einschlägigen Themen.



Abbildung 1: Mit kristallographischen Methoden zu neuen Energiematerialien



Abbildung 2: Dr. Tilmann Leisegang bei Arbeiten an einer Batteriezelle in der Glovebox

Am 7. Juni 2018 fand das Fachkolloquium zum Thema „Materialforschung im Kontext der Energiewende: Neue Batterien und die Abwärmenutzung von morgen“ statt (siehe S. 78). Das Kolloquium wurde gemeinsam vom Institut für Experimentelle Physik und der Sächsischen Akademie der Wissenschaften zu Leipzig (SAW) ausgerichtet und war in den 69. BHT – Freiburger Universitätsforum der TU Bergakademie Freiberg eingebettet. Das eintägige Kolloquium mit insgesamt 14 Vorträgen widmete sich zwei wichtigen Herausforderungen der Energiewende: der Speicherung elektrischen Stroms und der Niedertemperatur-Abwärmenutzung.

Zurückliegend wurde die *International Freiberg Conference on Electrochemical Storage Materials* (EStorM, www.estorm.de) etabliert. 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. Während der dritten EStorM (2017) standen Festkörperelektrolyte und Festkörperbatterien im Vordergrund. Anlässlich der Veranstaltungen wurden Konferenz-Proceedings herausgegeben. Artikel der ersten beiden Bände zählten mehrfach hintereinander zu den „Most read this month“. Insgesamt wurden die beiden Proceedings (AIP Conf. Proc. 1597 (2014) und AIP Conf. Proc. 1765 (2016)) bisher mehr als 23 000 Mal gelesen.

Aus diesem Grund wurde anlässlich der dritten Konferenz ein weiteres Buch, diesmal durch den Wissenschaftsverlag De Gruyter von den Editoren Dirk C.

Meyer, Tilmann Leisegang, Hartmut Stöcker und Matthias Zschornak herausgegeben. Auf mehr als 400 Seiten gibt das Buch mit dem Titel „Electrochemical Storage Materials – From Crystallography to Manufacturing Technology“ Einblicke in aktuelle Entwicklungen der elektrochemischen Energiespeicherung.

Verschiedenes

Die Arbeiten im Zusammenhang mit dem Kompetenzzentrum wurden in zahlreichen wissenschaftlichen Artikeln publiziert und auf verschiedenen Konferenzen weltweit vorgestellt, darunter die Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie in Essen, die Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft in Berlin, das Stuttgarter Energiespeichersymposium, der *Annual World Congress of Smart Materials* in Osaka (Japan), das *International Symposium on Systems with Fast Ionic Transport* in Minsk (Weißrussland), der BHT – Freiburger Universitätsforum in Freiberg, das *European Crystallographic Meeting* in Oviedo (Spanien) und das *Meeting of the Young Crystallographers* in Aachen.

Zudem beteiligte sich das IEP ein weiteres Mal an der Hannover Messe (siehe S. 77). Dort wurden auf dem Gemeinschaftsstand „Forschung für die Zukunft“ der Länder Sachsen, Sachsen-Anhalt und Thüringen die Batterieforschungsaktivitäten unter dem Titel „Aluminium-Ionen Batterien – Post-Lithium Konzepte“ Forschungsaktivitäten des IEP präsentiert, Labormuster elektrochemischer Speicher ausgestellt und für Forschungsdienstleistungen zu elektrochemischen Energiespeichern geworben.

Im Rahmen der Öffentlichkeitsarbeit wurde in Zusammenarbeit mit der Cinector GmbH eine Animation (<https://youtu.be/yWYzANbILUQ>) erstellt, die die Identifizierung und Präparation neuer Batteriematerialien veranschaulicht, den Zielen des Projekts R2RBattery entsprechend. Ferner wurden die Forschungsaktivitäten zu elektrochemischen Energiespeichern auch im Rahmen der Sendung „Elektroland Sachsen“ des Nachrichtensenders n-tv einer breiten Öffentlichkeit kommuniziert.

Als Mitglied des Energy Saxony e.V. wurde an der Mitgliederbefragung zu Schwerpunkten und Kooperationen im Energiebereich teilgenommen sowie an der Kompetenzbroschüre der Wirtschaftsförderung Sachsen „Energieinnovationen aus Sachsen“ mitgewirkt.

Die vielfältigen Aktivitäten führten auch dazu, mit Unternehmen in Kontakt zu kommen und gemeinsame Forschungs- und Entwicklungsvorhaben vorzubereiten. Es wurden verschiedene Projektanträge (national/europäisch) zur Förderung eingereicht.

Aufgrund intensiver experimenteller Arbeiten sowie der Diversifizierung von Materialien und elektrochemischen Charakterisierungsmethoden wurde ein eigenständiges und größeres Chemielabor bezogen, welches ausschließlich für Arbeiten zu elektrochemischen Energiespeichern genutzt wird.

Schließlich wurde eine studentische Arbeit von Luis Wolf zum Thema „Batterien der nächsten Generation: die Nutzung großer Datenmengen für neue Energiespeicherkonzepte“ angefertigt und von Falk Meutzner betreut.

Internationale Vernetzung

Die während der EStorM2017 ausgebauten Kontakte nach Singapur zum *Department of Materials Science and Engineering*, Gruppen Prof. Stefan Adams und Prof. Pieremanuele Canepa, der *National University of Singapore* mündeten bereits in einen gemeinsamen Artikel (Meutzner et al., Phys. Sci. Rev. 4 (2018) 20180044). Hier bezieht sich die Zusammenarbeit auf die Anwendung der dort entwickelten Software zur Berechnung von *Bond-Valence-Site-Energy* (BVSE) zum Auffinden potenzieller Festkörperelektrolyte sowie der gemeinsamen Diskussion zu Aluminium-Ionenleitern.

Weitere Arbeiten erfolgten in Zusammenarbeit mit Prof. Perla Balbuena von der *Texas A&M University* (College Station, USA) und mit Dr. Damien Monti vom *Institut*

de Ciència de Materials de Barcelona (Spanien): Zschornak et al., Phys. Sci. Rev. 3 (2018) 20170111, Meutzner et al., Phys. Sci. Rev. 4 (2018) 20180044.

Die erfolgreiche Zusammenarbeit mit dem *Samara Center for Theoretical Materials Science*, Arbeitsgruppe Prof. Vladislav Blatov, wurde auch in 2018 weiter vertieft. Während der Forschungsaufenthalte bereitete Tilmann Leisegang erneut gemeinsame Projektanträge zu Festelektrolyten und Kathodenmaterialien für Post-Lithium-Batterien vor und arbeitete gemeinsame Publikationen aus (z. B. F. Meutzner et al, Phys. Sci. Rev. 4 (2018) 20180044). Ein Erfolg bildete die durch das *German-Russian Interdisciplinary Science Center* (GRISC) bewilligte Förderung eines einmonatigen Aufenthaltes von Dr. Roman Eremin (*Senior Scientist* des SCTMS) im zurückliegenden Berichtsjahr. Das Projekt zielte auf die Kombination experimenteller und theoretischer Methoden zur Untersuchung von Materialien für Al- und Na-Ionen-Batterien.

Die finanzielle Unterstützung der Arbeiten des Kompetenzzentrums erfolgte im Rahmen des BMBF-Verbundprojekts R2RBattery (03SF0542A), PhosCar, G-RISC (P-2018a-9) und Sinergy (SAB 100256790).

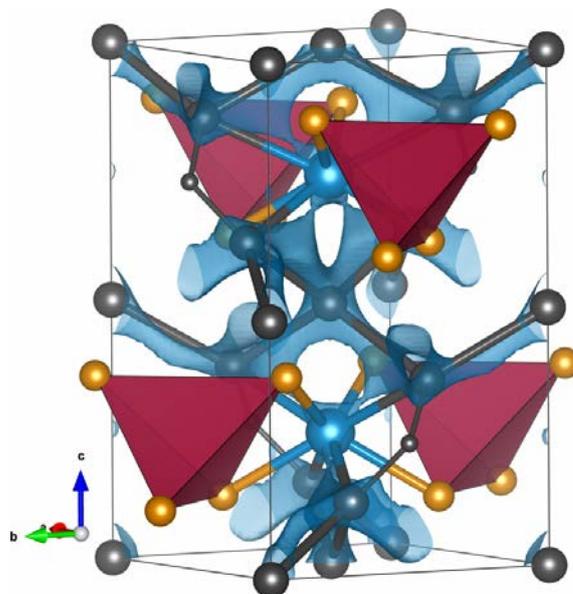


Abbildung 3: Graphische Darstellung der Voronoi-Dirichlet-Partitionierung und *Bond-Valence-Site-Energy*-Berechnung zum Auffinden von Leitfähigkeitsnetzwerken in Festelektrolytmaterialien



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 Wasserstoffherzeugung im Rahmen der ESF-Nachwuchsforschergruppe PyroConvert.
- 2014: Vakuumkammer zur Polarisierung pyroelektrischer Proben bei Spannungen bis zu 30 kV.
- 2015: Erstmalsiger 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.
- 2018: Portabler Messplatz zur Bestimmung pyroelektrischer Koeffizienten an Polymerproben.

Demonstrator zur pyroelektrischen Wasserstoffherzeugung

Zur Umwandlung von Niedertemperaturabwärme in chemische Energie wurde am IEP ein Demonstrator zur

pyroelektrischen Wasserstoffherzeugung 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 Potenziale 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>.



RESONANTE RÖNTGENMETHODEN UND KRISTALLMODELLIERUNG

Die Arbeitsgruppe unter der Leitung von Dr. Matthias Zschornak befasst sich schwerpunktmäßig zum einen mit der Anwendung und methodischen Weiterentwicklung der resonanten Röntgenmethoden an Synchrotron-Forschungseinrichtungen, insbesondere dem Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) in Hamburg und der *European Synchrotron Radiation Facility* (ESRF) in Grenoble. Zum anderen steht die Modellierung von atomarer und elektronischer Struktur kristalliner Materialien sowie der Vorhersage von Kristallstrukturen und entsprechenden Materialeigenschaften im Fokus (siehe Abbildungen 1–2).

Herr Zschornak wird bei den experimentellen Arbeiten, der Durchführung von Messreisen und den Modellierungen durch die Doktorandinnen Dipl.-Math. Melanie Nentwich und M. Sc. Tina Weigel unterstützt. Auch der ehemalige Kollege Dr. Carsten Richter, derzeit Beamline-Wissenschaftler an der ESRF, steht weiterhin als externer Berater bei Messzeiten und der Datenauswertung zur Seite. Zur Stärkung der *Ab-initio*-Modellierungen kam im Jahr 2018 B. Sc. Christian Ludt mit in die Gruppe.

Bezogen auf die Materialforschung werden insbesondere das Verhalten von Kristallen und deren Eigenschaften

im elektrischen Feld, bei Phasenumwandlungen und beim Einbau von Defekten untersucht. Im Fokus stehen u. a. Oxide (SrTiO_3 & RP-Phasen, TiO_2 , RbH_2PO_4 , Nb_2O_5), Halbleitermaterialien (GaAs, InP, CdSe), Seltenerdverbindungen (R_2PdSi_3 , $\text{YMn}_{2-x}\text{Fe}_x\text{O}_5$), Pyroelektrika (LiNbO_3 , LiTaO_3) sowie ferroelektrische Dünnschichten (MFP, SrTiO_3).

Genutzt werden dafür vor allem die Synchrotronmethoden *X-ray-Absorption Fine Structure* (XAFS, XANES, EXAFS), *Diffraction Anomalous Fine Structure* (DAFS), *Anisotropic Anomalous Scattering* (AAS), *Resonant X-ray Diffraction* (RXD), *Reciprocal Space Mapping* (RSM) und *X-ray Standing Waves* (XSW). Für die Modellierung kommen Dichtefunktionaltheorie (DFT), *Core State Excitation Modelling* (FDMNES, FEFF) und *Finite-Elemente-Methode* (FEM) zum Einsatz.

Die Arbeitsgruppe widmet sich auch der methodischen Forschung zur lagenselektiven und ortsaufgelösten Bestimmung elektronischer Zustände um Punktdefekte, zu verbotenen bzw. partiell verbotenen Bragg-Reflexen, zur hochpräzisen Ortsauflösung in Kristallen ($< 1 \text{ pm}$) und zur Symmetrieentstehung in Kristallen.

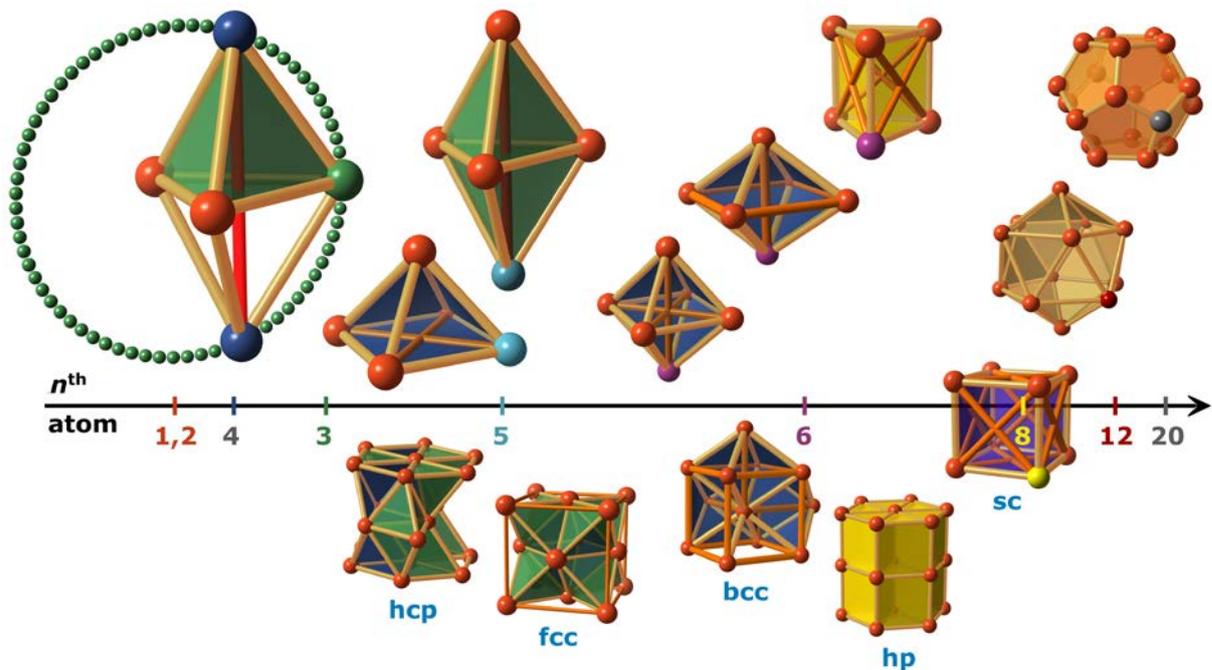


Abbildung 1: Atomistisches Kristallwachstumsmodell für die ersten Atome eines wachsenden Clusters mit Strukturmotiven (oben) und abgeleiteten Kristallsymmetrien (unterer Teil). Aufgrund ihrer hohen Symmetrie sind die platonischen Körper die stabilsten Cluster motive mit einer maximalen Anzahl an Gleichgewichtsabständen. Die hohen Kristallsymmetrien für elementare Strukturen: hcp, fcc, bcc, hp und sc entwickeln sich direkt oder als Kombination aus den dargestellten Motiven.

Hervorzuheben für das Jahr 2018 ist, dass Dr. Zschornak in Oviedo, Spanien von der *European Crystallographic Association (ECA)* und der *European Neutron Scattering Association (ENSA)* mit dem Erwin-Felix-Lewy-Bertaut-Preis als herausragender Nachwuchswissenschaftler für seine „Beiträge zur Entwicklung der resonanten Röntgenbeugung, zu Strukturstudien von Perowskiten und zu umfangreichen elektronischen Berechnungen, die ein umfassendes physikalisches Verständnis der Eigenschaften wichtiger Materialien ermöglichen“, geehrt wurde. Des Weiteren erhielt Frau Weigel die Möglichkeit durch die Förderung des Stipendiums *Young-Geomatenum-International* des Deutschen Akademischen Austauschdienstes (DAAD) und der TU Bergakademie Freiberg, einen sechswöchigen Aufenthalt an der ESRF wahrzunehmen. In dieser Zeit konnte sie sich in die Simulation und Auswertung von Spektren mit Hilfe des neuen Ansatzes *Resonant Suppressed Diffraction* (siehe Projekt REXSuppress) einarbeiten und weitere Erfahrung im praktischen Arbeiten mit Synchrotronstrahlung sammeln.

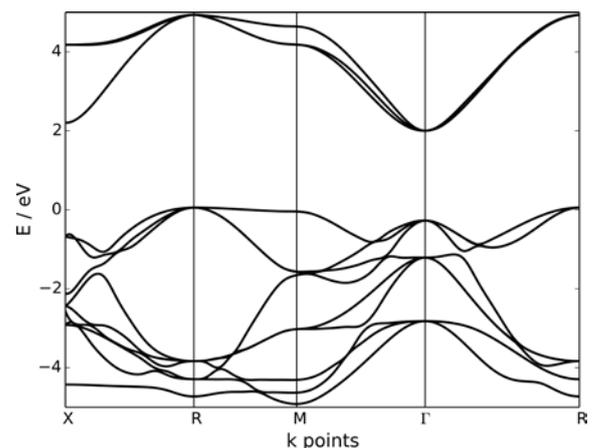


Abbildung 2: Elektronische Bandstruktur von Strontiumtitanat

Herr Ludt erhielt für sein Poster zur DFT-Modellierung von $\text{SrO}(\text{SrTiO}_3)_n$ Ruddlesden-Popper-Phasen einen Posterpreis auf der diesjährigen Tagung der Jungen Kristallographen in Aachen.



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 nun in den Jahren 2015 bis 2020 ca. 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 Antragsskizze wie auch eines umfangreichen Vollertrags beim Wissenschaftsrat, wobei der TU Bergakademie Freiberg 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 Prof. Christos Aneziris) und 799 „TRIP-Matrix-Composite“ (Sprecher Prof. Horst Biermann), das Innovationskompetenzzentrum „Virtuelle Hochtemperatur-Konversionsprozesse – VIRTUHCON“ (Sprecher Prof. Bernd Meyer) sowie der Spitzentechnologiecluster ADDE des Freistaats Sachsen (Sprecher Prof. 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

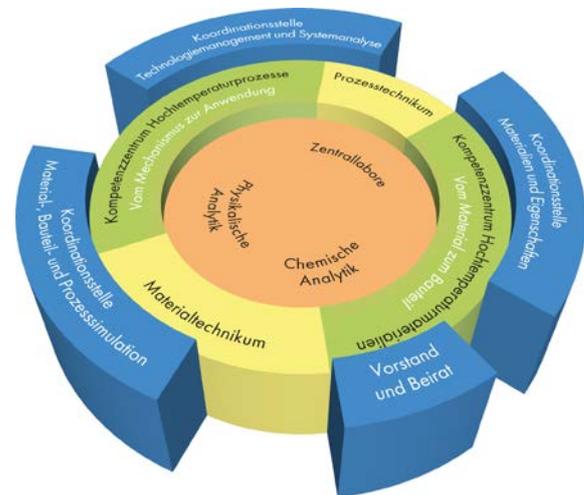


Abbildung 1: Teilbereiche des ZeHS

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 industriemassigen Pilotanlagen. Das ZeHS soll im Ergebnis den Verbleib der ressourcen- und energieintensiven Grundstoffindustrie in Deutschland unterstützen; strategisch werden auch Neuanstellungen 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 TU BAF wird durch das Prozess- und Materialtechnikum des ZeHS abgerundet (siehe Abbildung 1). Zur Umsetzung der Forschungsprogrammatik

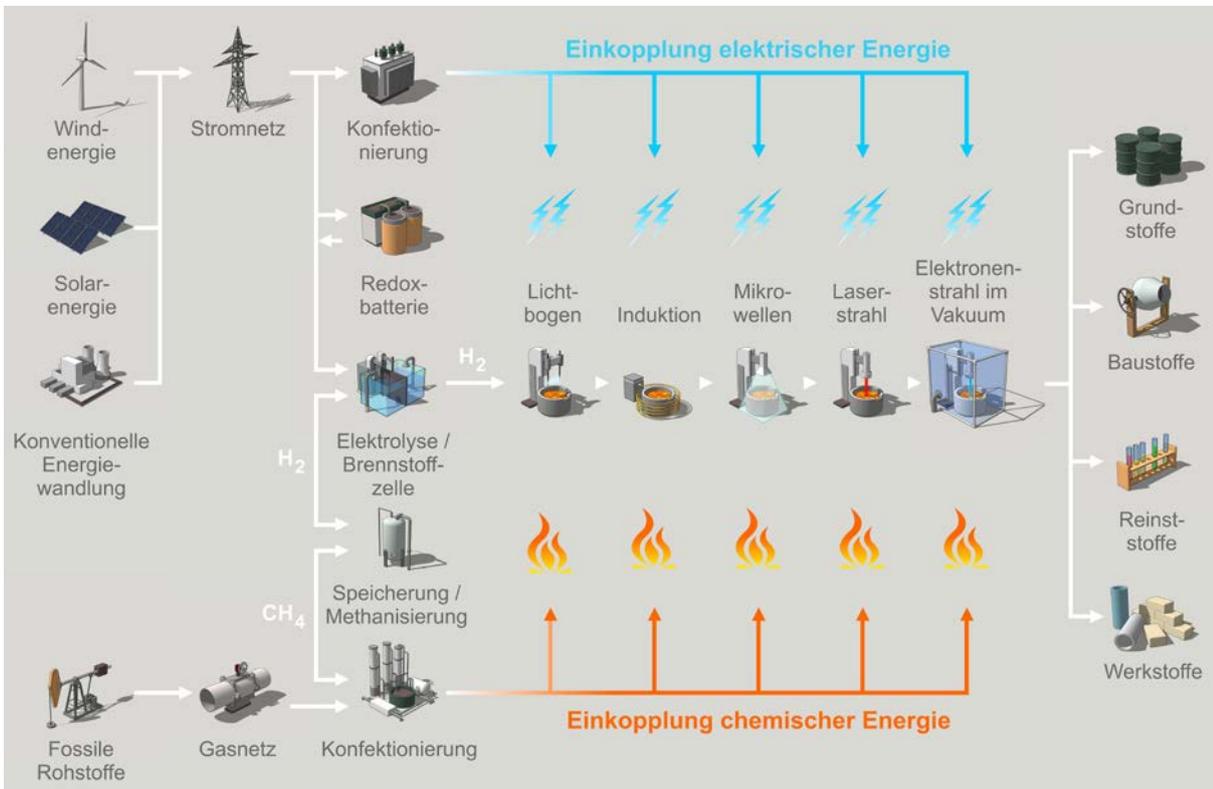


Abbildung 2: Stoff- und Energiekreisläufe mit HT-Prozessen, die am ZeHS betrachtet werden sollen

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 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-Prozess-Anlagen gebündelt, die für die Erzeugung der meisten industriellen Grundstoffe (z. B. Metalle, Keramik, Glas und Basischemikalien) von essentieller Bedeutung sind (siehe Abbildung 2). 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 zusammengeführt werden, mit dem Ziel ein umfassendes Stoff-, Prozess-, Material- und Modellierungswissen der beteiligten Fachdisziplinen für eine neue Generation von HT-Prozessen bereitzustellen.

Das Kompetenzzentrum „HT-Materialien“ bündelt die Forschungs- und Entwicklungsarbeiten des ZeHS für



Abbildung 3: Deckblatt zum Heft 2 – 2019 der Schriften zum Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung (ISSN 2513-1192)

synthetische feuerfeste Materialien. Diese bilden die Voraussetzung für den Aufbau der Prozessumgebung bei allen maßgeblichen HT-Prozessen. Die Forschungsprogrammatische des Kompetenzzentrums HT-Materialien folgt umfassend dem ausgesprochen 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, 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 Materialtechnik

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 Forschungsprogrammatische des ZeHS die Einrichtung interdisziplinärer Bachelor- und (internationaler) Masterstudiengänge. Damit soll die internationale Verankerung des ZeHS im Bereich der Lehre sowie die Entwicklung profilierter wissenschaftlichen Nachwuchses gewährleistet werden.



Abbildung 4: Rohbau des ZeHS im November 2018 mit noch nicht vollendetem Kopfbau

Schriftenreihe zum ZeHS

Zum Jahresende wurde der zweite Band der „Schriften zum Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung (ZeHS)“ vorbereitet, welcher im Frühjahr 2019 erscheinen wird. Dieses 2017 begründete Format widmet sich Aspekten der Forschungsprogrammatisierung des ZeHS und dient der internen und externen Kommunikation der Entwicklung der Arbeitsgegenstände des ZeHS und deren Einbindung in Systemzusammenhänge. Der Schwerpunkt der aktuellen Ausgabe liegt auf den für das ZeHS vorgesehenen zwanzig Forschungsgrößgeräten, die zusammen mit dem Gebäude des Zentrums zur Förderung empfohlen wurden. Es zeigt die Intentionen auf, welche die zukünftigen Nutzer damit verbinden. Vorgesehen sind weitere Ausgaben bereits während der Bauzeit des ZeHS. Für eine dauerhafte Etablierung wurde auf die Vergabe einer ISSN Wert gelegt (siehe Abbildung 3).

Bauliche Realisierung

Der Forschungsbau wird in den Jahren 2016 bis 2020 zentral auf dem Campus der TU BAF an der Winklerstraße errichtet. Die Gesamtkosten von 41,51 Mio. € teilen sich in Baukosten (28,67 Mio. €), Kosten für die Anschaffung von Großgeräten (9,75 Mio. €) und Kosten für die Erstausrüstung (3,09 Mio. €). Das Gebäude wird eine Gesamtfläche von 6.011 m² aufweisen, welche u. a. Büroräume, Laborflächen, Versuchshallen und einen Seminarraum umfasst. Die organisatorische Verantwortung für die Planung, Nutzung und den Betrieb des Forschungsbaus liegt beim Direktor und dem Vorstand des ZeHS. Der Forschungsbau schafft Platz für bis zu 145 wissenschaftliche und 33 nichtwissenschaftliche Mitarbeiter.

Baugeschehen

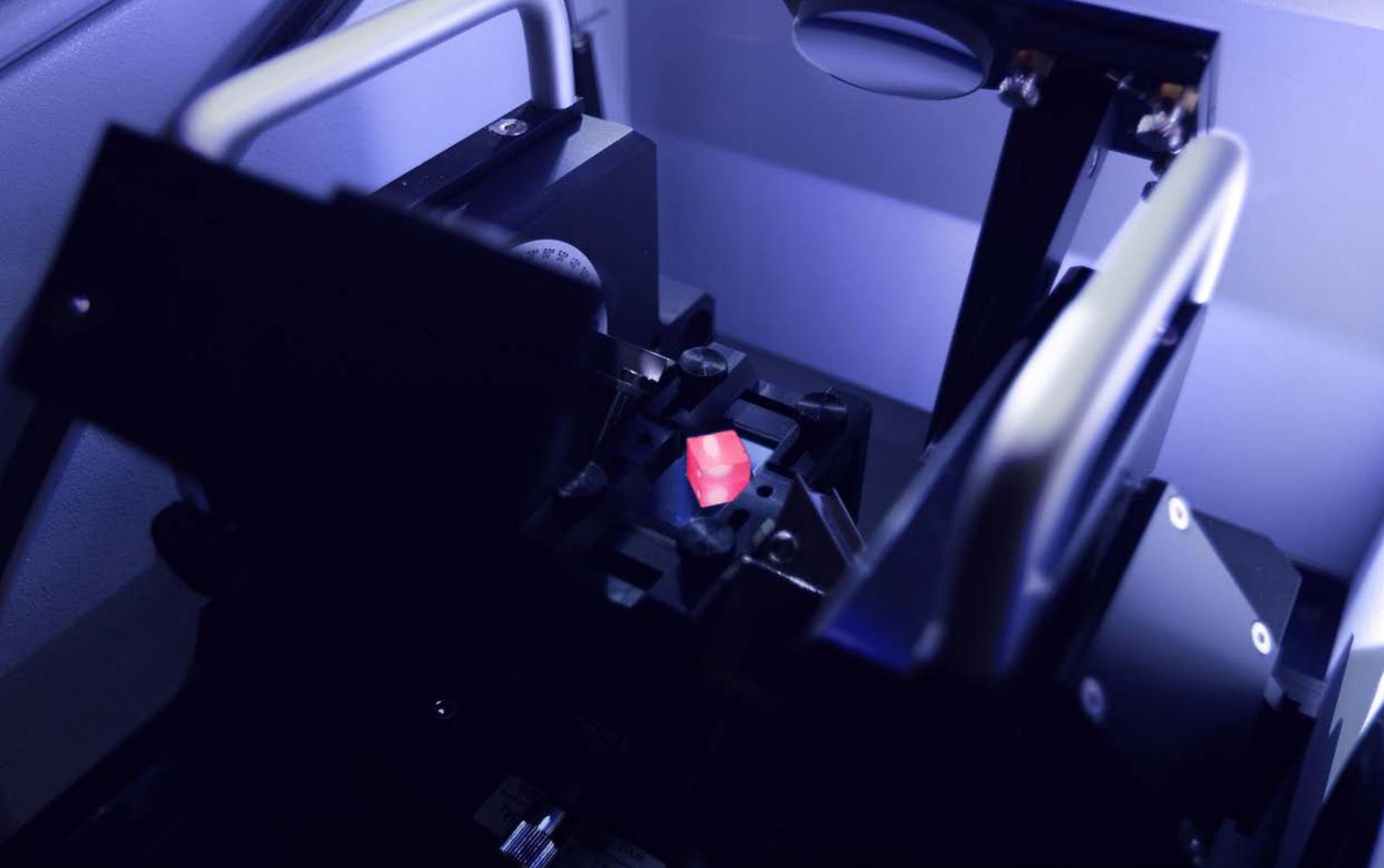
Mit einem symbolischen „Ersten Baggerbiss“ gab der damalige Finanzminister Prof. Dr. Georg Unland am 12. Mai 2017 den Startschuss für die vorbereitenden Infrastrukturbauarbeiten für die Neubauten des ZeHS sowie für das Hörsaalzentrum und die Universitätsbibliothek der TU BAF am Messeplatz in Freiberg. Im Jahr 2018 schritten der Bau und die Ausstattung des ZeHS planmäßig voran. So konnte bis zum Jahresende der Rohbau fertiggestellt werden (siehe Abbildungen 4 und 5). Auch die Feinplanung für den Innenbereich ist erfolgt. Verschiedene Aufträge wie etwa zur Ausstattung der Labore oder zur Beschaffung von Medientechnik wurden ausgeschrieben und vergeben. Bereits im Jahresverlauf 2019 soll der Bau weitestgehend fertiggestellt sein, so dass im Anschluss mit dem so genannten *Hook-up* (Maschinen- und Geräteanschlüsse) begonnen werden kann und so die Bedingungen für einen reibungslosen Einzug der Nutzer 2020 geschaffen sind. Für die vom Wissenschaftsrat zur Förderung empfohlenen zwanzig Forschungsgrößgeräte wurden fristgerecht Anträge bei der DFG zur Begutachtung eingereicht. Die Umsetzung des Vorhabens liegt insgesamt sehr gut im Zeitplan. Das IEP hat sich auch in diesem Jahr sehr stark für das ZeHS engagiert; Prof. Dirk C. Meyer fand als Direktor des ZeHS allzeit große Unterstützung durch seine Mitarbeiter.

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

Abbildung 5 (rechts): Impressionen vom Baufortschritt des ZeHS im Februar 2019



PROJEKTE



ENTWICKLUNG HOCHSENSITIVER WASSERSTOFFSENSORIK

HyProS ist Teil des HYPOS-Konsortiums, welches den Ausbau einer grünen Wasserstoffwirtschaft durch produktive Kooperation von Industrie und Wissenschaft zum Ziel hat. Innerhalb dieses Konsortiums widmet sich HyProS der Entwicklung hochsensitiver Wasserstoffsensoren, welche für die Sicherheit und das Qualitätsmanagement in vorhandenen Erdgasversorgungssystemen und -netzen vom Erzeuger bis zum Verbraucher in einer wasserstoffbasierten Energie-Wertschöpfungskette notwendig ist. Auf all diesen Ebenen der Wertschöpfungskette herrschen sehr unterschiedliche Umgebungsbedingungen. So müssen z. B. Wasserstoffkonzentrationen vom Prozentbereich bis in den ppm-Bereich kontrolliert werden, bei Drücken von Normaldruck bis 100 bar und Temperaturen von bis zu mehreren hundert Grad. Diese verschiedenen Anforderungsbereiche können nur durch verschiedene spezialisierte Sensortypen abgedeckt werden. Hierfür werden im Projekt fünf Sensortypen neu beziehungsweise weiterentwickelt.

Das Institut für Experimentelle Physik der TU Bergakademie Freiberg beteiligt sich mit dem Teilvorhaben „Aufklärung von festkörperphysikalischen und



festkörperchemischen Prozessen an fortgeschrittener Wasserstoffsensoren“ am Verbundprojekt. Hierfür stellt das Institut seine Expertisen im Bereich der Materialanalyse und Modifikation den Projektpartnern zur Verfügung, um Sensoren sowie Sensormaterialien unter produktions- und alterungsspezifischen Fragestellungen zu untersuchen und zu optimieren.

Im zweiten Projektjahr konzentrierten sich hierfür die Aktivitäten am IEP auf drei Schwerpunktbereiche: In der „klassischen“ Materialcharakterisierung erfolgten dabei zu beiden oben genannten thematischen Fragestellungen skalenübergreifende Arbeiten, von der atomaren Zusammensetzung, der Gefügestruktur bis zur makroskopischen Leitfähigkeit. Ein Beispiel hierfür ist die Analyse mittels der Infrarotspektroskopie, zur Detektion von

Wassereinschlüssen und Wasserstoffdefekten (siehe Titelbild und Abbildung).

Neben der Charakterisierung von Materialien wurde auch die Modifikation der Oberflächen mittels der Atomlagenabscheidung forciert. Die hierdurch hergestellten Schichten im Bereich von mehreren Nanometern sollen dem Schutz der Sensormaterialien gegenüber der aggressiven Umgebungsatmosphäre dienen, insbesondere der Verhinderung der ungewollten Einlagerung von Wasserstoff in das Material und der damit verbundenen Störung des Sensorsignals.

Des Weiteren konnte ein Messaufbau entwickelt bzw. modifiziert werden, an dem Alterungseffekte in Wasserstoffatmosphäre bei Temperaturen zwischen 20 °C und 800 °C untersucht werden können. Dieser wird gegenwärtig intensiv genutzt, um Sensoren und Sensorkomponenten auf den Einsatz in Erdgasversorgungssystemen und -netzen vorzubereiten.

Wir danken dem Bundesministerium für Bildung und Forschung für die Übernahme der Finanzierung des Projektes (Förderkennzeichen: 03ZZ07241) innerhalb der „Zwanzig-20-Partnerschaft für Innovation“, dem Projektträger Jülich für die Betreuung sowie allen Projektpartnern.

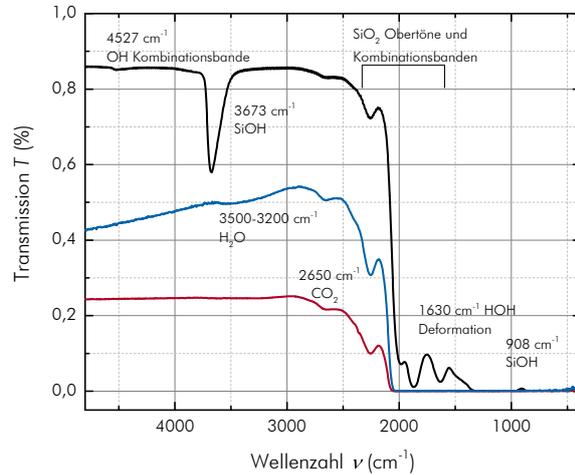
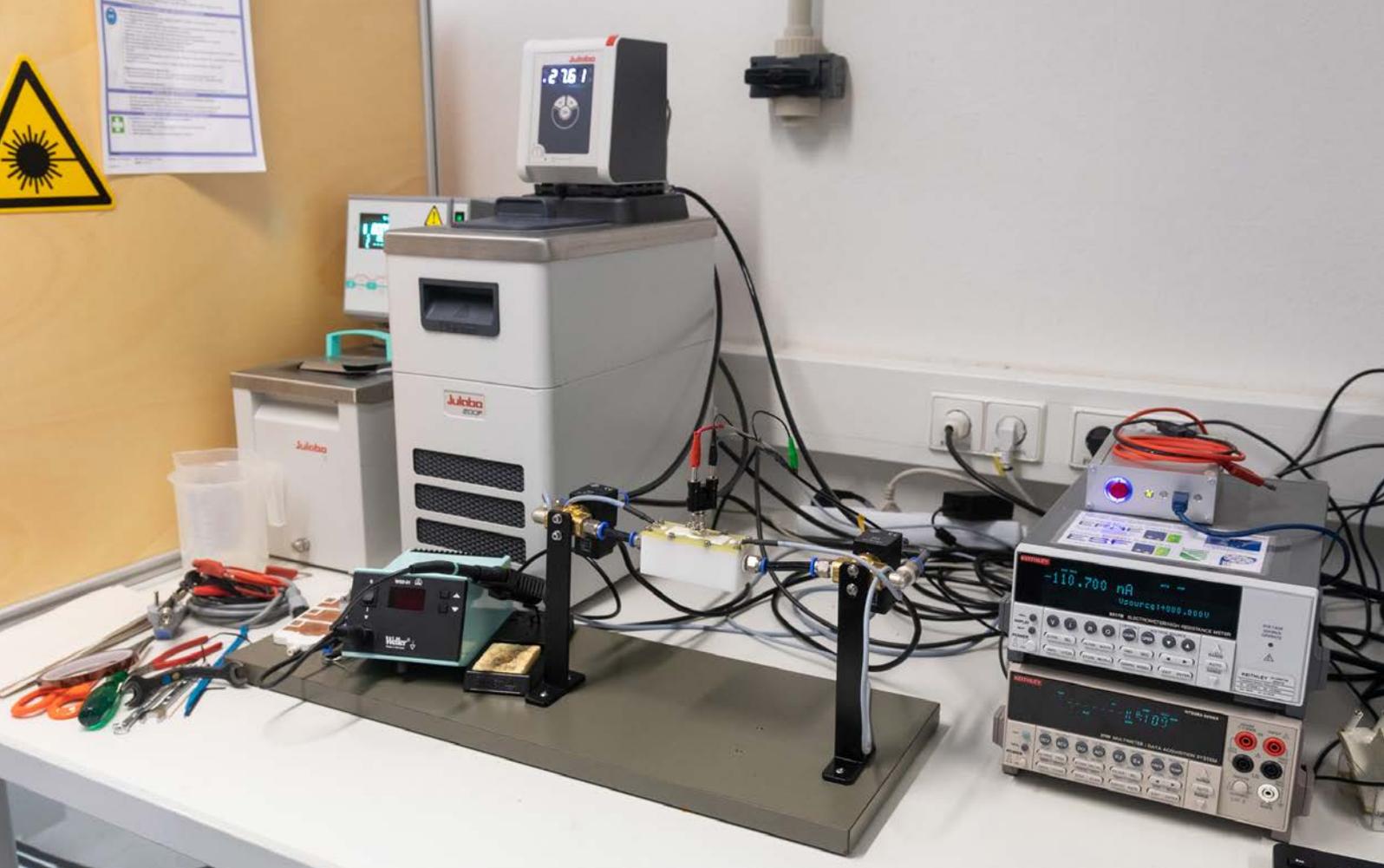


Abbildung: Spektren von drei repräsentativen Sensormaterialien mit ihren zugehörigen typischen Schwingungsbanden von Wasserstoffdefekten





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 kooperiert mit den Projekten „Entwicklung innovativer Materialsysteme für die bidirektionale elektrochemische Wasserstoff-Strom-Transformation“, welches am KSI Meinsberg bearbeitet wird, und „Katalysator und Reaktorentwicklung für die selektive chemische Synthese von Olefinen mit regenerativ erzeugten H_2 und CO_2 “, erforscht durch das Fraunhofer IKTS in Dresden. Trotz der thematischen Vielfalt stehen die Teilprojekte 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 Potenzial 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

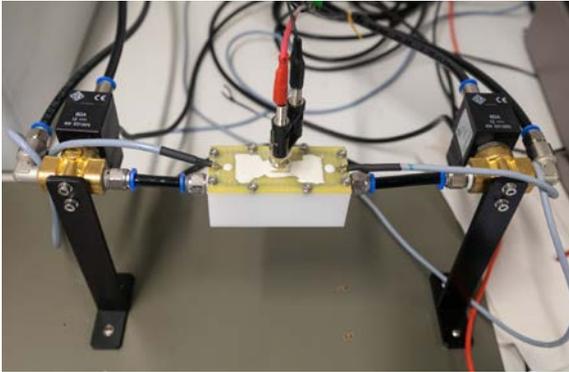


Abbildung 1: Aktuelles Setup des Demonstrators, siehe auch großes Bild links

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 auf die Industriekale gelegt.

Seit Beginn des Projekts wurde eine umfangreiche Literaturrecherche über pyroelektrischen Materialien und deren optimale und zugleich wirtschaftliche Kreisprozessführung für eine Restwärmenutzung angelegt. Außerdem wurde eine Kostenabschätzung der potenziell einsetzbaren Aktivmaterialien durchgeführt, wobei sich herausstellte, dass das in der Aktortechnik weit verbreitete Bleizirkonat-Titanat (PZT) der wirtschaftlich aussichtsreichste Kandidat ist. Im weiteren Verlauf wurde

ein Aufbau realisiert, welcher unterschiedlich temperiertes Wasser aus zwei Badthermostaten mit Hilfe von zwei 3-Wege-Ventilen abwechselnd zum Pyroelektrikum befördert (siehe Abbildung 1). Zentrales Element des Aufbaus bildeten erste Prototypen möglicher Restwärmeregeneratoren. Deren Verhalten wurde mit Hilfe des Programms Comsol (Finite-Elemente-Simulation) hinsichtlich Strömungsprofil des Wassers und den sich ergebenden Temperaturänderungen simuliert (siehe Abbildung 2). Dabei konnte eine gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment erzielt werden.

Zur Erhöhung der Leistungsabgabe ist es nötig einen möglichst schnellen Temperaturwechsel herbeizuführen. Aus den Simulationen und Experimenten ergab sich, dass dies im PZT am besten erreicht werden kann, wenn sich das Material direkt im Wasser befindet. Dafür bedarf es allerdings einer dünnen, elektrisch isolierenden Schicht, welche einen guten Wärmeübergang ermöglicht. Im aktuellen Design wurde mit wärmeleitfähigem Epoxidharz experimentiert, welcher eine Gesamtdicke von ca. 1 mm pro PZT-Platteneinheit erlaubt. Damit ist es möglich bis zu sieben solche Platteneinheiten in der nötigen Durchflusskammer zu verwenden (siehe Abbildung 3). Die Anzahl kann, ganz im Sinne einer skalierbaren Technik, noch auf mehr Platten ausgeweitet werden. Ob die theoretisch maximalen Energie- und Leistungsausbeuten von bis zu 2,7 J und 340 mW erreicht werden können, sollen die aktuellen Untersuchungen zeigen.

Im zweiten Teil des Projekts, der pyroelektrisch getriebenen Wasserstofferzeugung, wurde die Elektrolysezelle

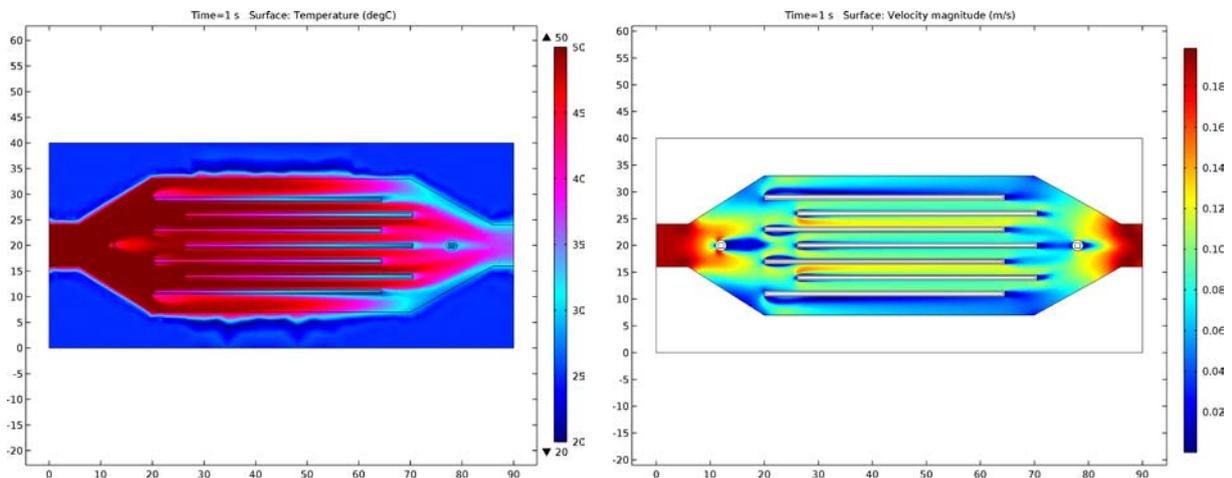


Abbildung 2: Simuliertes Temperaturprofil (links) und Strömungsprofil (rechts) im Demonstrator zu einem beliebigen Zeitpunkt



Abbildung 3: Realisiertes Demonstratorkonzept mit sechs isolierend beschichteten PZT-Platten

(siehe Abbildung 4) hinsichtlich der elektrischen Kontaktierung optimiert, um unter einem thermischen Gradienten, mittels optischer Heizung, Strom-Spannungskurven an der im wässrigen Medium befindlichen Kristalloberfläche aufnehmen zu können (siehe Abbildung 5). Wie zu erkennen ist, übersteigt das gemessene Potenzial in der Heiz- bzw. Abkühlphase das erforderliche Redoxpotenzial für die Wasserzersetzung. Damit wurde erstmals der Spaltungsprozess an einer pyroelektrischen Einkristall-Platte dargelegt und der Beweis angetreten, dass das geplante Konzept und Zelldesign den Anforderungen entspricht. Für die Quantifizierung der Daten hinsichtlich der Wasserstoffausbeute werden aus den Messdaten die transferierten Ladungsmengen bestimmt. Bisherige Datenanalyse ergeben beispielsweise für die pyroelektrische Keramik PZT eine H_2 -Bildungsrate von $0,12 \mu\text{mol/d}$. Die Ausbeuten an der Einkristall-Platte fallen entsprechend der Erwartung sehr gering aus. Jedoch stellen die Untersuchungen einen ersten Schritt hinsichtlich des Verständnisses der ablaufenden Redoxchemie dar und bieten ein hohes Potenzial zum Erschließen von wissenschaftlichem Neuland. Derzeit werden weitere pyroelektrische Einkristalle hinsichtlich ihres Potenzials untersucht.

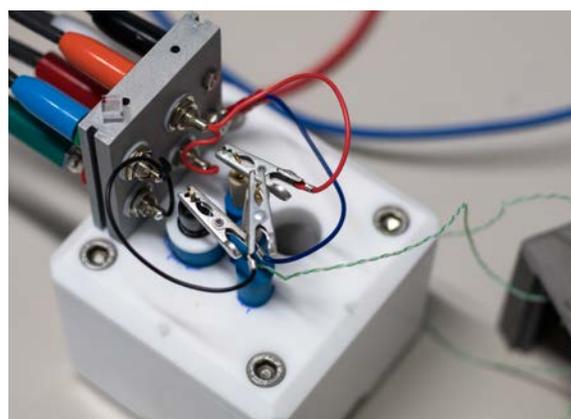


Abbildung 4: Elektrochemische Messzelle zum Nachweis der Pyroelektrolyse

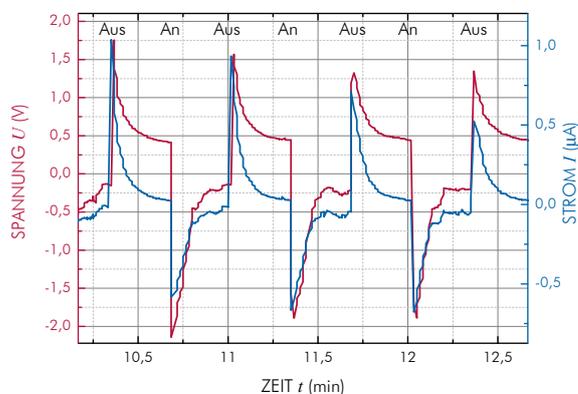


Abbildung 5: Strom-Spannungskurve an einer $LiTaO_3$ -Einkristall-Platte unter zyklischem Heizen und Abkühlen



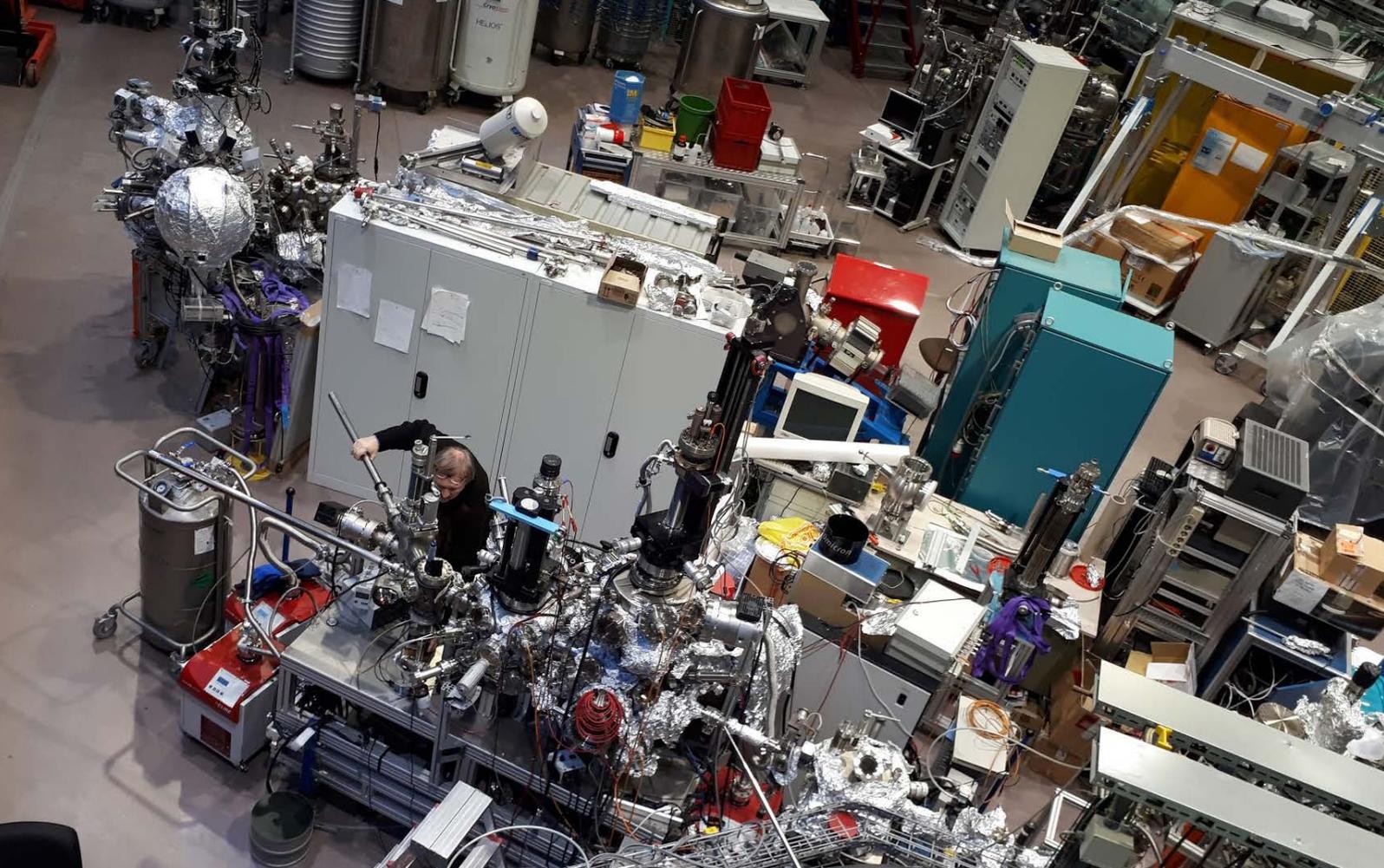
Europäische Union

Europa fördert Sachsen.

EFRE

Europäischer Fonds für regionale Entwicklung

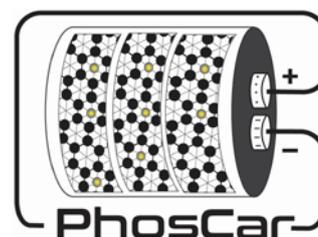




PHOSPHOR-DOTIERTE KOHLENSTOFF-NANORÖHREN FÜR NEUE ENERGIESPEICHER

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 Entwicklung und Charakterisierung neuer innovativer Energiespeichermaterialien. Diese Forschungsaktivitäten wurden 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 (Verbundprojekt SyNeSteSia) gefördert.

Das Projekt „PhosCar – Development of phosphorus-carbon nanotube materials for energy storage devices“, dass von Dr. Anastasia Vyalikh (IEP) und Professor Dr. Vladimir Fedin (NIIC-Institutsdirektor) koordiniert wird, konzentriert sich auf die Entwicklung neuartiger Nano hybridmaterialien aus Phosphor-Nanostrukturen. Diese Nanostrukturen werden innerhalb von



Kohlenstoff-Nanoröhren und an deren Oberfläche synthetisiert. Dabei wirken die Kohlenstoff-Nanoröhren als Nanoreaktoren während der Synthese und stabilisieren metastabile Spezies.

Die Herstellung der Phosphor-Nano hybridmaterialien erfolgt in Novosibirsk. Die Analyse der Nano hybridarchitektur, -struktur und -morphologie wurde im Rahmen des Projekts durch eine Kombination verschieden experimenteller Methoden in beiden Ländern durchgeführt. Die Ergebnisse der hochauflösenden Elektronenmikroskopie, Raman- und Röntgenphotoelektronenspektroskopie sowie magnetischen Resonanzspektroskopie weisen die erfolgreiche Verkapselung von Phosphor in den Kohlenstoff-Nanoröhren nach.

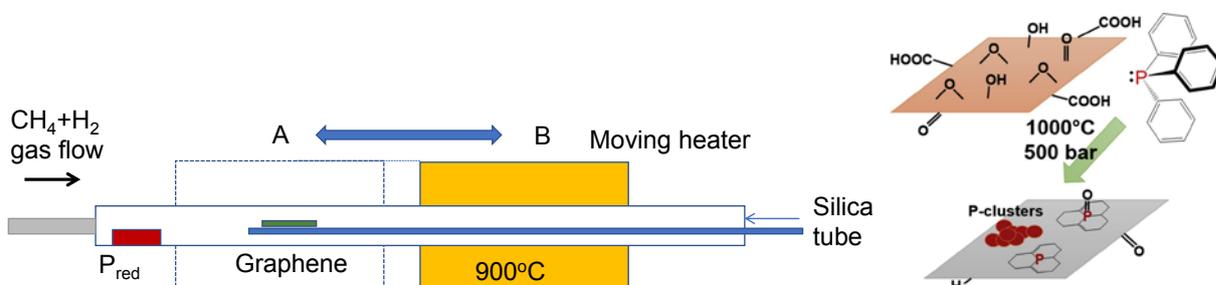


Abbildung 1: Schema des CVD-Reaktors für die Synthese von P-dotiertem Graphen (links). Schematische Darstellung von Phosphordotiertem Graphen nach Heißpressen von Graphitoxid bei $1000^{\circ}C$ und 500 bar in Anwesenheit von Triphenylphosphine (rechts). Nachdruck mit Genehmigung von © 2019 Elsevier B.V.

Des Weiteren wurden Phosphor-Graphen-Nanohybride durch Heißpressen hergestellt und von beiden Forschungsgruppen zuerst an der Russisch-Deutschen-Beamline am BESSY in Berlin mittels Röntgenspektroskopie (siehe Titelbild) und anschließend in Freiberg mittels NMR-Spektroskopie untersucht. Abbildung 1 zeigt das Schema des Reaktors für die Synthese von P-dotiertem Graphen bei hohem Druck und hohen Temperaturen. Im Laufe der Experimente wurden Phosphor-Nanocluster auf der Graphen-Oberfläche sowie im Zwischenraum der Graphenschichten entdeckt (siehe Abbildung 1 rechts). Außerdem zeigen die NMR-Ergebnisse, dass die Nanostrukturen aus weißem Phosphor (P_4 -Tetraeder) bestehen, der unter Standardvoraussetzungen (Luftkontakt) ein instabiles Phosphor-Allotrop ist. In der Nanohybridarchitektur bewirkt die erfolgreiche Verkapselung von Phosphor zwischen Graphenschichten einen Schutz vor

Oxidation. Die Forschungsergebnisse wurden im Journal *Synthetic Metals* im Jahr 2019 veröffentlicht.

Im Rahmen des Forschungsaustauschprogramms hat die Projektleiterin Anastasia Vyalikh die NIIC im September 2018 besucht. Innerhalb des zweiwöchigen Besuchs wurden mit den Projektpartnern vom NIIC nicht nur die Inhalte und Details zukünftiger gemeinsamer Experimente und Publikationen diskutiert, sondern auch Themen potenzieller internationaler Projektanträge.



Alexander von Humboldt
Stiftung/Foundation



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 I9494N). Das Verbundprojekt befindet sich unter der Leitung des Forschungsinstitutes für Leder und Kunststoffbahnen (FILK) Freiberg, mit dem Institut für Experimentelle Physik (IEP) und dem Fraunhofer Technologiezentrum für 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, thermo-plastisches 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

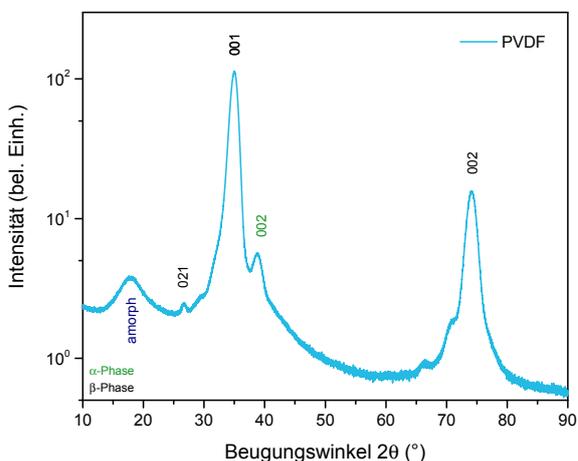


Abbildung 1: Röntgendiffraktogramm einer PVDF-Probe mit hohem β/α -Phasenverhältnis, d. h. intensiven Reflexen der β -Phase und schwachen Reflexen der α -Phase.

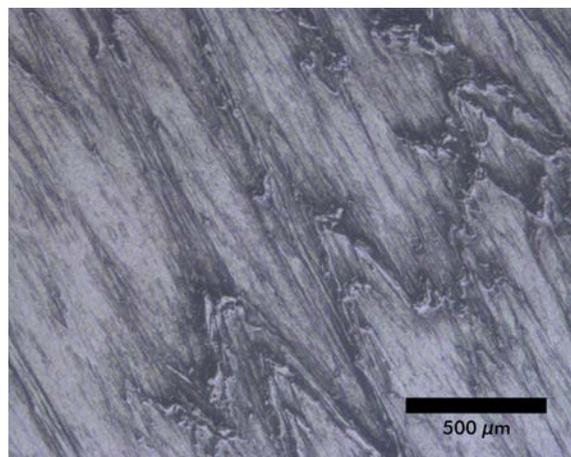


Abbildung 2: Oberflächenmorphologie einer PVDF-Folie im Lichtmikroskop

kristallinen Anteils der hergestellten Folienmaterialien verifiziert. Dies geschieht zum einen strukturell durch Röntgenbeugung (siehe Abbildung 1) und zum anderen elektrisch mithilfe der Sharp-Garn-Methode zur Bestimmung des pyroelektrischen Koeffizienten. Bisher wurden unterschiedliche Polymertypen mit unterschiedlichen Längen der PVDF-Polymerketten untersucht. Der Polymertyp mit mittlerer Kettenlänge lieferte dabei die größten β/α -Phasenverhältnisse und wird daher für die weiteren Versuche eingesetzt. Außerdem wurden die Herstellungsspezifika Ziehgeschwindigkeit, Breite des Reckspaltes und die Reckspalttemperatur optimiert (siehe Abbildung 2). Des Weiteren wurde ein Korona-Polungsaufbau zur Polarisierung der PVDF-Folien entwickelt und realisiert (siehe Abbildung 3). Dieser Aufbau wird stetig verbessert.

Seit Projektbeginn im März 2017 gab es etwa alle drei Monate Projekttreffen an den jeweiligen Forschungsstellen der beteiligten Partner, um die bisherigen Erkenntnisse zu diskutieren und das weitere Vorgehen zu besprechen.

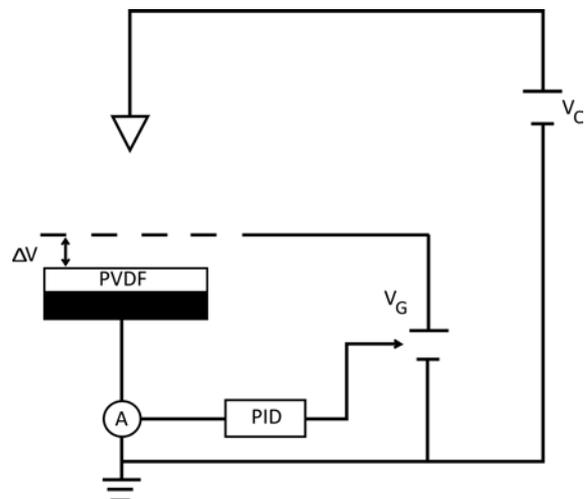
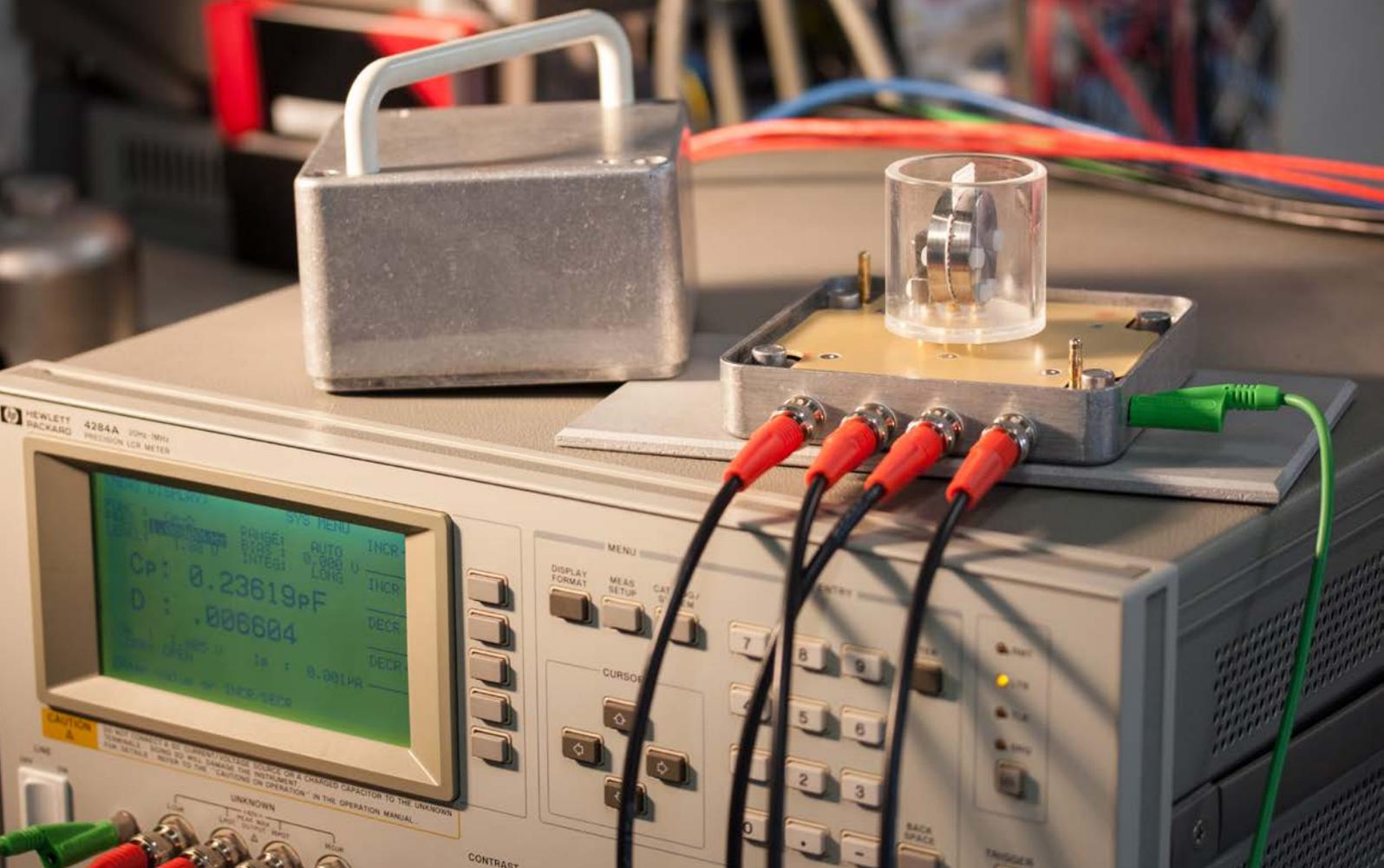


Abbildung 3: Schema der Korona-Polungsanlage mit Spitzenspannung V_C und Gitterspannung V_G , die über einen PID-Regler den Polungsstrom auf einen konstanten Wert einstellt.



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 Potenzial 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 piezoelektrische 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 $1200^\circ C$ 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 $1000^\circ C$ eingeschränkt. Einzig sogenannte PLS (Perovskite-like Layer Structures) sind nach bisherigen Erkenntnissen in der Lage, bis etwa $1300^\circ C$ 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.

Einer praktischen Anwendung der RCOBs muss die Aufklärung des möglichen Einflusses der thermischen Diskontinuitäten auf die elektromechanischen Eigenschaften vorausgehen. Während für die elektrische und pyroelektrische Grundcharakterisierung der RCOBs im Teilprojekt am IEP auf bewährte Messtechnik zurückgegriffen werden kann, werden für die dielektrischen Messungen neue Messplätze etabliert. Dabei wird für die hochgenaue Bestimmung der dielektrischen Tensoren bei Raumtemperatur die Substitutionsmethode eingesetzt (siehe Titelbild), um die Genauigkeit der in der Literatur bekannten Daten zu übertreffen. Für die Vermessung der Temperaturabhängigkeit der dielektrischen Tensoren wurde ein Messplatz für Temperaturen bis zu $1100^\circ C$ nach der Zwei-Terminal-Methode aufgebaut, der mit Messungen an Korund getestet wird (siehe Abbildung 2).

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

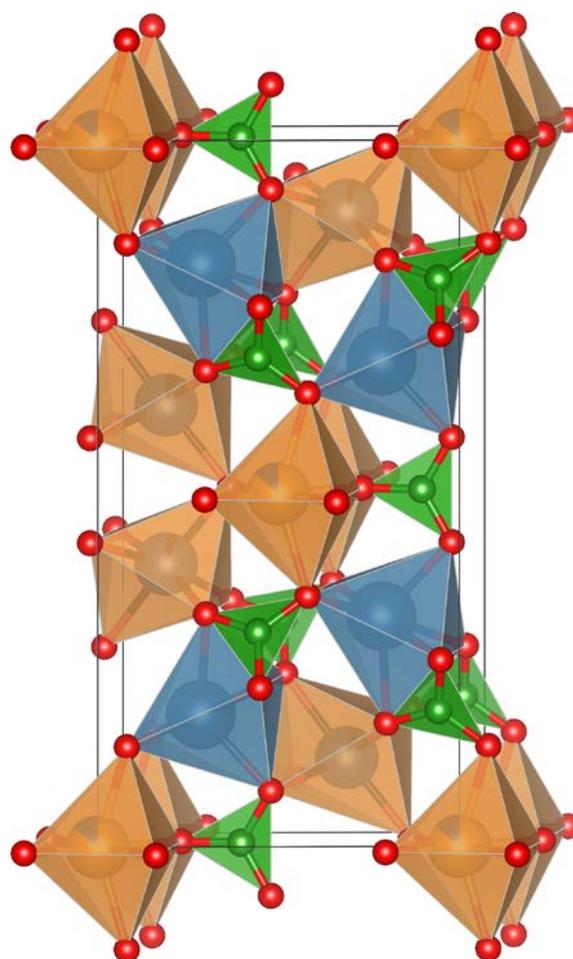


Abbildung 1: Strukturmodell von $RCa_2O(BO_3)_3$, in dem die b -Achse nach oben zeigt und die Atome in folgenden Farben dargestellt sind: R orange, Ca blau, O rot, B grün

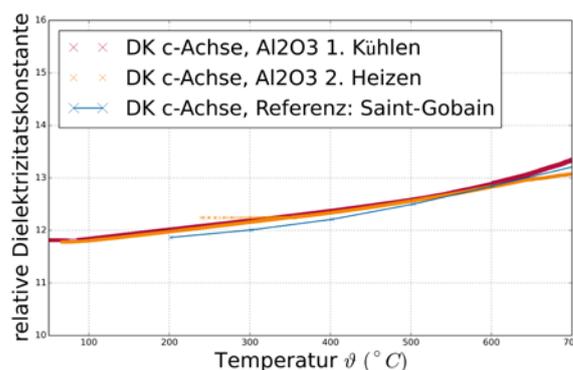
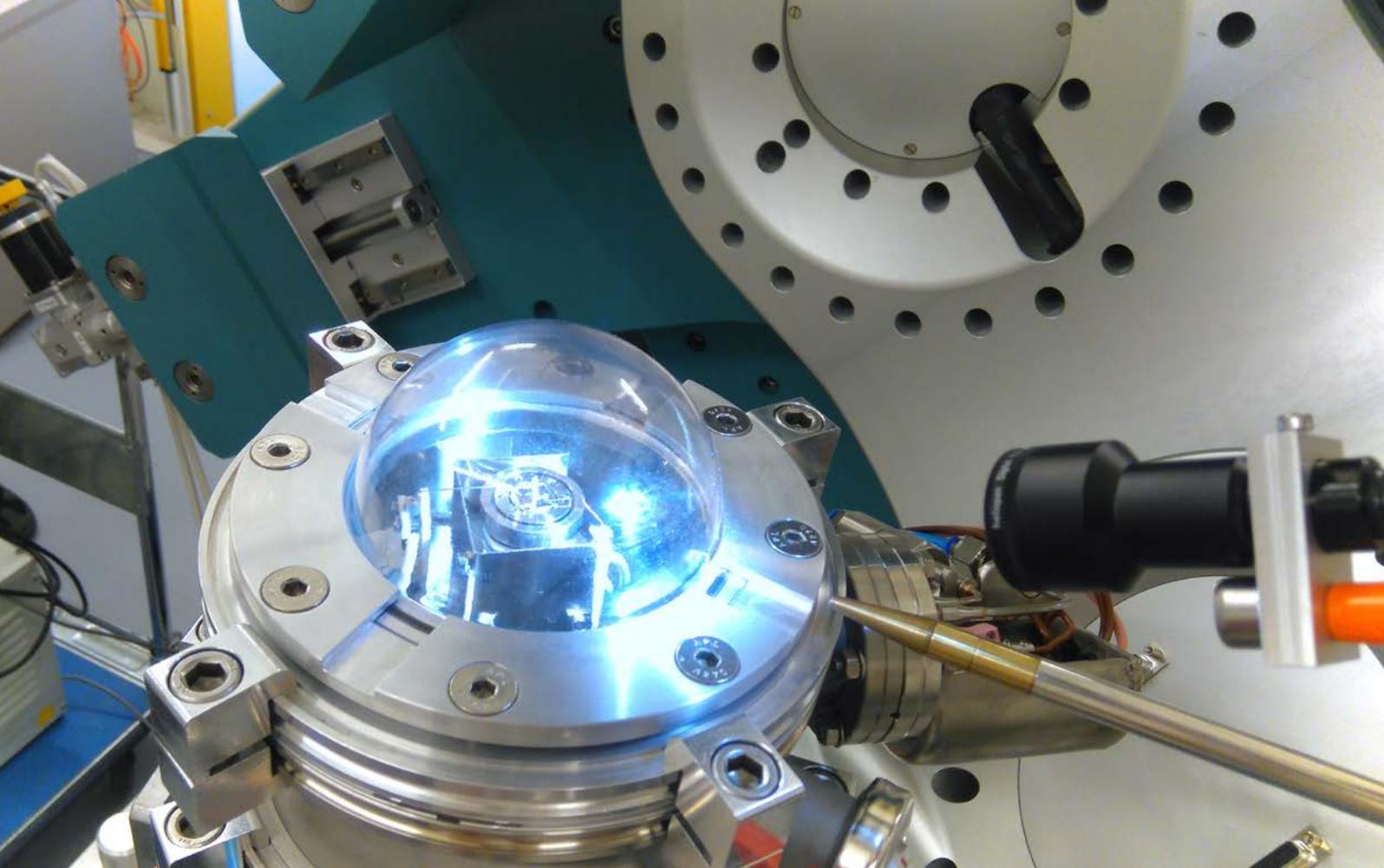


Abbildung 2: Temperaturabhängige Messungen der relativen Dielektrizitätskonstante von Korund in c -Richtung im Vergleich zu Literaturdaten.



RESONANTE RÖNTGENDIFFRAKTION UNTER OPTIMIERTER DESTRUKTIVER INTERFERENZ

Das Projekt „Resonante Röntgendiffraktion unter optimierter destruktiver Interferenz zur hochsensitiven Bestimmung phasenaufgelöster lagespezifischer Atomverrückungen in kristallinen Materialien“ (REXSuppress) wird seit Oktober 2016 am Institut für Experimentelle Physik von der Deutschen Forschungsgesellschaft (DFG) gefördert. Das Projekt basiert auf dem neuartigen Ansatz *Resonantly Suppressed Diffraction* (RSD), mit welchem kleinste Abweichungen der Atompositionen von der Idealstruktur mit Pikometer-Genauigkeit quantifiziert werden können.

Bei diesem Ansatz wird das lokale elektronische System einer atomaren Spezies resonant durch gezielt gewählte Wellenlängen des Röntgenspektrums angeregt. Unter bestimmten Bedingungen kann die Intensität eines Bragg-Reflexes in der Nähe der Absorptionskante durch destruktive Interferenz nahezu ausgelöscht werden. Dieses Intensitätsminimum ist hochsensitiv auf kleinste Abweichungen der atomaren Ordnung. Somit bietet die RSD-Methode einen innovativen Ansatz für die Charakterisierung von dynamischen Prozessen und Phasenumwandlungen, auch unter dem Einfluss externer Parameter wie Temperatur, mechanischen Spannungen, sowie

REXSUPPRESS

elektrischen oder magnetischen Feldern. Methodisch stellt RSD eine Kombination von Röntgenspektroskopie und -diffraktometrie auf Basis resonanter Effekte dar und ist in den Bereich des *Resonant Elastic X-Ray Scattering* (REXS) einzuordnen. Experimente zu dieser Methode können nur an Synchrotronstrahlungsquellen, wie dem Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) in Hamburg oder der *European Synchrotron Radiation Facility* (ESRF) in Grenoble durchgeführt werden.

Der innovative Ansatz eignet sich für Fragestellungen aus der chemischen Kristallographie, aber auch aus den Material-, Geo-, Bio- und Umweltwissenschaften. 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

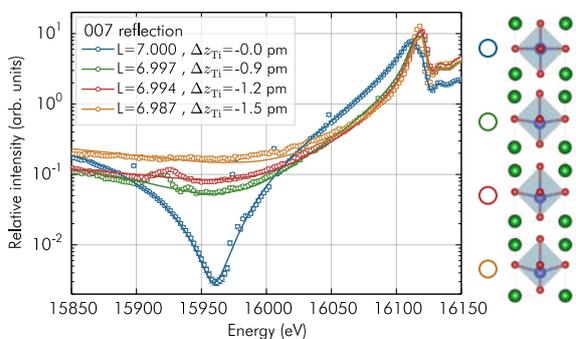


Abbildung 1: Intensitätsantwort des 007-Reflexes auf atomare Verrückungen induziert in SrTiO₃ durch Einwirkung eines elektrischen Feldes. Im Vergleich zum unbehandelten SrTiO₃ (blaue Kurve) bewirken die Verrückungen eine Verschiebung des Intensitätsminimums und einen deutlichen Anstieg der Intensität. Die Position des Titan-Atoms relativ zum unbehandelten SrTiO₃ ist in der Legende gegeben und rechts dargestellt (für eine bessere Visualisierung um den Faktor 10 verstärkt).

Defekte tragen maßgeblich zu einem besseren Verständnis der Materialien bei und können durch gezielte Modifikation (Defekt-Engineering) bestehende Eigenschaften optimieren oder neue hervorrufen. Somit hat die RSD-Methode auch im Bereich der Halbleiterindustrie, insbesondere bei der Datenspeicherung, sowie der elektrochemischen Energiespeicherung eine außerordentliche Bedeutung. Der Ansatz wurde von Dr. Carsten Richter im Zuge seiner Doktorarbeit entwickelt und erfolgreich zur strukturellen Aufklärung der migrationsinduzierten feldstabilisierten polaren (MFP) Phase in Strontiumtitanat

SrTiO₃ angewendet (siehe Abbildung 1). Hervorzuheben ist die Veröffentlichung dieser Ergebnisse im renommierten Wissenschaftsjournal *Nature Communications*.

Im vergangenen Jahr konnten im Zuge des Projekts sechs Messzeiten an Synchrotronstrahlungsquellen absolviert werden. Beispielsweise wurde an der Beamline ID01 am ESRF die Morphologie der MFP-Phase mittels *X-ray Diffraction Microscopy* (XDM) untersucht. An unterschiedlich präparierten Proben konnte somit die durch die Ausbildung der MFP-Phase verzerrte Kristallstruktur von SrTiO₃ an der Probenoberfläche und zwischen Elektroden charakterisiert werden (siehe Abbildung 2). Auch ortsaufgelöste RSD-Messungen wurden durchgeführt. Am DESY erfolgten Messungen zur strukturellen Charakterisierung von epitaktisch gewachsenen, ferroelektrischen SrTiO₃-Dünnschichten. Hierbei sollte mit RSD die Frage geklärt werden, wie sich die Struktur durch das epitaktische Wachstum ändert und somit ferroelektrische Eigenschaften entstehen. Durch das epitaktische Wachstum auf speziell gewähltem Substrat liegt das SrTiO₃-Gitter verzerrt vor und es kommt zu einer Erhöhung der Phasenübergangstemperatur von -240°C auf etwa -100°C , was dessen Untersuchung erleichtert. Die Projektmitglieder waren mit dieser Messzeit die ersten Nutzer der neuen Beamline P23.

Neben der weiteren Charakterisierung der MFP-Phase befasst sich REXSuppress auch mit dem Materialsystem Yttrium-Mangan-Oxid YMn₂O₅. Hierbei soll der Ursprung der Ferroelektrizität in einer Tieftemperaturphase

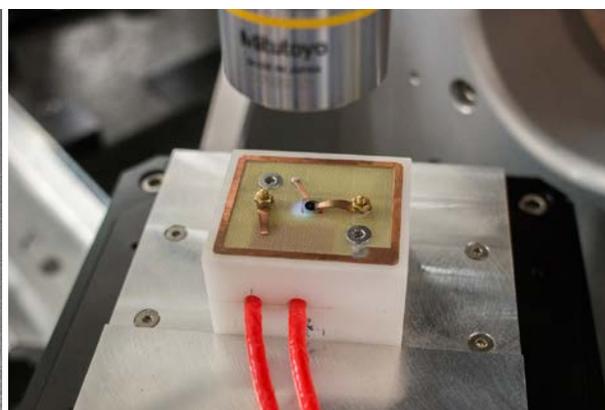
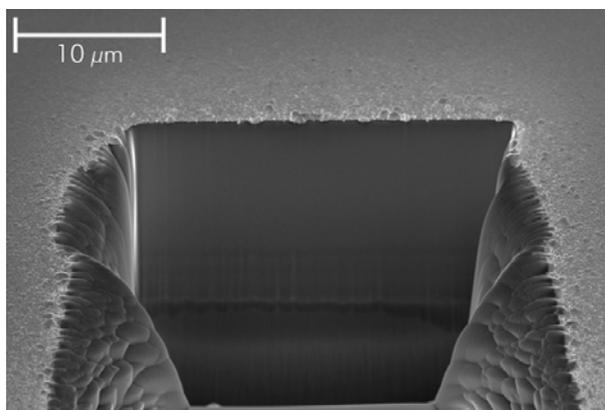


Abbildung 2: Links: Mit *Focussed Ion Beam* (FIB) strukturierter SrTiO₃-Kristall mit Platin-Elektrode, in den ein Graben präpariert wurde, um die Morphologie der MFP-Phase direkt im Querschnitt der Probe zu untersuchen. In mehreren Arbeitsschritten wurden eine möglichst glatte und strahlenschädenarme Fläche in den Kristall gearbeitet. Rechts: SrTiO₃-Kristall mit runder Platinelektrode auf einem Probenhalter während der Messzeit an der ID01-Beamline der ESRF.

von YMn_2O_5 untersucht werden. Für die Auswertung wurde ein Modell der strukturellen Änderungen während des Phasenübergangs erstellt. Die Probengeometrie sowie die notwendigen Wellenlängen der genutzten Röntgenstrahlen sorgten für herausfordernde experimentelle Bedingungen während der Messzeit am ESRF, wodurch eine zweite Messzeit zur Vervollständigung der Daten notwendig ist. Entsprechende Anträge wurden bereits eingereicht.

Neben der Datenprozessierung konnten bereits erste Projektergebnisse von den beiden Doktorandinnen Melanie Nentwich und Tina Weigel auf nationalen und internationalen Fachtagungen vorgestellt werden. Unter anderem wurden diese auf der Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) in Essen, dem *European Crystallographic Meeting* (ECM) in Oviedo, dem Treffen der Jungen Kristallographen in Aachen und der Deutschen Konferenz für Forschung mit Synchrotronstrahlung, Neutronen und Ionenstrahlung (SNI) in München präsentiert.

Chemical Crystallography Beamline P24 @ DESY Petra III

Neben der methodischen Weiterentwicklung engagiert sich die Arbeitsgruppe auch beim Aufbau der *Chemical Crystallography Beamline* im Rahmen mehrerer vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderter Verbundprojekte mit dem Schwerpunkt „Erforschung kondensierter Materie an Großgeräten“. Die Beamline P24 bildet eine der neuen Experimentierstationen des Speicherringes Petra III am DESY und startete 2018 den Nutzerbetrieb. Während der ersten Experimente konnte die Arbeitsgruppe erfolgreich die im Zuge des Verbundprojektes angeschaffte Anton-Paar-Kammer testen, und die strukturelle Instabilität von Selten-Erd-Oxoboraten $\text{RX}_2\text{Z}_2\text{O}(\text{BO}_3)_3$ ($R = \text{La, Y, Gd, Pr, Nd, Er}$, $X = Z = \text{Ca}$) bei hohen Temperaturen untersuchen (siehe Abbildung 3). Auch die speziell für die Beamline P24 konstruierte „Nordseekammer“ konnte hinsichtlich der Probenmanipulation mit elektrischen Feldern sowie Heizen und Kühlen der Proben erfolgreich getestet werden (siehe großes Bild auf S. 58). Im Weiteren soll die Nordseekammer in die Beamline-Software integriert und für die Durchführung von Messungen der pyroelektrischen

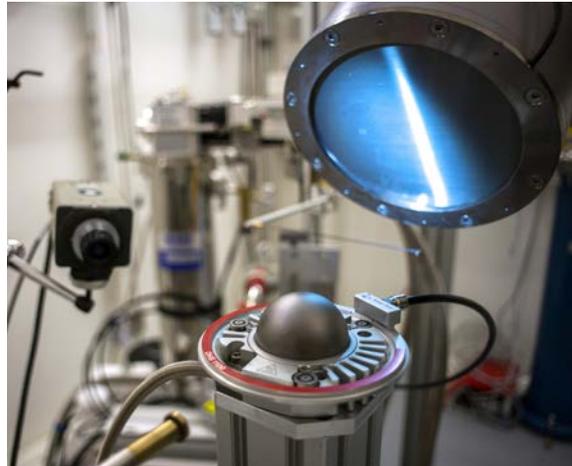


Abbildung 3: Aufnahme der Anton-Paar-Kammer während ihres ersten Einsatzes an der P24

Koeffizienten nach der Sharp-Garn-Methode programmiert werden.

Am Fortbestand des BMBF-Verbundprojektes wurde intensiv gearbeitet, im Herbst wurde ein Folgeantrag zum weiteren Aufbau der Beamline beim BMBF eingereicht. Forschungsschwerpunkte sind hierbei aus Freiburger Sicht die Untersuchung von Materialien der Energiewandlung und -speicherung. Das Engagement beim Aufbau der Beamline ist von außerordentlicher Bedeutung auch im Hinblick auf das geplante Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffumwandlung (ZeHS), bei dem Strukturänderungen unter extremen Temperaturen untersucht werden sollen.

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

DFG Deutsche
Forschungsgemeinschaft



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



ROLLE-ZU-ROLLE-FERTIGUNG NEUARTIGER POST-LITHIUM-ENERGIESPEICHER

Die weltweite Nachfrage nach Energiespeichern steigt mit dem Ausbau erneuerbarer Energien und der wachsenden Anzahl an Elektrofahrzeugen, mobilen Elektrogeräten und stationären Energiespeichern für das Stromnetz. Im Jahr 2016 wurden weltweit etwa 460 GWh wiederaufladbarer elektrochemischer Zellen produziert. Zurückliegend betrug das jährliche Wachstum des Gesamtmarktumsatzes 8 %, der Lithium-Markt wuchs sogar mit 23 %. Aktuell und mittelfristig wird neben der Blei-Säure-Technologie für den Einsatz als Starterbatterie die Lithium-Ionen-Technologie aufgrund ihres ausgereiften Stands den Markt der Sekundärspeicher dominieren.

Überwiegend große japanische (z. B. Panasonic) oder koreanische (z. B. LG Chem) Elektronikunternehmen treiben diese Technologie voran, seit einigen Jahren intensiv auch chinesische Unternehmen (z. B. CATL), was die exponentiell steigende Zahl von Patenten ebenso wiedergibt. Deutsche Unternehmen hingegen finden sich nicht unter den Top 10 der Patentanmelder. Um den zukünftigen Bedarf decken sowie den stetig steigenden Anforderungen gerecht werden zu können, sind neue Speichertechnologien und Materialsysteme mit höchsten



Energiedichten basierend auf gut verfügbaren Rohstoffen erforderlich. Das Institut für Experimentelle Physik entwickelt dafür im Verbundprojekt R2RBattery neuartige Post-Lithium-Energiespeicher.

Betrachtet man die Entwicklungen der letzten Jahre, so wird sich der globale Trend der Elektromobilität und der damit einhergehenden Lithium-Ionen-Batterien-Megafactories deutlich auf die Rohstoffnachfrage für wichtige Batterierohstoffe für die Energiespeicherung auswirken. Aktuell findet ein globales Wettrüsten zu Batterieprodukten und -technologien statt. So stieg die Anzahl von Lithium-Ionen-Batterie-Megafactories zwischen 2017 und 2019 von ca. 17 auf ca. 70, was einer Zunahme von 289 GWh auf 1.549 GWh entspricht, also etwa 22 Millionen reinen Elektrofahrzeugen. Diese

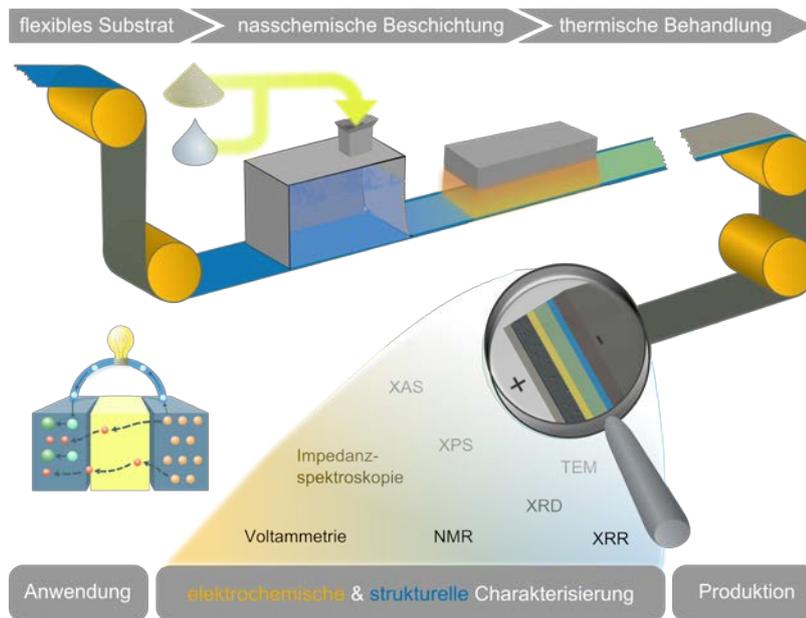


Abbildung 1: Schema zur Batterieherstellung innerhalb des Projekts R2RBattery im Rolle-zu-Rolle-Prozess inklusive der anschließenden Methoden zur Charakterisierung

Zahlen verdeutlichen die enorme Nachfrage nach Batterie-Rohstoffen wie Lithium, Kobalt, Nickel oder Graphit. Der Bedarf an Lithium wird um das 9-fache steigen, Kobalt um das 6-fache, Nickel um das 5-fache und Graphitanoden um das 9-fache. China hat den Rohstoffnachschub der meisten dieser Stoffe bereits abgesichert. Dies veranschaulicht, dass die Umsetzung der Energiewende, die elektrochemische Energiespeicher nicht nur für die Elektromobilität, sondern auch für stationäre Anwendungen vorsieht, allein mit der Lithium-Ionen-Technologie kaum möglich sein wird. 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 Hochvalente-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 Aluminium-Ionen-Batterien würde ein Auto potenziell 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 Kostensenkungspotenzial gegenüber kommerziellen Lithium-Systemen um ein Fünftel bezogen auf den Preis pro Kilowattstunde möglich. 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 Potenzial zu nutzen, da geeignete Kathoden- und Elektrolytmaterialien fehlten. Das Auffinden von Materialien mit hoher Aluminiumionen-Mobilität – einsetzbar als Festelektrolyte oder Interkalationskathoden – wird einen Innovationssprung im Bereich der wiederaufladbaren Hochvalente-Ionen-Batterien ermöglichen. Hier setzt das Verbundvorhaben „Maßgeschneiderte Materialsysteme



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

und Technologien für die Rolle-zu-Rolle-Fertigung elektrochemischer Energiespeicher auf flexiblen Trägern – Hochvalente Ionen für die Energiewende (R2RBattery)“ an.

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 potenzielle großtechnische Produktion zu erarbeiten. In dem vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderten Projekt arbeiten insgesamt vier Verbundpartner (Fraunhofer FEP Dresden, KSI Meinsberg, Vowalon GmbH Treuen) unter Leitung der TU Bergakademie Freiberg (Kordinator: Prof. 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 (FILK) Freiberg, die Frolyt Kondensatoren und Bauelemente GmbH Freiberg, die Rovak GmbH, die Gesellschaft zur Förderung von Medizin-, Bio- und Umwelttechnologien Radeberg und die Cinector 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. Insgesamt wurden mehr als 25 verschiedene Materialsysteme getestet, als Einkristall, als Pulver oder in Form von dünnen Schichten. Verschiedene Synthesemethoden und Dotierungen wurden ebenso in das Materialscreening

einbezogen. Hinsichtlich des Aufbaus eines elektrochemischen Elements nicht unerwartet, haben sich besondere Erfolge durch die Nutzung galvanischer Oxidationsprozesse ergeben. Neben der Einfachheit sind diese Prozesse durch die große Variabilität der Parameter der angestrebten Zielstrukturen gekennzeichnet.

In der Literatur werden nanostrukturierte Titanoxide beschrieben, die interessante elektrochemische Eigenschaften erwarten lassen. Zurückliegend wurden daher Versuche unternommen, auf Titan-Folien entsprechende Röhrenstrukturen zu erzeugen, um als Kathodenmaterial gegenüber einer Aluminiumanode eingesetzt werden zu können. So wurden Folien auf unterschiedliche Weise vorbehandelt, um möglichst homogene Oberflächen zu erzeugen. Bei der anschließenden anodischen Oxidation bildet sich eine Titanoxidschicht, die aus regelmäßigen, nach oben offenen Nanoröhren besteht (siehe Bilder auf S. 11). Durchmesser und Länge lassen sich durch Variieren der Parameter anpassen. Final folgt das thermische Nachbehandeln, um die gewünschte kristalline Phase einzustellen. Die so erzeugten Folien wurden als Elektrode diversen Einlagerungsversuchen mit unterschiedlichen Elektrolyten (organisch, ionisch) unterzogen und eine Aluminiumioneninterkalation beobachtet und theoretisch im Rahmen eines GRISC-Stipendiums begründet. Ein Übersichtsartikel wird alle Arbeiten zusammenfassen. Darüber hinaus wurde die Eignung dieser Nanostrukturen als Anodenmaterial auch für andere Ionen (Li, Na) getestet. Bestärkt durch die vielversprechenden Ergebnisse werden zukünftig ganze Zellen getestet.

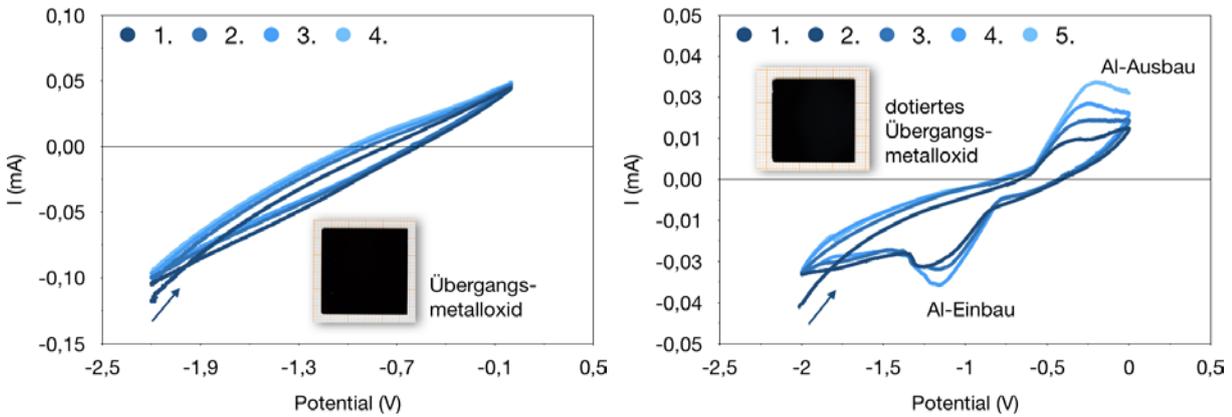


Abbildung 3: Zyklovoltammetriemessungen an mittels Magnetronsputtern abgeschiedenen positiven Elektroden für Aluminiumionen-Batterien. Für das reine Übergangsmetalloxid zeigen die Messungen keine Aluminiuminterkalation (links). Erst die Dotierung des Übergangsmetalloxids ermöglicht die Interkalation von Aluminiumionen (rechts).

Parallel wird in Kooperation mit dem FILK an der Realisierung einer Anlage (Rolle-zu-Rolle) zur kontinuierlichen Erzeugung von oxidierten Titanfolien, die einseitig über Nanoröhrenstrukturen verfügen, gearbeitet. So sollen industriennahe Fertigungsprozesse zur Bereitstellung des Elektrodenmaterials im Rahmen einer Zellfertigung entstehen (siehe Abbildung 1).

Das Blitzlampen-Kurzzeittempern (*Flash-Lamp-Annealing* – FLA) ist ein innovatives Verfahren zur thermischen Behandlung 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. In einer engen Kooperation mit Rovak wurde eine entsprechende Fertigungslinie aufgebaut, in der Anodenmaterialien hergestellt werden.

Der Partner Frolyt ist mit dem Wickeln von Testserien von Batteriesystemen im Rolle-zu-Rolle-Prozess befasst. In einer umfassenden Parametermatrix werden verschiedene Elektrodenkombinationen (auch die mittels FLA strukturierten Elektroden) und Separator-Trägermaterialien kombiniert, um die bestmöglichen Materialkombinationen zu identifizieren. Zusätzlich werden unterschiedliche Wickelgrößen erprobt, um die für die jeweiligen Einsatzzwecke nötigen Batteriegrößen realisieren zu können (siehe Abbildung 2). Erste Testzellen liefern bereits Kapazitäten von über 20 mAh und gute Zyklenfestigkeit.

Die Kompetenzen des KSI Meinsberg im Bereich keramischer Materialien kommen bei der Entwicklung von Pasten für die Elektrodenherstellung zum Einsatz. Außerdem wird in Zusammenarbeit mit dem IEP ein auf dem Tubandt-Prinzip beruhender Messplatz entwickelt, um Ionenleitfähigkeiten temperaturabhängig bestimmen zu können und dabei gleichzeitig die Ionenspezies zweifelsfrei abzuleiten.

Gemeinsam mit dem FEP sind zwei verschiedene Probensysteme als positive Elektroden bzw. als Festelektrolyte mit dem Magnetronsputterprozess hergestellt worden. Im Vordergrund der Aktivitäten standen die Phasenzusammensetzung, die Dotierung und die elektrochemischen Eigenschaften (Interkalation und Ionenleitung von Aluminiumionen). Dementsprechend konnten hinsichtlich Fremddotierung und Sputterparameter, wie Abscheidetemperatur und Sauerstoffpartialdruck, Prozessbedingungen gefunden werden, die die gezielte Herstellung von Batteriekomponenten ermöglichen (siehe Abbildung 3). In einem nächsten Schritt werden ganze Zellen präpariert und zyklisiert.

Um die Materialbasis zu erweitern wurde im Sinne eines systematischen Ansatzes in kristallographischen Datenbanken nach aluminiumhaltigen Schwefel- und Selenverbindungen gesucht, die potenziell Al^{3+} -Ionen-Leitfähigkeit ermöglichen könnten. Schwefel und Selen sind aufgrund ihres größeren atomaren Volumens und der daraus folgenden höheren Polarisierbarkeit besonders interessante Anionen, da sie die elektrostatischen Kräfte zu den sehr hoch geladenen Aluminiumionen abschwächen.



Abbildung 4: Ausschnitt aus der Animation zur Identifizierung und Präparation neuer Batteriematerialien

Dafür wurden, wie in den 2018 eingereichten Artikeln beschrieben, nach vorheriger Voronoi-Dirichlet-Partitionierung der gewählten Kristallstrukturen mithilfe von *Bond-Valence*-Lagenenergierechnungen Aktivierungsenergien für Al^{3+} -Leitfähigkeit abgeschätzt.

Die im Ergebnis der Arbeiten entstandenen Material- und Labormuster für hochvalente elektrochemische Speicher sowie die Forschungsergebnisse und -aktivitäten wurden auf der Hannover Messe unter dem Titel „Aluminium-Ionen Batterien – Post-Lithium Konzepte“ als Aussteller präsentiert (siehe S. 77). Im Rahmen der Öffentlichkeitsarbeit wurde ein Fachkolloquium zum Thema „Materialforschung im Kontext der Energiewende: Neue Batterien und die Abwärmenutzung von morgen“ veranstaltet (siehe S. 78). Zudem wurde in Zusammenarbeit mit der Cinector GmbH eine Animation (<https://youtu.be/yWYzANbLUQ>, siehe Abbildung 4) erstellt, die die Identifizierung und Präparation neuer Batteriematerialien veranschaulicht, den Zielen des

Projekts R2RBattery entsprechend. Ferner wurden die Forschungsaktivitäten zu elektrochemischen Energiespeichern auch im Rahmen der Sendung „Elektroland Sachsen“ des Nachrichtensenders n-tv einer breiten Öffentlichkeit kommuniziert. Tilmann Leisegang und Daniel Tittel vom FI Freiberg Institut für vernetzte Energieautarkie GmbH führten ein Gespräch zum Thema Lithium- und Post-Lithium-Batterien unter dem Titel „3 gegen 13 – Aluminium oder Lithium in der Batterie der Zukunft?“.

Im Jahr 2018 sind mehr als sieben Artikel veröffentlicht, ein Buch mit dem Titel „Electrochemical Storage Materials – From Crystallography to Manufacturing Technology“ im Wissenschaftsverlag De Gruyter herausgegeben, mehr als 13 Beiträge auf Konferenzen präsentiert und eine studentische Arbeit abgeschlossen worden.

Die Vernetzung sowohl mit Unternehmen (z. B. der Rovak GmbH) als auch mit internationalen Forschungsinstitutionen wurde durch gemeinsame Publikationen und Projektanträge verstetigt und ausgebaut, darunter mit der *National University of Singapore*, der *Texas A&M University* (College Station, USA), dem *Institut de Ciència de Materials de Barcelona* (Spanien) und der *Samara National Research University* (Russland).

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

Im Rahmen des vom Freistaat Sachsen geförderten F&E-Verbundprojekts SiNergy (Nr. 100256790) steht weiterhin die Herstellung von Si-Elektroden auf Metall- und Vlies-Basis für sekundäre Lithium-Ionen-Batterien (LIB) im Fokus. Verbundpartner sind das Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) und die 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). Im Unterauftrag ist die Firma Rovak GmbH in das Projekt integriert.

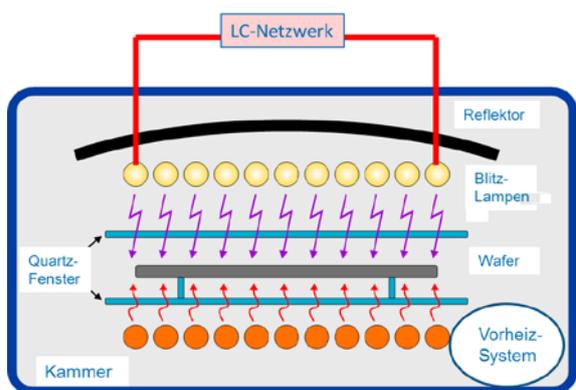
Si-Metallelektroden

Die Herstellungstechnologie ist einfach zu umreißen: Auf einer Metallfolie (z. B. Al oder Cu) wird mittels Sputtern eine Siliziumschicht definierter Dicke erzeugt. Anschließend erfolgt eine Wärmebehandlung mittels Blitzlampentempn (FLA – engl. *Flash Lamp Annealing*). Abbildung 1 zeigt den schematischen Aufbau eines FLA-Reaktors für die flächenhafte Behandlung von Wafern. Herzstück ist



das Xenon-Lampenfeld über dem Wafer, das durch ein induktiv-kapazitives Netzwerk (LC) elektrisch versorgt wird. Ein zweites Lampenfeld unter dem Wafer sorgt für eine moderate Vorheizung, um z. B. einem Bruch infolge thermischer Spannungen vorzubeugen. Zum Schutz vor Oxidation kann der gesamte Reaktorraum mit Inertgas gefüllt oder unter Vakuumbedingungen gebracht werden.

Beispielhaft für die Performance einer Si-Elektrode auf einer Cu-Metallfolie mittels FLA wurden elektrische Messungen zunächst in einer LIB-Knopfzelle mit einer 500 nm dicken Si-Elektrode durchgeführt. Die Abbildung 2 zeigt Lade-Entladezyklen vor bzw. nach der FLA-Behandlung. Die LIB weist hiernach bei 100 Zyklen eine ausgezeichnete Stabilität auf. Als weitere Metallfolie mit niedriger


Abbildung 1: Schematischer Aufbau eines FLA-Reaktors

Schmelztemperatur kann neben Cu z. B. auch Al genutzt werden. Ein mittels FLA nachbehandeltes Si-Cu-Einlagerungselektroden-Material (Wechselwirkungszeit ca. 1 ms) zeigt die in der Literatur für konventionelles Langzeittempern bei 400 °C (Ausheilzeit mehrere Tage) beschriebenen Si-Nano-Dendriten und eine Silizid-Phase Cu_xSi_y (siehe Abbildung 3). Es weist Strukturen mit einer Größe unter 10 nm auf, in denen die übliche und kritische Volumenänderung des Si und die damit einhergehende mögliche Materialdegradation infolge Einlagerung von Kationen nicht stattfindet. Hinzu kommt die erwähnte Silizid-Phase Cu_xSi_y , die nach einer ersten Einlagerung des Lithiums eine stabile Phase $Cu_xSi_yLi_z$ bildet, die als intermetallisches, reversibles Einlagerungselektroden-Material fungiert.

Die aktuell erreichbare Kapazität des Elektrodenmaterials beträgt für Lithium 0,16 mAh für einen 30 µm dicken Stapel (symmetrisch 10 µm Cu-Folie, 0,5 µm Si-Schicht, 10 µm Separator und 10 µm Gegenelektrode). Bei einer Knopfzellenfläche von 200 mm² (Elektrolyt auf Li-Salz-Basis, Separator Nafion) ergibt sich ein Gesamtvolumen von 6 mm³, was einer volumenbezogenen Kapazität von 0,026 mAh/mm³ entspricht.

Si-Vlieselektroden

Forschungen der vergangenen Jahre zeigten, dass textilibasierte Anoden das Problem der Volumenänderung von Si-Strukturen teilweise kompensieren können. Grund dafür sind vor allem die vom Material gegebene höhere Flexibilität und die zur Verfügung gestellten Freiräume. Zusätzlich sorgt die erhöhte innere Oberfläche für eine

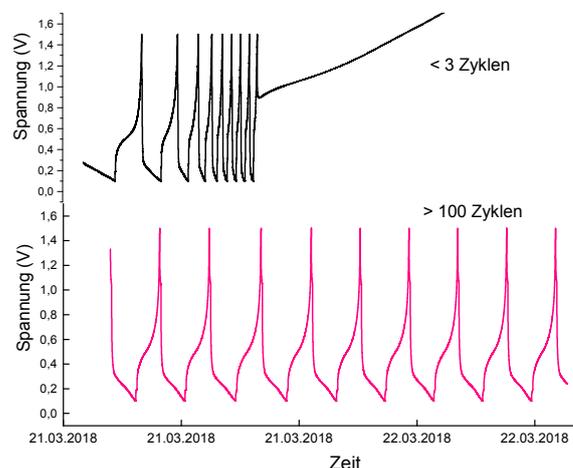


Abbildung 2: Zeitabhängige Darstellung der elektrischen Spannungsverläufe für Lade-/Entladezyklen bei konstantem Strom von 100 µA für eine 500 nm dicke Si-Einlagerungselektrode auf Cu ohne FLA-Behandlung (oben, schwarz) und mit FLA-Behandlung (unten, rot). Die Halbzelle ohne FLA zeigt eine hohe Kapazität von ca. 2 mAh, ist jedoch aufgrund von Zelledegradation nach zwei Entladezyklen unbrauchbar. Mit FLA ist eine wesentliche Verbesserung der Zyklenfestigkeit ablesbar (bisher über 100 Zyklen). Die Kapazität liegt im ersten Zyklus bei ca. 0,24 mAh und in den folgenden Zyklen bei ca. 0,15 mAh.

höhere Reaktivität mit der mobilen Spezies des Lithiumions. Die Grundmaterialien sind unter Umständen deutlich preisgünstiger als die sonst verwendeten hochreinen Metalle. Neben kohlenstoffbasierten Materialien wurden auch Materialien auf Zellulosebasis und biologische Polymere verwendet.

Abbildung 4 zeigt eine REM-Aufnahme eines gleichmäßig mit Si-Partikeln beladenen Vliesmaterials der Firma Norafin GmbH. Diese verfügen über einen leitfähigen Kontakt zur tragenden Struktur. Die Si-Partikel haben eine inhomogene Größenverteilung von einigen hundert Nanometern bis hin zu wenigen Mikrometern. Wie erwünscht existieren zwischen den Partikeln reichlich Freiräume zur Kompensation der Volumenänderung des Siliziums während der Einlagerung des Lithiums.

Die ersten Prototypen mit den Si-Vlieselektroden-Zellen lieferten nach dem Zusammenbau eine Spannung von 2,5 V bis 2,9 V. Sie sind im zusammengebauten Zustand bereits voll geladen. Um die Haltbarkeit des Si-haltigen Vlies-Gewebes zu testen, wurden die Zellen langsam entladen bei circa 0,1 mA. Optimierungen dieser Zellen werden derzeit intensiviert.

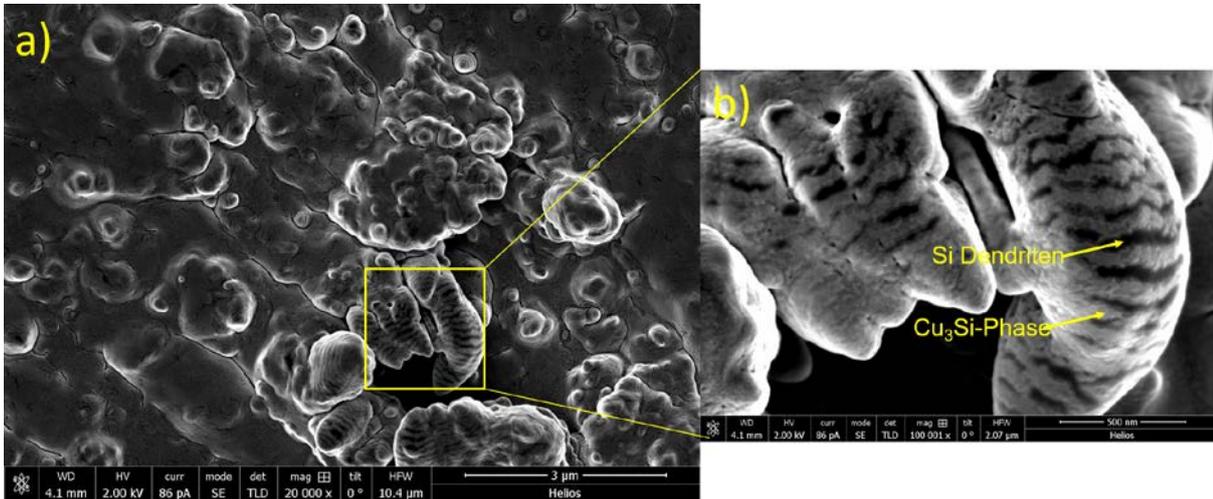


Abbildung 3: Rasterelektronenmikroskop-Aufnahme einer mittels FLA gefertigten Metall-Einlagerungselektrode auf Si-Basis auf einer 30 µm dünnen Cu-Folie (links). Die Vergrößerung (rechts) zeigt dendritische 3D-Nanostrukturen und eine Cu_3Si -Phase als intermetallisches, reversibles Einlagerungselektroden-Material.

HZDR-Innovationswettbewerb 2018

Unter dem Titel „Neuartige Si-Anodenmaterialien für Sekundärbatterien mit den höchsten Energiedichten“ beteiligte sich das SiNergy-Team am 2. HZDR-Innovationswettbewerb und gewann neben zwei weiteren Gewinnern unter insgesamt 18 Bewerbern den mit 1000 € dotierten Preis.

Ziel des HZDR-Innovationswettbewerbs war es, neue Ideen für Produkte und Dienstleistungen kennenzulernen, die auf vielversprechenden Forschungs- und Entwicklungsergebnissen, Know-how sowie der Infrastruktur des HZDR basieren. Neben Ideen für einen klassischen Technologietransfer in die Wirtschaft freuen wir uns auch über neue Ansatzpunkte für einen Wissenstransfer in die Gesellschaft. Die eingereichten Ideen von 18 Bewerberteamen wurden von einer Jury begutachtet. Ausgewählte Einreicher erhielten die Gelegenheit, ihre Ideen in einem eintägigen Workshop systematisch für eine Validierung vorzubereiten. Sie wurden dabei durch Experten als Mentoren unterstützt. Die Verleihung des Preises findet am 14.03.2019 statt.

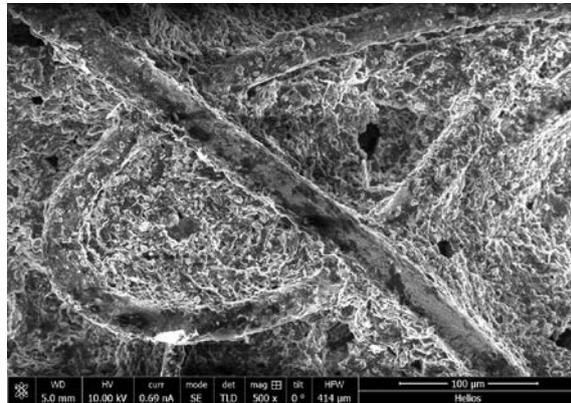


Abbildung 4: REM-Aufnahme eines mit Si-Partikeln beladenen Vliessubstrats





SYNCHROTRON- UND NEUTRONEN- BASIERTE UNTERSUCHUNGEN ZUR ENERGIESPEICHERUNG

Die Effizienz elektrochemischer Energiewandlung und -speicherung hat direkten Einfluss auf unsere Umweltbilanz und auf natürliche Ressourcen. Die entscheidenden Prozesse in Brennstoffzellen und Batterien finden an der Grenzfläche zwischen Elektrode und Elektrolyt statt. Da während der Nutzung dieser Prozesse metastabile und reaktive Zwischenzustände entstehen, die nur unter bestimmten elektrochemischen Potenzialen existieren können, ist die Fähigkeit zur Kontrolle und Identifikation von Prozessen an diesen Grenzflächen essentiell für eine effektive und ressourcenschonende Energiewirtschaft. Diese Zwischenzustände können nur *operando* untersucht werden, d.h. während des elektrochemischen Zyklirens. Diese Aussagen gelten auch für katalytische Prozesse, die ebenfalls eine immense Bedeutung für eine energieeffiziente Ressourcenbereitstellung besitzen.

Ziel des Teilprojekts des IEP im Projekt SYNESTESia ist es, elektrochemische Prozesse an Grenzflächen von Batteriematerialien und Katalysatoren *in situ* und *operando* mittels der *Nuclear Magnetic Resonance* (NMR) zu



charakterisieren und in Kombination mit anderen Methoden der Verbundpartner aufzuklären.

Im Rahmen der bisherigen Aktivitäten wurden dafür systemspezifische Präparationsverfahren und zwei experimentelle Aufbauten entwickelt. Diese ermöglichen *in situ* und *operando* Messungen an Lithium-Ionen-Batterien und katalytischen Oberflächen mittels der NMR. Des Weiteren konnte die Empfindlichkeit von NMR-Messungen, in Kooperation mit den Projektpartnern von der *Lomonosov Moscow State University* und dem *Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences*, durch Isotopen-Anreicherung in ausgewählten Materialien erhöht werden. So konnte zum einen die Messemphindlichkeit von Kohlenstoff in Kohlenstoffelektroden durch die Anreicherung mit dem

Isotop ^{13}C sowie die Messempfindlichkeit von Sauerstoff durch die Verwendung von ^{17}O in Lithium-Luft-Batterien erhöht werden. Außerdem wurde die Ionenmobilität von Festelektrolyten, u. a. auf NASICON-Basis, mittels NMR-Relaxationszeitmessungen bestimmt. Ergänzend zum experimentellen Schwerpunkt der NMR-Untersuchungen wurde im Rahmen der Vorcharakterisierung der neuartigen und vielversprechenden Batteriematerialien ein temperaturabhängiger Messplatz zur elektrochemischen Impedanzanalyse aufgebaut.

Die Diskussionen während des Projektverlaufs mit den Projektpartnern vom Fritz Haber-Institut der Max Planck-Gesellschaft und vom Max Planck-Institut für Chemische Energiekonversion haben ergeben, dass die *operando* NMR-Messtechnik insbesondere auch zur Aufklärung offener Fragestellungen zu elektrochemischen Vorgängen während katalytischer Reaktionen genutzt werden kann. Der entwickelte *Operando*-Messaufbau wurde deshalb so modifiziert, dass er auch im „Redox-Flow-Prinzip“ funktioniert (siehe Abbildung 1). Die Funktionstüchtigkeit des Messaufbaus wurde durch Validierungsexperimente, bei denen Kupfer aus einer Lösung als katalytische Oberfläche abgeschieden wurde, überprüft. Die erhaltenen Resultate (siehe Abbildung 2) stimmen gut mit den Ergebnissen überein, welche mit Photoelektronenspektroskopie vom CEC-Projektpartner für das gleiche System erhalten wurden. Die Projektergebnisse wurden bisher auf 16 Konferenzen präsentiert sowie in 15 Artikeln publiziert.

Für die Finanzierung danken wir dem Bundesministerium für Bildung und Forschung (Nr. 05KI4OFA).

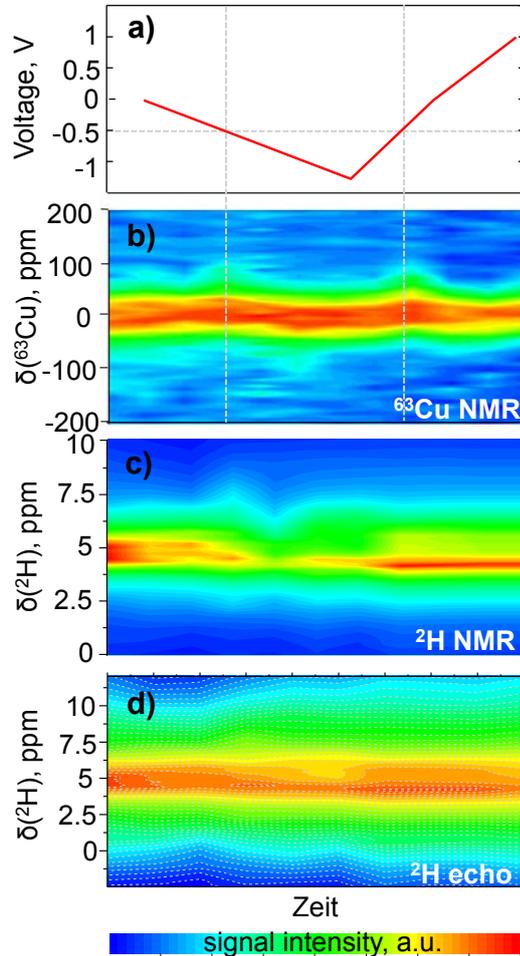


Abbildung 2: a) Zeitabhängige Spannungscharakteristik, b) ^{63}Cu -NMR-Spektren als Funktion der Zellspannung, c) und d) ^2H -NMR-Spektren mit zwei verschiedenen Pulssequenzen in Abhängigkeit von der Spannung

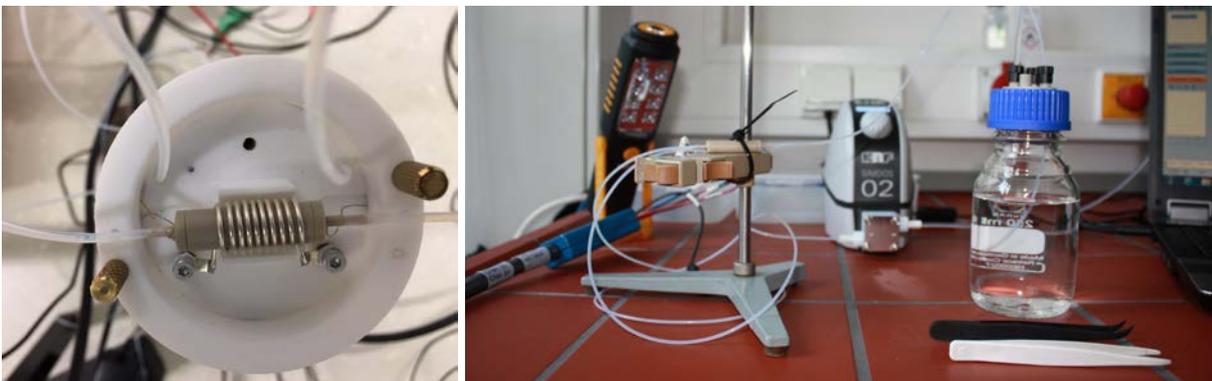
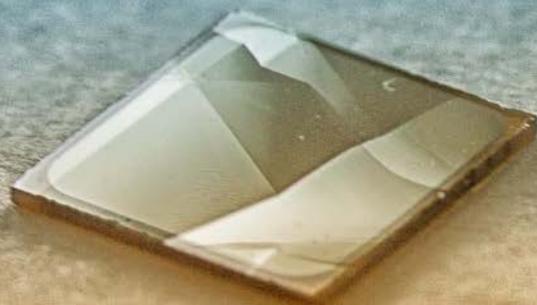


Abbildung 1: NMR-Messkopf mit integrierter Redox-Flow-Zelle (links), Testaufbau außerhalb des NMR-Spektrometers zur Überprüfung und Optimierung der Einstellungen und des Designs der Redox-Flow-Zelle (rechts)



WIDE-BANDGAP-HALBLEITER FÜR DIE OPTO- UND LEISTUNGSELEKTRONIK

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 (siehe Abbildung 1). 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).

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

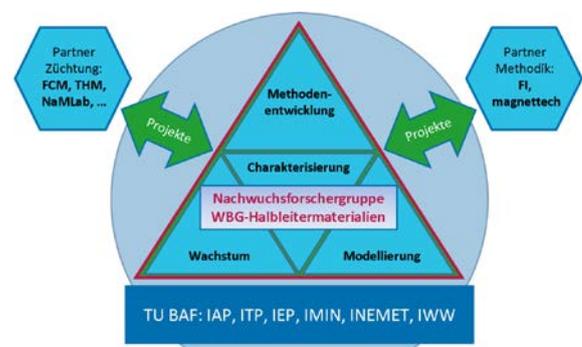


Abbildung 1: Struktur der institutsübergreifenden Nachwuchsforschergruppe HALMA. Die Gruppe arbeitet eng mit industriellen und außeruniversitären Forschungseinrichtungen zusammen.

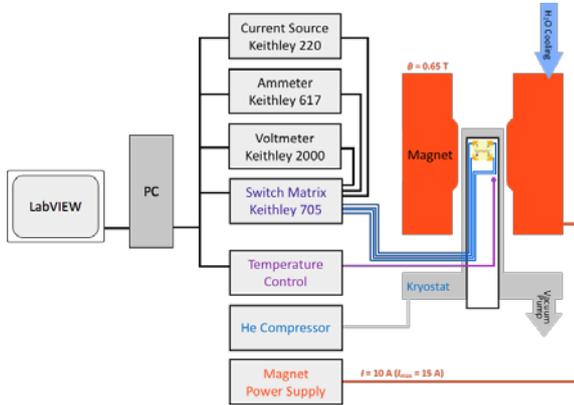


Abbildung 2: Schematischer Aufbau des Hall-Messplatzes

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 (INEMET) 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 Freiberger 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 Gitterfehlpassung teilweise kompensieren. Die daraus resultierenden Defekte können spätere Bauelemente beeinflussen und werden in der Gruppe deshalb charakterisiert. Die dafür verwendeten Methoden umfassen die Mikrostrukturaufklärung

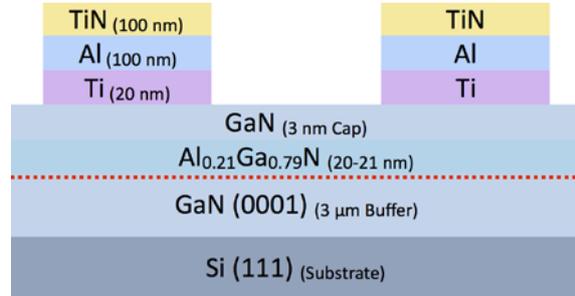


Abbildung 4: Schematischer AlGaIn/GaN-Schichtstapel als Substrat für Heterostruktur-Feldeffekt-Transistoren (HFET) mit ohmschem Ti/Al/TiN-Kontaktstapel. Die Lage des zweidimensionalen Elektronengases ist in rot angegeben.

(IWW), elektrische Charakterisierung (IEP und IAP) sowie optische Charakterisierung (IAP und ITP).

Valentin Garbe hat im Bereich der elektrischen Charakterisierung den Hall-Messplatz optimiert und seine dafür geschriebene Steuersoftware weiterentwickelt (siehe Abbildung 2). So konnten die temperaturabhängigen elektrischen Eigenschaften wie der spezifische Schichtwiderstand, die Ladungsträgerart, -konzentration und -mobilität von einer großen Anzahl Proben aus dem GaN-HTVPE-Prozess sowie GaAs-Proben vom Kooperationspartner FCM und Si-Proben untersucht werden. Für alle Halbleiterproben wurden auch die dafür notwendigen elektrischen Kontakte im Zentralen Reinraumlabor der TU Freiberg (ZRL) prozessiert (siehe Abbildung 3).

Darüber hinaus wurden HR-XRD-Messungen (engl. *High Resolution X-ray Diffraction*) an GaN/AlGaIn-Schichtstapeln für Heterostruktur-Feldeffekt-Transistoren (HFET) durchgeführt. Diese Hochleistungstransistoren zeichnen sich durch eine besonders hohe Ladungsträgermobilität in ihrer aktiven Schicht, dem zweidimensionalen Elektronengas (2DEG), aus. Das 2DEG ermöglicht sehr hohe Schaltgeschwindigkeiten im GHz-Bereich.

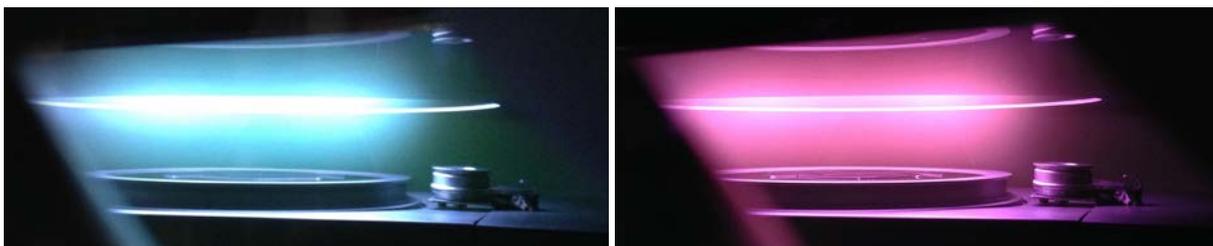


Abbildung 3: Plasma während der Sputterabscheidung von Ti (links) und Al (rechts) als Kontakte zu GaN und Si-Proben

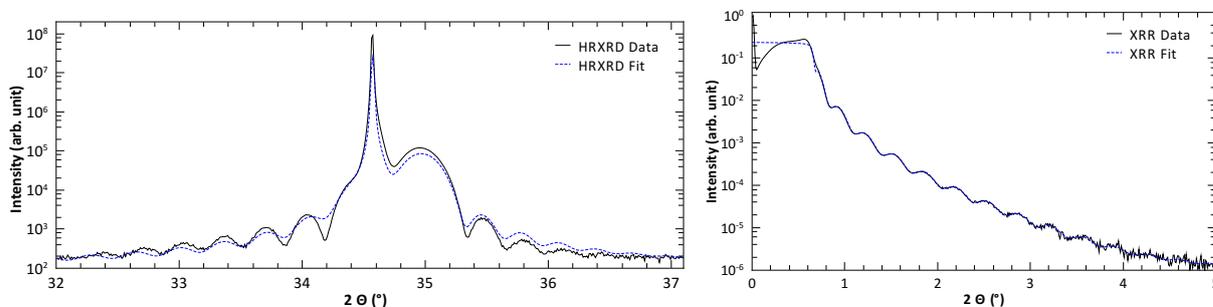


Abbildung 5: HR-XRD (links) und XRR-Messung (rechts) an HFET-Schichtstapeln zur Bestimmung der Schichtdicken und des Al-Gehaltes im AlGaIn

Mittels HR-XRD können der Aluminium-Gehalt der AlGaIn-Schicht sowie die Schichtdicken des Stapelaufbaus (siehe Abbildung 4) bestimmt und so das Substrat analysiert werden. Die Schichtdickenmessungen lassen sich alternativ mittels Röntgenreflektometrie (XRR) messen und somit unabhängig überprüfen (siehe Abbildung 5).

Mithilfe der Transferlängen-Methode (TLM) an einer zweidimensionalen elektrischen Teststruktur (siehe Abbildung 6) wird der spezifische Kontaktwiderstand ohmscher Kontakte zum 2DEG solcher AlGaIn/GaN-Heterostrukturen bestimmt. Gleichzeitig erhält man den Schichtwiderstand der aktiven 2DEG-Schicht.

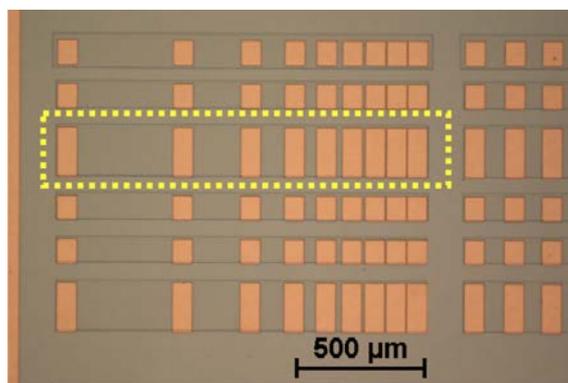


Abbildung 6: Zweidimensionale elektrische Teststruktur für die Transferlängen-Methode (TLM) zur Bestimmung des spezifischen Kontaktwiderstands sowie des Schichtwiderstandes im 2DEG





GASTWISSENSCHAFTLER AM IEP

In der Zeit vom 14. Mai bis 13. Juni 2018 besuchte Dr. Roman Eremin von der Nationalen Forschungsuniversität Samara (*Samara Center for Theoretical Materials Science – SCTMS*) das IEP im Rahmen eines Gastaufenthaltes, welcher durch das *German-Russian Interdisciplinary Science Center (GRISC)* gefördert wurde. Während seines Aufenthalts arbeitete er gemeinsam mit Falk Meutzner und Tilmann Leisegang an neuen Aluminium- und Natrium-Festelektrolyten (das Bild oben zeigt Falk Meutzner, Dr. Roman A. Eremin, Prof. Pavlo Solokha und Dr. Tilmann Leisegang). Hierbei wurde eine am SCTMS entwickelte Kombination von geometrisch-topologischer Analyse mit *First-Principles*-Berechnungen und maschinellen Lernansätzen für die Untersuchung kristalliner Materialien angewendet sowie die Ergebnisse für die Berechnung von Röntgenpulverdiffraktogrammen eingesetzt. Die Zusammenarbeit zielt auf die Kombination experimenteller und theoretischer Methoden zur Untersuchung von Materialien für elektrochemische Anwendungen.

Professor Pavlo Solokha von der Universität Genua besuchte das IEP in der Zeit vom 20. bis 25. Mai 2018, um die gemeinsamen Arbeiten an intermetallischen Verbindungen im Rahmen der Zusammenarbeit zwischen Genua, Samara und Freiberg zu diskutieren und experimentelle Ergebnisse auszuwerten. Ziel ist die gemeinsame Publikation einer neuen intermetallischen Phase sowie die Ausarbeitung eines gemeinsamen Forschungsvorhabens.

Im Rahmen des Projekts PhosCar besuchten Professor Alexander V. Okotrub und Dr. Liubov Bulusheva vom *Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry* das IEP im Zeitraum vom 30. April bis 15. Mai 2018, um gemeinsam mit Anastasia Vyalikh eine Messreise ans Berliner Synchrotron BESSY zu planen und durchzuführen. Hierbei standen spektroskopische Untersuchungen an neuen Graphitmaterialien für Lithium- und Natrium-Ion-Batterien im Fokus.



STIPENDIEN UND PREISE

Matthias Zschornak: **Erwin-Felix-Lewy-Bertaut-Preis der European Crystallographic Association (ECA) und der European Neutron Scattering Association (ENSA)** für seine „Beiträge zur Entwicklung der resonanten Röntgenbeugung, zu Strukturstudien von Perowskiten und zu umfangreichen elektronischen Berechnungen, die ein umfassendes physikalisches Verständnis der Eigenschaften wichtiger Materialien ermöglichen“, Preisverleihung durch Prof. Alessia Bacchi und Prof. Udo Heinemann (siehe Bild oben)

Charaf Cherkouk: **Zweiter Platz im HZDR-Innovationswettbewerb 2018**, Preisgeld von 1000 € für das SiNergy-Team: „Neuartige Si-Anodenmaterialien für Sekundärbatterien mit den höchsten Energiedichten“

Tina Weigel: **Young-Geomatenum-International des Deutschen Akademischen Austauschdienstes (DAAD) und der TU Bergakademie Freiberg** für einen sechswöchigen Aufenthalt an der ESRF zur Simulation und Auswertung von Spektren mit Hilfe des neuen Ansatzes *Resonant Suppressed Diffraction*

Christian Ludt: **Posterpreis Tagung 2018 der Jungen Kristallographen in Aachen** zur DFT-Modellierung von $\text{SrO}(\text{SrTiO}_3)_n$ Ruddlesden-Popper-Phasen

VERANSTALTUNGEN



GEMEINSCHAFTSSTAND „FORSCHUNG FÜR DIE ZUKUNFT“ AUF DER HANNOVER MESSE

Das IEP beteiligte sich 2018 erneut als Aussteller an der Industriemesse in Hannover, die vom 23. bis 27. April stattfand. Am Gemeinschaftsstand „Forschung für die Zukunft“ der Länder Sachsen, Sachsen-Anhalt und Thüringen wurden die Batterieforschungsaktivitäten des Instituts unter dem Titel „Aluminium-Ionen Batterien – Post-Lithium-Konzepte“ von Tilmann Leisegang und Robert Schmid präsentiert. Einerseits bekamen die Messebesucher so Einblicke in die schwerpunktmäßig am IEP bearbeiteten neuartigen Post-Lithium-Energiespeicherkonzepte und aktuelle Herausforderungen im Rohstoffbereich der elektrochemischen Speicher. Andererseits positionierte sich die Arbeitsgruppe so erneut im Post-Lithium-Batterie-Bereich und erhielt wertvolle Rückmeldungen anderer Akteure des Batteriesektors, die in die fortschreitende Entwicklung einfließen.

Neben fachlichen, wissenschaftlichen Fragen ging es auch um den Ausbau des Netzwerks und die Etablierung von Industriekontakten für künftige Kooperationen.

Während der fünf Tage wurden mehr als 60 Gespräche mit internationalen Forschenden, großen Herstellern, unterschiedlichsten Vertrieblern, potenziellen Anwendern und Interessenten aus vielen anderen Bereichen geführt. Neben Vertretern aus der Automobil- und Mobilfunkbranche lieferten insbesondere Spezialanwender aus den Bereichen erneuerbare Energien, stationäre Speicher, Sensor- & Messtechnik, Robotik und *Power tools* wertvolle Hinweise hinsichtlich der künftigen Bedarfe sowie sich abzeichnender Trends. Darüber hinaus wurden die regionale wissenschaftliche und fachliche Vernetzung am Gemeinschaftsstand der drei Bundesländer ausgebaut sowie Kooperationspartner für weitergehende FuE-Vorhaben identifiziert.

Neben dem IEP repräsentierte noch die Professur Additive Fertigung des Instituts für Maschinenelemente, Konstruktion und Fertigung (IMKF) die Bergakademie auf der mit mehr als 200 000 Besuchern und 5000 Ausstellern größten Investitionsgütermesse der Welt.



BHT FACHKOLLOQUIUM 6: MATERIALFORSCHUNG IM KONTEXT DER ENERGIEWENDE

Das Fachkolloquium zum Thema „Materialforschung im Kontext der Energiewende: Neue Batterien und die Abwärmenutzung von morgen“ wurde am 7. Juni 2018 gemeinsam vom Institut für Experimentelle Physik und der Sächsischen Akademie der Wissenschaften zu Leipzig (SAW) ausgerichtet. Es fand im Rahmen des 69. BHT – Freiburger Universitätsforum der TU Bergakademie Freiberg mit dem diesjährigen Motto „*future materials – safe resources supply – circular economy*“ statt.

„Energie geht nicht verloren, sondern kann nur von einer Form in eine andere Form umgewandelt werden.“ Mit diesem Zitat von Hermann von Helmholtz eröffnete Tilmann Leisegang das Kolloquium. Herrmann von Helmholtz fasste diese Erkenntnis bereits im Jahr 1847 in seinem Energieerhaltungssatz zusammen und stiftet heutzutage angesichts der Herausforderungen der Energiewende damit Optimismus. Durch den anhaltend hohen weltweiten Energiebedarf, die rasante Zunahme mobiler Endgeräte sowie den Ausbau der Elektromobilität und erneuerbarer Energieträger kommt der Energiewandlung

mit anschließender Energiespeicherung eine immer größer werdende Bedeutung zu. Diese sollte möglichst effizient und verlustarm in allen technologischen Bereichen, von der Gewinnung von Rohstoffen, der Herstellung von Materialien und Komponenten bis hin zu daraus entwickelten Anwendungen erfolgen.

Die Materialforschung muss diese Anforderungen an neue Materialien und Materialkonzepte im Energiebereich zu überführen versuchen. Insbesondere im Bereich elektrochemischer Energiespeicher, also den Batterien, sind zukünftig Lösungen mit zusätzlich höchsten Energiedichten, verbesserter Sicherheit und Ressourcen effizient nutzenden Materialkonzepten notwendig, um den prognostizierten hohen Bedarf decken zu können. So ist beispielsweise neben dem bisher eingesetzten Lithium auch Kobalt ein immer teurer werdender Rohstoff. Neue, sogenannte Post-Lithium-Energiespeicher sollten allen diesen Punkten Rechnung tragen.

Diese Themen sowie aktuelle Forschungsaktivitäten zu neuen Energiespeicherkonzepten und die Vorstellung

von Möglichkeiten zur Identifizierung, Bewertung, Entwicklung und Charakterisierung geeigneter Materialien für Batteriekomponenten standen im Fokus des ersten Teils des Kolloquiums. Prof. Rudolf Holze (TU Chemnitz und Mitglied der SAW) begann mit dem Hauptvortrag, in dem er die Beiträge der Elektrochemie zu einer sich wandelnden Energielandschaft diskutierte. Neben Mitgliedern der Arbeitsgruppe präsentierte ein weiterer Gast, Dr. Roman Eremin (*Samara National Research University*), wie neue kristalline Materialien für elektrochemische Anwendungen identifiziert werden können.

Den Mittelpunkt des zweiten Teils des Kolloquiums bildeten Materialien, welche dazu eingesetzt werden können, bisher in Form von Niedertemperaturabwärme verlorene Energie nutzbar zu machen. Niedertemperaturabwärme mit Temperaturen unter $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ fällt in großen Mengen in Industrie und Alltag an. Sogenannte pyroelektrische Materialien können diese Energieform nutzbar machen, um beispielsweise Wasserstoff oder elektrischen Strom zu erzeugen. Mit diesen Themen eröffnete Hartmut Stöcker den Nachmittag. Die beiden Gäste Prof. Bernd Ploss (Ernst-Abbe-Hochschule Jena) und Dr. Gunnar Suchanek (TU Dresden) berichteten anschließend über neue Entwicklungen im Bereich der Pyroelektrika und Elektrokaloreik. Abgerundet wurde der Nachmittag durch weitere Vorträge zu wissenschaftlichen Arbeiten der Arbeitsgruppe sowie zum Stand des Zentrums für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung.

Damit widmete sich das Kolloquium zwei wichtigen Herausforderungen der Energiewende, der Speicherung elektrischen Stroms und der Niedertemperaturabwärmennutzung. In den insgesamt 14 Vorträgen wurde ausdrücklich Augenmerk auf eine Vortragsweise, die dem breitgefächerten Teilnehmerkreis in verständlicher Sprache die aktuelle Forschung näher brachte, Wert gelegt.

Ziel des BHT ist es, einen Einblick in die jüngsten Erkenntnisse aus Forschung und Entwicklung zu geben. Interessierte aus Wissenschaft, Wirtschaft und Gesellschaft werden dazu eingeladen, sich am Dialog zu beteiligen und ein vielfältiges und themenübergreifendes Programm zu erleben, bei dem wichtige Zukunftsfragen diskutiert werden. Nähere Informationen zum BHT selbst sowie Rückblicke sind auf der zugehörigen Internetseite <https://tu-freiberg.de/bht> zu finden.



LEHRE



CAMPUSTAG 2018

Reger Betrieb herrschte anlässlich des CampusTages am 11.01.2018 auch in den physikalischen Instituten. Die Wissenschaftler stellten die Studienmöglichkeiten in den Naturwissenschaften in spannenden Vorträgen, Experimenten und Laborführungen vor.





ESF-FÖRDERUNG DER DIDAKTIK STEIGERT STUDENTISCHE LEISTUNG BEI PHYSIKKURSEN

Das seit Anfang 2017 laufende und durch den Europäischen Sozialfonds geförderte Projekt „Ausgleich unterschiedlicher fachlicher und nicht-fachlicher Qualifikationen in der Studieneingangsphase“ (Antragsnummer I00298803) zeigte im Sommersemester 2018 noch einmal eine positive Bilanz. Das Projekt, welches im Jahresbericht 2017 ausführlicher beschrieben wurde, sieht die Reduzierung der Studienabbrecherzahlen im ersten Studienjahr vor. Dieses Ziel soll erreicht werden durch die Implementierung verschiedener didaktischer Maßnahmen wie eine verstärkte Studentenbetreuung in Tutorien und Zusatzübungen, die Einbindung eines Onlinekurses über Testate, die Implementierung eines naturwissenschaftlichen Vorbereitungskurses sowie die didaktische Weiterbildung des Lehrpersonals.

Der Vorbereitungskurs Physik, der für Erstsemester im Rahmen der Einführungstage an der TU BAF angeboten wird, wurde von einem Tag im Jahr 2017 auf zwei Tage im Jahr 2018 erweitert. Dies folgte dem klaren Wunsch der Studenten, neben den Grundlagen wie dem Umrechnen von Einheiten bei manchen Themen wie Kinematik, Dynamik sowie Kreisbewegung tiefer in

die Materie einzudringen. Der Vorkurs begrüßte ca. 190 Studenten und wurde sehr positiv bewertet. Außerdem wurden die Vorträge aufgezeichnet, so dass sie 2019 mit Hilfe von didaktischen Software-Tools wie H5P Teil eines gemischten Onlineangebots mit Videos, Aufgaben, Fragen und Folien werden können. Die Studenten regten zudem an, den Vorkurs Physik nach dem Vorkurs Mathematik abzuhalten. Das konnten wir in Absprache mit den weiteren Beteiligten für 2019 durchsetzen. Nicht zuletzt diente der Vorkurs einer ersten Kennenlernrunde, da die Erstis sich an diesem Tag zum ersten Mal begegneten und noch nicht wussten, wer alles dasselbe studiert wie sie.

Für die im Sommersemester stattfindende Veranstaltung „Physik für Naturwissenschaftler II“ wurde nach dem Erfolgsmodell der „Physik für Naturwissenschaftler I“ auch ein Onlinekurs auf die Beine gestellt. Dieser vorerst einfache Kurs bietet Erklärungen und Beispiele, listet wichtigste Formeln auf und weist auf bestimmte Literaturstellen hin, so dass sich die Studenten im Vorfeld der Übung vorbereiten können. Zu Beginn der Übung wurde ein Antestat geschrieben, welches auf den Inhalten des Onlinekurses basierte. Durch die Vergabe von Zusatzpunkten für die

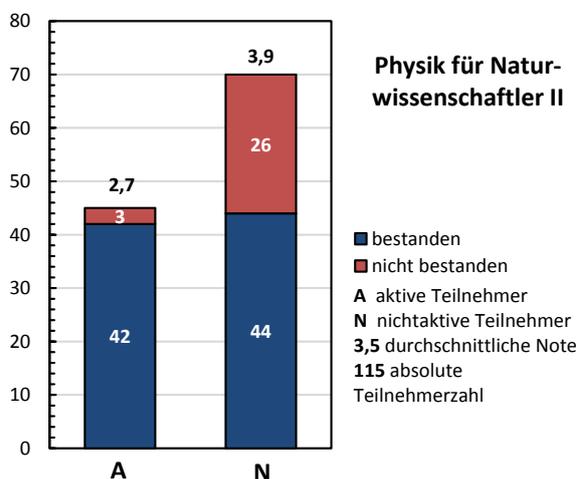


Abbildung: Erfolg nach Testateilnahme

Klausur wurde die Motivation erhöht, den Onlinekurs zu nutzen.

Ähnlich wie 2017 wurden die Studenten in aktive (A) und nichtaktive (N) Teilnehmer unterteilt. Das Kriterium war die aktive Teilnahme an mindestens fünf von insgesamt sieben Testaten. Bei richtiger Beantwortung aller Testate wurden bis zu zwei Zusatzpunkten (etwa 5%) für die schriftliche Klausur vergeben. Die Abbildung zeigt, dass sich die aktive Teilnahme mit einer Bestehensquote von 93% im Vergleich zu 63% der nichtaktiven Teilnehmer deutlich auszahlte. Zudem war die durchschnittliche Note der aktiven Studenten (2,7) besser als die der

Nichtaktiven (3,9). Die maximal erzielbaren zwei Zusatzpunkte machten einen Unterschied von höchstens 0,2 Noten aus. Die restliche Differenz (1,0) kann entweder dem positiven Effekt des kontinuierlichen Lernens oder, was nicht ausgeschlossen werden kann, dem eventuell ohnehin höheren Elan einzelner Studentengruppen zugeschrieben werden, die von Haus aus die nötige Motivation mitbringen.

Dieses Ergebnis ist mit dem des Wintersemesters 2017/18 sehr vergleichbar (A: 89% Bestehensquote mit Durchschnittsnote 2,7; N: 65% mit 3,8) und bestätigt uns in unserer Bemühung für eine verbesserte Lehre. Nach dieser Projektphase bleibt noch offen, wie stark sich die aktive Nutzung des Onlinekurses beim Klausurerfolg bemerkbar macht. Dazu bedarf es nachverfolgbarer Tests, so dass wir in das Engagement der Studenten zu Hause Einsicht bekommen. 2017 zeigte die Statistik für die „Physik für Naturwissenschaftler I“ eine noch bessere Bilanz als die der aktiven Teilnehmer. Ob das auch für die Physik II gilt, kann in der Projekterweiterung 2019 nach dem Ausbau des Online-Angebots nachgegangen werden.





PHYSIKALISCHES GRUNDPRAKTIKUM

Dieses Praktikum zu den Vorlesungen „Physik für Naturwissenschaftler“ und „Physik für Ingenieure“ absolvieren ca. 450 Studierende pro Jahr. Für neun naturwissenschaftliche Studiengänge (z. B. Naturwissenschaften, 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 7 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.



Messgerät zur Bestimmung der Radioaktivität einer Radon-Probe



PROJEKTTAG GYMNASIUM ERFURT

Am 18. Juni 2018 öffneten die Physikalischen Institute des Gellertbaus die Türen für einen Projekttag der MINT-Klassen des Albert-Schweitzer-Gymnasiums Erfurt. Im Rahmen verschiedener Praktikumsversuche bekamen die Schüler einen Einblick in die aktuellen Forschungsschwerpunkte der Physik in Freiberg.





ANGEBOTENE LEHRMODULE

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

Energiewandlung und Speicherung, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Florian Mertens,
beteiligte Vorlesende: Prof. Dr. Florian Mertens, Dr. Matthias Müller,
Übung durch Dr. Wolfram Münchgesang,
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: Prof. Dr. Dirk C. Meyer, Dr. Matthias Zschornak,
Wintersemester, 4 SWS Vorlesung, 2 SWS Übung

Physik für Naturwissenschaftler II, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer,
beteiligte Vorlesende: Prof. Dr. Dirk C. Meyer, 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. Friedrich Roth,
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

- K. Irscher, I. Gamov, E. Nowak, G. Gärtner, F. Zimmermann, F. C. Beyer, E. Richter, M. Weyers, G. Tränkle: **Tri-carbon defects in carbon doped GaN**, Applied Physics Letters 113 (2018) 262101
- P. Pandey, Y. Bitla, M. Zschornak, M. Wang, C. Xu, J. Grenzer, D. C. Meyer, Y. Y. Chin, H. J. Lin, C. T. Chen, S. Gemming, M. Helm, Y. H. Chu, S. Zhou: **Enhancing the magnetic moment of ferrimagnetic NiCo₂O₄ via ion irradiation driven oxygen vacancies**, APL Materials 6 (2018) 066109
- M. Zschornak, F. Meutzner, J. Lück, A. Latz, T. Leisegang, J. Hanzig, M. Nentwich, J. Zosel, P. B. Balbuena: **Fundamental principles of battery design**, Physical Sciences Reviews 3 (2018) 20170111
- M. Nentwich, B. Störr, J. Hanzig: **Battery concepts: The past, the present, and research highlights**, Physical Sciences Reviews 4 (2018) 20180038
- F. Meutzner, T. Nestler, M. Zschornak, P. Canepa, G. S. Gautam, S. Leoni, S. Adams, T. Leisegang, V. A. Blatov, D. C. Meyer: **Computational analysis and identification of battery materials**, Physical Sciences Reviews 4 (2018) 20180044
- F. Meutzner, M. Zschornak, M. Nentwich, D. Monti, T. Leisegang: **Electrodes: definitions and systematisation – a crystallographers view**, Physical Sciences Reviews 3 (2018) 20180043
- M. Stöber, C. Cherkouk: **Positive electrodes based on Ion-implanted SrTiO₃**, Physical Sciences Reviews 3 (2018) 20180122

- T. Nestler, E. Roedern, N. F. Uvarov, J. Hanzig, G. A. Elia, M. de Vivanco: **Separators and electrolytes for rechargeable batteries: Fundamentals and perspectives**, *Physical Sciences Reviews* 4 (2018) 20170115
- T. Köhler, J. Hanzig, V. Koroteev: **Optical spectroscopy as a tool for battery research**, *Physical Sciences Reviews* 4 (2018) 20170154
- A. Vyalikh, T. Köhler, T. Zakharchenko, D. M. Itkis, A. Krajnc, G. Mali: **Magnetic resonance spectroscopy approaches for electrochemical research**, *Physical Sciences Reviews* 3 (2018) 20170155
- C. Funke, V. S. K. Chakravadhanula: **Characterisation of battery materials by electron and ion microscopy techniques: a review**, *Physical Sciences Reviews* 4 (2018) 20170153
- O. Kluge, B. Abendroth, T. Köhler, M. Altenburg, L. Borhardt, E. Abbe, T. Schüler, A. Zwiebler, M. Tajmar, T. Schmiel: **Electrochromics for Thermal Control on Spacecrafts**, *Proceedings of the 3rd World Congress on Momentum, Heat and Mass Transfer* (2018) ICHTD 103
- V. R. Rayapati, N. Du, D. Bürger, R. Patra, I. Skorupa, P. Matthes, H. Stöcker, S. E. Schulz, H. Schmidt: **Electroforming-free resistive switching in polycrystalline YMnO_3 thin films**, *Journal of Applied Physics* 124 (2018) 144102
- M. Zschornak, T. Leisegang, F. Meutzner, H. Stöcker, T. Lemser, T. Tauscher, C. Funke, C. Cherkouk, D. C. Meyer: **Harmonic Principles of Elemental Crystals—From Atomic Interaction to Fundamental Symmetry**, *Symmetry* 10 (2018) 228
- S. Jachalke, T. Schenk, M. H. Park, U. Schroeder, T. Mikolajick, H. Stöcker, E. Mehner, D. C. Meyer: **Pyroelectricity of silicon-doped hafnium oxide thin films**, *Applied Physics Letters* 112 (2018) 142901
- M. Stöber, C. Cherkouk, T. Leisegang, M. Schelter, J. Zosel, J. Walter, J. Hanzig, M. Zschornak, S. Prucnal, R. Böttger, D. C. Meyer: **Oxygen Exchange Kinetics of SrTiO_3 Single Crystals: A Non Destructive, Quantitative Method**, *Crystal Research and Technology* 53 (2018) 1800004
- P. Goldberg, S. Apelt, D. Spitzner, R. Boucher, E. Mehner, H. Stöcker, D. C. Meyer, A. Benke, U. Bergmann: **Icing Temperature Measurements of Water on Pyroelectric Single Crystals: Impact of Experimental Methods on the Degree of Supercooling**, *Cold Regions Science and Technology* 151 (2018) 53–63
- Z. M. Khumalo, M. Blumenthal, M. Topic, C. Funke, J. Bollmann, A. Vantomme, C. Ndlangamandla: **Oxide reduced silicon nanowires**, *Current Applied Physics* 18 (2018) 576-582
- A. Vyalikh, M. Zschornak, T. Köhler, M. Nentwich, T. Weigel, J. Hanzig, R. Zaripov, E. Vavilova, S. Gemming, E. Brendler, D. C. Meyer: **Analysis of the defect clusters in congruent lithium tantalate**, *Physical Review Materials* 2 (2018) 013804
- V. A. Vizgalov, T. Nestler, L. A. Trusov, I. A. Bobrikov, O. I. Ivankov, M. V. Avdeev, M. Motylenko, E. Brendler, A. Vyalikh, D. C. Meyer, D. M. Itkis: **Enhancing Lithium-Ion Conductivity in NASICON Glass-Ceramics by Adding Yttria**, *CrystEngComm* 20 (2018) 1375–1382

- C. Richter, M. Zschornak, D. Novikov, E. Mehner, M. Nentwich, J. Hanzig, S. Gorfman, D. C. Meyer: **Picometer polar atomic displacements in strontium titanate determined by resonant X-ray diffraction**, *Nature Communications* 9 (2018) 178
- M. J. Kriegel, A. Kilmametov, M. Rudolph, B. B. Straumal, A. S. Gornakova, H. Stöcker, Y. Ivanisenko, O. Fabrichnaya, H. Hahn, D. Rafaja: **Transformation Pathway upon Heating of Ti-Fe Alloys Deformed by High-Pressure Torsion**, *Advanced Engineering Materials* 20 (2018) 1700933
- D. Wiedemann, F. Meutzner, O. Fabelo, S. Ganschow: **The Inverse Perovskite BaLiF₃: Single-Crystal Neutron Diffraction and Analyses of Potential Ion Pathways**, *Acta Crystallographica B* 74 (2018) 643–645

Strukturforschung mit XFELs und Synchrotronstrahlung

- S. L. Molodtsov: **European XFEL in operation: Status and first experiments**, 2018 International Conference Laser Optics (ICLO), IEEE (2018) 430
- V. V. Sikolenko, S. L. Molodtsov, M. Izquierdo, I. O. Troyanchuk, D. 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 (2018) 597–599
- T. Arion, W. Eberhardt, J. Feikes, A. Gottwald, P. Goslawski, A. Hoehl, H. Kaser, M. Kolbe, J. Li, C. Lupulescu, M. Richter, M. Ries, F. Roth, M. Ruprecht, T. Tydecks, G. Wüstefeld: **Transverse resonance island buckets for synchrotron-radiation based electron time-of-flight spectroscopy**, *Review of Scientific Instruments* 89 (2018) 103114
- P. Zalden, R. Carley, T. Tschentscher, C. Bressler, S. Molodtsov, G. Geloni, A. Scherz, A. Perucchi, S. Bonetti, A. Cavalieri, K. Hollmack, D. Turchinovich, A. Lindenberg, K. Nelson, L. DiMauro, M. Lederer, M. Hoffmann, F. Kärtner, A. Cavalleri, M. Krasilnikov, M. Gensch, N. Stojanovic, C. Hauri, A. Savilov, Z. Huang: **Terahertz Science at European XFEL**, XFEL.EU TN-2018-001-01.0
- M. K. Rabchinskii, A. T. Dideikin, D. A. Kirilenko, M. V. Baidakova, V. V. Shnitov, F. Roth, S. V. Konyakhin, N. A. Besedina, S. I. Pavlov, R. A. Kuricyn, N. M. Lebedeva, P. N. Brunkov, A. Ya. Vul': **Facile reduction of graphene oxide suspensions and films using glass wafers**, *Scientific Reports* 8 (2018) 14154
- K. Witte, I. Mantouvalou, R. Sánchez-de-Armas, H. Lokstein, J. Lebendig-Kuhla, A. Jonas, F. Roth, B. Kanngießner, H. Stiel: **On the Electronic Structure of Cu Chlorophyllin and Its Breakdown Products: A Carbon K-Edge X-ray Absorption Spectroscopy Study**, *Journal of Physical Chemistry B* 122 (2018) 1846–1851
- F. Roth, T. Arion, H. Kaser, A. Gottwald, W. Eberhardt: **Angle resolved Photoemission from Ag and Au single crystals: Final state lifetimes in the attosecond range**, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* 224 (2018) 84–92
- V. Yu. Aristov, A.N. Chaika, O.V. Molodtsova, S.V. Babenkov, A. Locatelli, T.O. Menteş, A. Sala, D. Potorochin, D. Marchenko, B. Murphy, B. Walls, K. Zhussupbekov, I.V. Shvets: **Layer-by-Layer Graphene Growth on β -SiC/Si (001)**, *ACS nano* 13 (2018) 526–535

T. Szatkowski, K. Kopczynski, M. Motylenko, H. Borrmann, B. Mania, M. Gras, G. Lota, V. V. Bazhenov, D. Rafaja, F. Roth, J. Weise, E. Langer, M. Wysokowski, S. Zóltowska-Aksamitowska, Ia. Petrenko, S. L. Molodtsov, J. Hubáľková, C. G. Aneziris, Y. Joseph, A. L. Stelling, H. Ehrlich, T. Jesionowski: **Extreme biomimetics: Carbonized 3D spongin scaffold as a novel support for nanostructured manganese oxide (IV) and its electrochemical applications**, Nano Research 11 (2018) 4199–4214

Juniorprofessur Kristallphysik

F. Taubert, J. Seidel, R. Hüttl, M. Bobnar, R. Gumeniuk, F. Mertens: **The heat capacity and entropy of the metastable lithium silicide $\text{Li}_{15}\text{Si}_4$ in the temperature range (2 to 615) K**, Journal of Chemical Thermodynamics 116 (2018) 323–329

A. Amon, E. Svanidze, R. Cardoso-Gil, M. N. Wilson, H. Rosner, M. Bobnar, W. Schnelle, J. W. Lynn, R. Gumeniuk, C. Hennig, G. M. Luke, H. Borrmann, A. Leithe-Jasper, Yu. Grin: **Noncentrosymmetric superconductor BeAu** , Physical Review B 97 (2018) 014501

A. Amon, A. Ormeci, M. Bobnar, L. G. Akselrud, M. Avdeev, R. Gumeniuk, U. Burkhardt, Y. Prots, C. Hennig, A. Leithe-Jasper, Yu. Grin: **Cluster Formation in the Superconducting Complex Intermetallic Compound $\text{Be}_{21}\text{Pt}_5$** , Accounts of Chemical Research 51 (2018) 214–222

R. Gumeniuk, A. N. Yaresko, W. Schnelle, M. Nicklas, K. O. Kvashnina, C. Hennig, Yu. Grin, A. Leithe-Jasper: **Uniaxial ferromagnetism of local uranium moments in hexagonal UBeGe** , Physical Review B 97 (2018) 174405

R. Gumeniuk: **Structural and Physical Properties of Remeika Phases**, In: Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths, Ed. J.-C. G. Bünzli, V. K. Pecharsky, North-Holland, Amsterdam, Vol. 54 (2018) 43–145

M. Feig, M. Nicklas, M. Bobnar, W. Schnelle, U. Schwarz, A. Leithe-Jasper, C. Hennig, R. Gumeniuk: **Superconductivity and magnetism in noncentrosymmetric LaPtGe_3 and CePtGe_3** , Physical Review B 98 (2018) 184516



KONFERENZBEITRÄGE

Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie

- M. Nentwich, C. Richter, T. Weigel, E. Mehner, M. Zschornak, D. C. Meyer: **Resonant X-ray Diffraction at the Petra III Chemical Crystallography Beamline**, German Conference for Research with Synchrotron Radiation, Neutrons and Ion Beams at Large Facilities, München, 16.–19. September 2018, Poster
- F. Meutzner, M. Zschornak, A. A. Kabanov, T. Nestler, T. Leisegang, V. A. Blatov, D. C. Meyer: **Implications for the search of crystalline Al-ion conductors in chalcogenide-containing compounds**, 3rd Meeting of the Young Crystallographers, Aachen, 12.–14. September 2018, Lightning Talk und Poster
- C. Ludt: **Electronic structure of the homologous series of Ruddlesden-Popper phases $\text{SrO}(\text{SrTiO}_3)_n$, ($n = 0 - 3, \infty$)**, 3rd Meeting of the Young Crystallographers, Aachen, 12.–14. September 2018, Lightning Talk und Poster
- M. Rothenberger: **Analysis of aluminum conductivity in high-valent transition metal oxides with Bond-Valence-Site-Energy calculations**, 3rd Meeting of the Young Crystallographers, Aachen, 12.–14. September 2018, Lightning Talk und Poster
- M. Nentwich, C. Richter, T. Weigel, E. Mehner, M. Zschornak, D. C. Meyer: **Manipulation of the Sample Environment with the ‚Nordseekammer‘ at P24**, 3rd Meeting of the Young Crystallographers, Aachen, 12.–14. September 2018, Lightning Talk und Poster
- T. Weigel, C. Richter, M. Nentwich, E. Mehner, M. Zschornak, C. Funke, D. C. Meyer: **Morphology and strain field of the migration-induced field-stabilized polar phase of strontium titanate**, 3rd Meeting of the Young Crystallographers, Aachen, 12.–14. September 2018, Lightning Talk und Poster

- M. Zschornak: **Breaking Crystalline Symmetries – The Local Electronic Structure**, 31st European Crystallographic Meeting, Oviedo, Spanien, 22.–27. August 2018, Preisträgervortrag
- T. Leisegang, T. Nestler, F. Meutzner, M. Zschornak, R. Schmid, W. Münchgesang, A. A. Kabanov, V. A. Blatov, D. C. Meyer: **The aluminium-ion battery**, 31st European Crystallographic Meeting, Oviedo, Spanien, 22.–27. August 2018, Vortrag MS19-O4
- M. Nentwich, C. Richter, T. Weigel, M. Zschornak, D. C. Meyer: **Atomic displacements in yttrium-manganese-oxide with and without Fe-substitution, revealed by resonant X-ray diffraction**, 31st European Crystallographic Meeting, Oviedo, Spanien, 22.–27. August 2018, Poster MS14-P04
- E. Mehner, H. Stöcker, M. Münchhalphen, C. Reuther, J. Götze, J. Schreuer, D. C. Meyer: **Dielectric, pyroelectric and structural properties of rare-earth calcium oxoborates $RCa_4O(BO_3)_3$** , 31st European Crystallographic Meeting, Oviedo, Spanien, 22.–27. August 2018, Poster MS16-P12
- T. Weigel, M. Zschornak, C. Funke, S. Jachalke, C. Richter, M. Nentwich, H. Stöcker, T. Leisegang, D. C. Meyer: **Assessment of Pyroelectricity in Polar Oxides from Atomic Displacements**, 31st European Crystallographic Meeting, Oviedo, Spanien, 22.–27. August 2018, Poster MS16-P15
- W. Münchgesang, D. Wagner, M. Motylenko, J. Schilm, D. Rafaja, D. C. Meyer: **Influence of the glass-ceramic synthesis route on the ionic conductivity of the sodium solid electrolyte $Na_2O-Y_2O_3-SiO_2$ (NYS)**, 31st European Crystallographic Meeting, Oviedo, Spanien, 22.–27. August 2018, Poster MS19-P08
- T. Leisegang: **Neue Batteriekonzepte der TU Bergakademie Freiberg**, 69. BHT – Freiburger Universitätsforum, Fachkolloquium 6, Freiberg, 7. Juni 2018, Vortrag
- T. Nestler: **Das 1000 Meilen Auto – Science or Fiction**, 69. BHT – Freiburger Universitätsforum, Fachkolloquium 6, Freiberg, 7. Juni 2018, Vortrag
- F. Meutzner: **Identifizierung neuer Batteriematerialien mittels Data-Mining**, 69. BHT – Freiburger Universitätsforum, Fachkolloquium 6, Freiberg, 7. Juni 2018, Vortrag
- C. Cherkouk: **Was hat ein Blitz mit einer Batterie zu tun?**, 69. BHT – Freiburger Universitätsforum, Fachkolloquium 6, Freiberg, 7. Juni 2018, Vortrag
- W. Münchgesang: **Aktuelle Fragen und Lösungsansätze der Batterieforschung**, 69. BHT – Freiburger Universitätsforum, Fachkolloquium 6, Freiberg, 7. Juni 2018, Vortrag
- H. Stöcker: **Strom aus Wärme – Restwärmenutzung mittels Pyroelektrika**, 69. BHT – Freiburger Universitätsforum, Fachkolloquium 6, Freiberg, 7. Juni 2018, Vortrag
- E. Mehner: **Strontiumtitanat – Informationsspeicher, Energiespeicher, Energiewandler**, 69. BHT – Freiburger Universitätsforum, Fachkolloquium 6, Freiberg, 7. Juni 2018, Vortrag
- S. Jachalke: **Neue Pyroelektrika aus der Halbleiterindustrie**, 69. BHT – Freiburger Universitätsforum, Fachkolloquium 6, Freiberg, 7. Juni 2018, Vortrag

- T. Köhler: **Lithiumniobat – den Defekten auf der Spur**, 69. BHT – Freiburger Universitätsforum, Fachkolloquium 6, Freiberg, 7. Juni 2018, Vortrag
- B. Abendroth: **Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung Freiberg**, 69. BHT – Freiburger Universitätsforum, Fachkolloquium 6, Freiberg, 7. Juni 2018, Vortrag
- A. Vyalikh: **Solid-State NMR in materials science**, 3rd International Conference on Advanced Spectroscopy Crystallography and Applications in Modern Chemistry, London, Großbritannien, 4.–5. Juni 2018, Keynote Lecture
- A. Vyalikh: **Solid state NMR for the study of battery materials and cells**, CIC Energigune, Vitoria-Gasteiz, Spanien, 24. April 2018, Invited Talk
- A. Vyalikh, V. Koroteev, W. Münchgesang, L. Bulusheva, A. Okotrub, D. C. Meyer: **^{13}C isotope enriched graphitic material for operando NMR studies of processes in electrochemical cells**, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Berlin, 11.–16. März 2018, Vortrag CPP 64.12
- W. Münchgesang, D. Wagner, M. Motylenko, J. Schilm, D. Rafaja, D. C. Meyer: **Influence of the glass-ceramic synthesis route on the ionic conductivity of the sodium solid electrolyte $\text{Na}_2\text{O}-\text{Y}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$** , Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Berlin, 11.–16. März 2018, Vortrag KFM 14.3
- T. Köhler, W. Münchgesang, E. Mehner, J. Hanzig, H. Stöcker, D. C. Meyer: **Towards a proof of water splitting via pyroelectrolysis**, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Berlin, 11.–16. März 2018, Poster KFM 27.4
- M. Stöber, C. Cherkouk, S. Prucnal, M. Neubert, C. Funke, D. C. Meyer: **Structural Study of the Metal Induced Crystallization of Silicon**, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Berlin, 11.–16. März 2018, Poster MM 27.24
- S. Jachalke, T. Schenk, M. H. Park, U. Schroeder, T. Mikolajick, H. Stöcker, E. Mehner, D. C. Meyer: **Pyroelectricity of silicon-doped hafnium oxide thin films**, Conference „High-k oxides by ALD“, Wroclaw (Polen), 9. März 2018, eingeladener Vortrag
- M. Zschornak: **Solid High-Valence Ion Conductors – Challenges and Perspectives**, 4th Annual World Congress of Smart Materials – WCSM-2018, Osaka, Japan, 5.–8. März 2018, eingeladener Vortrag
- T. Leisegang, F. Meutzner, T. Nestler, M. Zschornak, R. Schmid, A. A. Kabanov, R. A. Eremin, V. A. Blatov, D. C. Meyer: **Crystallography in the context of the energy transition – the battery of tomorrow**, 26. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Essen, 5.–8. März 2018, Poster P141
- F. Meutzner, M. Zschornak, T. Nestler, A. A. Kabanov, T. Leisegang, V. A. Blatov, D. C. Meyer: **Advantages of chalcogenide bonded metals as basis for potential Al-ion conducting materials**, 26. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Essen, 5.–8. März 2018, Vortrag S13-04
- M. Rothenberger, F. Meutzner, T. Nestler, T. Leisegang, D. C. Meyer: **Analysis of aluminum conductivity in high-valent transition metal oxides with Bond-Valence-Site-Energy calculations**, 26. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Essen, 5.–8. März 2018, Vortrag LT2-09

- M. Nentwich, M. Zschornak, M. Sonntag, R. Gumeniuk, S. Gemming, T. Leisegang, D. C. Meyer: **Structure variations within certain rare-earth disilicides**, 26. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Essen, 5.–8. März 2018, Vortrag S20-01
- T. Weigel, M. Zschornak, T. Behm, C. Funke, S. Jachalke, H. Stöcker, T. Leisegang, D. C. Meyer: **Determination of structure-property-relations from single crystal X-ray diffraction data**, 26. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Essen, 5.–8. März 2018, Poster P087

Strukturforschung mit XFELs und Synchrotronstrahlung

- S. L. Molodtsov: **The European XFEL view**, CREMLIN WP5 Workshop: „Towards a conceptual design for the Russian SSRS-4 facility“, Hamburg, 23. Januar 2018, Vortrag
- S. L. Molodtsov: **SASE3 instruments: Status and plans**, European XFEL User Meeting 2018, Hamburg, 24.–26. Januar 2018, Vortrag
- S. L. Molodtsov: **European XFEL: Research with free electron lasers**, DESY-Weizmann Science Forum, Tel Aviv, Israel, 24. April 2018, Vortrag
- S. L. Molodtsov: **Soft X-Ray Instrumentation at the European XFEL**, School of XFEL and Synchrotron Radiation Users “SFEL2018“, Liptovsky Jan, Slowakei, 27.–31. Mai 2018, Vortrag
- S. L. Molodtsov: **European XFEL in operation: status and first experiments**, 18th International Conference Laser Optics, ICLO 2018, St. Petersburg, Russland, 4.–8. Juni 2018, Vortrag
- S. L. Molodtsov: **X-ray sources**, Summer School RACIRI 2018, Rügen, 25. August – 1. September 2018, Vortrag
- S. L. Molodtsov: **European XFEL: Status and spectroscopic applications**, International School on XFEL: Science and Instrumentation, Gdansk, Polen, 10.–12. Oktober 2018, Vortrag
- S. L. Molodtsov: **European XFEL: Status and research applications**, IV International Conference on Particle Physics and Astrophysics (ICPPA 2018), Moskau, Russland, 22.–26. Oktober 2018, Vortrag
- S. L. Molodtsov: **European XFEL: Superior tool for studying correlated quantum materials**, Workshop on Dynamic Quantum Matter, Stockholm, Schweden, 10.–14. Dezember 2018, Vortrag
- F. Roth: **New insights into the dynamics of the surface photovoltage effect of Si(100) in the sub ps to ns time range**, 14th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure, Shanghai, China, 8.–12. Oktober 2018, Poster

Juniorprofessur Kristallphysik

- R. Gumeniuk, W. Schnelle, F. Weitzer, A. Leithe-Jasper, Yu. Grin: **Influence of chemical pressure on the ferromagnetism in UBeGe**, 48èmes Journées des Actinides (JdA 2018), Praia de Porto Novo, Portugal, 21.–24. März 2018, Poster P23
- A. Amon, A. Ormeci, M. Bobnar, L. G. Akselrud, M. Avdeev, R. Gumeniuk, U. Burkhardt, C. Hennig, A. Leithe-Jasper, Yu. Grin: **Cluster formation in the superconducting complex intermetallic compound Be₂₁Pt₅**, 18th International Conference on Solid Compounds of Transition Elements (SCTE 2018), Wien, Österreich, 25.–29. März 2018, Vortrag Tu-A14
- S. Flipo, I. Veremchuk, M. Bobnar, T. Weigel, U. Burkhardt, A. Leithe-Jasper, R. Gumeniuk: **Investigation on the Boron-rich compounds in the RE-(Cr,Mo)-B systems**, 37th International Conference on Thermoelectrics (ICT 2018), Caen, Frankreich, 1.–5. Juli 2018, Poster P64
- P. Wyzga, I. Veremchuk, M. Bobnar, C. Himcinschi, T. Weigel, U. Burkhardt, A. Leithe-Jasper, R. Gumeniuk: **Thermoelectric properties of indium thiospinel**, 37th International Conference on Thermoelectrics (ICT 2018), Caen, Frankreich, 1.–5. Juli 2018, Poster P. 73
- E. Zuñiga, M. Humeres, B. Fritzke, R. Cardoso-Gil, I. Veremchuk, M. Bobnar, G. Heide, R. Gumeniuk: **Thermoelectric Properties of Natural and Synthetic Pyrites**, 37th International Conference on Thermoelectrics (ICT 2018), Caen, Frankreich, 1.–5. Juli 2018, Poster P. 77
- R. Gumeniuk, W. Schnelle, L. Akselrud, Q. Zheng, U. Schwarz, A. Leithe-Jasper: **Superconductivity in some new Remeika Phases**, International Conference on Magnetism, San Francisco, USA, 15.–20. Juli 2018, Poster L14-07



GRADUIERUNGEN UND STUDENTISCHE ARBEITEN

Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie

Luis Wolf: **Batterien der nächsten Generation: Die Nutzung großer Datenmengen für neue Energiespeicherkonzepte**, Forschungsbezogenes Projektseminar, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2018

Christian Radach: **Modifizierung polarer Eigenschaften von LiMO_3 mittels optisch und elektrisch aktiver Defekte**, Problemorientierte Projektarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2018

Lukas Hell: **3D-FEM-Simulation of the Heat transfer on $\text{Si/SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ layers after Flash Lamp Annealing**, Problemorientierte Projektarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2018

Sandra Jankus: **Atomlagenabscheidung und Charakterisierung von epitaktischen Oxid-Schichten auf SrTiO_3 -Einkristall-Substraten**, Masterarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2018

Lukas Hell: **Dotiertes Zinkoxid als transparentes Elektrodenmaterial für kristalline Si-Solarzellen: Einfluss der Prozessparameter der chemischen Gasphasenabscheidung auf die optischen und elektrischen Eigenschaften**, Masterarbeit, Meyer Burger AG, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2018



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

Magnetron-Sputteranlage im Zentralen Reinraumlabor der TU Bergakademie Freiberg zur Herstellung metallischer und oxidischer Schichten auf Wafern von bis zu 150 mm Durchmesser, © Sven Jachalke.

Autoren

1	Dirk C. Meyer
5–10	Hartmut Stöcker
13–17	Dirk C. Meyer, Hartmut Stöcker, Tilman Leisegang
18–26	Serguei Molodtsov, Friedrich Roth
27–29	Roman Gumeniuk, Manuel Feig
30–31	Barbara Abendroth
32–35	Tilman Leisegang
36–37	Hartmut Stöcker, Tilman Leisegang
38–39	Matthias Zschornak
40–44	Dirk C. Meyer, Theresa Lemser
47–48	Wolfram Münchgesang
49–51	Thomas Köhler, Sven Jachalke
52–53	Anastasia Vyalikh, Wolfram Münchgesang
54–55	Sandra Jankus
56–57	Hartmut Stöcker, Erik Mehner
58–60	Melanie Nentwich, Matthias Zschornak, Tina Weigel
61–65	Marco Herrmann, Tilman Leisegang, Falk Meutzner, Robert Schmid, Hartmut Stöcker, Matthias Zschornak
66–68	Charaf Cherkouk
69–70	Anastasia Vyalikh, Wolfram Münchgesang
71–73	Valentin Garbe
74	Tilman Leisegang
75	Hartmut Stöcker
77–79	Tilman Leisegang, Robert Schmid
81	Hartmut Stöcker
82–83	Mateo de Vivanco
84	Hartmut Bergelt
85	Hartmut Stöcker

Bildquellen

1	Medienzentrum
5–10	Sven Jachalke
11	Claudia Funke, Uta Fischer, Sven Jachalke
13	Erik Mehner
15	Sven Jachalke
17	Tilman Leisegang
18	European XFEL GmbH
19	Sven Jachalke, Friedrich Roth
20–21	Friedrich Roth
22–23	European XFEL GmbH
24–25	Friedrich Roth
27	Sven Jachalke

28–29	Manuel Feig
30–32	Sven Jachalke
33	Tilman Leisegang, Sven Jachalke
34	Sven Jachalke
35	Falk Meutzner
36	Sven Jachalke
37	Sven Jachalke, Tilman Leisegang
38	ESRF
39	Matthias Zschornak
40	Heinle, Wischer und Partner
41–43	Cinector GmbH
44	Theresa Lemser
45–47	Sven Jachalke
48	Thomas Köhler
49–50	Sven Jachalke
51	Sven Jachalke, Thomas Köhler
52–53	Yulia Fedoseeva, Alexander Okotrub, Lyubov Bulusheva
54	Sven Jachalke
55	Sandra Jankus, Juliane Hanzig
56	Erik Mehner
57	Hartmut Stöcker, Erik Mehner
58	Melanie Nentwich
59	Carsten Richter, Claudia Funke, Erik Mehner
60	Erik Mehner
61	Sven Jachalke
62	Tina Nestler
63	Sven Jachalke
64	Tilman Leisegang
65	Marco Herrmann, Cinector GmbH
66	Sven Jachalke
67	Charaf Cherkouk
68	Claudia Funke, Uta Fischer
69–70	Anastasia Vyalikh, Wolfram Münchgesang
71	Sven Jachalke, Valentin Garbe
72–73	Valentin Garbe
74	Tilman Leisegang
75	European Crystallographic Association
77	Robert Schmid
78	Sven Jachalke
79	Detlev Müller, Sven Jachalke
81–82	Sven Jachalke
83	Mateo de Vivanco
84	Hartmut Bergelt
85–100	Sven Jachalke

