

Sehr geehrte Leserin, sehr geehrter Leser,

für den vorliegenden Jahresbericht 2019 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. Im zu Ende gehenden Jahr wurden wieder zahlreiche Abschlüsse in verschiedenen Stufen der fachlich-wissenschaftlichen Qualifikation erreicht, was nicht zuletzt durch intensive Betreuungsleistungen ermöglicht wurde. Auch für das außerordentliche Engagement in allen Bereichen der Lehre und Selbstverwaltung möchte ich allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern danken.

Neben der aktiven Teilnahme an internationalen Fachkonferenzen und weiteren einschlägigen Veranstaltungen trugen auch in diesem Jahr unsere Publikationsaktivitäten in internationalen wissenschaftlichen Fachzeitschriften zur Sichtbarkeit des IEP und der gesamten Universität bei. Die Ergebnisse der kreativen und intensiven Arbeit waren die Grundlage für die Einwerbung von Projektmitteln, die uns den Erhalt und weiteren Ausbau unserer Kompetenzen ermöglichen. So erfüllt es mich vor allem mit Freude, dass kürzlich das an „R2R-Battery“ anknüpfende BMWi-Vorhaben „Die Aluminiumbatterie: Herausforderungen für die industrielle Fertigung – ProBaSol“ bewilligt wurde und schon im kommenden Januar an den Start gehen kann. Dank einer umfangreichen weiteren



Zuwendung des BMBF im Rahmen von „R2R-Battery“ stehen uns nunmehr auch Mittel für die Anschaffung weiterer Forschungsgroßgeräte sowie für den Ausbau unserer gerätetechnischen Infrastruktur zur Verfügung.

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 Labors 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 zentralen Einrichtung dankbar bin. Das Gebäude ist nahezu fertiggestellt und wird im nächsten Jahr eingeweiht. Es ist offenbar, dass durch mich auch Ressourcen des IEP für den Aufbau des ZeHS eingesetzt werden. Da dies zusätzliche Anstrengungen bedeutet, meinen Dank auch dafür.

Allen Partnern des IEP bin ich sehr verbunden und freue mich auf die weitere Zusammenarbeit im Jahr 2020 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, appearing to read "Dipl. C. Mayer".

Direktor des IEP und des ZeHS

# INHALT

<b>Das Institut für Experimentelle Physik</b>	<b>4</b>
Das Institut	5
Die Mitarbeiter des Instituts für Experimentelle Physik	7
Geräte am Institut für Experimentelle Physik	8
Bearbeitete Stoffsysteme	10
<b>Arbeitsgruppen</b>	<b>12</b>
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	31
Methodisches Kompetenzzentrum Elektronikmaterialien	37
Methodisches Kompetenzzentrum Energiermaterialien	39
Freiberger Zentrum für Pyroelektrizität	46
Resonante Röntgenmethoden und Kristallmodellierung	48
Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung	52
<b>Projekte</b>	<b>58</b>
Entwicklung hochsensitiver Wasserstoffsensorik	59
Nutzung von Abwärme zur Erzeugung von Wasserstoff und Elektrizität mit Pyroelektrika	61
Pyroelektrische Polymere für die Abwärmenutzung	64
Pyro- und dielektrische Eigenschaften von Hochtemperaturpiezoelektrika der Oxoborat-Familie $RX_2Z_2O(BO_3)_3$	66
Resonante Röntgendiffraktion unter optimierter destruktiver Interferenz	68
Kontrollierte Einstellung der Atomstruktur durch akustische Wellen und elektrische Felder	70
Rolle-zu-Rolle-Fertigung neuartiger Post-Lithium-Energiespeicher	72
Silizium-basierte Anodenmaterialien für Sekundärbatterien mit hohen Energiedichten	77
Stipendien und Preise	81
<b>Lehre</b>	<b>82</b>
Physikauffrischung vor Studienbeginn	83
Physikalisches Grundpraktikum	86
Projekttag Landesschule Pforta	87
Angebotene Lehrmodule	88
<b>Publikationen</b>	<b>90</b>
Wissenschaftliche Publikationen	91
Konferenzbeiträge	95
Graduiierungen und studentische Arbeiten	99
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 Reinraumlabors der TU Bergakademie Freiberg und betreibt die Strukturaufklärung mittels Röntgenstrahlung mit besonderem methodischen Anspruch. Unter Leitung des Institutedirektors 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 Dreibrüder-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 Gelertbau 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

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

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

**Institutsdirektor**  
Prof. Dr. Dirk C. Meyer  
Tel.: 03731 39 2860  
dirk-carl.meyer@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.moldtsov@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

**Juniorprofessur  
Kristallphysik**  
**Jun. Prof. Dr. Roman Gumeniuk**  
Tel.: 03731 39 4268  
romangumeniuk@physik.tu-freiberg.de

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

**Kompetenzzentrum  
Elektronikmaterialien**  
Dr. Barbara Abendroth  
Tel.: 03731 39 2773  
barbara.abendroth@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

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

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

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

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

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

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

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

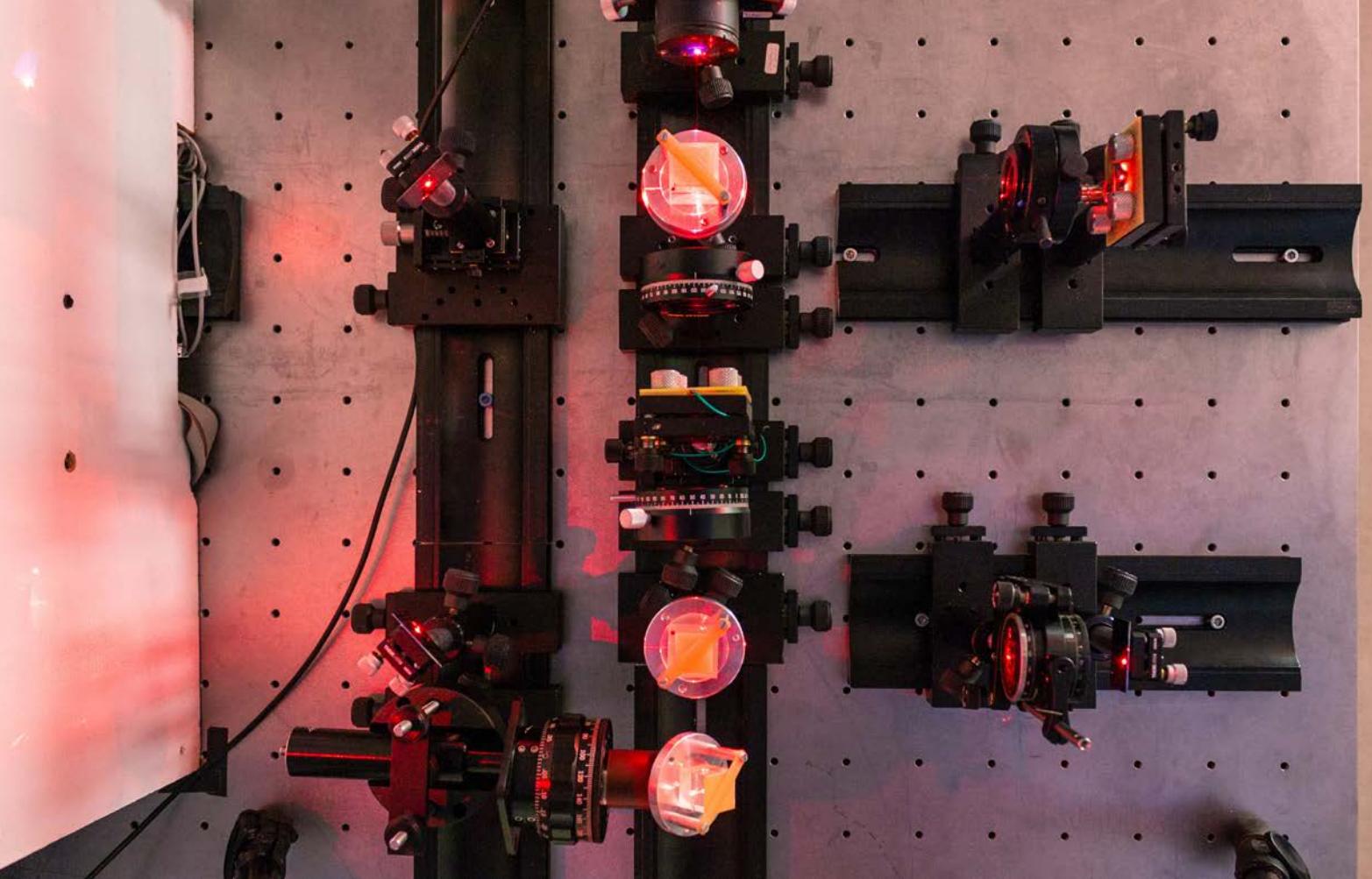


---

## 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, Magnetron sputterquelle
- 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, Batteriezylindrierer
- Oriel Sol1A, 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

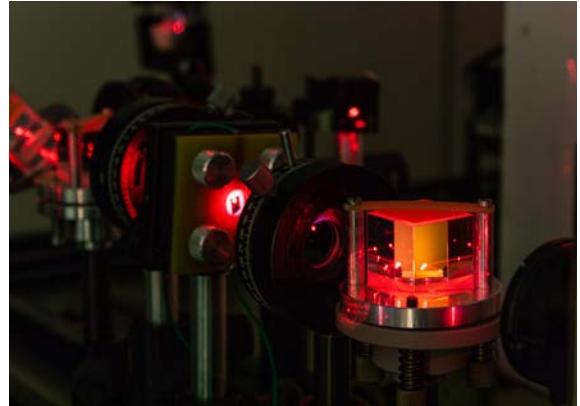
- Glovebox MBraun LABmaster dp
- Glovebox Sylatech
- Struers Accutom-5, Präparationssäge
- Struers RotoPol-35, Poliermaschine
- Struers Secotom-10, Präparationssäge
- Zwicki 2.5, Zugmaschine

### Mikroskopie

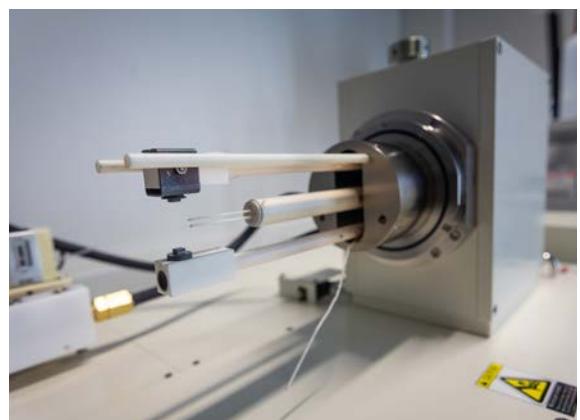
- FEI Helios NanoLab 600i, Rasterelektronenmikroskop mit Focussed Ion Beam
- Hochgeschwindigkeitskamera pco 1200
- Jeol JSM 6400, Rasterelektronenmikroskop
- Leitz Ergolux AMC, Lichtmikroskop
- PIV-System, *Particle Image Velocimetry*
- Thermographiesystem VarioCAM basic
- Zeiss Axiotech, Lichtmikroskop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



Strahlengang des Laserinterferometers (siehe auch Bild links)



Probenhalter des ZEM-3

## 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



BioLogic- und Neware-Batterietester

## Topographie

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



---

## BEARBEITETE STOFFSYSTEME

### Verbindungshalbleiter

- oxidische Halbleiter (z. B.  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{SrTiO}_3$ ) 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.  $\text{Ho}_2\text{PdSi}_3$
- oxidische Pyroelektrika, z. B.  $\text{BaTiO}_3$ ,  $\text{LiNbO}_3$  und  $\text{LiTaO}_3$
- pyroelektrische Polymere, z. B. PVDF
- Galliumnitrid (GaN)

### Kristallphysik

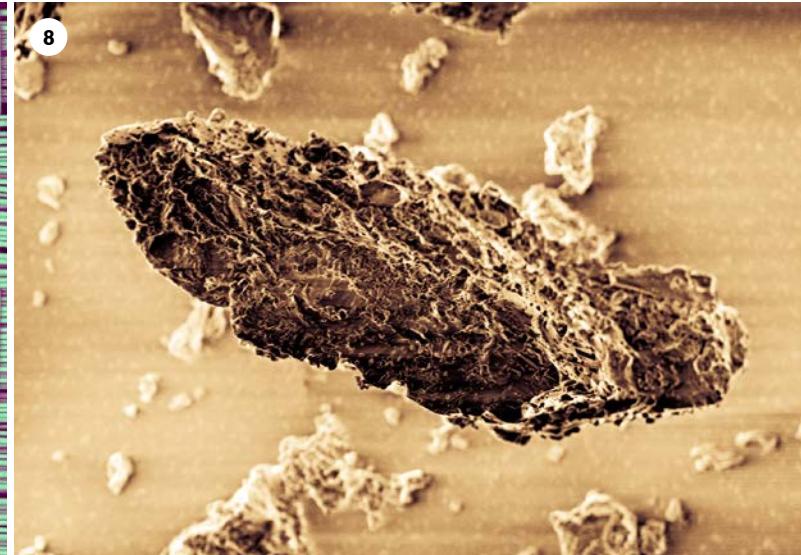
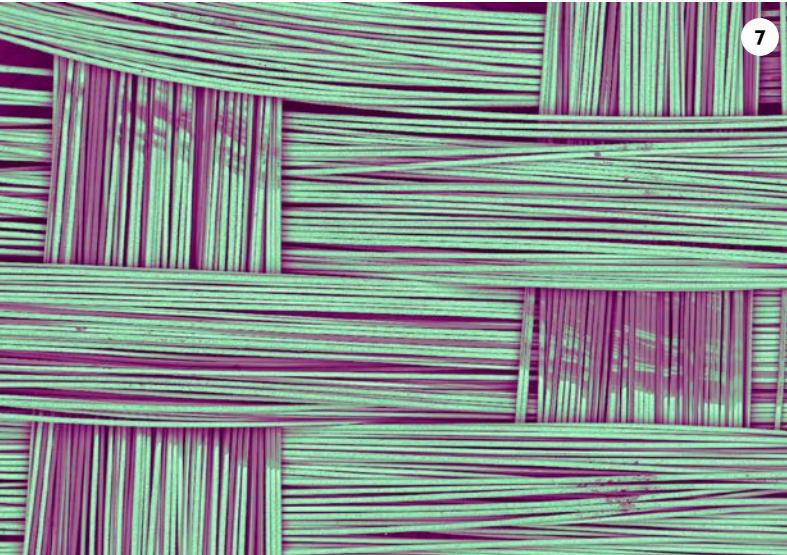
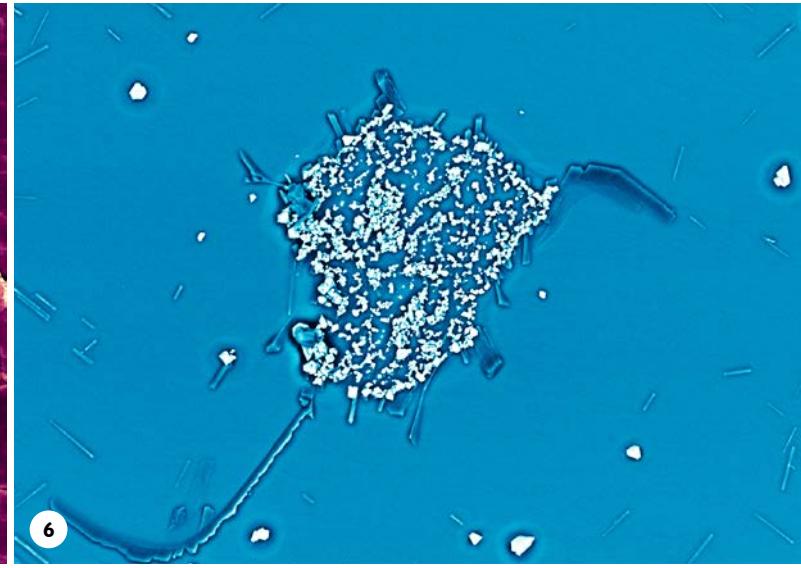
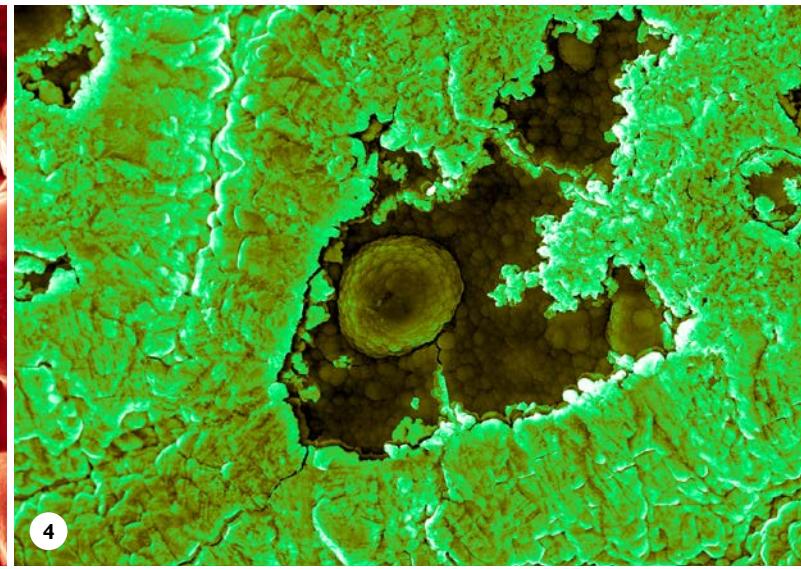
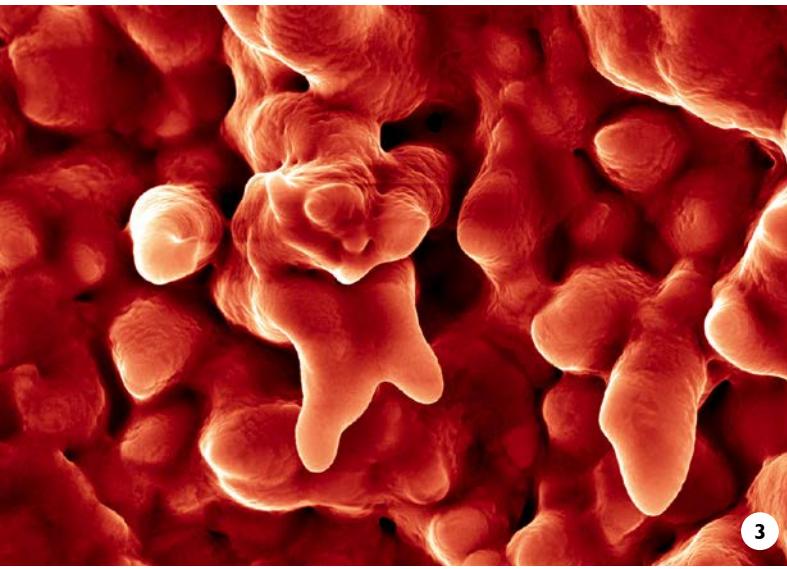
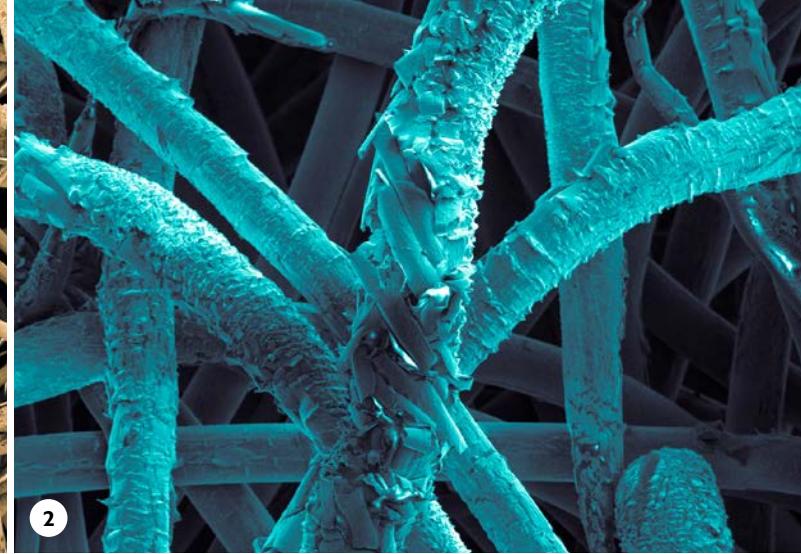
- ferromagnetische Legierungen
- Graphen und Graphenoxid
- intermetallische Phasen aus Übergangsmetallen und Seltenerdmetallen
- metallische binäre und ternäre Chalkogenide der Übergangsmetalle
- Molekülkristalle, Mott-Isolatoren
- Remeika-Phasen
- supraleitende Sulphide

### Batteriematerialien

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

### Bilder auf der rechten Seite:

- 1 FLA-behandelte Silber-Drähte (120x)
- 2 FLA-behandelte Silber-Drähte (500x)
- 3 FLA-behandelte Si-Elektrode (40 000x)
- 4 FLA-behandelte Si-Elektrode (6 500x)
- 5 FLA-behandelte Si-Elektrode (1 000x)
- 6 Ausscheidung auf einem GdCOB-Kristall (3 500x)
- 7 Gewebe-Probe (250x)
- 8 Ausscheidung auf Na-Malachit (2 500x)



# 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 Funktionslemente. 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. Bezuglich 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 Anwendungsbereiche 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-Forschergruppe 520 „Ferroische Funktionselemente: Physikalische Grundlagen und Konzepte“ – kennzeichneten seine Arbeit und das Bestreben, jeweils entlang einer geschlossenen Kette, ausgehend von der Synthese über die Kristallstruktur und Grenzflächenmorphologie bis hin zu den Eigenschaften und Anwendungen zu wirken.

Begleitend hat Prof. Dirk C. Meyer zur methodischen Entwicklung im Bereich der Röntgenanalysemethoden, hier insbesondere mit frühen Arbeiten zur quantitativen Ausarbeitung der Methode der *Diffraction anomalous fine structure* (DAFS) und der Kombination von *X-ray absorption fine structure* (XAFS) und *X-ray standing waves* (XSW) in einem Experiment, beigetragen. Diese Arbeiten



wurden durch die Verleihung des Max-von-Laue-Preises der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie im Jahr 2004 gewürdigt. Hinzu kamen Beiträge zur Instrumentierung von Synchrotronexperimenten, wie die Entwicklung und der Bau spezifischer Halbleiterdetektoren und Arbeiten für die digitale Signalprozessierung zur Erweiterung des Dynamikbereichs dieser Systeme.

Während der Zeit als Leiter einer selbstständigen Nachwuchsgruppe und seiner Juniorprofessur für „Nanostrukturphysik“ baute Prof. Dirk C. Meyer an der TU Dresden eine Gruppe von insgesamt über 15 Diplomanden, Doktoranden und wissenschaftlichen Mitarbeitern auf. In den Bereichen Lehre und Forschung widmete er sich u. a. der Kristallographie und den Röntgenmethoden mit besonderer Intensität. Neben der Fortführung der methodischen Arbeiten unter Nutzung von Synchrotronstrahlung lag ein besonderer Arbeitsschwerpunkt auf Kopplungsphänomenen zwischen elektromagnetischen Feldern und der Kristallstruktur sowie deren Anwendungen für Funktionselemente. Aus diesen Vorarbeiten leitet sich auch der Zugang zu den heute im Fokus stehenden Fragestellungen ab.

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

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

### Strukturelle Erweiterungen

Die methodischen Kompetenzzentren und Schwerpunktgruppen, zu denen auf den Seiten 37 bis 51 berichtet wird, sind Bestandteil der Arbeitsgruppe. Das Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung ZeHS (siehe S. 52 bis 57) hat hinsichtlich der Antragstellung im Wettbewerb und der Umsetzung im Bau maßgeblich von Erfahrungen und Sichtbarkeit der Arbeitsgruppe profitiert.

## 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 Batteremarkt 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“ Streuversuche 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 – 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 Auslösungsregeln nicht mehr greifen, wenn sie auf Translationssymmetrien beruhen, die mit einer Rotation kombiniert wurden, wie es bei den Symmetrieelementen Schraubenachse und Gleitspiegellebene 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 atomlagensenitiven Variante der Röntgenspektroskopie wird in der Arbeitsgruppe insbesondere für die Charakterisierung struktureller Defekte vorangetrieben. Die im Rahmen eines BMBF-Verbundvorhabens am Synchrotron Petra III des DESY in Hamburg eingerichtete *Chemical Crystallography Beamline* ist 2018 in Betrieb gegangen.



---

## 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 (EuXFEL)* in Hamburg ([www.xfel.eu](http://www.xfel.eu)) innehat, beschäftigt sich mit den verschiedenen spektroskopischen Methoden zur Materialuntersuchung unterschiedlichster Stoffsysteme, sowohl an der TU Bergakademie Freiberg als auch an anderen nationalen und internationalen Forschungseinrichtungen. Vor allem die Anbindung sowie enge Kooperation mit dem EuXFEL ist hier besonders hervorzuheben. Seit 2017 ist der EuXFEL erfolgreich im Nutzerbetrieb und ermöglicht mit bis zu 27 000 Lichtblitzen pro Sekunde völlig neue Forschungsmöglichkeiten für Wissenschaftlerteams aus der ganzen Welt – wie auch aus Freiberg. Von dieser neuen Forschungseinrichtung profitieren die unterschiedlichsten naturwissenschaftlichen Gebiete, darunter die im Ressourcenprofil der TU Bergakademie Freiberg verankerten Profillinien Geowissenschaft, Material/Werkstoffe, Energie und Umwelt. Neben der Spitzforschung an weltweit einzigartigen Großgeräten steht die Ausbildung

von Studenten verschiedenster Fachrichtungen im Fokus der Aktivitäten der „Professur für Strukturforschung mit XFELS und Synchrotronstrahlung“. Dies umfasst auf der einen Seite die unmittelbare Einbindung von Studenten in die Forschung, auf der anderen Seite die Vermittlung von Wissen in Form von Spezialvorlesungsreihen mit den Titeln: „Materialforschung mit Freie-Elektronen-Röntgenlasern (XFELS)“ sowie „Spectroscopy: Synchrotron Radiation and its Applications“.

Zugleich ist unsere Arbeitsgruppe maßgeblich bei der Studienwerbung sowie der Öffentlichkeitsarbeit der TUBAF beteiligt. Bei einem öffentlichen Abendvortrag im Rahmen der Science Sessions stellte Herr Dr. Friedrich Roth mit dem Thema „Licht der Zukunft – Modernste Röntgenstrahlungsquellen und die Herausforderungen unsrer Zeit“ die Möglichkeiten der Nutzung von Freie-Elektronen-Lasern für ein breites Publikum dar (siehe Abbildung 1). Die Science Sessions sind ein interaktives Hochschulevent, bei dem Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler der Universität in kurzen Vorträgen



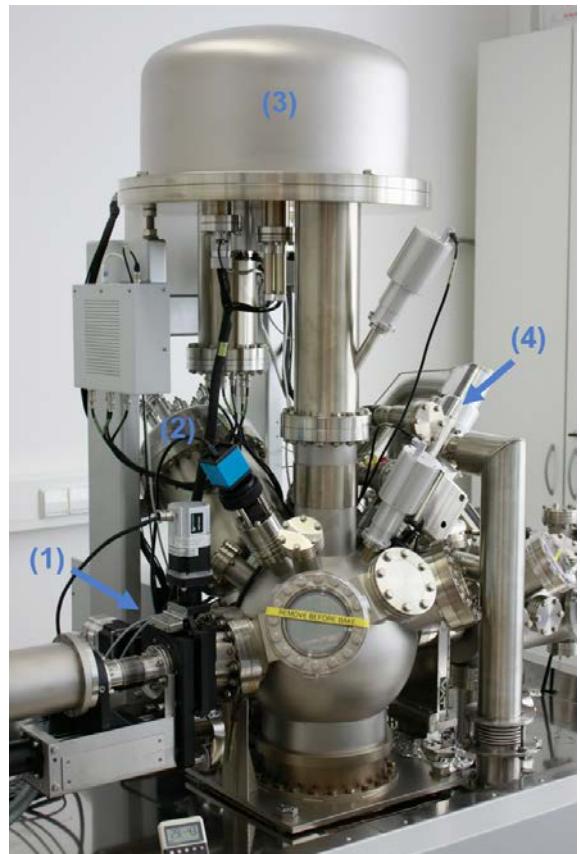
**Abbildung 1:** Impressionen von den zweiten Science Sessions aus dem Campuscafé SIZ

(„Sessions“) ihre aktuellen Forschungsthemen einem Publikum vorstellen. Hierbei werden gesellschaftsrelevante und neuartige Projekte an der Universität ansprechend und allgemeinverständlich aufbereitet, um die Bedeutung der Forschung herauszustellen und Wissenschaft erlebbar zu machen.

## Forschungstätigkeiten am Institut für Experimentelle Physik

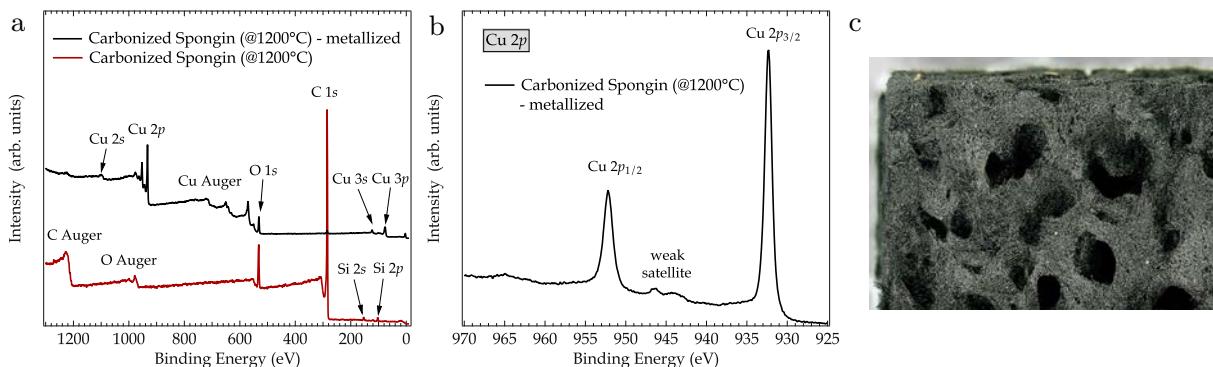
Das Labor der Arbeitsgruppe am Institut für Experimentelle Physik (IEP) ist mit einem modernen Photoemissionsspektrometer – Thermo Scientific Escalab 250Xi (siehe Abbildung 2) – ausgestattet, dass zur Untersuchung der elektronischen Struktur hochentwickelter Materialien geeignet ist. Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS) Messungen dienen verschiedensten Fragestellungen innerhalb des IEP, insbesondere zu Energiewandlungs- und Energiespeichermaterialien.

Weitere kontinuierliche Beziehungen gibt es zum Institut für Elektronik- und Sensormaterialien unter der Leitung von Prof. Yvonne Joseph, wo für grenzflächenbestimmte Funktionsmaterialien die Zusammensetzung dünner Filme analysiert wird, sowie zur Arbeitsgruppe „Biomineralogie und Extreme Biomimetik“ von Prof. Hermann Ehrlich. Speziell die letztere Kooperation hat bereits zu einer Vielzahl hochrangiger Publikationen in internationalen Zeitschriften geführt. Gemeinsam mit einem internationalen Forscherteam konnte 2019 die Struktur eines marinen Badeschwamskeletts entschlüsselt und daraus ein neuartiger dreidimensionaler Verbundwerkstoff für



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

die moderne Werkstoffindustrie entwickelt werden. Dabei wurden von Wissenschaftler/innen um Prof. Hermann Ehrlich die Spongin-Gerüste bei Temperaturen von bis



**Abbildung 3:** XPS-Übersichts- (a) sowie Cu-2p-Rumpfniveau-Spektren (b) des untersuchten karbonisierten Schwammes vor und nach der Metallisation und Ausschnitt des neuartigen Kohlenstoffschwamms (c). Die Abbildungen (a) und (b) sind entnommen aus Petrenko et al., Science Advances 5 (2019) eaax2805.

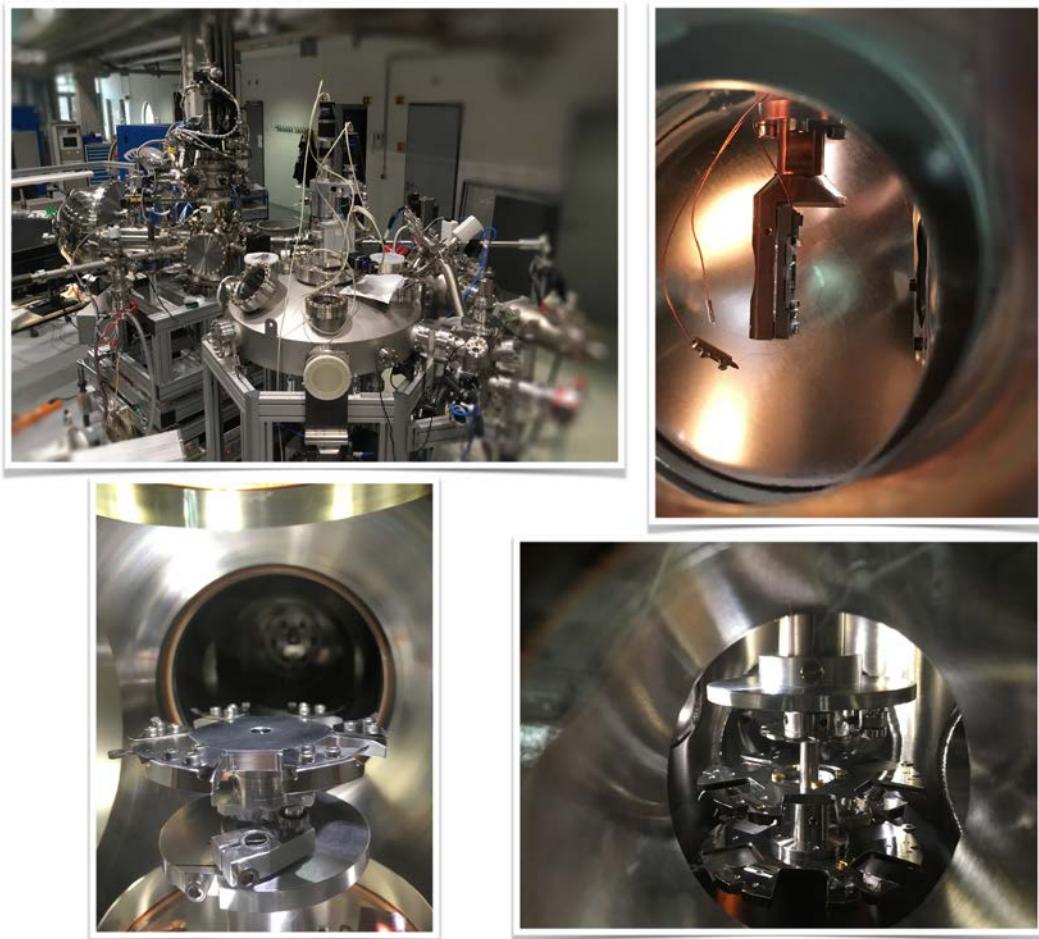
zu 1200 °C karbonisiert. Der daraus entstehende Kohlenstoffschwamm ähnelt der Form und der einzigartigen Mikroarchitektur des ursprünglichen Spongin-Gerüsts und ist so stabil, dass er sich mit einer Metallsäge zu beliebigen Formen schneiden lässt. Überzogen mit einer Metallschicht wird er zudem zu einem einzigartigen Hybridmaterial mit hervorragender katalytischer Leistung. Mittels des XPS-Spektrometers wurde im Anschluss die Oberflächenzusammensetzung der einzelnen Schwammstrukturen zu unterschiedlichen Zeitpunkten des Herstellungsprozesses untersucht (siehe Abbildung 3).

Darüber hinaus existieren auch Forschungskooperationen mit internationalen Partnern, wie zum Beispiel mit der Staatlichen Universität für Informationstechnologien, Mechanik und Optik St. Petersburg (*ITMO University*) in Russland. Es ist hervorzuheben, dass diese Messapparatur sich im besonderen Maße zur Durchführung von Bachelor- und Masterarbeiten eignet. Damit kann sie direkt als Anwendung des während des Studiums angeeigneten Wissens auf Fragestellungen der aktuellen Forschung angesehen werden. Daten, die im Labor der Professur für Strukturforschung mit XFELs und Synchrotronstrahlung erhoben wurden, sind bereits in mehreren Publikationen in hochrangigen wissenschaftlichen Journals veröffentlicht worden.

Neben den bereits genannten Tätigkeitsfeldern ist die Professur Molodtsov direkt und maßgeblich am Aufbau eines neuen (Hochtemperatur-)Photoemissionsspektrometers (HT-PES) im Rahmen des Forschungsneubaus des „Zentrums für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung“ (ZeHS) in Freiberg beteiligt. Dieses neue Großgerät wird

die bereits an der TU Bergakademie Freiberg vorhandenen spektroskopischen Möglichkeiten erweitern und zur Bündelung von vorhandenen Kompetenzen sowie instituts- und fakultätsübergreifenden Kooperationen genutzt werden. Wie von den Gutachtern der DFG hervorgehoben, besteht die Einzigartigkeit des neuen Spektrometers in der Kombination aus (Hochtemperatur)-XPS sowie hochauflösender (Tieftemperatur)-ARPES.

Ein solches Gerät ist nach aktuellem Kenntnisstand nicht im Freistaat Sachsen vorhanden und stellt somit ein Alleinstellungsmerkmal dar, das die bereits am IEP vorhandene spektroskopischen Möglichkeiten vielversprechend erweitert. Im Sinne zukünftiger Vernetzungen unter Wissenschaftlern ist es besonders erfreulich, dass bereits unterschiedliche Institutionen u. a. die Technische Universität Chemnitz, das Leibnitz-Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung Dresden, die Technische Universität Dresden sowie das Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf schriftliches Kooperationsinteresse bekundet haben. Mit dem Schreiben vom 15.08.2019 der DFG wurde die Anschaffung des HT-PES-Spektrometers mit einem Volumen von 1 233 000 € zur Beschaffung empfohlen und wird nach aktueller Planung im November 2020 im ZeHS installiert und in Betrieb genommen. Der Fokus wird dabei zum einen auf Probencharakterisierungen mittels XPS bei hohen Temperaturen und zum anderen auf Untersuchungen der elektronischen Eigenschaften im Valenzbandbereich mittel UV-Photoelektronenspektroskopie (UPS) liegen. Des Weiteren wird mit dem neuen Spektrometer auch winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie möglich sein, um zum Beispiel etwas über



**Abbildung 4:** Impressionen des Upgrades der iDEEAA-Endstation an der MLS in Berlin-Adlershof

die Bandstruktur der untersuchten Materialien herauszufinden. So eröffnet das neue Spektrometer im Rahmen der studentischen Ausbildung ganz neue Optionen und Perspektiven.

## Weitere nationale und internationale Forschungstätigkeiten

### Forschungskooperation mit der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt

Seit nunmehr drei Jahren besteht eine bilaterale Forschungskooperation zwischen der Physikalisch Technischen Bundesanstalt (PTB) und der TU Bergakademie

Freiberg. Die Kooperation basiert auf einer langjährigen Zusammenarbeit von Herrn Dr. Friedrich Roth und der PTB auf dem Gebiet 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.

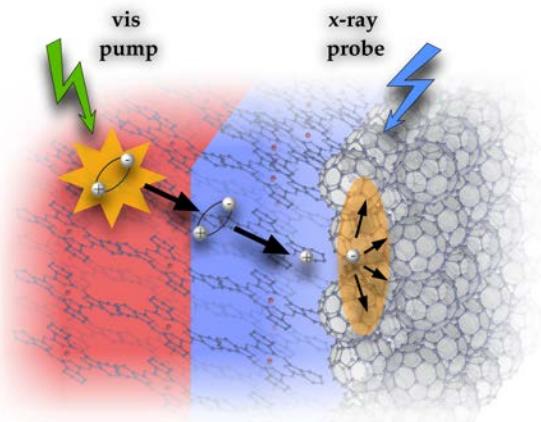
Die PTB als nationales Metrologie-Institut mit wissenschaftlich-technischen Dienstleistungsaufgaben führt im Rahmen ihrer satzungsgemäßen Aufgaben unter

anderem Forschungs- und Entwicklungsarbeiten auf dem Gebiet Radiometrie und Spektrometrie mit Synchrotronstrahlung durch. Die Forschungstätigkeit am Institut für Experimentelle Physik der TU Bergakademie Freiberg im Rahmen der Professur Molodtsov beinhaltet die methodische Weiterentwicklung der grundlegenden und applikationsorientierten Elektronenspektroskopie mit Hilfe von Synchrotronstrahlung.

In den vergangen drei Jahren konnten erfolgreich eine Optimierung der genannten Forschungs- und Entwicklungsaufgaben erreicht und gemeinsame wissenschaftliche Publikationen veröffentlicht werden. Weiterhin konnten bereits einige Freiberger Wissenschaftler/innen und Studenten/Studentinnen, Forschungstätigkeiten an der „Metrology Light Source“ (MLS) in Berlin durchführen. Zudem wurde das vorhandene Spektrometer sowie die Möglichkeiten der Präparation von Proben maßgeblich verbessert sowie erweitert. Hauptneuerung ist ein komplett überarbeiteter Rahmen zur Halterung der Analysekammer, des Spektrometers und des Probenmanipulators sowie eine vollkommen neue Präparations- und Distributionskammer (siehe Abbildung 4). Basierend auf diesen Erfolgen wurde im Jahr 2019 die Forschungskooperation um weitere drei Jahre verlängert.

### 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 das *Atomic, Molecular, and Optical Sciences* (AMOS) Programm am *Lawrence Berkeley National Laboratory* in Berkeley leitet, eine sich stetig weiterentwickelnde und vertiefende Kooperation. Grundlage ist die Etablierung sowie Nutzung von zwei neuartigen *Endstations* an der *Advanced 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



**Abbildung 5:** Funktionsskizze des optisch induzierten Ladungstransfers an der Grenzfläche zwischen CuPc und C<sub>60</sub>

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 C<sub>60</sub>-Molekülen (ein Prototypsystem für organische Photovoltaik) untersucht. Dabei wird Licht im CuPc-Molekül absorbiert und sogenannte Exzitonen (gebundene Elektron-Lochpaare) erzeugt, welche sich durch den molekularen Festkörper zur Grenzfläche zum C<sub>60</sub> bewegen. Dort kommt es zum Ladungstransfer sowie 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-C<sub>60</sub>-Heterostrukturen vermessen (siehe Abbildung 5). 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. Sie wurden im Januar bei *Physical Review B* als *Rapid Communication* veröffentlicht und in ihrer Bedeutung durch Artikel sowohl bei *Phys.org* als auch im PV-Magazin unterstrichen.

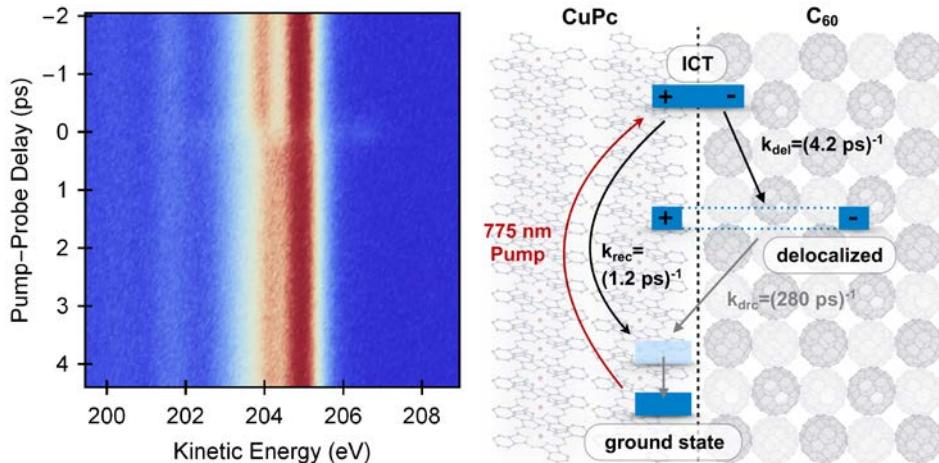
Als weiteres Highlight, welches aus dieser fruchtbaren Kooperation hervorgegangen ist und im Jahr 2019 im Fachjournal *Faraday Discussion* veröffentlicht wurde, kann eine Studie über zeitaufgelöste Röntgenabsorption an CuO genannt werden. Dabei wurde gezeigt, dass thermische Anregungen (inkl. Phasenübergängen), speziell in Hinsicht auf *High Repetition Rate* Röntgenquellen (wie zum Beispiel FELs), bei nahezu allen Photon-Absorptionsprozessen eine wichtige Rolle spielen. Das grundätzliche Verständnis der Auswirkung von (thermischen) Anregungsprozessen sowie deren Minimierung/Unterdrückung bei ultraschnellen, spektroskopischen Röntgenuntersuchungen stellt eine ausschlaggebende Voraussetzung für den Erfolg einer Vielzahl von Experimenten dar. Dies bezieht sich vor allem auf dynamische Prozesse, welche stärker an thermische Anregungen gekoppelt sind bzw. erst nach Zeiten ab 100 fs nach der Photoanregung auftreten, wo aufgrund der Elektron-Phonon-Kopplung Beiträge von Gitterbewegungen mehr und mehr relevant werden. Trotz dieser großen Bedeutung ist zum jetzigen Zeitpunkt die Anzahl an systematischen Studien über die relativen Beiträge von elektronischen und thermischen Anregungen, speziell in Hinsicht auf zeitaufgelöste Röntgen-Spektroskopie, kaum vorhanden und diese Studie kann in ihrer Komplexität und Systematik als erste ihre Art weltweit angesehen werden.

Auf Grundlage mehrerer *General User Proposal* 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. Weiterhin sollen auch katalytische Prozesse wie zum Beispiel photokatalytische Wasserspaltung an Au-Nanopartikel/TiO<sub>2</sub>-Grenzflächen untersucht werden.

Neben den bereits erwähnten Forschungsschwerpunkten wurde im Jahr 2019 ein neues Forschungsprojekt mit dem Titel „Ultrafast Science beyond Pump-Probe“ begonnen. Dieses Projekt hat zum Ziel, spontane Dynamiken in kondensierten Systemen im chemischen und thermischen Gleichgewicht mit zeitaufgelöster XPS über Zeitskalen von Nano- bis Millisekunden zu untersuchen. Im Unterschied zur weitverbreiteten *Pump-Probe*-Technik entfällt bei diesem Ansatz der externe Anregungspuls (wie zum Beispiel durch einen optischen Laser), der die Dynamik auslöst. Dieses Projekt kombiniert neueste

XPS-Messmethoden (*MCP-Delay-Line-Detektor* in Kombination mit einem *Time-to-Digital-Converter* (TDC) für die Zeitmessung) mit korrelationsbasierten Analysemethoden, wobei Techniken wie *X-ray Photon Correlation Spectroscopy* (XPCS) und *Fluorescence Correlation Spectroscopy* (FCS) als Vorbild zur Bestimmung dynamischer Zeitkonstanten dienen. Dem Messprinzip dieser Korrelationsspektroskopien liegt die Idee zugrunde, dass aus scheinbar zufälligen Fluktuationen in der spektroskopischen Signalstärke – durch Berechnung der zeitlichen Autokorrelation – Diffusions- und Reaktionsgeschwindigkeiten des betrachteten Systems zurückgewonnen werden können.

Während einer ersten Messzeit im Jahr 2019 konnte das Messkonzept erfolgreich demonstriert werden, was den Grundstein für zukünftige korrelationsspektroskopische Messungen an der ALS legte. Für das Experiment wurde der auch bei den anderen Messzeiten verwendete Aufbau für zeitaufgelöste XPS-Messungen am Strahlrohr 11.0.2 der ALS genutzt. Zusätzlich wurde ein neuer TDC installiert und eine speziell für dieses Experiment entwickelte Detektorauslesesoftware verwendet. Dabei wird jedes detektierte Photoelektron mit einem Zeitstempel und seiner kinetischen Energie registriert. Bei dem beschriebenen ersten *Proof-of-Principle*-Experiment wurde die durch die *Surface Photovoltage* (SPV) induzierte Verschiebung der Si-2p-Rumpfniveaulinie eines p-dotierten Silizium-Wafers nach Bestrahlung mit einem optischen Laser bei einer Wellenlänge von 532 nm aufgezeichnet. Dabei wurde das Signal sowohl klassisch mit dem bereits seit Jahren genutzten zeitaufgelösten XPS-Messprinzip als auch mittels der Korrelationsmethodik detektiert. Dies hat den großen Vorteil, dass die exakten Dynamiken aus dem *Pump-Probe*-Experiment mit den Ergebnissen der Korrelationsmessung direkt verglichen werden können. Der große Unterschied der beiden Methoden ist, dass das exakte *Timing* (und somit die Synchronisation zwischen dem optischen Laser und der Röntgenquelle), welches die Grundlage für alle *Pump-Probe*-Experimente darstellt, bei den Korrelationsmessungen entweder ignorierbar oder gänzlich unbekannt ist. Die Korrelationsanalyse der XPS-Signale basiert ausschließlich auf der relativen Ankunftszeit zwischen verschiedenen Photoelektronen, mit dem Ziel die Wahrscheinlichkeitsverteilung für das Detektieren zweier Elektronen als Funktion der relativen Ankunftszeit zu gewinnen. Erste Tests haben



**Abbildung 6:** Femtosekunden-zeitaufgelöste C-1s-XPS-Messung an der Grenzfläche zwischen CuPc und C<sub>60</sub> als Funktion von Zeitversatz zwischen Pump-Laser und Probe-X-rays (links) und Übersicht über die Anregungs- und Zerfallskanäle (rechts)

gezeigt, dass aus dieser Messgröße sowohl die zeitliche Autokorrelation der gepulsten Röntgenquelle als auch – unter Zuhilfenahme einiger Annahmen – die dynamische Entwicklung der durch den SPV induzierten Verschiebung der Si-2p-Rumpfniveaulinie aus den Korrelationsmessungen zurückgewonnen werden konnten. Weitere Experimente, die diese Methodik nutzen, sind geplant.

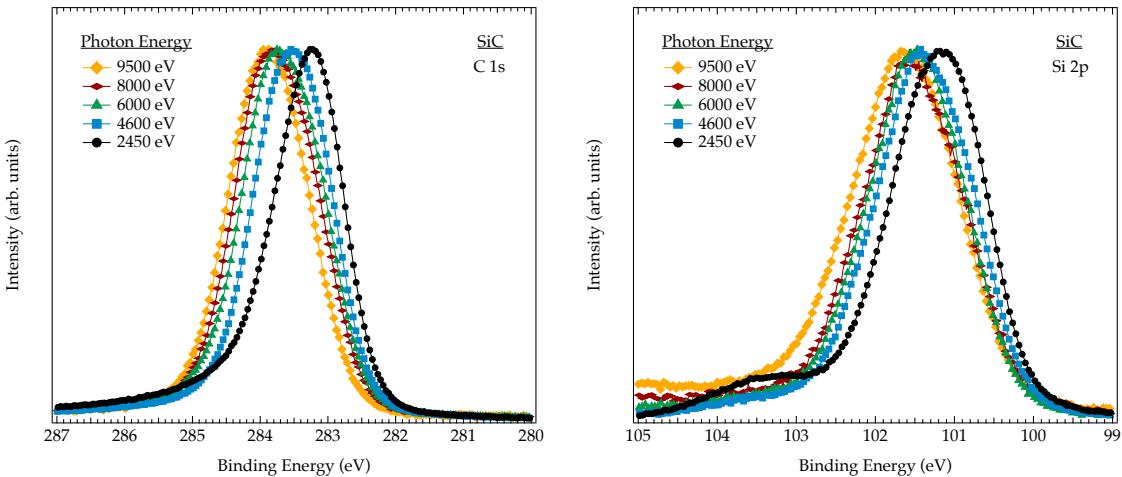
### Forschungskooperation mit der AG Wurth bei FLASH in Hamburg

Nachdem die Arbeitsgruppe erfolgreich bei Messungen in Berkeley gezeigt hat, dass mittels zeitaufgelöster XPS Ladungstransfer-Dynamiken untersucht werden können, wurde im Jahr 2017 der Grundstein für eine Kooperation mit der Arbeitsgruppe Wurth der Universität Hamburg sowie DESY gelegt. Grundlage dieser Kooperation ist es, zeitaufgelöste Photoemission an ähnlichen Ladungstransfer-Systemen auch bei kürzeren Zeitskalen (100 fs bis 10 ps) unter Nutzung eines Freie-Elektronen-Lasers durchzuführen. Bei nunmehr vier Messzeiten am Freie-Elektronen-Laser in Hamburg (FLASH) unter Nutzung der WESPE-Endstation (Wide Angle Electron Spectrometer) konnte erfolgreich der Ladungstransfer zwischen Kupferphthalocyanine (CuPc) als Elektronendonator sowie C<sub>60</sub> als Elektronenakzeptor 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 vonstattengeht. Bei der aktuellen Studie wurde ein vorher unbekannter Zerfallskanal von sogenannten *Interfacial Charge Transfer States*, welche sich an der Grenzfläche beider Materialien bilden, in mobile (also nutzbare) Ladungsträger mit einer Effizienz von 22 % identifiziert (siehe Abbildung 6). Diese Ergebnisse stellen eine Möglichkeit dar, direkt die interne Quanteneffizienz für solche Heterostrukturen zu ermitteln.

### Forschungskooperation mit DESY / PETRA III

Anfang Mai 2019 konnte die Arbeitsgruppe Molodtsov unter Leitung von Dr. Friedrich Roth mit Kollegen von DESY erfolgreich Experimente am Strahlrohr P22 bei Petra III in Hamburg über Rückstoßeffekte, welche beim Photoemissionsprozess unter Nutzung hohen Anregungsenergien auftreten, durchführen. Unter Einhaltung der Impulserhaltung findet ein Rückstoß durch das emittierte Elektron an das Atom, von welchem es kommt, statt, welcher als Ergebnis eine Verringerung der kinetischen Energie des Photoelektrons nach sich zieht. Dieses als Rückstoßeffekt (engl. „recoil effect“) bezeichnete Phänomen manifestiert sich in Energieverschiebungen sowie Peakverbreiterungen der Rumpfniveaulinien, wobei die Verschiebung proportional mit der kinetischen Energie der Elektronen und invers proportional mit der Atommasse, von dem das Rumpfelektron emittiert wird,



**Abbildung 7:** C 1s (links) und Si 2p (rechts) Rumpfniveauspektren von SiC gemessen bei fünf unterschiedlichen Anregungsenergien zwischen 2,4 keV und 9,5 keV

skaliert. Ein Problem bei der Durchführung des Experiments ist die Kalibrierung der Photonenergie, was in dem durchgeführten Experiment durch eine dünne Goldschicht auf der Oberfläche der beiden Proben (Si und SiC) gelöst wurde. Zudem mussten Spannungsnetzteile des Spektrometers kalibriert werden. Bei der Messzeit konnte zum ersten Mal ein umfangreicher Datensatz mit fünf unterschiedlichen Anregungsenergien aufgenommen und ausgewertet werden, welcher das Verständnis über die Rückstoßeffekte maßgeblich verbessern wird (siehe Abbildung 7).

## Forschungs- und Bautätigkeiten am European XFEL

In der Metropolregion Hamburg ist in den letzten Jahren eine internationale Forschungseinrichtung der Superlative (siehe Abbildung 8) entstanden. Der Röntgenlaser *European XFEL* erzeugt 27 000 Lichtblitze pro Sekunde, mit einer Leuchtkraft, die milliardenfach höher ist als die der besten Röntgenstrahlungsquellen herkömmlicher Art. Damit eröffnet der EuXFEL 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. Seit 2018 existiert eine bilaterale Kooperationsvereinbarung zwischen dem EuXFEL und der TU Bergakademie Freiberg, welche es Freiberger Studenten ermöglicht, ihre Master- und Bachelorarbeiten gemeinschaftlich in Freiberg und Hamburg anzufertigen. Dies eröffnet die einzigartige Möglichkeit, dass Studenten der TUBAF bereits in ihrer Ausbildungsphase direkten Zugang zu diesen weltweit einzigartigen Großgeräten haben und Spitzenforschung betreiben können.

## Meilensteine und Highlights 2019

Seit Ende April ist das *European XFEL*-Betriebsrestaurant BeamStop auf dem Forschungscampus in Schenefeld offiziell eröffnet. Es bietet warme Gerichte, Snacks und Getränke. Für *European XFEL*-Beschäftigte, Nutzer, Gäste und externe Besucher stehen in dem neuen Gebäude 150 Sitzplätze zur Verfügung.

Die schnellste Kamera für weiche Röntgenstrahlung der Welt ist erfolgreich auf Herz und Nieren geprüft



**Abbildung 8:** European XFEL mit den drei Betriebsgeländen Schenefeld (Experimentierhalle), Osdorfer Born sowie DESY-Bahrenfeld: Die Gesamtlänge der Anlage beträgt 3,4 km (© European XFEL).

worden. Die Installation, Inbetriebnahme und der Betrieb des einzigartigen Detektors markierten den Höhepunkt von über einem Jahrzehnt internationaler Zusammenarbeit. Der so genannte DSSC-Detektor, der speziell für die niedrigen Energien und langen Röntgenwellenlängen der *European XFEL*-Instrumente für weiche Röntgenstrahlen entwickelt wurde, wird die wissenschaftlichen Fähigkeiten des Instruments für Spektroskopie und kohärente Streuung (SCS) erheblich erweitern. Hier wird er ultraschnelle Untersuchungen von elektronischen Spin- und Atomstrukturen im Nanobereich unter Verwendung jedes Röntgenblitzes des *European XFEL* ermöglichen. Ende Mai wurden die ersten wissenschaftlichen Experimente mit der DSSC-Kamera am SCS-Instrument erfolgreich durchgeführt.

Die ersten Experimente haben im Juni an der Experimentierstation für *High Energy Density* (HED) begonnen. HED ist die sechste und damit letzte Station der aktuellen Versuchseinrichtungen des *European XFEL*, die den Nutzerbetrieb aufnimmt. Mit sechs Stationen auf drei SASE-Beamlines ist der *European XFEL* nun in der Lage, dreimal so viele Nutzerexperimente durchzuführen wie zu Beginn des Betriebs im Jahr 2017. HED kombiniert harte Röntgen-FEL-Strahlung und die Fähigkeit, Materie unter extremen Bedingungen – hervorgerufen durch Druck, Temperatur oder elektrische Felder – zu untersuchen. HED wird eingesetzt für Untersuchungen von Materie, die in Exoplaneten vorkommt, von neuen

Hochdruckphasen und Festkörperplasmen sowie von strukturellen Phasenübergängen komplexer Feststoffe in hohen Magnetfeldern. Das HED-Instrument wird in enger Zusammenarbeit mit dem vom Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) geführten HiBEF-Konsortium gebaut.

Die italienische Physikerin Dr. Sakura Pascarelli wird neue wissenschaftliche Direktorin bei *European XFEL*. Pascarelli hat ihr neues Amt am 1. September 2019 angetreten. Sie kommt von der *European Synchrotron Radiation Facility* (ESRF) in Grenoble, Frankreich. Bei *European XFEL* folgt Pascarelli auf Dr. Andreas Schwarz, der Ende 2018 in den Ruhestand gegangen ist. Als eine von drei wissenschaftlichen Direktoren/Direktorinnen wird sie unter anderem verantwortlich sein für vier der sechs Experimentierstationen am *European XFEL*, die im Bereich kurzwelliger, harter Röntgenstrahlung arbeiten.

Am 1. September 2019 jähren sich die feierliche Eröffnung und der Beginn des Nutzerbetriebs am *European XFEL* zum zweiten Mal. Mit der planmäßigen Erweiterung um vier auf nun sechs Experimentierstationen hat die Einrichtung in den vergangenen zwei Jahren ihre Kapazitäten und Forschungsmöglichkeiten deutlich gesteigert. Gleichzeitig konnte die Leistung des Freie-Elektronen-Röntgenlasers und der Instrumente kontinuierlich verbessert werden. Externe Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler zeigen großes Interesse an Experimenten an der neuen Anlage und reichten bislang 363 Vorschläge



**Abbildung 9:** Luftaufnahme des Betriebsgeländes Schenefeld vom 25. Juli 2019 (© European XFEL)

für Forschungsvorhaben ein, von denen 98 berücksichtigt werden konnten. Insgesamt 1200 Nutzer aus aller Welt kamen für diese Forschungsvorhaben nach Schenefeld. Im Zuge der weiteren Entwicklung der Anlage wird künftig noch mehr Zeit für Nutzerexperimente angeboten. In den letzten zwei Jahren stand die Anlage insgesamt 4032 Stunden für externe Forscher zur Verfügung, wobei die Forscherinnen und Forscher etwa 6 Petabyte an Daten sammelten. Fünf Publikationen wurden bereits in Peer-reviewed-Fachzeitschriften veröffentlicht, viele weitere sind in Vorbereitung.

Am 22. November 2019 feierte European XFEL den zehnten Jahrestag seiner Gründung (siehe Abbildung 10). In Ansprachen und einer Diskussionsrunde blickten Mitarbeiter und Gäste auf ein Jahrzehnt zurück, das von Bau, Entwicklung und ersten Erfolgen im Nutzerbetrieb

geprägt war. Im Fokus standen dabei die wachsenden Möglichkeiten für Experimente am Röntgenlaser und der Austausch von Erfahrungen. Etwa 400 Mitarbeiter und Gäste aus Politik und Wirtschaft sowie Vertreter der Gesellschafter und Partnereinrichtungen nahmen an der Feier teil.

### Russisch-Deutsches Labor am Helmholtz-Zentrum Berlin

Als Supervisor war Prof. Molodtsov federführend beim Aufbau der Deutsch-Russischen Beamline sowie der damit verbundenen Experimentierstation (*Russian-German Laboratory*) bei BESSY II am Helmholtz-Zentrum Berlin (HZB) beteiligt. Unmittelbar nach seiner Berufung nach Freiberg wurde die TU Bergakademie Freiberg als Partner in der bilateralen Kooperation im Rahmen des



**Abbildung 10:** Redner und Geschäftsführung schneiden die Geburtstagstorte an (links). European XFEL-Geschäftsführerin Nicole Elleuche und der Vorsitzende der Geschäftsführung Robert Feidenhans'l begrüßen die Gäste. (© European XFEL)



**Abbildung 11:** Mitglieder des Lenkungsausschusses sowie leitende Wissenschaftler des Russisch-Deutschen Labors mit unterschriebenem Verlängerungsantrag (© HZB/Michael Setzpfandt)

Russian-German Laboratory aufgenommen. Der Kooperationsvertrag wurde beidseitig unterzeichnet und im Dezember 2016 sowie Dezember 2019 verlängert. Mit Hilfe der vorhandenen Apparatur in Berlin und den guten Kontakten zum HZB sowie zu den mit dem Strahlrohr assoziierten Wissenschaftlern vor Ort besteht eine hervorragende Basis für zukünftige synchrotronbasierte Messungen. Zudem wurde im September 2019 (unter Anwesenheit der Mitglieder der Arbeitsgruppe Molodtsov) feierlich ein neues Instrument für spin- und winkelaufgelöste Photoemission, welches durch das Russisch-Deutsche Labor entwickelt wurde, am Elektronenspeicherring BESSY II in Berlin eingeweiht (siehe Abbildung 11). Der hohe Stellenwert, welcher dem Labor beigemessen wird, zeigt auch die Beteiligung der russischen Botschaft: Der Botschaftsrat im Referat für Bildungs-, Wissenschafts- und Technikfragen, Alexander Rusinov, sprach zum Auftakt am HZB und am Abend empfing der Botschafter Sergei Jurjewitsch Netschajew die Teilnehmerinnen und Teilnehmer des anlässlich der Einweihung stattfindenden internationalen Workshop in der russischen Botschaft in Berlin. Damit hat die TU Bergakademie Freiberg beste Möglichkeiten für enge Kooperationen, auch mit internationalen Partnern und kann ihr Portfolio an Messtechniken erheblich erweitern. Zu diesem Zwecke fand am 27.01.2020 unter Leitung des Prorektorats Forschung sowie der

Arbeitsgruppe Molodtsov eine Informationsveranstaltung zum Russisch-Deutschen Labor für alle interessierten Wissenschaftler der TU Bergakademie Freiberg statt, bei dem Herr Dr. Friedrich Roth das Labor und die bestehenden Untersuchungsmöglichkeiten vorstellt.

## Lehre in Hamburg

### Fünf Jahre gemeinsame Kurse zwischen der TU Bergakademie Freiberg und dem European XFEL

Vom 22. bis 27. September 2019 besuchte eine Gruppe von zehn Masterstudenten der TU Bergakademie Freiberg den European XFEL in Hamburg, um sich über Aufbau und Anwendungen des Röntgenlasers zu informieren. Bereits seit fünf Jahren wird am Institut für Experimentelle Physik eine Spezialvorlesungsreihe mit dem Titel „Materialforschung mit Freie-Elektronen-Röntgenlasern (XFELs)“ unter der Leitung von Prof. Serguei Molodtsov sowie Dr. Friedrich Roth angeboten. In dem einwöchigen Kurs erhalten die Studierenden direkt vor Ort einmalige Einblicke in den Aufbau und die Anwendung der neuesten Generation von Röntgen-Lichtquellen.

Das außergewöhnliche Wahlpflichtmodul bietet allen Studierenden der TU Bergakademie Freiberg bereits in



**Abbildung 12:** Zum 5-jährigen Jubiläum der Blockvorlesung begrüßten Prof. Dr. Robert Feidenhans'l (Geschäftsführer des *European XFEL*, Bildmitte im blauen Hemd) und Prof. Dr. Serguei Molodtsov (wissenschaftlicher Direktor, mittig rechts im Bild mit grauem Jackett) die Studierenden persönlich in Hamburg. (© European XFEL)

ihrer Ausbildungsphase die Möglichkeit, mit leitenden Wissenschaftlern am *European XFEL* direkt in Kontakt zu treten, Informationen über Spitzenforschung zu sammeln sowie dieses weltweit einzigartige Großgerät zu besuchen. Im Rahmen der Blockvorlesung besuchten die Studierenden auch die Experimentierhalle vom *European XFEL* in Schenefeld, die DESY Speicherring-Röntgenstrahlungsquelle PETRA III und den weltweit ersten Freie-Elektronen-Röntgenlaser FLASH, ebenfalls bei DESY.

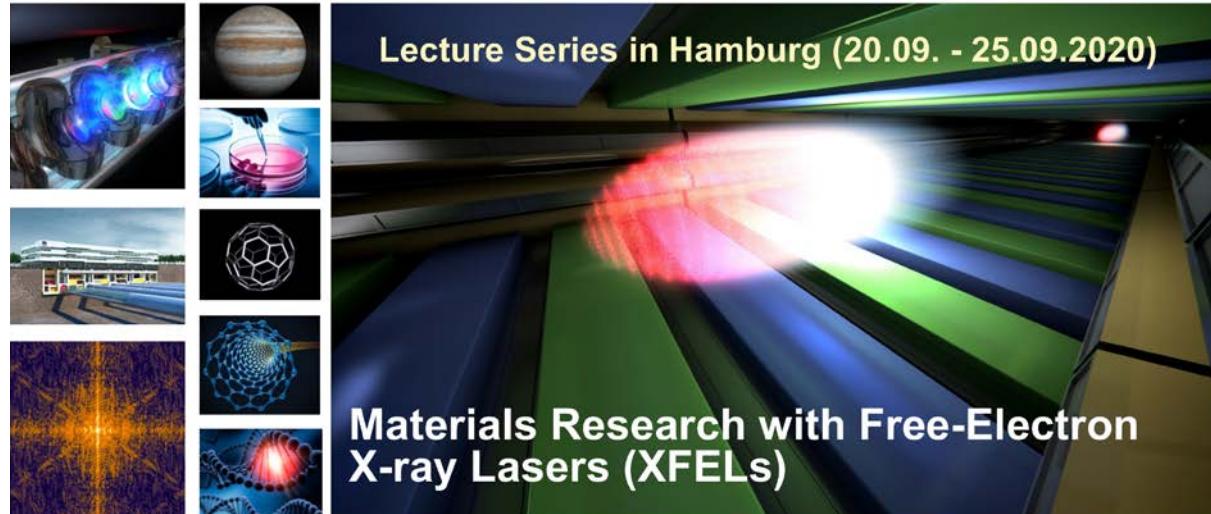
Der hohe Stellenwert, welcher diesem einzigartigen Wahlpflichtmodul auch auf Seiten des EuXFEL beigemessen wird, zeigte die persönliche Begrüßung der Studenten durch Prof. Dr. Robert Feidenhans'l (Geschäftsführer des EuXFEL) und weitere leitende Wissenschaftler vom EuXFEL zum fünfjährigen Bestehen im September 2019 (siehe Abbildung 12). In den letzten fünf Jahren konnte die Arbeitsgruppe dieses neuen Moduls erfolgreich an der TU Bergakademie Freiberg etablieren, was auch durch konstant hohe Teilnehmerzahlen widergespiegelt wird. Ab dem kommenden Sommersemester 2020 ist die Blockvorlesung auch fester Bestandteil des neuen Masterprogramms „Advanced Materials Analysis“ der

Fakultät 5. Der bilaterale Kooperationsvertrag zwischen dem EuXFEL und der TU Bergakademie Freiberg ermöglicht es Freiberger Studenten ihre Bachelor- und Masterarbeiten gemeinschaftlich in Freiberg und Hamburg anzufertigen.

### Ankündigung Blockvorlesung 2020

Die nächste Blockvorlesung „Materialforschung mit Freie-Elektronen-Röntgenlasern (XFELs)“ ist vom 20. bis 25. September 2020 in Hamburg geplant (siehe Abbildung 13). Die Vorlesungsreihe zeigt die Nutzung von konventionellen und ultrahoch-zeitaufgelösten spektroskopischen Methoden und Methoden zur Bestimmung der strukturellen Eigenschaften:

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



**Abbildung I 3:** Ankündigung der Blockvorlesung 2020 am DESY in Hamburg

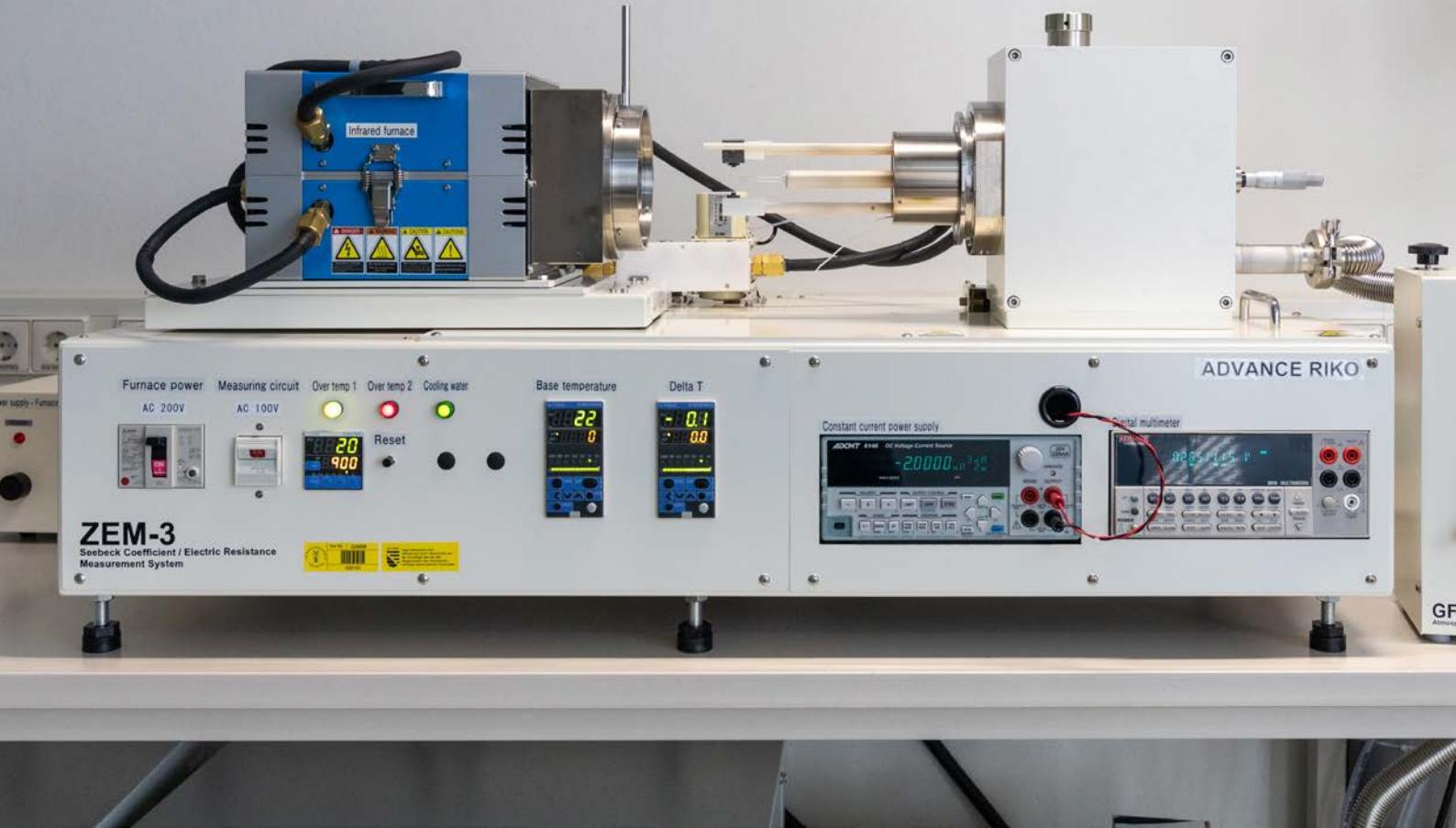
Die Anwendung der genannten Methoden wird während den Führungen durch den weitersten Freie-Elektronen-Röntgenlaser FLASH bei DESY illustriert. Es wird außerdem einen Besuch des European XFEL geben. Die Studierenden erlangen vertiefte Kenntnisse des Aufbaus und der Anwendung der neuesten Generation von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

Die Studierenden lernen Messmethoden kennen, bei denen ultrakurze Laserlichtblitze im Röntgenbereich bis zu hunderttausendmal in der Sekunde und mit einer Leuchtstärke, die milliardenfach höher ist, als die der besten Röntgenstrahlungsquellen herkömmlicher Art, eingesetzt werden. Freie-Elektronen-Röntgenlaser werden

in der Materialforschung und -entwicklung von katalytischen, magnetischen sowie biologischen Stoffen und Hybrid-Strukturen benutzt. Verschiedene experimentelle 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 zu sammeln.

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

Die Studenten können sich gerne bis zum 14.08.20 via OPAL registrieren.



## ARBEITSGRUPPE „KRISTALLPHYSIK“ JUN.-PROF. ROMAN GUMENIUK

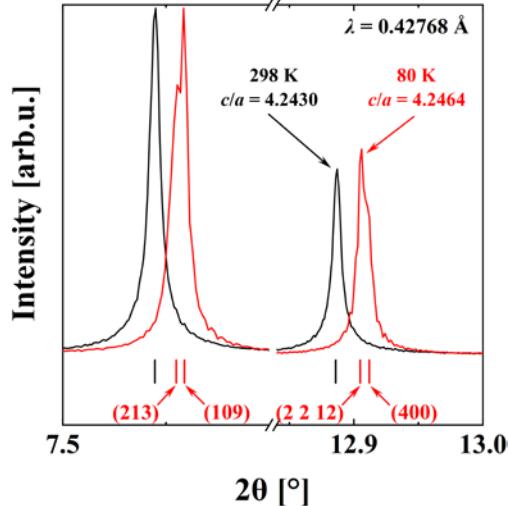
Das DAAD-Projekt „Thermoelektrische Eigenschaften von Mineral-ähnlichen Verbindungen mit Schwefel“ ist auf die Untersuchung der strukturellen und thermoelektrischen (TE) Eigenschaften von In-basierten  $M\text{In}_2\text{S}_4$  Thiospinellen ( $M = \text{Mn, Fe, Co, Ni}$ ) und deren Mischkristalle ( $\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{In}_2\text{S}_4$ ,  $x = 0-1$ ) fokussiert. Um diese Eigenschaften besser zu verstehen, wurde der Forschungsumfang auch auf binäre  $\text{In}_{1-x}\square_x\text{In}_2\text{S}_4$  sowie ternäre  $\text{Fe}_x\text{In}_y\text{S}_4$  und  $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_2\text{S}_{4-z}(\text{Se,Te})_z$  ausgeweitet. Der Großteil der erzielten Ergebnisse wurde bereits veröffentlicht [1–3]. Zwei weitere Veröffentlichungen sind gegenwärtig in Arbeit. Dieser Bericht umfasst die wesentlichen Ergebnisse bezüglich des  $\text{Fe}_x\text{In}_y\text{S}_4$ -Thiospinells ebenso wie neue Daten über die Kristallstruktur des  $\text{In}_2\text{S}_3$ -Sulfids sowie die TE-Eigenschaften des  $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_2\text{S}_{4-z}(\text{Se,Te})_z$ -Systems.

### Literatur-Rückblick und Methodik

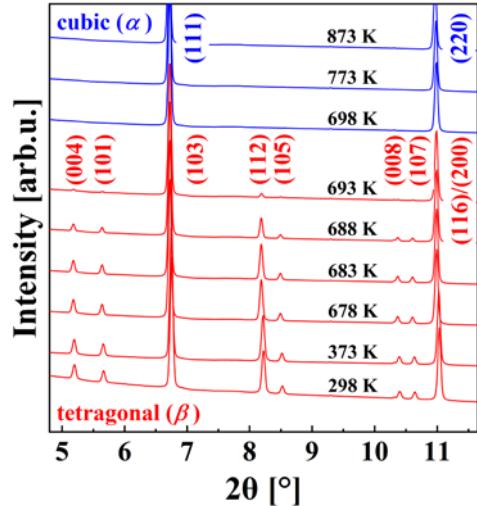
Eine umfassende Untersuchung von Indiumsulfid  $\text{In}_{1-x}\square_x\text{In}_2\text{S}_4$  (wobei  $\square$  für Leerstand steht,  $x = 0,33; 0,28; 0,22; 0,16$ ) [1], zeigte eine mögliche Eignung dieses

Thiospinells für TE-Anwendungen. Diese Studie ist auch von besonderer Bedeutung, da das Interesse an den optischen und photokatalytischen Eigenschaften dieses Materials stetig wächst (siehe Scopus-Datenbank, 1290 Datensätze im April 2020 gegenüber 927 im März 2019). Trotz recht guter Kenntnisse über seine physikalischen Eigenschaften [4, 5] ist der Mechanismus des beobachteten  $\alpha$ - $\beta$ -Phasenübergangs (der im potenziellen Betriebstemperaturbereich des TE-Geräts auftritt) noch unklar. Ein weiteres Problem ist eine enge strukturelle Beziehung zwischen beiden polymorphen Modifikationen, was die Phasenanalyse besonders kompliziert macht, wenn beide Phasen in der Probe vorhanden sind [1]. Diese Probleme motivierten uns, weitere Strukturstudien an der tetragonalen  $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_2\text{S}_4$ -Verbindung durchzuführen, welche hochauflösende Röntgenbeugungsexperimente sowie umfangreiche Messungen der physikalischen Eigenschaften (spezifische Wärmekapazität, elektrischer Widerstand, Seebeck-Koeffizient und Wärmeleitfähigkeit) beinhalteten.

Unsere früheren Untersuchungen [1] ergaben eine extrem niedrige Gesamtwärmeleitfähigkeit



**Abbildung 1:** Hochauflösende PXRD-Aufnahme eines gepulverten  $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_2\text{S}_4$ -Kristalls gemessen bei 80 K und 298 K.



**Abbildung 2:** Ausgewählte *in situ* HA-PXRD-Aufnahmen der polykristallinen  $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_2\text{S}_4$ -Probe gemessen im Aufheizmodus mit  $\lambda = 0,73138 \text{ \AA}$  Strahlung.

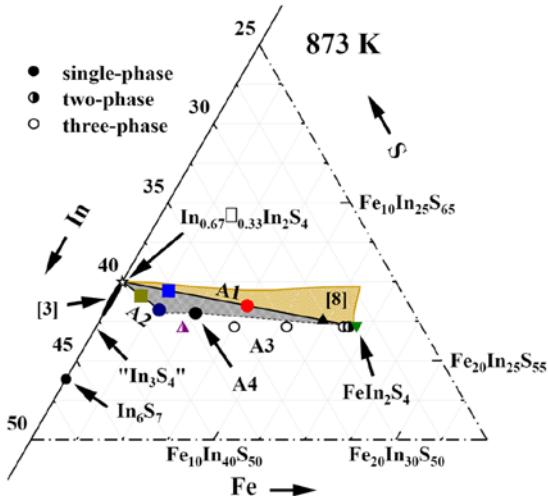
$\kappa_{\text{tot}} < 0,8 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$  über 300 K in den kubischen  $\text{In}_{1-x}\square_x\text{In}_2\text{S}_4$ -Proben (vorteilhaft für TE-Anwendungen), die jedoch mit einem relativ großen spezifischen elektrischen Widerstand  $\rho > 10^3 \Omega\text{m}$  verbunden ist (zu hoch für TE-Material). Dies war eine treibende Kraft, um zu untersuchen, wie unterschiedliche chemische Substitutionen  $\rho$  (durch Optimierung der Ladungsträgerkonzentration  $n$  oder der Ladungsträgermobilität  $\mu$ ) im In-Thiospinell beeinflussen. Als erstes Objekt dieser Studie wurde das  $\text{Fe}_x\text{In}_y\text{S}_4$ -Thiospinell ausgewählt. Tatsächlich ist die Verbindung mit der Zusammensetzung  $\text{FeIn}_2\text{S}_4$  das am häufigsten untersuchte Indiumthiospinell. Ein Einbau von Fe in die Struktur von  $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_2\text{S}_4$  und die Existenz eines  $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_2\text{S}_4\text{-FeIn}_2\text{S}_4$ -Mischkristalls wurde von mehreren Autoren nachgewiesen [6–8]. Interessanterweise wird in dieser Reihe über eine lineare Abnahme der direkten Energielücke mit zunehmendem Fe-Gehalt berichtet [8], was auf eine mögliche Zunahme von  $n$  im binären In-Thiospinell durch Fe-für-In-Substitution hindeutet. In unseren Experimenten [3] haben wir uns nicht nur mit bekannten  $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_2\text{S}_4\text{-FeIn}_2\text{S}_4$ -Mischkristallen befasst, sondern auch mit  $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_2\text{S}_4\text{-Fe}$ - und  $\text{In}_2\text{S}_4\text{-Fe}$ -Querschnitten des ternären Fe-In-S-Systems (Abbildung 3).

Wir haben auch versucht, die Ladungsträgermobilität des kubischen  $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_2\text{S}_4$  zu verbessern, wobei Schwefel durch Selen oder Tellur ersetzt wurde. Bekanntlich führt die Verringerung der Elektronegativität des

Anions beim Übergang von Sulfid zu Selenid zu Tellurid zu einer allmählichen Verringerung der Bandlücke [9], und die chemische Substitution durch ein isoelektronisches Element führt häufig zu Modifikationen der Bandstruktur [10]. Beispielsweise ergab die kürzlich durchgeführte umfassende Studie zum  $\text{SnS}_{1-x}\text{Se}_x$ -Sulfid, dass der Einbau von Selen zu einer leichten Abnahme der effektiven Lochmasse  $m_b^*$  (und damit zu einer Erhöhung der Ladungsträgermobilität) führt, während die Temperaturentwicklung der Banden deren Konvergenz und eine Verbesserung der TE-Leistung zur Folge hat [11]. Nach diesen Konzepten synthetisierten wir zwei Probenreihen, die Selen und Tellur enthielten:  $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_{2-z}\text{X}_z$  ( $\text{X} = \text{Se}, \text{Te}$ ) mit  $z = 0; 0,05; 0,1; 0,15; 0,2; 0,5$ . Eine höhere nominelle Konzentration von Se als Te wurde gemäß den angegebenen Phasendiagrammen gewählt [12, 13].

### $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_2\text{S}_4$ -Thiospinell

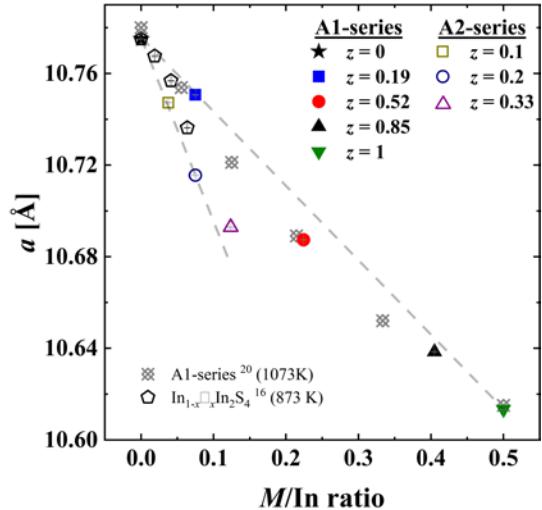
Strukturuntersuchungen an polykristallinen Proben von  $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_2\text{S}_4$  wurden unter Verwendung von Labor- und hochauflösenden (HA) Pulverröntgenbeugungsexperimenten (PXRD) durchgeführt. Sie zeigten, dass Massenproben immer einphasig waren und tetragonales  $\beta\text{-In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_2\text{S}_4$  enthielten, während ihre Gitterparameter (GP) in engen Bereichen  $a = 7,6195(6) \text{ \AA}$  und



**Abbildung 3:** Untersuchter Teil des ternären Phasendiagramms des Fe-In-S-Systems bei 873 K. Der vorgeschlagene Homogenitätsbereich des Fe-In-Thiospinells ist grau schattiert und die komplementäre Region, welche zuvor bei 1073 K untersucht wurde, ist mit Gold markiert [6].

$c = 32,325(4)$  Å variierten, unabhängig vom Glühverfahren. Das Verhältnis  $c/a = 4,2426$  war ein typischer pseudokubischer Wert, der eher keine tetragonale Verzerrung der anfänglich kubischen Kristallstruktur anzeigt. Dies ist auch der Grund, warum die meisten tetragonalen Röntgenreflexe vollständig überlappen [z. B. (213) und (109), schwarzes Muster in Abbildung 1]. Offensichtlich ist es nicht möglich, diese Reflexe bei Raumtemperatur mit einem herkömmlichen Labordiffraktometer unter Verwendung von Cu-K $\alpha_1$ /Co-K $\alpha_1$ -Strahlung aufzulösen. Um dieses Problem zu lösen, wurde der HA-PXRD-Aufbau bei niedriger Temperatur verwendet, bei der das Verhältnis  $c/a$  stärker verzerrt war (rotes Muster in Abbildung 1). Dies ermöglichte es uns auch, zum ersten Mal das in der Literatur akzeptierte tetragonale Strukturmodell für  $\beta\text{-In}_{0.67}\square_{0.33}\text{In}_2\text{S}_4$  zu validieren [14, 15].

Im nächsten Schritt wurden temperaturabhängige *In-situ*-PXRD-Experimente durchgeführt. Sie zeigten deutlich eine allmähliche Abnahme der Intensität der tetragonalen Satellitenreflexe beim Erhitzen [(004), (101), (112), (105), (008) und (107) in Abbildung 2], was den tetragonal-zu-kubisch  $\beta\text{-}\alpha$ -Übergang zwischen 693 und 698 K bestätigt. Eine kontinuierliche Volumenänderung im Zusammenhang mit dem Übergang wurde beobachtet (im Bereich von 683 bis 698 K, hier nicht gezeigt), was darauf hindeutet, dass der Typ des Übergangs zwischen

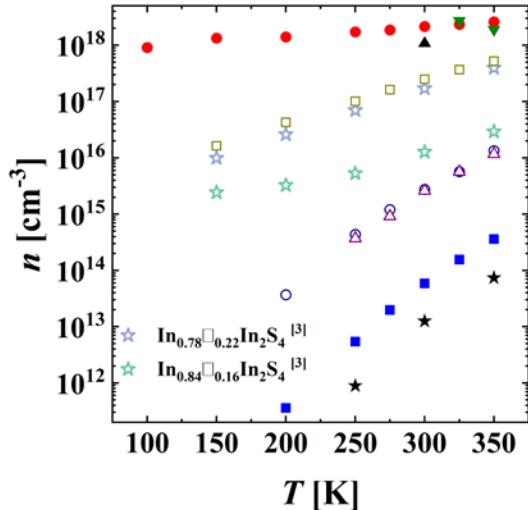


**Abbildung 4:** Zellparameter gegen  $M/\text{In}$ -Verhältnis der Proben der A1- und A2-Serien nach der Synthese zusammen mit zuvor berichteten Daten [1, 6].  $M = \text{Fe}$  oder  $\text{In}$  (Überschuss von  $\text{In}$  im Vergleich mit Zusammensetzung  $\text{In}_{0.67}\square_{0.33}\text{In}_2\text{S}_4$ ).

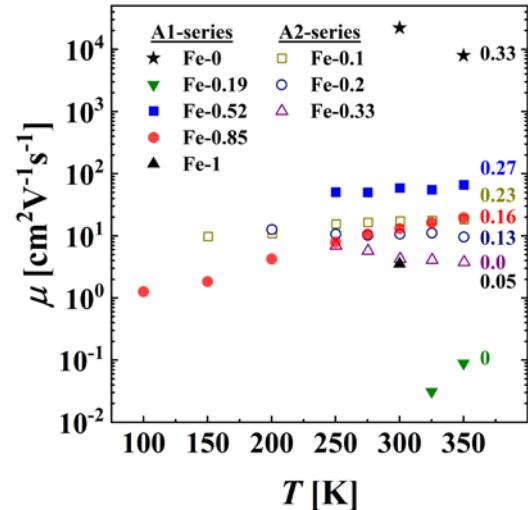
der 1. und 2. Ordnung liegt. Die Analyse der physikalischen Eigenschaften am Phasenübergang (z. B. spezifische Wärmedaten) sowie die Erstellung des Manuskripts sind im Gange.

## Fe-In-S-System

Vier Serien von Fe-In-S-Proben, beschrieben durch die Formeln  $(\text{In}_{0.67+y}\square_{0.33-y})_{\text{tetr}}[\text{In}_{2-z}\text{Fe}_z]_{\text{oct}}\text{S}_4$  ( $z = y = 0$ ; 0,19; 0,52; 0,85; 1; A1, Ladungsbilanz),  $(\text{In}_{0.67+y}\square_{0.33-y})_{\text{tetr}}[\text{In}_{2-z}\text{Fe}_z]_{\text{oct}}\text{S}_4$  ( $z = y = 0,1$ ; 0,2; 0,33; A2, Ladungsungleichgewicht),  $(\text{In})_{\text{tetr}}[\text{In}_{2-z}\text{Fe}_z]_{\text{oct}}\text{S}_4$  ( $z = 0,53$ ; 0,73; 0,95; 0,97; A3) und  $\text{Fe}_{0,345}\text{In}_{2,552}\text{S}_4$  (A4) wurden durch Langzeitglühen bei 873 K und anschließendes Abschrecken in flüssigem Stickstoff synthetisiert (Abbildung 3). Die Abkürzungen „tetr“ und „oct“ bezeichnen Atome, die tetraedrische 8a- und oktaedrische 16d-Stellen besetzen. Die PXRD-Phasenanalyse bestätigte, dass die Proben aus den Reihen A1 ( $0 \leq y = z \leq 1$ ), A2 ( $0 \leq y = z \leq 0,2$ ) und A4 einphasig waren, während die anderen Proben aus der Reihe A2 ( $z = 0,33$ ) und A3 Sekundärphasen enthielten [3]. Im Anschluss an diese Ergebnisse schlugen wir einen Homogenitätsbereich von Eisenindiumthiospinell bei 873 K vor (grau in Abbildung 3), der die zuvor beschriebene Region bei 1073 K ergänzt [6] (Gold



**Abbildung 5:** Ladungsträgerkonzentration für A1- und A2-Proben. Der Farbcode ist analog zu Abbildung 6.



**Abbildung 6:** Ladungsträgermobilität für A1- und A2-Proben. Die Zahlen indizieren die nominelle Vakanz-Konzentration pro Formeleinheit.

in Abbildung 3). PXRD-Experimente zeigten deutlich, dass der Einbau einer kleinen Menge Fe in das anfänglich tetragonale  $\text{In}_{0.67}\square_{0.33}\text{In}_2\text{S}_4$  (das  $\beta$ -Polymorph) zu einer Stabilisierung des kubischen  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ -Strukturtyps ( $F\bar{d}m$ ,  $a \approx 10 \text{ \AA}$ ) führt.

Die ungewöhnliche Verringerung des GP bei größerem Fe-Gehalt (niedrigere Leerstellenkonzentration) wurde in beiden Probenreihen (Abbildung 4) beobachtet, ähnlich wie beim binären In-S- und ternären  $M\text{In}_2\text{S}_4$ -System ( $M = \text{Mn, Co, Ni, Cu}$ ) [1, 2, 16–18] und im Gegensatz zu anderen  $M\text{In}_2\text{S}_4$ -Verbindungen ( $M = \text{Na, Ag, Cd}$ ) [19–21]. Der Vergleich der interatomaren  $M\text{-S-Abstände}$  in Tetraedern und Oktaedern, der Ionenradien und der bevorzugten Koordinationszahl für  $M$ - und In-Atome führte zu dem Schluss, dass die Verteilung der  $M$ -Atome und die Größe ihrer Ionenradien (im Vergleich zu In) eine entscheidende Rolle bei dem beobachteten GP-Trend spielt. Folglich führt die Substitution von In durch kleineres Fe zu einem verringerten GP. Es wurde auch postuliert, dass die steilere Abnahme des GP für die A2- als für die A1-Serie (Abbildung 4) die Folge einer zusätzlichen elektrostatischen Anziehung zwischen  $\text{In}^{3+}$  und  $\text{S}^{2-}$ -Ionen innerhalb der Tetraeder ist, die durch ein Ladungsungleichgewicht verursacht wird (siehe allgemeine Formel der A2-Serie). Darüber hinaus ergab die Analyse der Intensitäten von PXRD-Reflexen, der Verfeinerung der Kristallstruktur sowie

$^{57}\text{Fe}$ -Mössbauer-Spektroskopie für die A1- und A2-Proben [3], dass Fe-Atome die oktaedrischen Hohlräume nur im untersuchten Thiospinell besetzen.

Die elektronischen und thermischen Transporteigenschaften wurden für A1- und A2-Proben untersucht. Beide Reihen zeigen typische Halbleitereigenschaften, d. h. den spezifischen elektrischen Widerstand  $\rho$  zwischen  $10^{-4}$  und  $10^3 \Omega\text{m}$  und eine monotone Abnahme von  $\rho(T)$  mit zunehmender Temperatur [3]. Im Gegensatz zum vorherigen Bericht über die Energiefülle in Fe-In-S-Thiospinell [8] konnten wir in der A1-Serie keine eindeutige Abhängigkeit von  $\rho(T)$  oder der Aktivierungsenergie  $E_a$  vom Fe-Gehalt (oder der Leerstellenkonzentration) feststellen. Bei den A2-Proben nehmen  $E_a$  und  $\rho(T)$  mit abnehmender Leerstellenkonzentration monoton zu. Der negative Seebeck-Koeffizient  $\alpha$  und der Hall-Koeffizient für alle Proben [3] zeigen an, dass Elektronen die Hauptladungsträger sind. Große Werte  $|\alpha(T)| > 200 \mu\text{V K}^{-1}$  über 100 K entsprechen einem hohen  $\rho(T)$ . Der Seebeck-Koeffizient zeigt auch keine Korrelation mit dem Fe-Gehalt. Signifikante Minima in  $\alpha(T)$  wurden für Proben mit  $z = 0,1; 0,19$  und  $0,2$  beobachtet, die möglicherweise einem Phonon-Drag-Effekt zugeordnet werden können.

Die Ladungsträgerkonzentration  $n(T)$  steigt allmählich mit dem Fe-Gehalt für die A1-Reihe an (Abbildung 5): von  $z = 0,19$  bis  $z = 0,52$  und scheint dann bei  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$

gesättigt zu sein für  $z = 0,85$  und 1. Bei A2-Proben wurde ein entgegengesetzter Trend beobachtet, ähnlich wie beim binären  $\text{In}_{1-x}\square_x\text{In}_2\text{S}_4$ -Thiospinell [1]. Daher kann dieser Effekt auf die gleichen strukturellen Besonderheiten sowohl der A2- als auch der binären Reihe zurückgeführt werden, welche (i) Ladungsgleichgewicht mit dem Einbau zusätzlicher In/Fe-Atome sowie (ii) tetraedrische Hohlräume (ausschließlich von In-Atomen besetzt) sind. Die Ladungsträgermobilität  $\mu$  nimmt bei niedrigerer Leerstellenkonzentration monoton oberhalb von 250 K (unabhängig von der Reihe) ab (siehe Zahlen in Abbildung 6). Folglich kann  $\mu$  als Indikator für die Leerstellenkonzentration in Eisenindiumthiospinellen angesehen werden. Die Analyse der  $\mu(T)$ -Abhängigkeiten (d. h. ihrer Steigungen) zeigte, dass die Streuung ionisierter Verunreinigungen ein dominierender Streumechanismus von Ladungsträgern ist.

Die Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{\text{tot}}$  ist bei niedrigerem Fe-Gehalt für die Serie A1 reduziert und innerhalb der A2-Serie nahezu gleich [3]. Dies kann durch die zusätzliche Störung in Proben mit Leerstellen und damit verstärkter Phonenstreuung erklärt werden. Deutlich niedrigere Werte von  $\kappa_{\text{tot}} < 0,7 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$  über 300 K für die A2-Proben zeigen einen zusätzlichen Beitrag zur Phonenstreuung aufgrund des Ladungsgleichgewichts an. Wie erwartet, erhöhte der Fe-Einbau die Ladungsträgerkonzentration von Indiumthiospinell, jedoch nicht ausreichend, um den niedrigeren Seebeck-Koeffizienten auszugleichen und damit den Leistungsfaktor  $PF$  und die thermoelektrische Gütezahl  $ZT$  im Vergleich zum binären  $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{S}_4$  zu verbessern. Daher ist die Einführung von Fe kein wirksamer Weg, um die TE-Leistung von Indiumthiospinell zu verbessern.

### Serien $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_2\text{S}_{4-z}\text{Se}_z$ und $\text{In}_{0,67}\square_{0,33}\text{In}_2\text{S}_{4-z}\text{Te}_z$

Acht Proben von Indiumthiospinell mit teilweise substituiertem S durch Se oder Te wurden synthetisiert. Alle

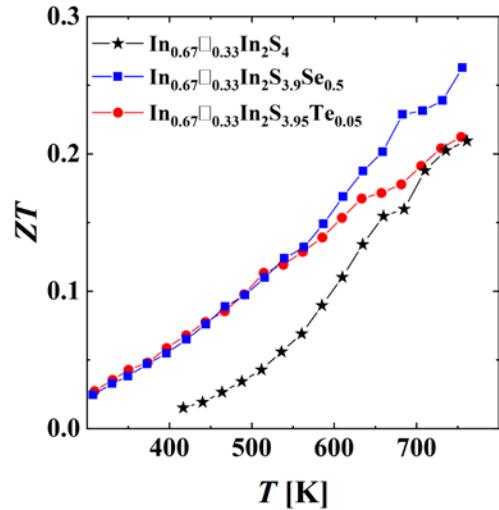


Abbildung 7: Thermoelektrische Gütezahl  $ZT$  für ausgewählte Se- und Te-enthaltende Proben.

Proben waren einphasig und enthielten die kubische  $\alpha$ -Modifikation (mit Ausnahme der Se-haltigen Probe mit  $z = 0,1$ , die sowohl  $\alpha$ - als auch  $\beta$ -Polymorphe enthielt). Sowohl Änderungen der Gitterparameter als auch die chemische Analyse bestätigten den Einbau von Se und Te in die Struktur. In beiden Serien wurde eine signifikante Verringerung des spezifischen elektrischen Widerstands ( $2 \times 10^{-4}$  gegenüber  $2 \times 10^{-2} \Omega\text{m}$  bei 300 K) und des Seebeck-Koeffizienten ( $-160 \mu\text{V K}^{-1}$  gegenüber  $-550 \mu\text{V K}^{-1}$  bei 300 K) im Vergleich zum binären Thiospinell beobachtet. Ähnlich wie bei den binären und Fe-haltigen kubischen Verbindungen wurde die Wärmeleitfähigkeit durch Einbau von Se und Te (hier nicht gezeigt) merklich unterdrückt. Folglich zeigten nur wenige Proben eine verbesserte thermoelektrische Gütezahl  $ZT$  im gesamten analysierten Temperaturbereich (Abbildung 7). Es ist klar, dass die Se/Te-Substitution ein wirksamer Ansatz zur Optimierung der thermoelektrischen Leistung des Indiumthiospinells ist. Eine detaillierte Analyse der Ladungsträgerkonzentration und -mobilität sowie eine Erstellung des Manuskripts sind im Gange.

## Referenzen

- 1 P. Wyżga et al., Dalton Trans. 48 (2019) 8350–8360.
- 2 P. Wyżga et al., Z. Anorg. Allg. Chem. 646 (2020) 1–9.
- 3 P. Wyżga et al., Chem. Eur. J. 26 (2020) 5245–5256.
- 4 N. Barreau, Sol. Energy 83 (2009) 363–371.
- 5 N. Naghavi et al., Prog. Photovoltaics Res. Appl. 18 (2010) 411–433.
- 6 M. Womes et al., J. Solid State Chem. 97 (1992) 249–256.
- 7 P. G. Rustamov et al., Russ. J. Inorg. Chem. 24 (1979) 1223–1225.
- 8 I. V. Bodnar et al., Semicond. 44 (2010) 37–40.
- 9 A. V. Powell, J. Appl. Phys. 126 (2019) 100901.
- 10 T. Zhu et al., Adv. Mater. 29 (2017) 1605884.
- 11 W. He et al., Science 365 (2019) 1418–1424.
- 12 C. Manolikas, Phys. Status Solidi A 31 (1975) K17–K19.
- 13 V. Zlomanov et al., J. Phase Equilib. 22 (2001) 339–344.
- 14 G. A. Steigmann et al., Acta Crystallogr. 19 (1965) 967–971.
- 15 P. Pistor et al., Acta Crystallogr. Sect. B Struct. Sci. Cryst. Eng. Mater. 72 (2016) 410–415.
- 16 A. Likforman et al., J. Solid State Chem. 34 (1980) 353–359.
- 17 T. Gödecke, K. Schubert, Z. Metallkd. 76 (1985) 358–364.
- 18 I. V. Bodnar, Semicond. 48 (2014) 557–561.
- 19 N. Barreau et al., J. Cryst. Growth 241 (2002) 4–14.
- 20 G. Delgado et al., Mater. Res. Bull. 36 (2001) 2507–2517.
- 21 H. Falcón et al., Eur. J. Inorg. Chem. 2016 (2016) 1558–1565.



---

## METHODISCHES KOMPETENZZENTRUM ELEKTRONIKMATERIALIEN

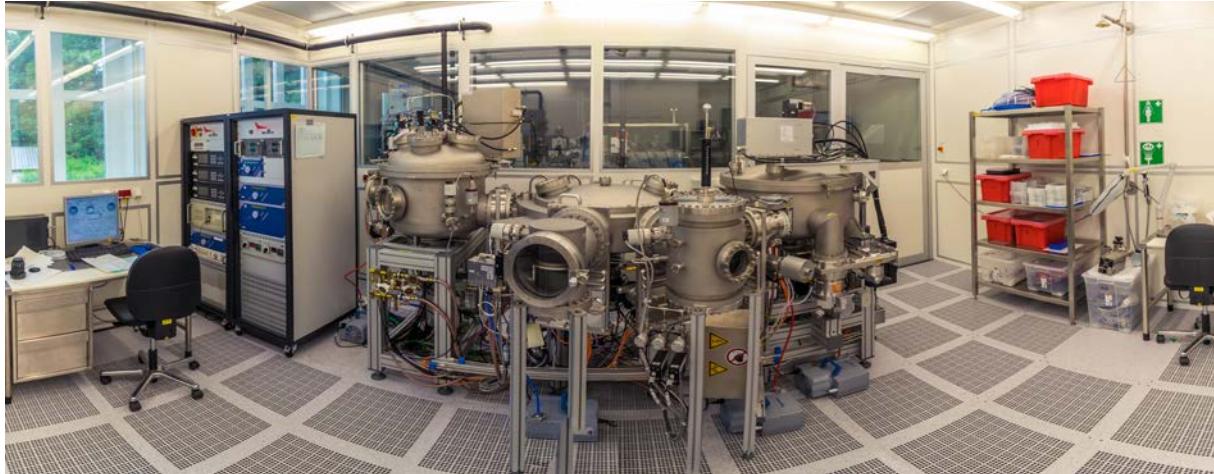
Das Methodische Kompetenzzentrum Elektronikmaterialien (MKEM) wurde im Rahmen der Sächsischen Landesexzellenzinitiative „Funktionales Strukturdesign neuer Hochleistungswerkstoffe durch atomares Design und Defekt-Engineering“ (ADDE) im Jahr 2009 gegründet. Organisatorisch wurde das MKEM an die Institute 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 Reinraumlabs (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 Reinraumlabs (ZRL) und bietet Unterstützung bei der Planung und Durchführung der Prozessierung dünner

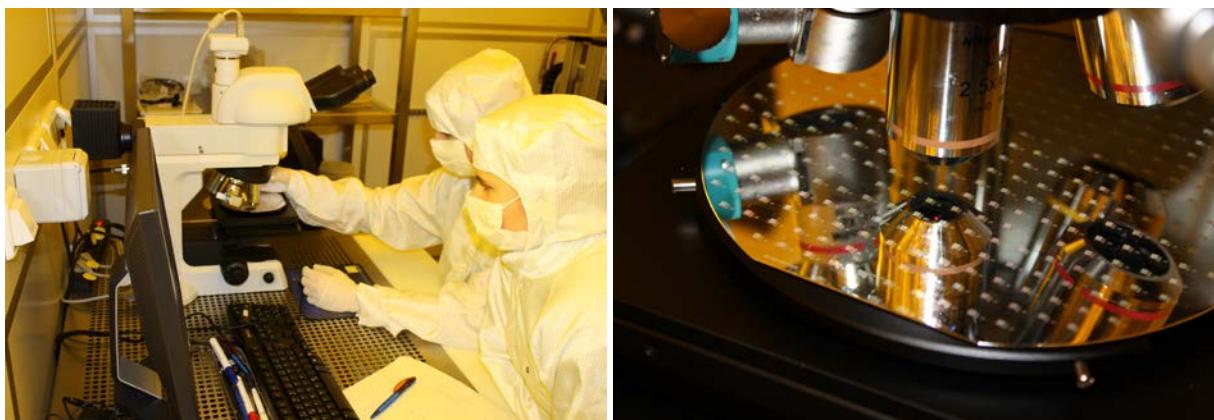
Schichten und mikroelektronischer Bauelemente im ZRL. Zum anderen wirkt das MKEM als institutsübergreifende Schnittstelle zwischen den Betreibern einzelner Geräte – insbesondere im ZRL – und potenziellen Nutzern.

Für das 2015 vom Deutschen Wissenschaftsrat bewilligte Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandler (ZeHS) dienten 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 m<sup>2</sup> 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 Graduiierungsarbeiten, 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

Angesichts der beunruhigenden globalen klimatischen Entwicklungen, insbesondere auf russischem Territorium mit einem fast 2,5-fachen des globalen Temperaturanstiegs, werden immer konkretere Maßnahmen diskutiert und eingeführt. So die globale Energiewende, die unser Leben zunehmend beeinflusst. Doch wie Mary Shelley in ihrem 1818 veröffentlichten Roman „Frankenstein“ schrieb: „Nichts ist für den menschlichen Geist so schmerhaft wie eine große und plötzliche Veränderung.“ Die Wissenschaften sind heute mehr denn je gefordert, die globalen Herausforderungen einer nachhaltigen Entwicklung anzunehmen und verantwortungsbewusst systemische Lösungsstrategien zu entwickeln – der gesamte Roman mag hier als Mahnung dienen.

Optimismus angesichts der Herausforderungen der globalen Energiewende findet sich hier im Zitat von Hermann von Helmholtz: „Energie geht nicht verloren, sondern kann nur von einer Form in eine andere umgewandelt werden.“ Dies beschrieb er 1847 in seinem Energieerhaltungssatz.

Aufgrund des anhaltend hohen weltweiten Energiebedarfs, der rasanten Zunahme mobiler Geräte und des

Ausbau von Elektromobilität und erneuerbaren Energien wird die Energiekonversion mit anschließender Energiespeicherung zum wichtigsten Treiber für neue Batteriematerialien. Dies spiegelt sich in der Politik Europas – allen voran Norwegen mit seinem „Beschluss 672“, der alle Reedereien verpflichtet, ab 2026 nur noch emissionsfreie Wasserfahrzeuge in die Welterbe-Gewässer Norwegens fahren zu lassen – und Chinas mit seinem riesigen Automarkt und seinen intensiven Bemühungen (Investitionen im Milliarden-Dollar-Bereich) wider.

Im Jahr 2018 wurden weltweit rund 590 GWh an wiederaufladbaren elektrochemischen Zellen produziert. Es wird eine jährliche Wachstumsrate von 9 % insgesamt und 18 % für Lithium-Ionen-Batterien (LIBs) (basierend auf dem Umsatz in USD) erwartet. Neben der Blei-Säure-Technologie für den Einsatz in Autobatterien wird die Lithium-Ionen-Technologie aufgrund ihrer hervorragenden Leistungsparameter auch im nächsten Jahrzehnt den Sekundärspeichermarkt dominieren. Die LIB ist zurzeit der attraktivste und am besten kommerzialisierte Akkumulator. Die Zielwerte von 150 USD/kWh sind bereits unterschritten, und die Energiedichte hat sich seit seiner



Kommerzialisierung im Jahr 1991 fast vervierfacht. Die Lernkurve ist jedoch abgeflacht und die physikalisch-chemische Grenze wird bald erreicht sein. Daher sind in diesem Bereich sprunghafte Innovationen erforderlich, um die Energiedichte weiter zu erhöhen oder die Kosten pro kWh zu senken. Diese müssen sich jedoch auch mit der effizienteren Nutzung von Rohstoffen befassen, da die Herausforderungen hinsichtlich des Angebots und der Nachfrage absehbar sind. Während Lithium oft im Zentrum von Diskussionen über Ressourcenverfügbarkeit, Versorgungsengpässen und Kostensteigerungen steht, ist die Nachfrage nach anderen LIB-Materialien wie Kobalt und Phosphor (Teil der positiven Elektrode), aber auch Kupfer (ein Stromkollektor) beträchtlich und spürbar.

Ein wichtiger Nachteil der LIB ist, dass für den Ionentransfer ein flüssiger Elektrolyt erforderlich ist, der hauptsächlich aus aprotischen (nichtwässrigen, organischen) Lösungsmitteln besteht. Viele der Probleme, mit denen diese Batterien konfrontiert sind, wie z. B. Sicherheitsbedenken, Kapazitätsschwund und -alterung, der umständliche Elektrolytfüll- und Benetzungsprozess während der Produktion und das aufwendige Formierungsverfahren, tragen alle zu hohen Kosten bei und lassen sich auf diesen flüssigen Elektrolyten zurückführen. Sicherheitsbedenken ergeben sich aus der Entflammbarkeit der Lösungsmittel.

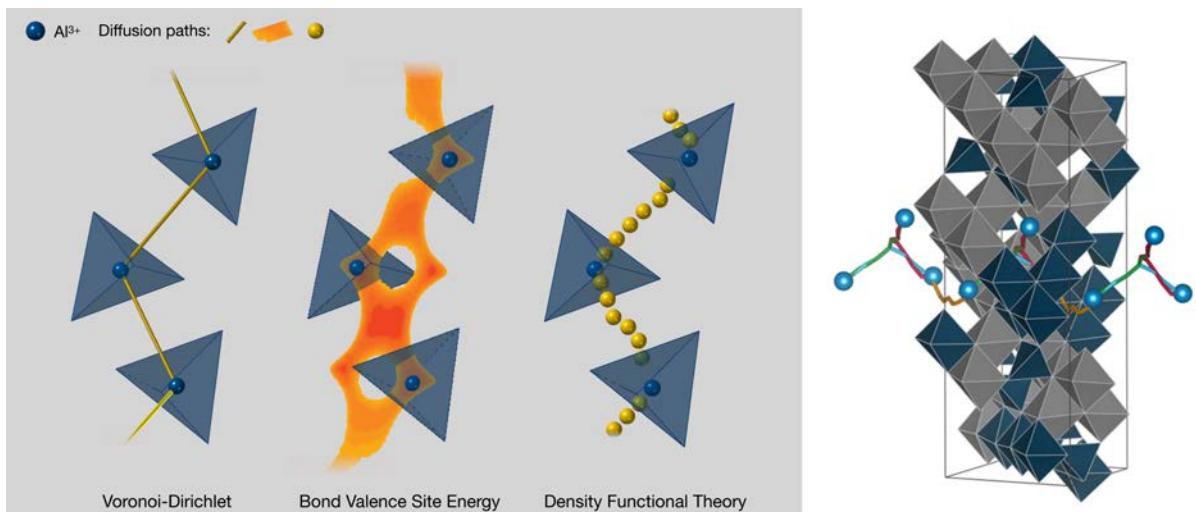
Aus diesem Grund sind neue disruptive Technologien, d. h. über Lithium hinausgehende Ansätze, mit einer deutlich höheren theoretischen Energiedichte als die bestehenden LIBs erforderlich. Dies sind z. B. All-Solid-State- oder Hochvalente-Ionen-Akkumulatoren bestehend aus gut verfügbaren Metallen, insbesondere für die negative Metallelektrode. In den letzten Jahren sind diese Konzepte zu vielversprechenden Themen herangereift, die auch die Möglichkeit für neue Anwendungen und

Marktteilnehmer sowie für neue führende Industrien und Forschungseinrichtungen bilden.

Die Material- und Strukturforschung muss versuchen, die aktuellen Anforderungen auf neue Materialien und Materialkonzepte zu übertragen. Dies soll möglichst effizient und verlustarm in allen Gliedern der Innovations- und Wertschöpfungskette erfolgen, von der Rohstoffgewinnung über die Herstellung von Werkstoffen und Bauteilen bis hin zu den daraus entwickelten Anwendungen. Insbesondere auf dem Gebiet der elektrochemischen Energiespeicherung, d. h. der Akkumulatoren, werden in Zukunft Lösungen mit zusätzlich höchsten Energiedichten, verbesserter Sicherheit und ressourceneffizienten Materialkonzepten (Natur, Energie und Materialien betreffend) notwendig sein, um den prognostizierten hohen Bedarf nachhaltig zu decken.

Deshalb wurde am IEP in den letzten Jahren ein Bewertungssystem aufgestellt, um neuartige elektrochemischen Energiespeicher unter Berücksichtigung von Resourcen-, Umwelt- und Kostenaspekten zu bewerten. Der erste Schritt bestand in der Bewertung der Elemente des Periodensystems hinsichtlich ihrer Eignung für neuartige Material- und Speicherkonzepte. Die zur Bewertung der chemischen Elemente berücksichtigten Parameter lassen sich grob in die Kategorien „Elektrochemie“ und „Ökonomie“ einteilen, wobei die Bewertung für die jeweilige Aufgabe anpassbar ist.

Wir haben mit der negativen Metallelektrode begonnen, weil das chemische Element dieser Elektrode, das gleichzeitig auch die mobile Spezies darstellt, den größten Anteil neben Sauerstoff in einer Festkörper-Prototypbatterie ausmacht. Dementsprechend ist Aluminium neben anderen Elementen wie Magnesium, Eisen, Titan, Natrium, Kalium, Kalzium oder Zink der aussichtsreichste Kandidat.



**Abbildung I:** Algorithmen zur Identifizierung potenzieller Ionenleiter aus kristallographischen Datenbanken

Das Auffinden von Festelektrolyten und positiven Interkationenselektroden bleibt dann eines der Hauptherausforderungen auf dem Weg zu Hochvalente-Ionen-Akkumulatoren mit hoher Energiedichte. Oxide bieten theoretisch höhere Energiedichten, aber auf Kosten der Ionenmobilität. Es wurde daher eine Strategie der sukzessiven Anwendung von immer komplexeren Algorithmen zur Identifizierung potenzieller Ionenleiter aus kristallographischen Datenbanken entwickelt (siehe Abbildung I). Dementsprechend werden die Kristallstrukturen der chemischen Verbindungen zunächst mit einer geometrischen, aber schnellen Methode, der Voronoi-Dirichlet-Partitionierung, analysiert, gefolgt von Berechnungen der *Bond Valence Site Energy* und schließlich der Modellierung der vielversprechendsten Verbindungen durch die Dichtefunktionaltheorie, um den Rechenaufwand bei steigender Berechnungszeit der Algorithmen zu verringern. Mit diesem Ansatz konnten vielversprechende Ionenleiter für eine Vielzahl mobiler Ionen identifiziert werden, die in der gemeinsam mit dem *Samara Center for Theoretical Materials Science (SCTMS)* entwickelten Datenbank [batterymaterials.info](http://batterymaterials.info) gesammelt sind und werden.

Die Arbeitsgruppe Energiematerialien setzt damit etablierte und moderne, Kristallographie-inspirierte Methoden, Methoden der Kristallchemie und der Elektrochemie zur Schaffung neuer technologischer Ansätze und Lösungen im Bereich der Energiewandlung und -speicherung ein. Zudem bündelt sie die Forschungsinfrastruktur zur

Untersuchung der kristallographischen Struktur einkristalliner Materialien. Mit besonderem Schwerpunkt werden Ionenleiter, Materialien mit komplexen strukturellen Feinheiten auf atomarer Skala, modulierte Strukturen und aperiodische Kristalle bearbeitet, wobei die  $N$ -dimensionale Kristallographie, röntgenographisch bestimmte Elektronendichten, das *Knowledge Mining* und das *Machine Learning* besondere Akzente setzen. Genutzte experimentelle und theoretische Methoden beziehen sich auf:

- die Kristallstrukturbestimmung (FIB-Präparation von Einkristallen, Kristallorientierungsbestimmung, Röntgenekristalldiffraktometrie, röntgenographische Elektronendichtebestimmung, *Maximum-Entropy*-Methode,  $N$ -dimensionale Kristallographie),
- die elektrochemische Charakterisierung (Glovebox, Impedanzspektroskopie, Tubandt-Methode, Zyklovoltammetrie, Batteriezylkierung),
- die Anwendung theoretischer Methoden der Kristallographie, Kristallchemie und Kristallphysik (topologische Methoden, z. B. Voronoi-Dirichlet-Partitionierung in ToposPro, *Bond-Valence*-Methode und Strukturmödellierung mittels Dichtefunktionaltheorie) und
- das *Knowledge Mining* und *Machine Learning*.

Im Fokus der Arbeiten stehen Materialien aus den Bereichen der Energiewandlung und -speicherung: Ionenleiter, Interkationenselektroden, Stromkollektoren, Pyroelektrika, intermetallische Phasen und dünne Schichten. Weitere Themen betreffen methodische Arbeiten zur

Röntgendiffraktometrie, Anwendung von textilen Geweben und Untersuchung von Farbstoffen für organische Solarzellen.

## Ionenleiter für Aluminiumionen

Das Forschungsgebiet der Aluminium-Ionen-Akkumulatoren hat sich in den letzten 10 Jahren rasant als ein wichtiges Thema neben der Aluminium-Luft-Technologie entwickelt und etabliert. Eine Vielzahl von verschiedenen und vielversprechenden Systemen wurden entwickelt und die Herausforderungen herausgearbeitet. Für einen Aluminium-Ionen-Akkumulator gibt es neben der hohen Energiedichte und guten Verfügbarkeit von Aluminium viele weitere Vorteile (siehe Abbildung 2). Allerdings bestehen wegen der hohen Valenz des dreifach geladenen Aluminiumions Herausforderungen hinsichtlich der Ionenleitung und Interkalation bzw. Deinterkalation. Im Mai 2019 erschien der Review-Artikel „The Aluminum-Ion Battery: A Sustainable and Seminal Concept?“ in der Zeitschrift „Frontiers in Chemistry – Inorganic Chemistry“ als Teil des Research Topic „Realizing Multivalent Batteries: Recent Developments and Challenges“. Tilmann Leisegang wurde 2018 von den Gasterausgebern Pieremanuele Canepa von der National University of Singapore, Sai Gautam Gopalakrishnan von der Princeton University, Alexandre Ponrouch vom Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona und Jordi Cabana von der University of Illinois at Chicago für einen Beitrag eingeladen. Der Artikel fasst den aktuellen Stand zum Aluminium-Ionen-Akkumulator zusammen. Seit November 2019 gehört dieser Artikel mit mehr als 24 000 Aufrufen zum „Most Viewed“-Artikel der Rubrik „Inorganic Chemistry“ und befindet sich unter den 20 meistgelesenen Artikeln von „Frontiers in Chemistry“.

Ein weiterer Review-Artikel von Tina Nestler erschien ebenfalls 2019. Dieser fasst den Stand zur  $\text{Al}^{3+}$ -Ionenleitung in kristallinen Festkörpern zusammen. Während für einfach und doppelt geladene Ionen zahlreiche Festkörperelektrolyte bekannt sind, ist die Situation für Ionen mit einer Ladung von mehr als zwei unklar und nur spärlich erforscht. Um die systematische Untersuchung zu unterstützen, wurden Verbindungen, die in der Literatur als Festkörperelektrolyte oder Interkalationsmaterialien für  $\text{Al}^{3+}$  beschrieben wurden, sowie weitere Materialien, die



**Abbildung 2:** Vorteile von Aluminium als Batteriematerial

allgemein für hohe Mobilitäten für mehrwertige Ionen bekannt sind, kritisch und mit dem Ansatz der *Bond Valence Energy Landscape* (BVEL) analysiert. Während Festkörperelektrolyte für  $\text{Al}^{3+}$  in der Literatur noch nicht eindeutig identifiziert werden konnten, zeigt die Analyse der Interkalationskathoden vielversprechende Strukturmodelle für eine vergleichsweise schnelle  $\text{Al}^{3+}$ -Diffusion auf, die für die Analyse, den Vergleich und das Design neuer vielversprechender Materialien genutzt werden können. Darüber hinaus wurden Chancen und Grenzen der BVEL für hochvalente Ionenleiter exemplarisch aufgezeigt.

Das Auffinden von Ionenleitern für  $\text{Al}^{3+}$ -Ionen wurde auch auf Schwefel- und Selen-haltige Verbindungen ausgedehnt und veröffentlicht. Gegenstand waren kristalline Chalkogenide ( $\text{O}^{2-}$ ,  $\text{S}^{2-}$  und  $\text{Se}^{2-}$ ), wobei zunächst Modellstrukturen konstruiert wurden, die Metallkationen unterschiedlicher Wertigkeit ( $\text{Sr}^{2+}$ ,  $\text{Y}^{3+}$ ,  $\text{Zr}^{4+}$ ,  $\text{Nb}^{5+}$  und  $\text{Mo}^{6+}$ ) beinhalteten. Mittels der Dichtefunktionaltheorie erfolgte die Relaxation der Strukturen. Die Elektronendichte wurde mittels einer Bader-Partitionierung analysiert. Da man davon ausgeht, dass  $\text{Al}^{3+}$ -Ionen stark mit ihrer atomaren Umgebung wechselwirken, stellte die Elektronendichtetopologie, die durch höherwertige Kationen in der erweiterten chemischen Nachbarschaft von Al induziert wird, den Schwerpunkt dar. Tatsächlich fand sich eine generelle Abnahme der Ionenladungen und eine zunehmende Verschiebung der Chalkogenide hin zu höherwertigen Ionen für die schwereren Chalkogene.



**Abbildung 3:** Synthetisierte Pulverproben von potentiellen Festkörper-Ionenleitern

Daher erfolgte ein theoretisches Screening von S- und Se-haltigen Verbindungen hinsichtlich niedriger Migrationsbarrieren für  $\text{Al}^{3+}$ -Ionen, unter Verwendung von Voronoi-Dirichlet-Partitionierung und Berechnungen der *Bond Valence Site Energy*. Die Grundlage für diese Suche bildete die *Inorganic Crystal Structure Database* (ICSD). Es konnten sechs vielversprechende Kandidaten für  $\text{Al}^{3+}$ -Ionenleiter mit niedrigen  $\text{Al}^{3+}$ -Migrationsbarrieren identifiziert werden.

Im Zusammenhang erfolgte die Promotion von Falk Meutzner. Die Arbeit wurde in enger Zusammenarbeit zwischen dem IEP und dem SCTMS der Samara State Technical University durchgeführt. Vladislav Blatov, Direktor des SCTMS, und Thomas Doert, Lehrstuhl für Anorganische Chemie an der Technischen Universität Dresden, waren die externen Gutachter der Doktorarbeit. Falk Meutzner widmete sich der theoretischen Beschreibung der kationischen Leitfähigkeit in fester kristalliner Materie. Die Hauptergebnisse betrafen neben Aluminium- und Natriumionenleitern einen Algorithmus zur theoretischen Identifizierung potentiell ionenleitender Materialien aus großen kristallographischen Datenbanken unter maßgeblicher Nutzung des Programm pakets ToposPro (<http://topospro.com>).

Es wurde damit begonnen, die vorhergesagten Ionenleiter zu synthetisieren und elektrochemisch zu charakterisieren (siehe Abbildung 3). Richard Wolowski gelang

es, in seiner Bachelorarbeit einen Natriumionenleiter zu synthetisieren, der nun Gegenstand weitere elektrochemischer Untersuchungen ist.

## Kalium-Ionenleiter und Machine Learning

Gemeinsam mit dem SCTS wurde eine theoretische Studie zum Einfluss der Ti-Dotierung auf die  $\text{K}^+$ -Migration in  $\text{K}_{1-x}\text{Fe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_2$ -Festelektrolyten durchgeführt. Hierbei wurde ein neuartiger Ansatz vorgeschlagen, der auf der Modellierung von Konfigurationsräumen und vollständigen Sätzen nicht-äquivalenter Migrationswege mittels Dichtefunktionaltheorie (DFT) und Techniken des *Machine Learnings* (ML) basiert. Für verschiedene Ti-Gehalte erfolgte die Konstruktion von bis zu 8 630 400 Superzellen, die alle symmetrisch nicht-äquivalenten atomaren Konfigurationen und  $\text{K}^+$ -Migrationswege enthalten. Mit der von der DFT abgeleiteten Energetik der  $\text{K}^+$ -Migration auf dem niedrigsten Dotierniveau wurden die ML-Modelle darauf trainiert, Ionentransporteigenschaften durch Verwendung geometrischer Deskriptoren für die Pfad-Dotierungsanordnung vorherzusagen. Die trainierten ML-Modelle wurden dann verwendet, um die  $\text{K}^+$ -Migrationseigenschaften für Pfade bei höheren Dotierungen zu bewerten. Die erzielten Berechnungsergebnisse stimmten mit den Ergebnissen einer früheren experimentellen Studie überein. Hiermit konnte die erfolgreiche Anwendbarkeit des vorgeschlagenen Ansatzes für die Modellierung und Vorhersage von Effekten der Dotierung in kristallinen Festkörperelektrolyten und Interkalationselektroden gezeigt werden.

## Datenbank zu Festkörperelektrolyten und Interkalationsmaterialien

Gemeinsam mit dem SCTMS wurde die Idee entwickelt und nun umgesetzt, die in den gemeinsamen Aktivitäten der letzten Jahre vorhergesagten Ionenleiter und Interkalationsmaterialien zu sammeln, zu systematisieren und bereitzustellen. Dazu schaffte das SCTMS die *Battery Materials-Plattform* ([batterymaterials.info](http://batterymaterials.info)). Artem A.

Kabanov, der Leiter des *Laboratory for Mathematical Modeling of Materials* des SCTMS und Verantwortlicher für die Datenbank, entwickelt diese gemeinsam mit Tilmann Leisegang weiter.

## Lithium-Ionen-Technologie

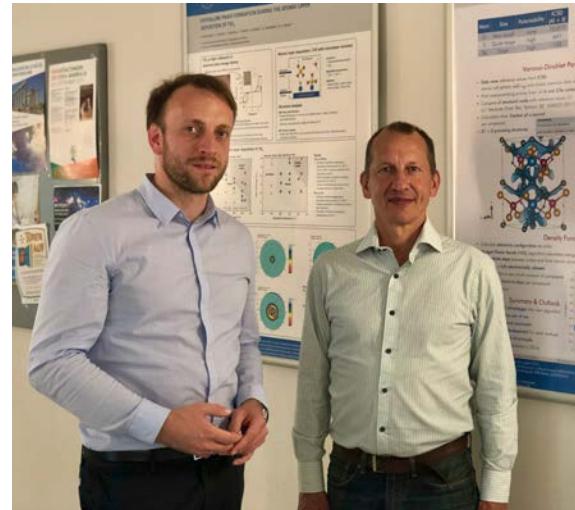
Neben der Ausarbeitung von Festkörperakkumulatoren mit einer Lithium-Metallelektrode könnte auch ein patentierter Ansatz der elfolion GmbH eine Sprunginnovation hinsichtlich deutlich gesteigerter Energiedichten mit gleichzeitig signifikant reduziertem Metallbedarf für die Lithium-Ionen-Technologie darstellen. Dieser basiert auf einer Lithium-Ionen-Zelle mit metallisierten gewebebasierten Stromkollektoren. Dazu wurde eine Zusammenarbeit begonnen und ein gemeinsames Forschungs- und Entwicklungsvorhaben vorbereitet, das dieses Konzept realisieren soll.

Eine weitere im vergangenen Jahr aufgenommene Kooperation mit Anton Jesche vom Institut für Physik des Zentrums für Elektronische Korrelation und Magnetismus am Lehrstuhl für Experimentalphysik VI der Universität Augsburg betraf einkristalline Festkörperelektrolyte und Interkalationselektroden. In diesem Rahmen wurde eine studentische Arbeit zu „Li<sub>3</sub>N als Festkörperelektrolyt“ gemeinsam betreut.

## Internationale Vernetzung

Die erfolgreiche Zusammenarbeit mit dem SCTMS wurde auch in 2019 weiter verstetigt. Während der Forschungsaufenthalte bereitete Tilmann Leisegang gemeinsame Projektanträge zu Festelektrolyten und Kathodenmaterialien für Post-Lithium-Batterien vor und arbeitete gemeinsame Publikationen aus. Außerdem wurde das *Battery Materials Project* (siehe oben) ins Leben gerufen.

Es erfolgte weiterhin eine Anbahnung einer Zusammenarbeit mit der Universität Sydney. Am 26. September 2019 besuchte Siegbert Schmid von der *School of Chemistry* an der Universität Sydney in Australien auf Einladung von Tilmann Leisegang das IEP (siehe Abbildung 4). Während seines Besuchs hielt er den Vortrag „Beyond 3D-order: Modulated structures from elements to proteins“.



**Abbildung 4:** Besuch von Siegbert Schmid (im Bild rechts) von der *School of Chemistry* der Universität Sydney

Hierbei konzentrierte er sich auf die grundlegenden Aspekte von kommensurabel und inkommensurabel modulierten Strukturen sowie von Komposit-Strukturen. Er wies darauf hin, dass sich die Forschung zunehmend auch mit Batterie-Materialien befassen muss, die modulierte Strukturen aufweisen. Die Kooperation soll genau auf diesem Gebiet erfolgen.

Im Rahmen des XXI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry in St. Petersburg (Russland) ergaben sich zahlreiche Diskussionen, u. a. mit Wissenschaftlern des Skolkovo Institute of Science and Technology (Skoltech) über ein gemeinsames Vorhaben zu Festkörperbatterien.

Zur Intensivierung der Zusammenarbeit zwischen Freiberg und Mailand (Italien) wurde Tilmann Leisegang von Davide M. Proserpio zu einem Forschungsaufenthalt eingeladen. Davide M. Proserpio ist ein weltweit anerkannter Experte auf dem Gebiet der Topologie von Kristallstrukturen, insbesondere von metallorganischen Architekturen. Mehr als 1000 Kristallspezies einschließlich ihrer physikalisch-chemischen Eigenschaften sind von ihm untersucht worden. Viele seiner bahnbrechenden Artikel gehören zu den meistzitierten Artikeln in den jeweiligen Fachzeitschriften. Mehrere Jahre arbeitete er mit Roald Hoffmann zusammen, der 1981 den Nobelpreis für Chemie für seine Theorien über den Ablauf chemischer Reaktionen erhielt. Während seines Aufenthalts hielt Tilmann Leisegang zwei Vorträge „From peculiarities of crystalline

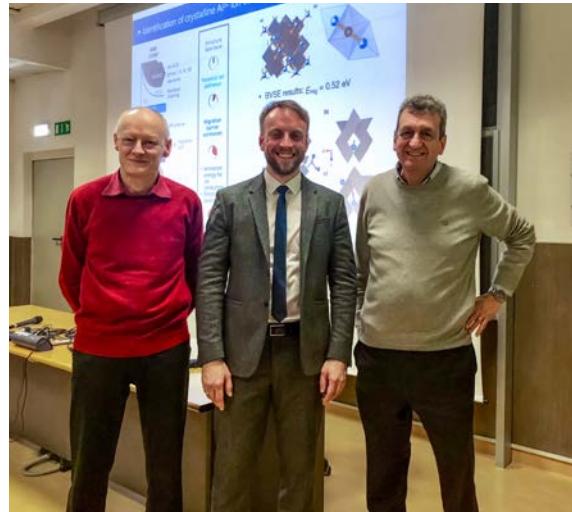
matter to material conversion and storage“ und „Identification of battery materials: demands and assessment“ (siehe Abbildung 5). Im Rahmen des Aufenthalts wurden Ansätze zur Identifizierung günstiger struktureller Eigenschaften für neuartige Festkörperelektrolyte diskutiert. Zusammen mit Pavlo Solokha von der Universität Genua, der kurz Mailand zur gleichen Zeit besuchte, konnte die gemeinsame Arbeit am Hochdurchsatz-Screening intermetallischer Verbindungen zur Identifizierung von Approximanten finalisiert werden. Darüber hinaus hatte Tilmann Leisegang die Gelegenheit, mit Lucia Carlucci, einer Spezialistin für die Synthese von neuen *Metal-Organic Framework* (MOF)-Graphen-Verbundmaterialien für Anwendungen im Energiebereich, und mit Carlo Gatti, der für die Entwicklung experimenteller und theoretischer Methoden zur Untersuchung der Elektronendichte in Kristallen und deren Verwendung zur Bestimmung molekularer und kristalliner Eigenschaften mit dem Gregori-Aminoff-Preis für Kristallographie 2013 ausgezeichnet wurde, zu diskutieren.

## Verschiedenes

Die Arbeiten im Zusammenhang mit der Arbeitsgruppe wurden in sieben wissenschaftlichen Artikeln publiziert und auf sieben Konferenzen vorgestellt, darunter auf der Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie in Leipzig, dem *XXI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry* in St. Petersburg (Russland), der *XXIII International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists* (AYSS) in Dubna (Russland) und dem *Forum Theoretical Materials Science* an der Samara State Transport University in Samara (Russland).

Ferner hielt Tilmann Leisegang einen Vortrag zum Thema „Röntgenstrahlung und Kristallographie – Forschung mit Nobelpreisgarantie“ im Rahmen der Akademievorträge am Emil-Fischer-Gymnasium in Schwarzheide.

Die finanzielle Unterstützung der Arbeiten erfolgte im Rahmen des BMBF-Verbundprojekts R2R-Battery (03SF0542A) und dem von der Alexander von Humboldt Stiftung finanzierten Projekt PhosCar.



**Abbildung 5:** Prof. Davide Proserpio, Dr. Tilmann Leisegang, und Dr. Carlo Gatti im Anschluss an einen Vortrag an der Universität Mailand



---

## FREIBERGER ZENTRUM FÜR PYROELEKTRIZITÄT

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

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

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

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

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



- 2012–2014: ESF-Nachwuchsforschergruppe „Pyroelektrische Funktionsmaterialien für die Energie- und Stoffwandlung (PyroConvert)“. In der interdisziplinären Gruppe wurden auf Pyroelektrika basierende Konzepte für die Nutzung von Niedertemperaturabwärme für Energie- und Stoffwandlungsprozesse erarbeitet.
- 2013: Messaufbau zur Bestimmung pyroelektrischer Koeffizienten mit der Sharp-Garn-Methode im Temperaturbereich von 0 °C bis 170 °C.
- 2013–2015: VIP-Vorhaben „Pyroelektrisch funktionalisierte Schichten zur aktiven Schaltung von Oberflächeneigenschaften (PyroFunk)“. Ziel war die Entwicklung und Optimierung neuartiger eisabweisender Oberflächenbeschichtungen auf der Basis pyroelektrischer Materialien.
- 2013–2014: Bau eines Demonstrators zur Wasserstofferzeugung im Rahmen der ESF-Nachwuchsforschergruppe PyroConvert.
- 2014: Vakuumkammer zur Polarisierung pyroelektrischer Proben bei Spannungen bis zu 30 kV.
- 2015: Erstmaliger Nachweis von Pyroelektrizität der MFP-Phase von Strontiumtitannat 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.
- 2019: Portabler Messplatz zur Bestimmung pyroelektrischer Koeffizienten an Polymerproben.

### Demonstrator zur pyroelektrischen Wasserstofferzeugung

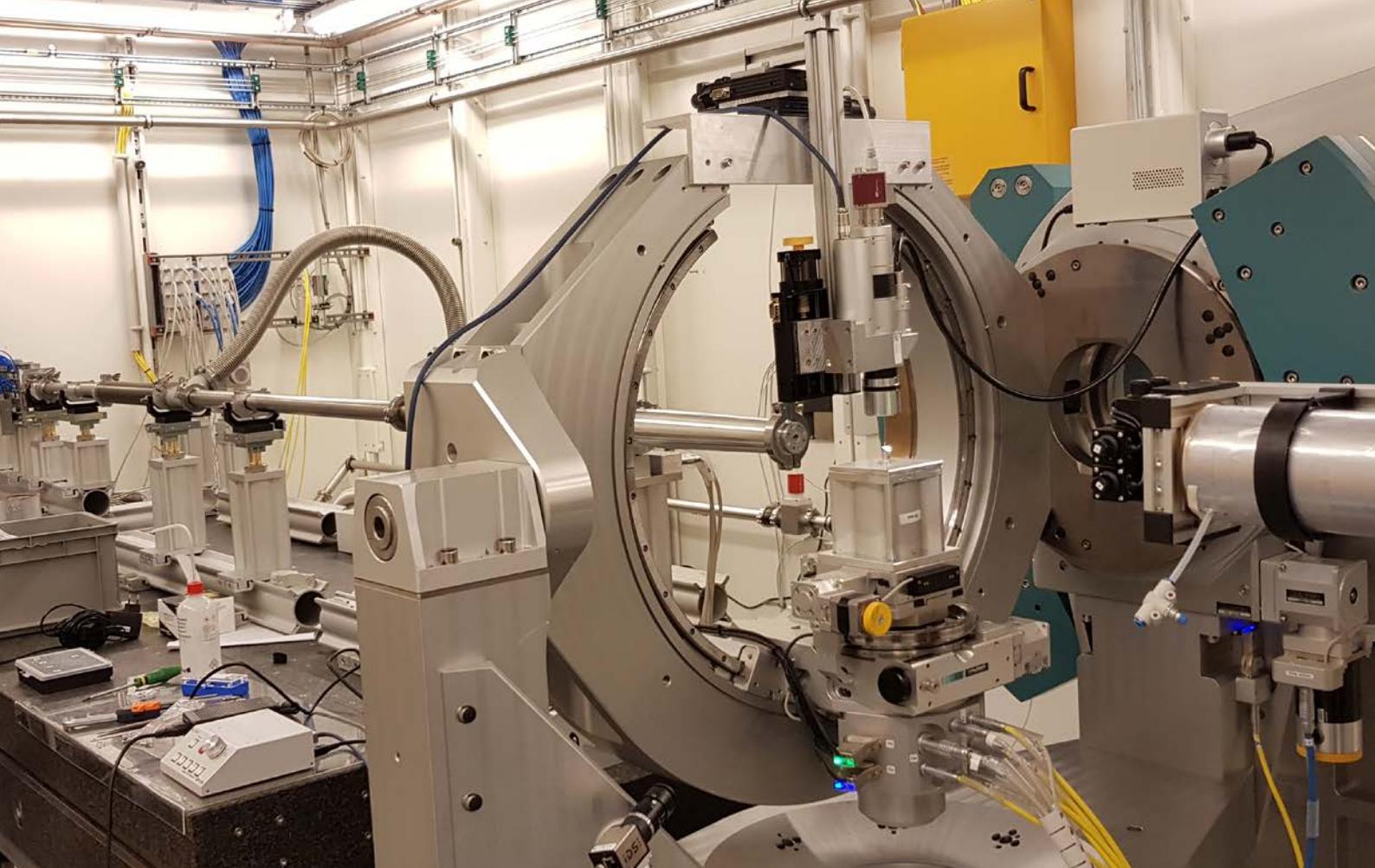
Zur Umwandlung von Niedertemperaturabwärme in chemische Energie wurde am IEP ein Demonstrator zur

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

Die Pyroelektrizität ist eine kristallphysikalische Eigenschaft, die ausschließlich bei Materialien auftritt, die ein permanentes elektrisches Dipolmoment besitzen (wie z.B. Bariumtitannat). 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 Zstrom 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 Tätigkeiten der Arbeitsgruppe unter der Leitung von Dr. Matthias Zschornak beinhalten sowohl die experimentellen als auch theoretischen Aspekte resonanter Röntgenmethoden. Im Projekt REXSuppress steht die Anwendung und methodische Weiterentwicklung resonanter Röntgenmethoden an Synchrotron-Forschungseinrichtungen im Mittelpunkt. Dagegen liegt der Fokus im Projekt AcoustREXS auf der begleitenden Modellierung der atomaren und elektronischen Struktur kristalliner Materialien sowie der Vorhersage von Kristallstrukturänderungen inklusive entsprechender Materialeigenschaften.

Die zentralen materialbezogenen Fragestellungen der Gruppe betreffen das Verhalten und die Eigenschaftsänderung von Kristallen bei Phasenumwandlungen durch elektrische Felder, unter Einwirkung von akustischen Wellen und durch den Einbau von Defekten, insbesondere bei Oxiden ( $\text{SrTiO}_3$  und dessen Ruddlesden-Popper-Phasen,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$ ,  $\text{Nb}_2\text{O}_5$ ), Halbleitermaterialien (GaAs, InP, CdSe), Seltenerdverbindungen ( $R_2\text{TSi}_3$ ,  $\text{YMn}_2\text{O}_5$ ), Pyroelektrika ( $\text{LiNbO}_3$ ,  $\text{LiTaO}_3$ ) sowie ferroelektrischen Dünnschichten ( $\text{SrTiO}_3$ ). Genutzt werden dafür vor allem resonante Synchrotronmethoden (Resonant X-ray

Diffraktion, RXD) wie X-ray-Absorption Fine Structure (XAFS, XANES, EXAFS), Diffraction Anomalous Fine Structure (DAFS), Anisotropic Anomalous Scattering (AAS) und nicht-resonante Methoden wie 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-Methoden (FEM) zum Einsatz.

Die Arbeitsgruppe widmet sich nicht nur der methodischen, sondern auch der apparativen Weiterentwicklung von Synchrotronmethoden. Dies beinhaltet u. a. die Entwicklung und Konstruktion einer individuell angepassten Probenkammer, der sogenannten Nordseekammer (siehe Abbildung 1). Die Nordseekammer wurde im Rahmen eines vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderten Verbundprojekts (Laufzeit 2013 bis 2016) mit dem Schwerpunkt „Erforschung kondensierter Materie an Großgeräten“ für die Beamlines P23 und P24 am Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) konzipiert und konstruiert, um Proben mittels elektrischer Felder unter variablen Temperaturen zu manipulieren.



**Abbildung 1:** Die Nordseekammer ermöglicht Synchrotronmessungen simultan zur Probenmanipulation mittels elektrischen Feldes und Temperatur.



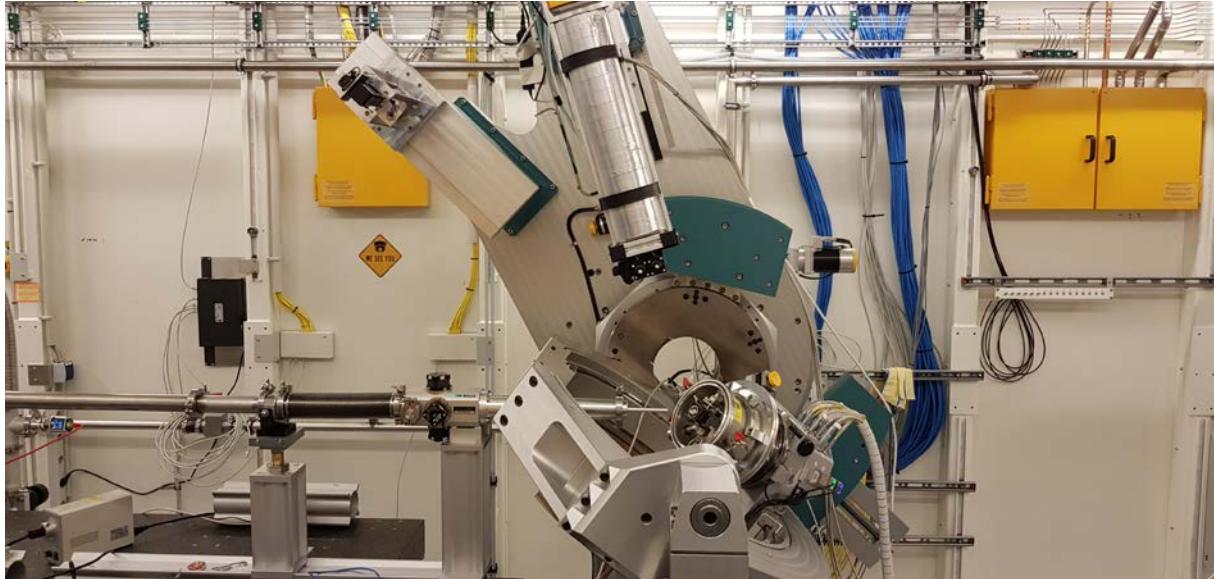
**Abbildung 2:** Um die Messzeit effektiv zu Nutzen, wurden gleich zwei  $\text{LiTaO}_3$ -Proben einjustiert, einmal stöchiometrisch und einmal kongruent.

Auch nach Abschluss des Projektes wurde die Nordseekammer durch die Arbeitsgruppe eingehend charakterisiert und erfolgreich für die Anwendung am Synchrotron getestet. Zukünftig soll die Ansteuerung der Nordseekammer in die Beamline-Software integriert und für die Durchführung von Messungen der pyroelektrischen Koeffizienten nach der Sharp-Garn-Methode programmiert werden.

Die Expertise der Arbeitsgruppe war neben Messzeiten, die für die Projektbearbeitungen relevant waren, auch bei anderen Fragestellungen des Institutes für Experimentelle Physik gefragt. Beispielsweise wurden die pyroelektrischen Materialien Lithiumniobat und -tantalat ( $\text{LiTaO}_3$  und  $\text{LiNbO}_3$ ) temperaturabhängig strukturell charakterisiert, um ihren pyroelektrischen Koeffizienten zu bestimmen. Aus den Strukturverfeinerungen der Ein-kristalldiffraktometrieuntersuchungen an Beamline P24 (DESY) im Temperaturbereich von 100 K bis 650 K sollen mit Hilfe eines semi-theoretischen Ansatzes direkt die spontane Polarisation und die pyroelektrischen Koeffizienten bestimmt werden. Diese Messungen waren essentiell für die Beantragung eines Forschungsprojektes zur weiteren Optimierung dieses semi-theoretischen Ansatzes. Zeitgleich zu dieser Messzeit fanden an Beamline P23 Untersuchungen zur Defektstruktur an  $\text{LiTaO}_3$  mittels der Analyse von „verbotenen“ Reflexen statt. Diese

sogenannten „verbotenen“ Reflexe sind systematische Auslöschen aufgrund von speziellen Symmetrieeigenschaften der Kristallstruktur. Die Auslösung der Intensität ist jedoch unter resonanten Bedingungen aufgehoben. Dadurch sind diese Reflexe äußerst sensitiv auf die lokale Symmetrie. Ziel des Experiments ist die Bestimmung der vorherrschenden Defekte im stöchiometrischen und kongruenten  $\text{LiTaO}_3$  durch Korrelation der elektronischen Struktur spezifischer Defektmodelle (deren projizierte lokale Zustandsdichte und Simulation entsprechender Anregungsspektren) mit den experimentell gewonnenen Spektren (siehe Abbildungen 2 und 3).

Matthias Zschornak wird bei den experimentellen Arbeiten, der Durchführung von Messreisen und den theoretischen Modellierungen durch die Doktorandinnen Dipl.-Math. Melanie Nentwich und M. Sc. Tina Weigel unterstützt. Auch der ehemalige Kollege Dr. Carsten Richter, welcher seit Anfang des Jahres 2019 am Leibniz-Institut für Kristallzüchtung in Berlin arbeitet, steht weiterhin als externer Berater bei Messzeiten und der Datenauswertung zur Seite. Im Bereich der *Ab-initio*-Modellierungen wird die Arbeitsgruppe durch M. Sc. Christian Lüdt verstärkt. Dieser hat im Jahr 2019 erfolgreich seine Masterarbeit zum Thema „Interactions of Ruddlesden-Popper phases and Migration-Induced Field-Stabilized Polar phase in Strontium Titanate“ abgeschlossen und



**Abbildung 3:** Bei Messung verbotener Reflexe müssen teilweise sehr steile Reflexposition einjustiert werden, wie hier zu sehen ist. Auch bei diesem Experiment an der P23 kam die Nordseekammer zum Einsatz.

seine Promotion am Institut für Experimentelle Physik begonnen.

Im Jahr 2019 ist besonders die erfolgreiche, nationale und internationale Präsenz der Arbeitsgruppe hervorzuheben. Auf der *4th International Conference on Resonant Elastic X-ray Scattering (REXS 2019)* in Riverhead, New York, haben Matthias Zschornak und Tina Weigel ihre Forschung einem internationalen Fachpublikum vorgestellt. Dabei wurde Tina Weigel nicht nur mit einem Reisestipendium des Veranstalters unterstützt, sondern auch mit einem Preis für die beste Posterpräsentation für ihren Beitrag „Morphology and strain field of the migration-induced field-stabilized polar phase in strontium titanate“ ausgezeichnet. Weiterhin konnte Melanie Nentwich gleich zweimal überzeugen und Posterpreise gewinnen: mit ihrem Beitrag „Sample environment chamber for the manipulation of temperature and electric field during synchrotron measurements“ auf der 27. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie in Leipzig und mit „LiTaO<sub>3</sub> defect structures by means of forbidden reflections“ auf dem ersten gemeinsamen Treffen der Jungen Kristallographen und der Jungen Kristallzüchter in Köln. Weitere Ergebnisse aus dem Projekt REXSuppress wurden auch auf dem *European Crystallographic Meeting (ECM)* in Wien von Melanie Nentwich und Tina Weigel vorgestellt.

Ein weiteres Highlight für Tina Weigel und die Arbeitsgruppe war ihre erfolgreiche Bewerbung für die *HERCULES European School* in Grenoble. Mit der finanziellen Unterstützung durch das YoungGEOMATENUM-International-Stipendium des Deutschen Akademischen Austauschdienstes (DAAD) und der TU Bergakademie Freiberg vertiefte sie in dem fünfwöchigen Kurs nicht nur die Grundlagen der Synchrotron- und Neutronenforschung, sondern auch deren neueste Anwendungsbereiche. Zusätzlich zu den Vorlesungen gab es die Möglichkeit, praktische Erfahrungen in Laborpraktika an Forschungseinrichtungen in Grenoble zu sammeln. Außerdem wurde den Teilnehmern die Datenauswertung von unterschiedlichen Röntgen- und Neutronen-Charakterisierungsmethoden mit verschiedenen Softwarepaketen vorgestellt und anschließend mit Beispieldatensätzen gefestigt.

Aufgrund der Umbaumaßnahmen an der Synchrotronquelle *European Synchrotron Radiation Facility (ESRF)* und der Neutronenquelle *Institute Laue Langevin (ILL)* gab es erstmalig zwei Exkursionswochen außerhalb Grenoble. Hierbei hatte Tina Weigel die Möglichkeit am *Paul Scherrer Institute (PSI)* in Villigen, Schweiz, und am *Karlsruhe Institute for Technology (KIT)*, siehe Abbildung 4) weitere praktische Erfahrungen beim Arbeiten an einer Beamline zu erlangen und neue Analysenmethoden zu erlernen. Neben all der Wissenschaft gab



**Abbildung 4:** Tina Weigel bei ihrem Praktikum „X-ray Absorption Spectroscopy“ (XAS) am KIT an der XAS-Beamline.

es natürlich auch einige soziale Unternehmungen, um das akademische Netzwerk zu stärken. So führte eine Schneeschuhwanderung die Teilnehmer nach Chamrousse in die französischen Alpen oder die Besucher des PSI in eine Schweizer Therme.



---

## 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 Vollantrags 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

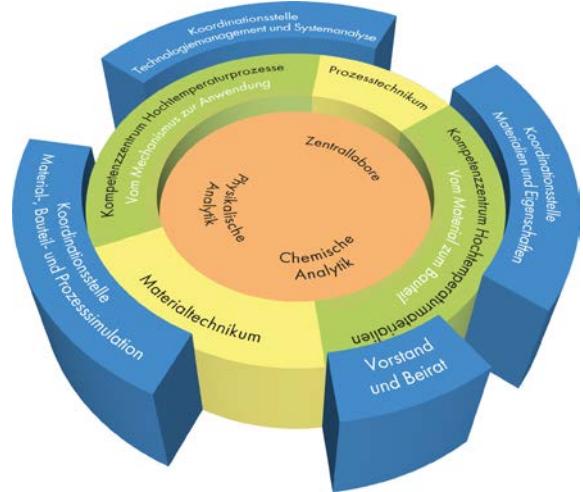
Forschungsprogrammatik sehr hohe nationale Bedeutung beimaß, da diese einen technologisch und wirtschaftlich sehr relevanten Beitrag zum Thema der Energiewende ermöglicht. Schließlich bestätigte die Gemeinsame Wissenschaftskonferenz aus Bund und Ländern diese Empfehlung am 19. Juni 2015. Eine wichtige 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 skalenmäßigen 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 I:** 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 industrieskaligen Pilotanlagen. Das ZeHS soll im Ergebnis den Verbleib der ressourcen- und energieintensiven Grundstoffindustrie in Deutschland unterstützen; strategisch werden auch Neuansiedlungen angestrebt.

### Strukturelle Kennzeichen

Das ZeHS ist im Rahmen der interdisziplinären Arbeitsgegenstände der Forschungsprogrammatik für alle Professuren der TU BAF offen, womit deren Mitarbeiter die mit dem Forschungsbau geschaffene Infrastruktur und die Zentrallabore kooperativ in Anspruch nehmen können. Die Professuren verbleiben an ihren Instituten, um die Verflechtung mit den Fakultäten zu erhalten. Die Forschungsinfrastruktur der TU BAF wird durch das Prozess- und Materialtechnikum des ZeHS abgerundet (siehe Abbildung I). Zur Umsetzung der Forschungsprogrammatik

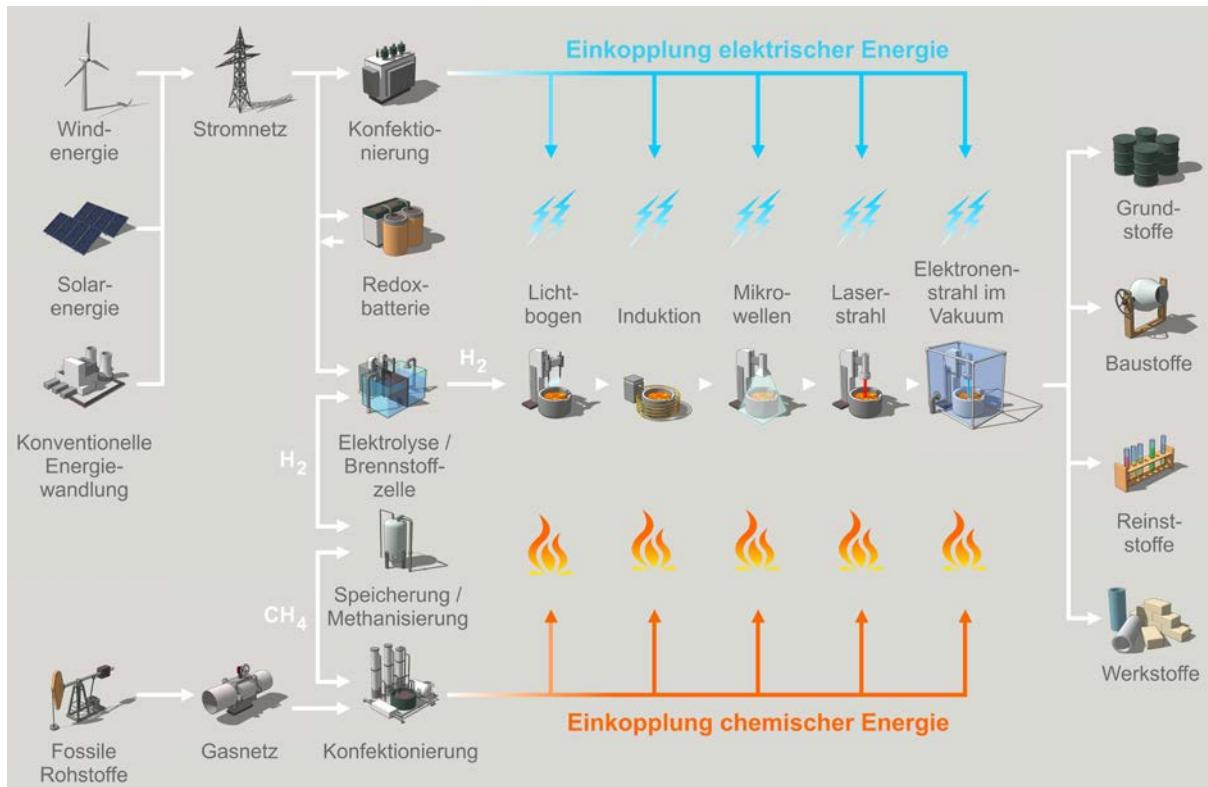


Abbildung 2: Stoff- und Energiekreisläufe mit HT-Prozessen, die am ZeHS betrachtet werden sollen

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 Fragestellungen.

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:** Richtfest am 22. März 2019

synthetische feuerfeste Materialien. Diese bilden die Voraussetzung für den Aufbau der Prozessumgebung bei allen maßgeblichen HT-Prozessen. Die Forschungsgrammatik 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 Materialtechnika

Darüber hinaus sollen zwei Hallen für ein Prozess- und ein Materialtechnikum als kooperativ genutzte Infrastrukturen gebaut werden. Durch die Großgeräte im Prozess- und Materialtechnikum kann die Forschungsinfrastruktur der TU BAF zu geschlossenen Prozessketten integriert werden. Das Prozesstechnikum gliedert sich dabei in ein Synthese- und ein Ofentechnikum sowie ein Korrosions- und Nitrierlabor mit jeweils verschiedenen Geräten und Versuchsständen. Im Materialtechnikum soll das Kernstück einer pulvermetallurgischen Fertigungslinie für HT-Materialien bzw. refraktäre Verbundwerkstoffe abgebildet werden.

### Ausbau der Studienangebote

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

### 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 Erstausstattung (3,09 Mio. €). Das Gebäude wird eine Gesamtfläche von 6.011 m<sup>2</sup> aufweisen, welche u.a. Büroräume, Laborflächen, Versuchshallen und einen Seminarraum umfasst. Die organisatorische Verantwortung für die Planung, Nutzung und den Betrieb



**Abbildung 4:** Rohbau des ZeHS im Februar 2019 mit fast vollendetem Kopfbau

des Forschungsbaus liegt beim Direktor und dem Vorstand des ZeHS. Der Forschungsbau schafft Platz für bis zu 145 wissenschaftliche und 33 nichtwissenschaftliche Mitarbeiter.

### Baugeschehen

Der Bau des ZeHS auf dem Wissenschaftskorridor in Freiberg schreitet rasch voran. Am 22. März 2019 wurde das Richtfest für das Forschungszentrum begangen (siehe Abbildung 3). Neben dem sächsischen Finanzminister, Herrn Dr. Matthias Haß, und dem Rektor der TU BAF, Herrn Prof. Dr. iur. Klaus-Dieter Barbknecht, kamen auch der Staatssekretär, Herr Uwe Gaul, sowie der Leiter der Niederlassung Chemnitz des Staatsbetriebs Sächsisches Immobilien- und Gebäudemanagement, Herr Peter Voit, zu Wort. Alle Redner waren sich darin einig, dass dieser besondere Tag ein wichtiger Meilenstein im Zuge des Baus eines Forschungszentrums sei, mit welchem an der TU Bergakademie Freiberg eine der größten Einrichtungen für interdisziplinäre Forschung und Ausbildung auf einem zukunftsweisenden Gebiet entsteht.

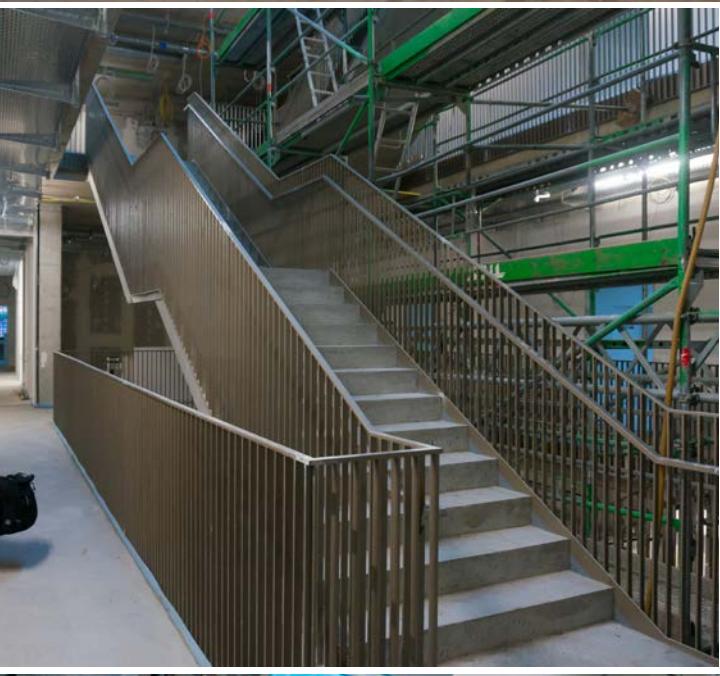
Damit ist ein wichtiger Bauabschnitt des Zentrums fertiggestellt. Ein Rückblick zeigt, dass diese wichtige Phase des Baugeschehens bestmöglich verlaufen ist. Nicht zuletzt erlaubte die Witterung – vor allem bei der Errichtung des Rohbaus – eine termingemäße Bauausführung

(siehe Abbildungen 4 und 5). Nunmehr sind auch die im Zusammenhang mit dem ZeHS beantragten Forschungsgroßgeräte mit einer Investitionssumme von insgesamt 9,75 Millionen Euro von der DFG zur Förderung empfohlen worden, so dass entsprechende Verfahren zu deren Beschaffung im Gange sind. Ab Sommer 2020 können diese dann sukzessive in den Bau einziehen. Hierfür wurde genügend Zeit eingeplant, da manches Forschungsgroßgerät einen erheblichen Installationsaufwand verursachen wird.

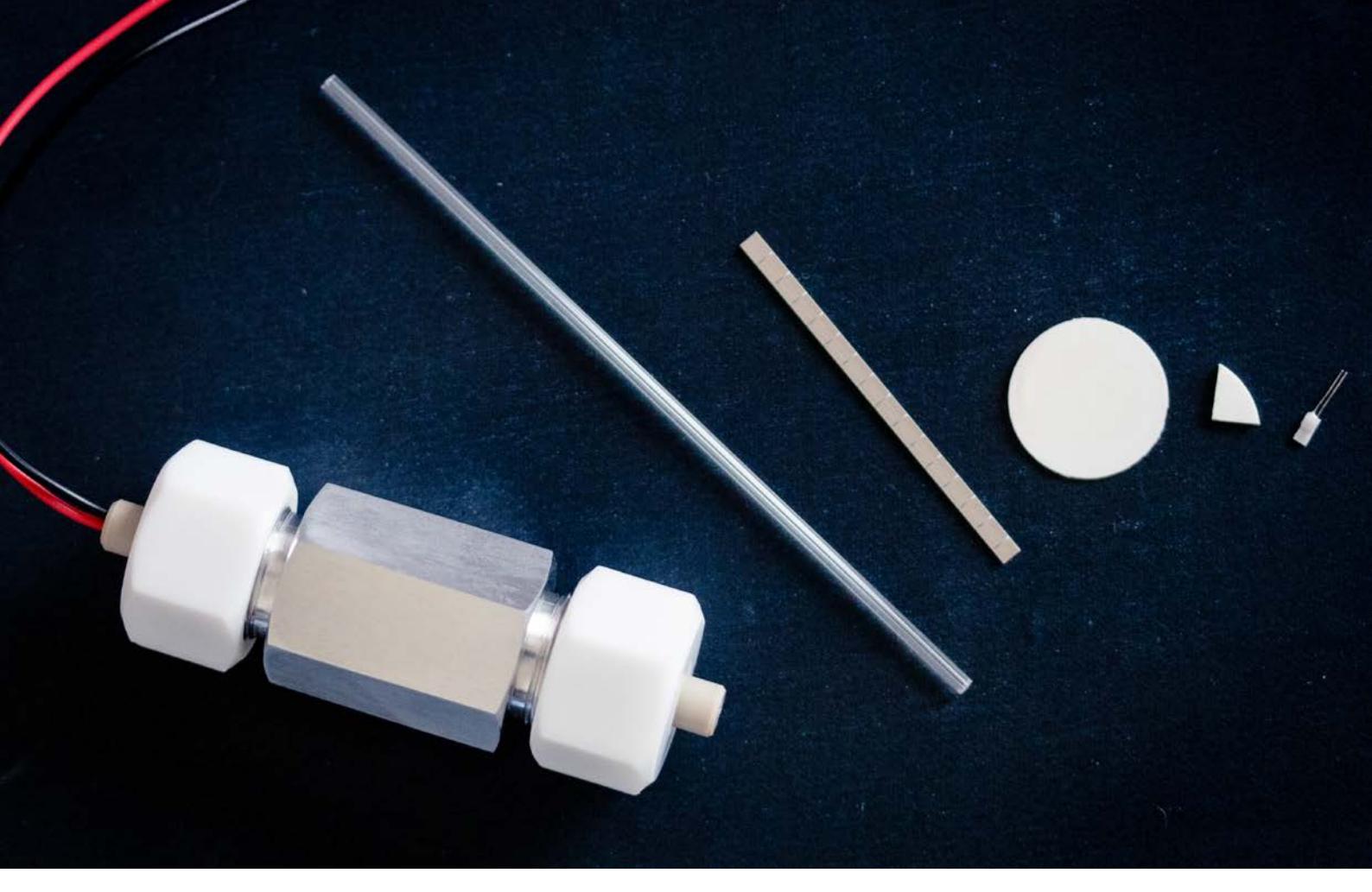
Während der Bauzeit wurden durch das Institut für Experimentelle Physik personelle und materielle Ressourcen für die Detailplanung und praxisgerechte Entwicklung initiativ bereitgestellt. Herauszuhoben ist hier insbesondere das tatkräftige Wirken von Frau Dr. Barbara Abendroth. Als Leiterin der Koordinationsstelle „Materialien und Eigenschaften“ des ZeHS bringt sie im Zusammenhang mit der Laborplanung ihre Erfahrungen vom Zentralen Reinraumlabor, dem sie als Laborleiterin vorsteht, ein.

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

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



# PROJEKTE



---

## ENTWICKLUNG HOCHSENSITIVER WASSERSTOFFSENSORIK

Der Verein „Hydrogen Power Storage & Solutions East Germany e. V.“ (HYPOS) beschäftigt sich mit dem Aufbau einer grünen Wasserstoffwirtschaft speziell in Ostdeutschland durch die produktive Kooperation von Industrie und Wissenschaft. Innerhalb dieses Konsortiums werden verschiedene Projekte über die gesamte Prozess- und Wertschöpfungskette für eine grüne Wasserstoffwirtschaft gefördert, wie z. B. HyProS, in dem die Prozess- und Sicherheitssensorik für die gesamte Prozess-, Transport- und Lagerkette entwickelt wird. Auf all diesen Ebenen der Wertschöpfungskette herrschen sehr unterschiedliche Umgebungsbedingungen. So müssen z. B. Wasserstoffkonzentrationen vom Prozent- 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 erfasst werden. Hierfür werden im Projekt fünf spezialisierte Sensortypen neu und weiterentwickelt.

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



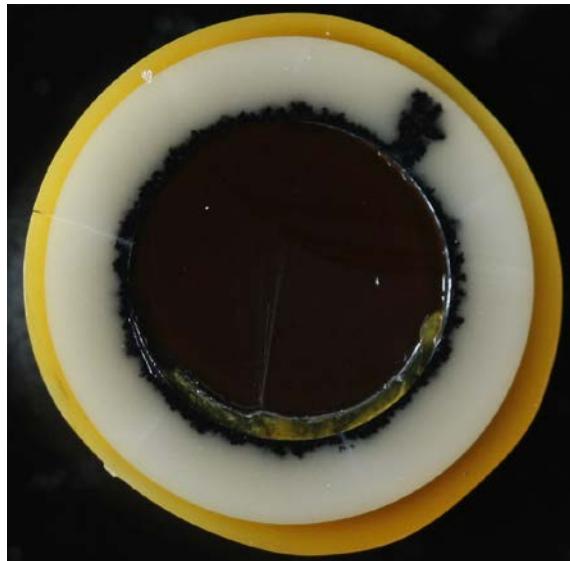
festkörperchemischen Prozessen an fortgeschrittener Wasserstoffsensorik“ am Verbundprojekt. Die Expertisen im Bereich der Materialanalyse und -modifikation sollen insbesondere zur Untersuchung und Weiterentwicklung von Sensoren und deren Komponenten unter produktions- und alterungsspezifischen Fragestellungen dienen.

Im dritten Projektjahr konzentrierten sich die Aktivitäten des IEP auf die Charakterisierung der Degradationserscheinungen insbesondere bei keramischen Materialien aus entsprechenden Feldtests sowie auf den Einfluss verschiedener Ausgangsbedingungen auf die Sensoreigenschaften. Dabei war insbesondere die Degradation des Festelektrolytsensors (FES) in Form des sogenannten *Blackening* von Interesse (siehe Abbildung). Beim *Blackening* entstehen Risse, durch die das Zirkoniumdioxid

gasdurchlässig wird und somit zum Versagen des FES führt. Die Ursachen und der genaue Verlauf dieses Defektmechanismus sollten insbesondere durch das IEP in enger Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer IMWS Halle aufgeklärt werden. Hierbei konnte mittels Raman-Spektroskopie die Ursache der Degradation auf eine Phasenänderung des  $ZrO_2$  zurückgeführt werden.

Eine weitere wichtige Fragestellung war der Einfluss von Produktionsprozessen und Materialmodifikationen auf die spezifischen Eigenschaften verschiedener Sensormaterialien und -komponenten. So wurden z. B. für den impediemtrischen Spilloversensor (IMS) des Projektpartners Leibniz-Institut für Katalyse Oberflächenparameter wie Rauigkeit, chemische Zusammensetzung und Homogenität ermittelt, welche wesentlich die Messgenauigkeit, Ansprechzeit und Lebensdauer beeinflussen. Ein weiteres Beispiel für diese Arbeiten ist die Identifikation, Tiefenlokalisierung und Ursachenidentifikation einer chemischen Veränderung des Stahlgehäuses des Metalloxid-, Wärmeleitfähigkeits- und Druck-Multisensors, die während der Integration des Druck-Sensors auftrat, und sich in einer deutlichen Verfärbung dieses Gehäuses zeigte.

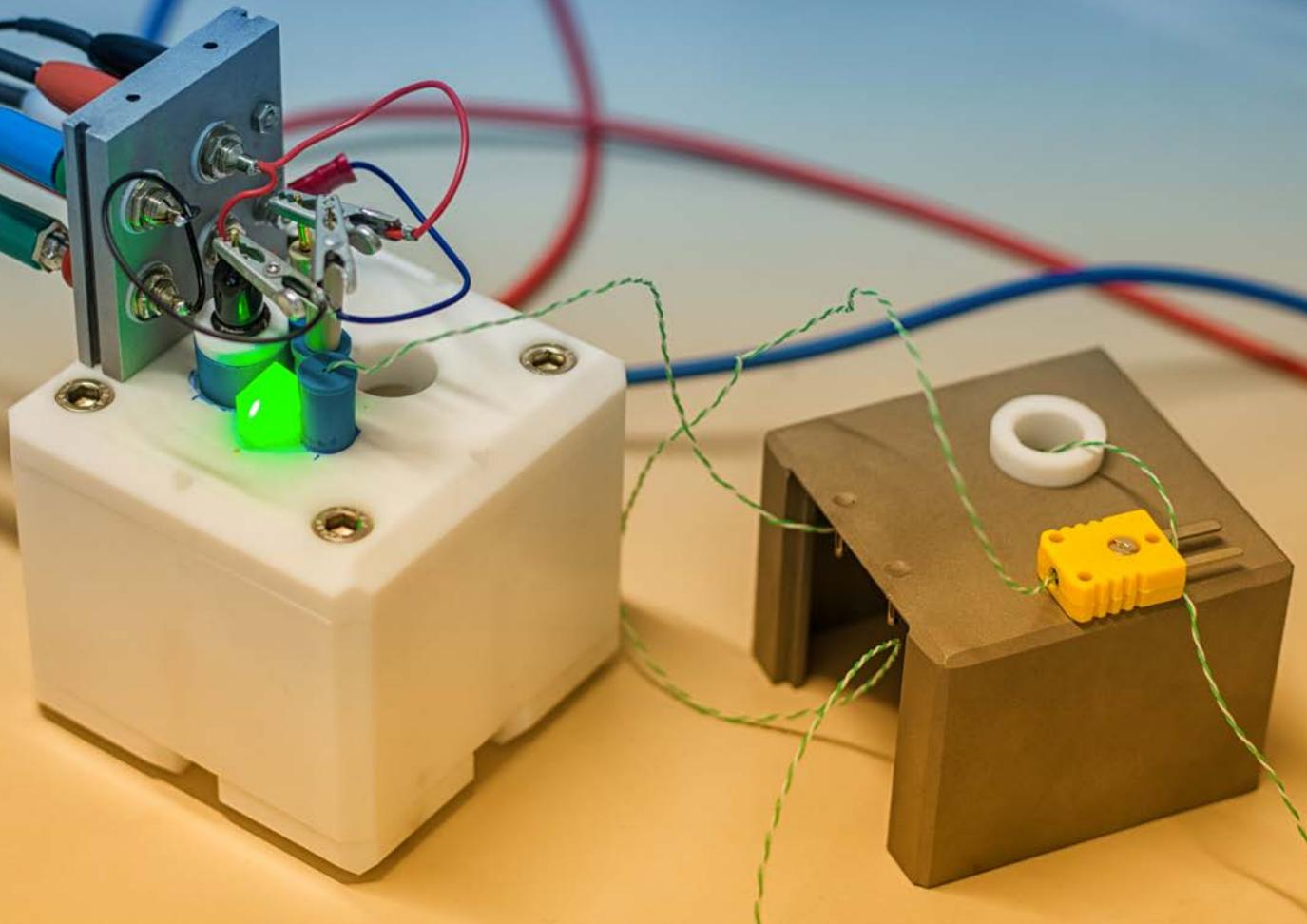
Wir danken dem Bundesministerium für Bildung und Forschung für die Übernahme der Finanzierung des Projektes (Förderkennzeichen: 03ZZ0724I) innerhalb der „Zwanzig-20-Partnerschaft für Innovation“, dem Projektträger Jülich für die Betreuung sowie allen Projektpartnern.



**Abbildung:** Fotografie eines FES-Sensors mit Blackening im sonst weißen  $ZrO_2$ -Ring.



Bundesministerium  
für Bildung  
und Forschung



---

## NUTZUNG VON ABWÄRME ZUR ERZEUGUNG VON WASSERSTOFF UND ELEKTRIZITÄT MIT PYROELEKTRIKA

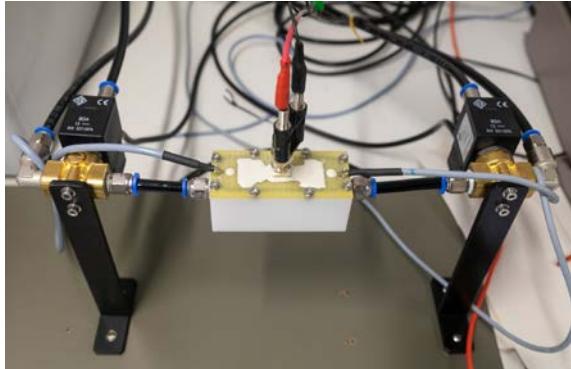
Das Forschungsvorhaben „Nutzung von Abwärme zur Erzeugung von Wasserstoff und Elektrizität mit pyroelektrischen Oxiden“ wird im Rahmen einer Initiative des Sächsischen Staatsministeriums für Wirtschaft, Arbeit und Verkehr gefördert. Deren Ziele sind insbesondere die Steigerung der Energieeffizienz und die Erforschung innovativer Energietechniken. Am Institut für Experimentelle Physik forschen im Rahmen des Projekts 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 die elektrischen Kreisprozesse auf Basis von Pyroelektrika zu untersuchen. Dazu zählen Olsen- und Widerstandszyklus, die in der wissenschaftlichen Literatur

bereits länger bekannt sind, deren Potential in der Technik aber noch nicht erschlossen ist. Ziel des Vorhabens ist die Evaluierung und Weiterentwicklung der bekannten elektrischen Kreisprozesse, um Wirkungsgrad und Wirtschaftlichkeit zu verbessern und eine technische Umsetzung vorzubereiten.

Bei den Redoxprozessen, welche durch Pyroelektrika aktivierbar sind, soll die Wasserspaltung im Vordergrund stehen. Die an der Oberfläche des pyroelektrischen Aktivmaterials ablaufenden Ladungs- und Stofftransfers sind gegenwärtig unzureichend untersucht. Ein besseres Verständnis der Redoxaktivität der Oberfläche soll im Vorhaben erarbeitet werden, um die gewinnbare Menge an Wasserstoff voraussagen und steigern zu können. Mit dieser Voraussetzung für die Optimierung von Material und Verfahren wird somit auch die Grundlage für den Transfer und Einsatz auf der Industrieskale gelegt.

Seit Beginn des Projekts wurde eine umfangreiche Literaturrecherche über pyroelektrische Materialien und deren optimale und zugleich wirtschaftliche



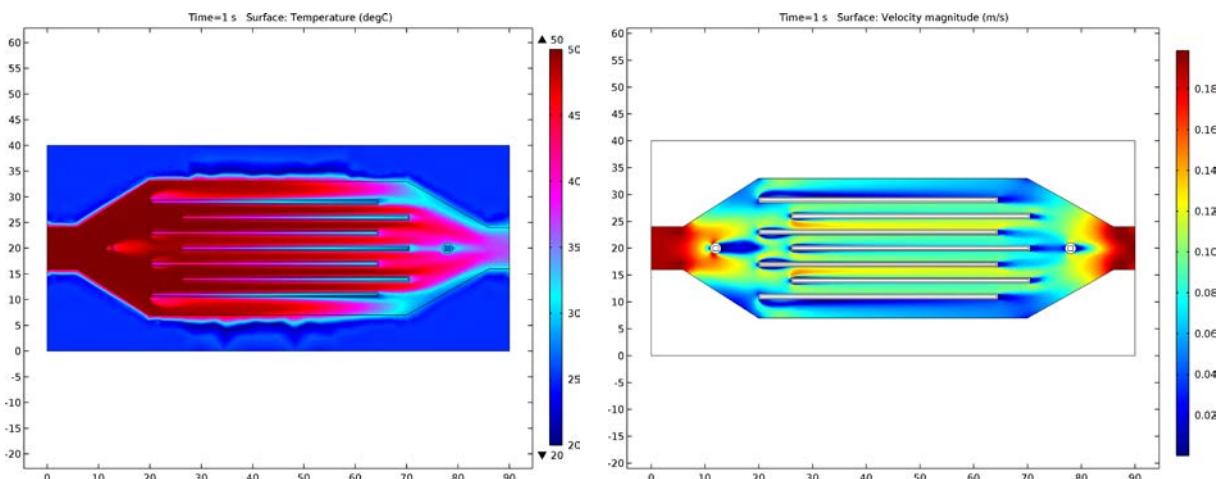
**Abbildung 1:** Aktuelles Setup des Demonstrators

Kreisprozessführung für die Restwärmevernutzung durchgeführt. 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 (Finitie-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 mit 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 ist es möglich bis zu sechs PZT-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 Untersuchungen zeigen.

Im zweiten Teil des Projekts, der pyroelektrisch getriebenen Wasserstofferzeugung, wurde die Elektrolysezelle (siehe großes Bild auf der vorherigen Seite) 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 4). Wie zu erkennen ist, übersteigt das gemessene Potential in der Heiz- bzw. Abkühlphase das erforderliche Redoxpotenzial für die Wasserzerersetzung. Damit wurde erstmals der Spaltungsprozess an einer pyroelektrischen Einkristall-Platte dargelegt und der Beweis angetreten, dass das geplante Konzept und Zelldesign den Anforderungen entspricht.



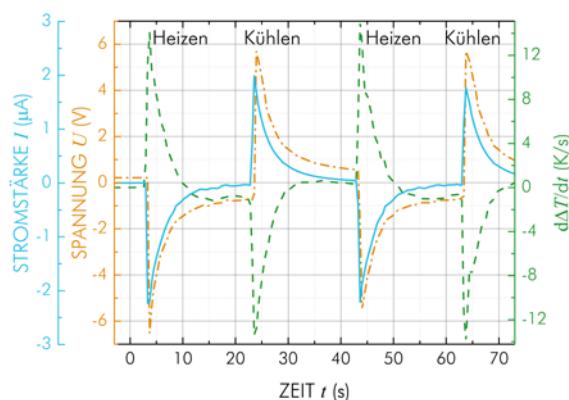
**Abbildung 2:** Simuliertes Temperaturprofil (links) und Strömungsprofil (rechts) im Demonstrator zu einem beliebigen Zeitpunkt



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

Für die Quantifizierung der Daten hinsichtlich der Wasserstoffausbeute werden aus den Messdaten die transferierten Ladungsmengen bestimmt. Bisherige Datenanalysen ergeben beispielsweise für die pyroelektrische Keramik PZT eine H<sub>2</sub>-Bildungsrate von 0,55 µmol/d (im höchsten Leistungsregime des optischen Heizers). In Abhängigkeit von verschiedenen Materialien wurde eine direkte Korrelation zwischen der H<sub>2</sub>-Ausbeute und dem pyroelektrischen Koeffizienten der Materialien aufgedeckt. 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 Potential zum Erschließen von wissenschaftlichem Neuland.

Wir danken der SAB und der Europäischen Union für die finanzielle Unterstützung.



**Abbildung 4:** Strom-Spannungskurve an einer LiTaO<sub>3</sub>-Einkristall-Platte unter zyklischem Heizen und Abkühlen



Europa fördert Sachsen.  
**EFRE**  
Europäischer Fonds für  
regionale Entwicklung



---

## 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.

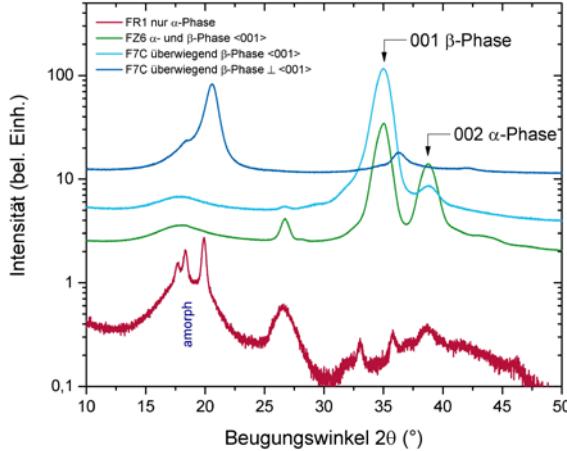
Ziel des Projektes ist die Technologieentwicklung zur Herstellung einer pyroelektrisch wirksamen Folie für die Bereitstellung elektrischer Energie aus Restwärme sowie deren Verwendung in einem Demonstrator zur pyroelektrischen Energiewandlung. Dabei nutzt das Projekt das umfassende und langjährige Know-how 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  $\beta$ -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  $\beta$ -Phase erfolgt zum Beispiel durch uniaxiales Recken der aus der Schmelze gewonnenen unpolaren  $\alpha$ -Phase bei der Folienextrusion. Da die  $\beta$ -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  $\beta$ -Phase von PVDF sowie die Maximierung des



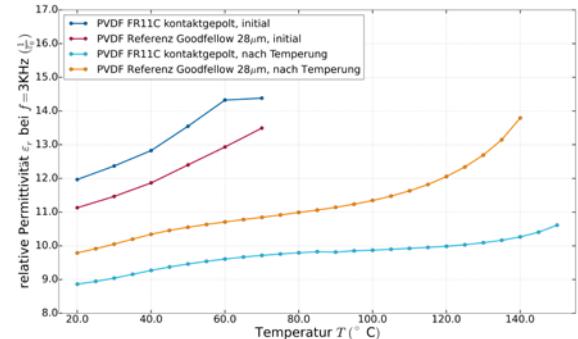
**Abbildung 1:** Röntgendiffraktogramme von PVDF-Proben mit verschiedenen Phasenanteilen, d.h. unterschiedlich intensiven Reflexen der  $\beta$ - und  $\alpha$ -Phase.

kristallinen Anteils der hergestellten Folienmaterialien verifiziert. Dies geschieht zum einen strukturell durch Röntgenbeugung (siehe Abbildung 1) und zum anderen elektrisch mit Hilfe 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  $\beta/\alpha$ -Phasenverhältnisse und wird daher für die weiteren Versuche eingesetzt.

Im letzten Projektjahr fokussierten sich die Arbeiten am IEP auf Untersuchungen zur Dauerstabilität der Polymereigenschaften. Hierfür wurde unter anderem die Permittivität in Alterungsversuchen bei erhöhter Temperatur vermessen (siehe Abbildung 2).

Im Rahmen des Projektes wurde am IEP außerdem ein portables und benutzerfreundliches Messsystem für pyroelektrische Koeffizienten entwickelt, dass nun für die Projektpartner zur Verfügung steht (siehe Abbildung 3).

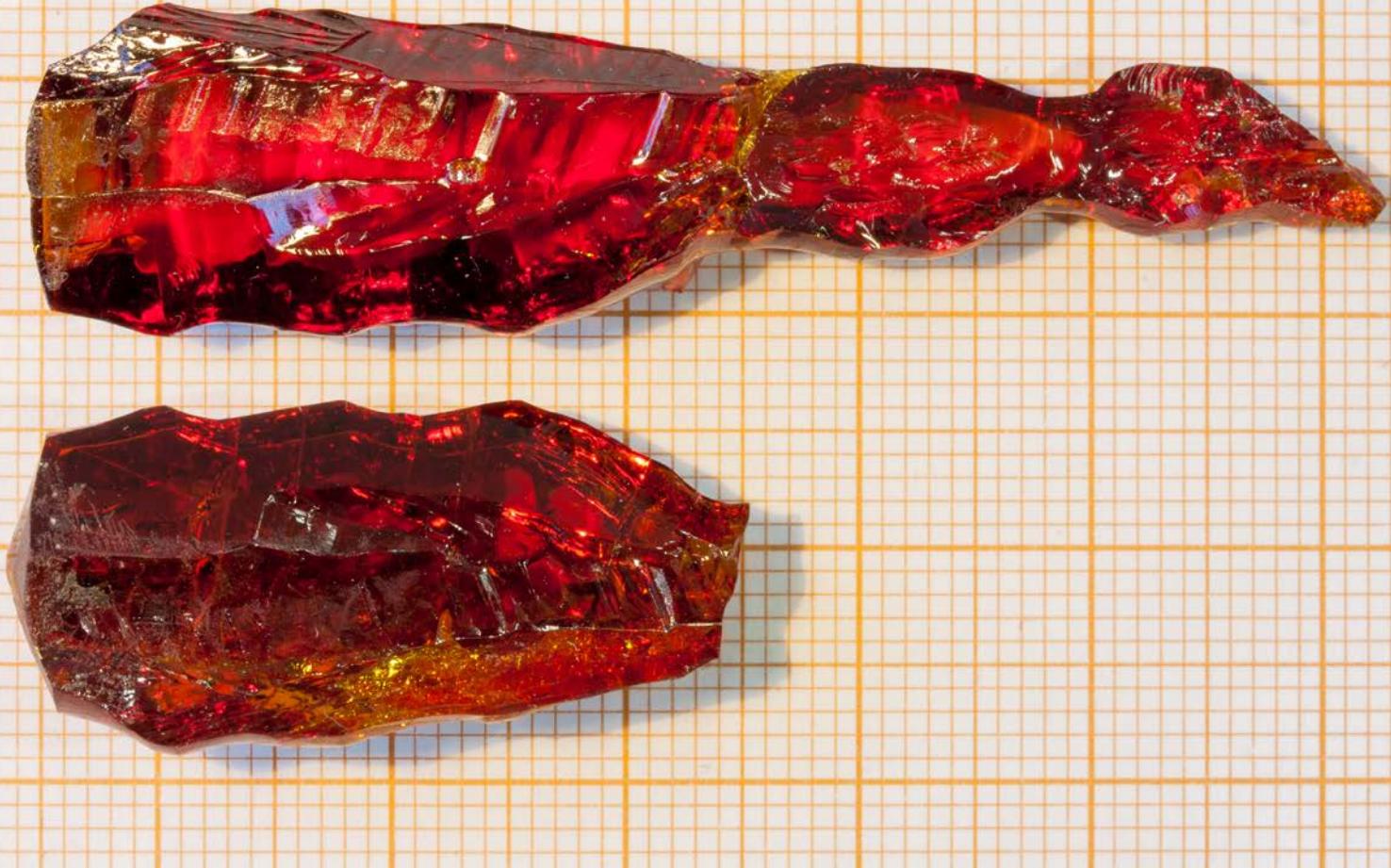
Seit Projektbeginn im März 2017 gab es etwa alle drei Monate Projekttreffen an den jeweiligen Forschungsstellen der beteiligten Partner, um die bisherigen Erkenntnisse zu diskutieren und das weitere Vorgehen zu besprechen.



**Abbildung 2:** Messung der Permittivität verschiedener vorbehandelter PVDF-Proben bei erhöhter Temperatur.



**Abbildung 3:** Portables Messsystem für pyroelektrische Koeffizienten, das per Touchscreen gesteuert wird.




---

## 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 Oxboraten (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

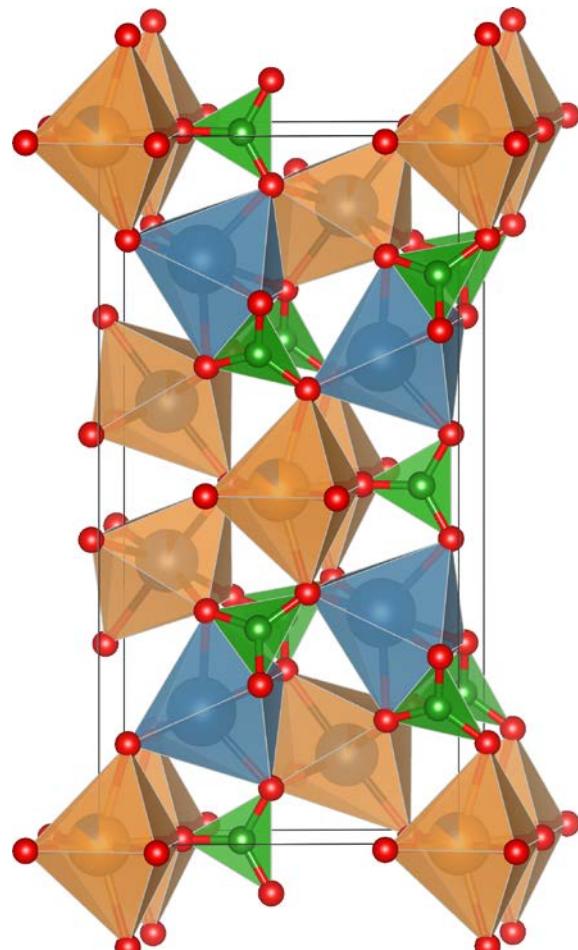
Abhängigkeiten von chemischer Zusammensetzung und Temperatur.

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.

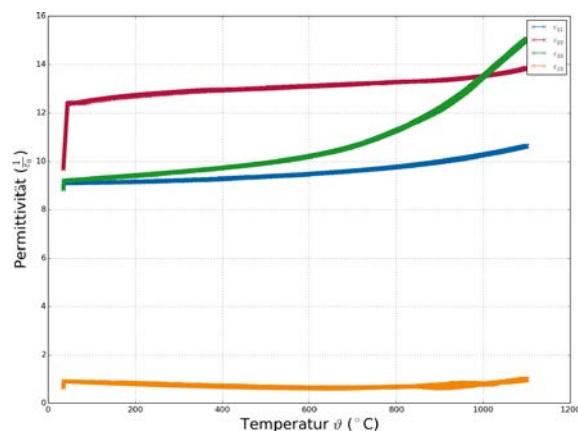
Pyroelektrische Materialien der Perowskitfamilie (z. B.  $Pb(Zr,Ti)O_3$ ,  $BaTiO_3$ ) oder auch verschiedene Niobate und Tantalate (z. B.  $LiNbO_3$ ,  $LiTaO_3$ ) sind durch die Curie-Temperatur, Relaxationsphänomene oder die mit der Temperatur steigende elektrische Leitfähigkeit in ihren pyro- und 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, im 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, 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. Exemplarische Messergebnisse an GdCOB zeigt Abbildung 2.

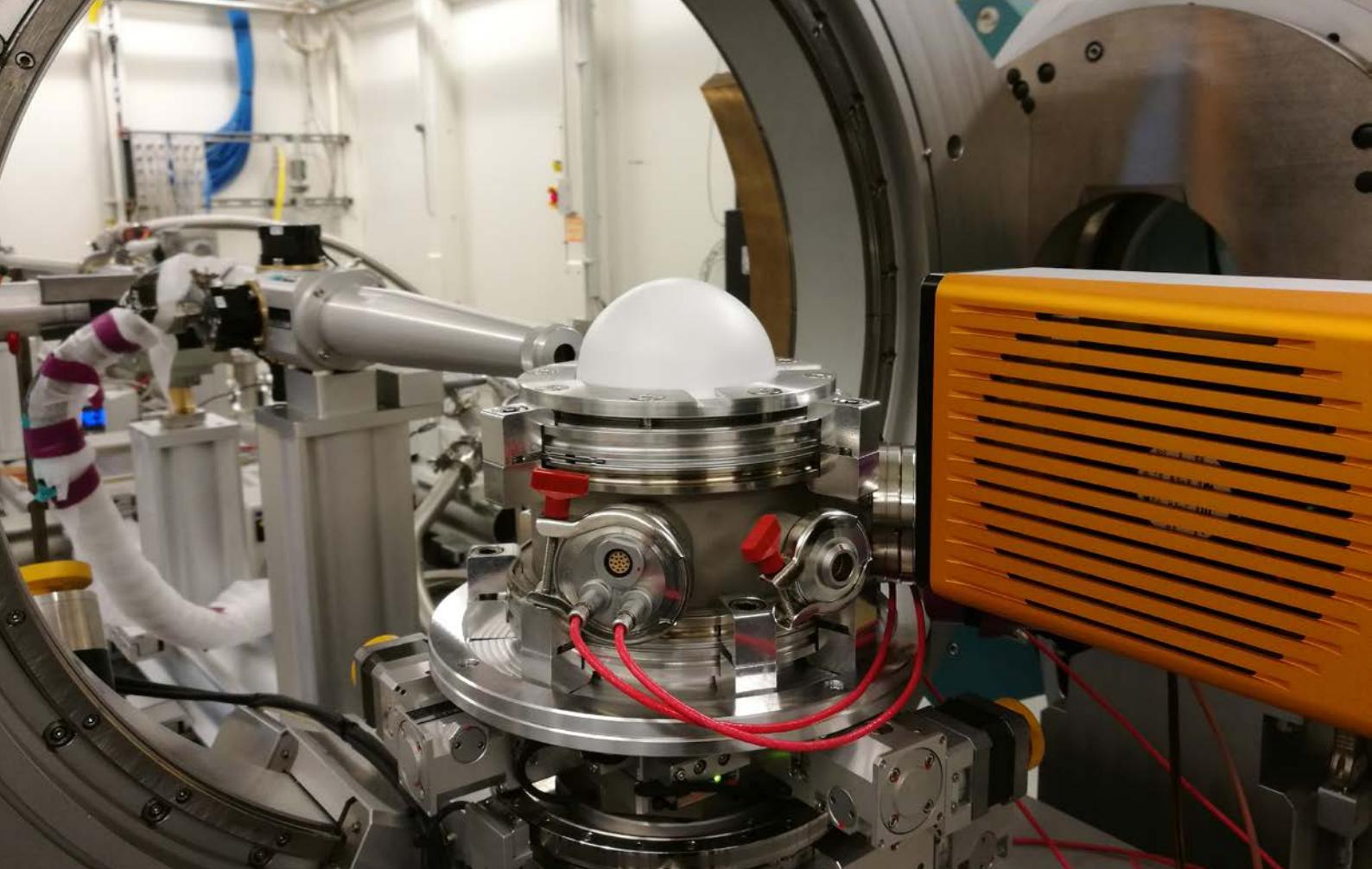
Wir danken der DFG für die finanzielle Unterstützung (Projektnummer: ME 1433/14-1).



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



**Abbildung 2:** Temperaturabhängige Messung aller Komponenten der relativen Dielektrizitätskonstante von GdCOB.



---

## 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 November 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 auf Pikometer-Genauigkeit quantifiziert werden können.

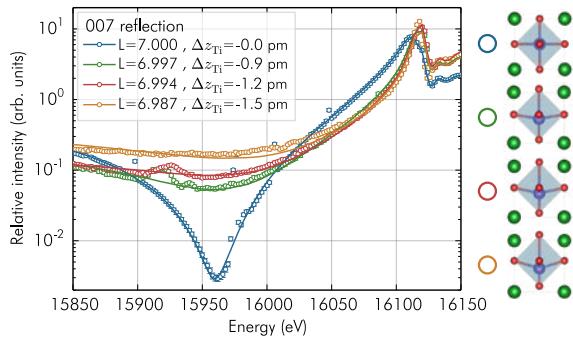
Wie bei allen resonanten Techniken wird das lokale elektronische System einer atomaren Spezies resonant durch gezielt gewählte Wellenlängen des Röntgenspektrums angeregt. Das besondere der RSD ist der Fokus auf ein Intensitätsminimum nahe der Absorptionskante eines Bragg-Reflexes, welches durch destruktive Interferenz hervorgerufen wird. 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,

## REXSUPPRESS

mechanischer Spannung sowie 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 DESY oder der ESRF 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  $\text{SrTiO}_3$  durch Einwirkung eines elektrischen Feldes. Im Vergleich zum unbehandelten  $\text{SrTiO}_3$  (blaue Kurve) bewirken die Verrückungen eine Verschiebung des Intensitätsminimums und einen deutlichen Anstieg der Intensität. Die Position des Titan-Atoms relativ zum unbehandelten  $\text{SrTiO}_3$  (oben) ist in der Legende 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 (*Defect 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 Strontiumtitantat  $\text{SrTiO}_3$  angewendet (siehe Abbildung 1). Er konnte im renommierten Wissenschaftsjournal „Nature Communications“ veröffentlicht werden.

Im letzten Jahr der Projektlaufzeit von REXSuppress wurde eine Messzeit am DESY in Hamburg am Materialsystem Yttrium-Mangan-Oxid  $\text{YMn}_2\text{O}_5$  durchgeführt. Dieses Oxid wurde bereits bei einer früheren Messzeit am ESRF im Jahr 2018 untersucht, um den Ursprung der Ferroelektrizität in einer Tieftemperaturphase von  $\text{YMn}_2\text{O}_5$  verstehen zu können. Die Probengeometrie sowie die notwendigen Wellenlängen der genutzten Röntgenstrahlen sorgten damals für herausfordernde



**Abbildung 2:** Für die Messzeit an der P23 an  $\text{YMn}_2\text{O}_5$  wurde ein Helium-Flow-Cryostat verwendet. Gezeigt ist die auf den Kühlfinger mittels eines Saphirplättchens für die elektrische Isolation geklebte und kontaktierte Probe.

experimentelle Bedingungen, sodass eine zweite ergänzende Messzeit notwendig war. Aufbauend auf dem Wissen der ersten Messzeit, wurde die Probenpräparation und die experimentelle Durchführung optimiert (siehe Abbildung 2), was zu einer äußerst erfolgreichen Messzeit an der Beamline P23 des DESY führte.

Im letzten Projektjahr stand die Aufarbeitung vorangegangener Messzeiten im Fokus. So sind Manuskripte über die Nordseekammer, über die strukturelle Charakterisierung von epitaktisch gewachsenen, ferroelektrischen  $\text{SrTiO}_3$ -Dünnschichten und über die strukturelle Analyse des Ursprungs der Ferroelektrizität in einer Tieftemperaturphase von  $\text{YMn}_2\text{O}_5$  in Vorbereitung.

Zum Abschluss des Projektes, dessen Laufzeit im Dezember 2019 endete, blicken alle Beteiligten auf eine äußerst erfolgreiche Bearbeitung zurück. Die Projektziele wurden im erwarteten Umfang erfüllt und die Ergebnisse stießen auf große Resonanz und wurden mehrfach im Rahmen nationaler und internationaler Konferenzen ausgezeichnet.



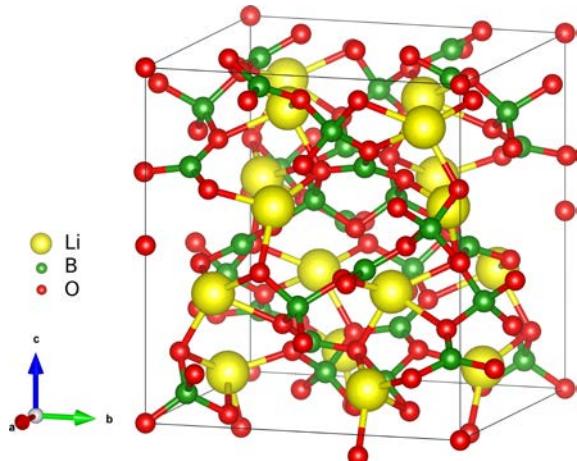
## KONTROLLIERTE EINSTELLUNG DER ATOMSTRUKTUR DURCH AKUSTISCHE WELLEN UND ELEKTRISCHE FELDER

In dem deutsch-russischen Kooperationsprojekt „Kontrollierte Einstellung der Atomstruktur in Funktionsmaterialien durch akustische Wellen und elektrische Felder“ (AcoustREXS) geht es um die Untersuchung des Einflusses von akustischen Wellen und elektrischen Feldern auf strukturelle Charakteristiken, wie z. B. kleinste atomare Verrückungen und Vakanzmigration in polaren Materialsystemen. Hierbei sollen die physikalischen Eigenschaften gezielt durch äußere Einflüsse kontrolliert oder neue Materialeigenschaften erzeugt werden. Dies geschieht insbesondere durch stehende akustische Druckwellenfelder oder elektrische Potentialgradienten, die die Materialrandbedingungen lokal variieren und Kristallsymmetrien brechen. Die Arbeitsgruppe unterstützt die russischen Partner der Lomonossow-Universität Moskau (MSU) insbesondere im Bereich der theoretischen Modellierung mittels DFT, während die Gruppe um Frau Prof. Dr. Elena Ovchinnikova das Knowhow der Probenpräparation sowie des experimentellen Aufbaus und Ablaufs mitbringen. In dem Projekt, welches seit Mai 2019 läuft, wird Herr Dr.

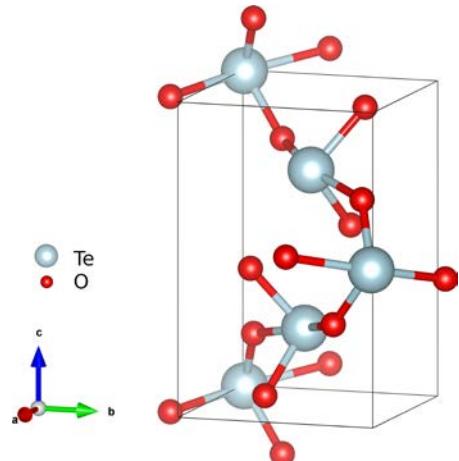
 AcoustREXS

Matthias Zschornak bei den Modellierungen von Doktorand Christian Lüdt unterstützt.

Zur Planung und Interpretation der Synchrotronmessungen unserer russischen Partner wurden die Kristallsysteme  $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$  und  $\text{TeO}_2$  unter Einfluss akustischer oder elektrischer Felder simuliert (siehe Abbildungen 1 und 2). Anhand der relaxierten Atompositionen ist es möglich, Renninger-Reflexe aus den experimentellen Synchrotrondaten zu eliminieren und unter resonanten Streubedingungen auftretende, schwache „verbotene“ Reflexe sichtbar zu machen, welche Informationen zu den kleinen Verrückungen (im pm-Bereich) der Atome in der Einheitszelle liefern. Diese kleinen Verrückungen können die Symmetrie im Kristall brechen und somit spezielle Eigenschaften der Kristalle ändern. Die praktischen Möglichkeiten kontrolliert durchstimmbarer Änderungen



**Abbildung 1:** Kristallstruktur von  $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$



**Abbildung 2:** Kristallstruktur von  $\text{TeO}_2$

von Kristalleigenschaften durch leicht zu variierende äußere Einflüsse sind mannigfaltig und vielversprechend. Zu einem ersten Projekttreffen trafen sich die Kooperationspartner am DESY in Hamburg im Anschluss an eine gemeinsame Messzeit an Beamline P23, die strukturelle Änderungen von  $\text{TeO}_2$  im elektrischen Feld untersuchte (siehe Abbildung 3). Hier wurde das weitere Vorgehen im Projekt und zukünftige gemeinsame Experimente besprochen. Außerdem luden die russischen Partner zu einem Seminar an der MSU ein, um den Austausch zwischen den beiden Arbeitsgruppen zu intensivieren und die nächsten Schritte für die Projektbearbeitung zu festigen. Dieses fand im Januar 2020 stattfinden (siehe Titelbild).



**Abbildung 3:** Erstes Projekttreffen am DESY mit Prof. Dr. Elena Ovchinnikova, Dr. Anton Kulikov und Dr. Dmitri Novikov



---

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

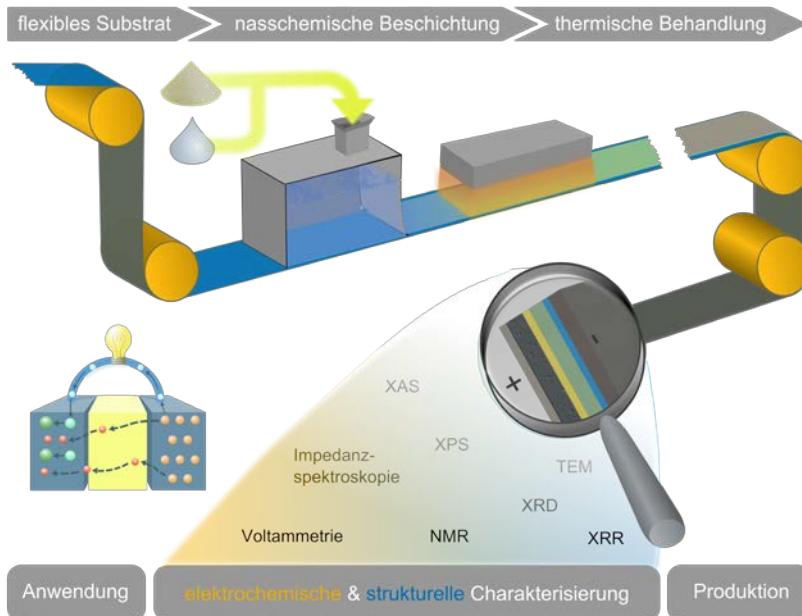
Die weltweite Nachfrage nach Energiespeichern steigt mit dem Ausbau erneuerbarer Energien und der wachsenden Anzahl an Elektrofahrzeugen, mobilen Elektrogeräten und stationären Energiespeichern für das Stromnetz. Im Jahr 2016 wurden weltweit etwa 460 GWh wiederaufladbarer elektrochemischer Zellen produziert. 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 I:** 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, Resourcenverfügbarkeit, 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.

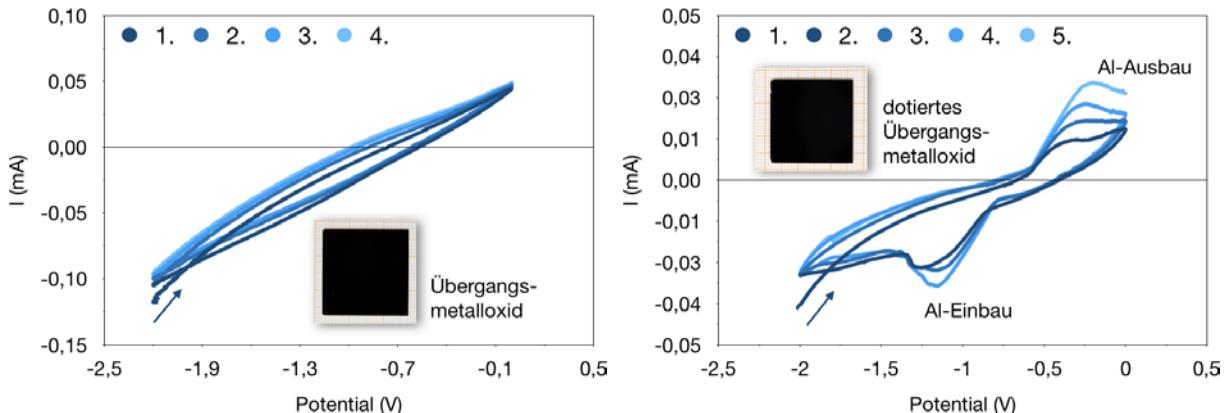
und Technologien für die Rolle-zu-Rolle-Fertigung elektrochemischer Energiespeicher auf flexiblen Trägern – Hochvalente Ionen für die Energiewende (R2RBattery)“ an.

Ziel von R2RBattery ist es, ein Post-Lithium-Energie-speichersystem 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 (Koordinator: 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. Ins-gesamt wurden mehr als 25 verschiedene Materialsyste-me 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 ange-strebten Zielstrukturen gekennzeichnet.

In der Literatur werden nanostrukturierte Titanoxide beschrieben, die interessante elektrochemische Eigen-schaften erwarten lassen. Zurückliegend wurden daher Versuche unternommen, auf Titan-Folien entsprechende Röhrenstrukturen zu erzeugen, um als Kathodenmateri-al gegenüber einer Aluminiumanode eingesetzt werden zu können. So wurden Folien auf unterschiedliche Weise vorbehandelt, um möglichst homogene Oberflächen zu erzeugen. Bei der anschließenden anodischen Oxida-tion bildet sich eine Titanoxidschicht, die aus regelmäßi-igen, 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 kristal-line Phase einzustellen. Die so erzeugten Folien wurden als Elektrode diversen Einlagerungsversuchen mit unter-schiedlichen Elektrolyten (organisch, ionisch) unterzogen und eine Aluminiumioneninterkalation beobachtet und theoretisch im Rahmen eines GRISC-Stipendiums be-gründet. Ein Übersichtsartikel wird alle Arbeiten zusam-menfassen. Darüber hinaus wurde die Eignung dieser Nanostrukturen als Anodenmaterial auch für andere Ionen (Li, Na) getestet. Bestärkt durch die vielversprechen-den Ergebnisse werden zukünftig ganze Zellen getestet.



**Abbildung 3:** Zyklovoltammetriemessungen an mittels Magnetronputtern abgeschiedenen positiven Elektroden für Aluminiumionen-Batterien. Für das reine Übergangsmetallocid zeigen die Messungen keine Aluminiuminterkalation (links). Erst die Dotierung des Übergangsmetallocids 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 Fertigungsline 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 Zyklusfestigkeit.

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 Ionenarten zweifelsfrei abzuleiten.

Gemeinsam mit dem FEP sind zwei verschiedene Probensysteme als positive Elektroden bzw. als Festelektrolyte mit dem Magnetronputterprozess 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  $\text{Al}^{3+}$ -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 mit Hilfe von Bond-Valence-Lagenenergierechnungen Aktivierungsenergien für  $\text{Al}^{3+}$ -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 Cinektor GmbH eine Animation (<https://youtu.be/yWYzANbILUQ>, 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 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. Im Unterauftrag ist die Firma Rovak GmbH in das Projekt integriert.

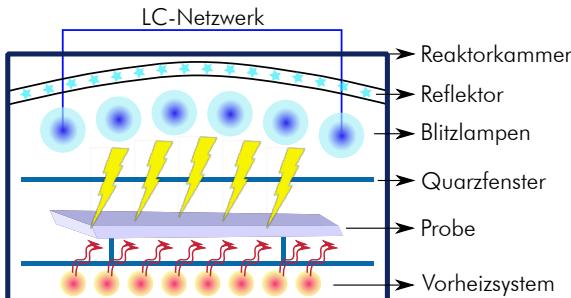
### Si-Metallelektronen

Die Herstellungstechnologie ist einfach zu umreißen: Auf einer Metallfolie (z. B. Cu) wird mittels Sputtern eine Siliziumschicht definierter Dicke erzeugt. Anschließend erfolgt eine Wärmebehandlung mittels Blitzlampentempern (FLA – engl. *Flash Lamp Annealing*). Abbildung I zeigt den schematischen Aufbau einer FLA-Reaktorkammer für die



flächenhafte Behandlung von Proben. Herzstück ist das Xenon-Lampenfeld über der Probenfolie, das durch ein induktiv-kapazitives Netzwerk (LC) elektrisch versorgt wird. Ein zweites Lampenfeld unter der Probe 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.

Die Zielstellung des FLA-Prozesses bei der Herstellung von Si-Anodenmaterialien ist die Fixierung des Siliziums am Substrat, Einstellung der Leitfähigkeit und Gewährleistung der Interkalationsstabilität. Insbesondere dem letzten Punkt kommt hohe Bedeutung zu, da die Einlagerung von Li-Ionen in das Si-Gitter zu einer



**Abbildung 1:** Schematischer Aufbau einer FLA-Reaktorkammer

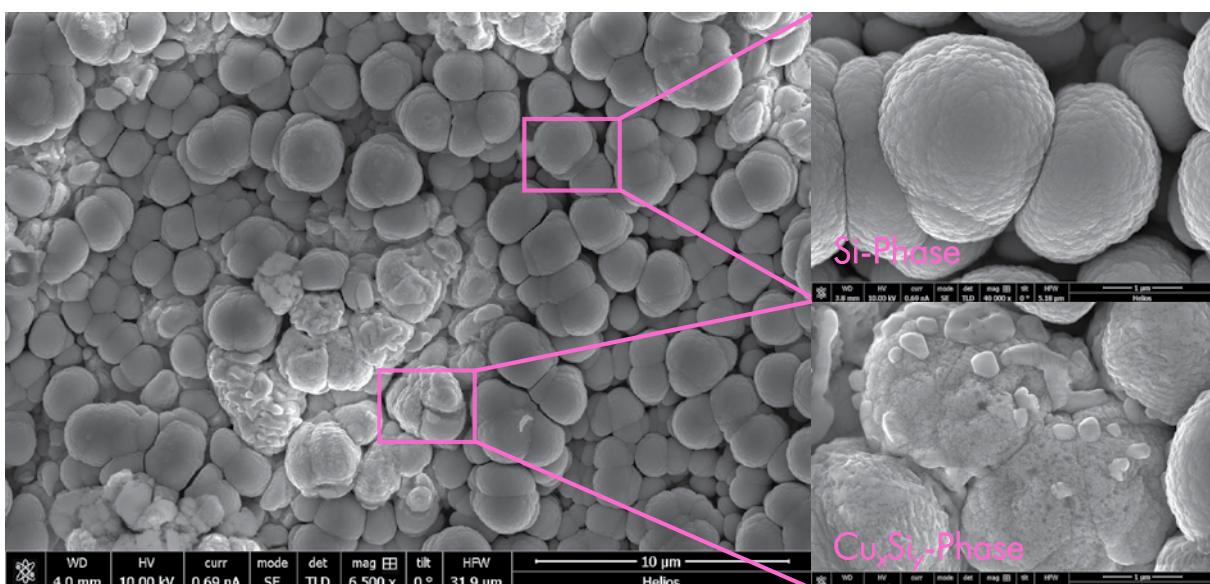
drastischen Volumenexpansion von 300% führt. Die Langzeitstabilität der Schicht muss also gegenüber der starken Gitterexpansion und -kompression beim La-de-Entlade-Prozess gewährleistet sein. Die Abbildung 2 zeigt eine REM-Aufnahme einer solchen Si-Metallelekrode. Diese zeigt blumenkohlartige Mikrostrukturen im Bereich unter 10 µm. Eine FLA-behandelte Anode (Wechselwirkungszeit ca. 1 ms) zeigt mindestens zwei unterscheidbare Phasenbereiche. Zum einen zeigen sich glatte kugelartige Strukturen, welche größtenteils reines Si sind und zum anderen liegt eine Silizid-Mischphase ( $\text{Cu}_x\text{Si}_y$ ) vor. Letztere soll nach einer ersten Einlagerung des Lithiums eine stabile  $\text{Cu}_x\text{Si}_y\text{Li}_z$ -Phase bilden, welche ebenfalls neben dem Si als intermetallische, reversible

Einlagerungselektrode fungiert. Als weitere Metallfolie mit niedriger Schmelztemperatur kann neben Cu z. B. auch Al genutzt werden.

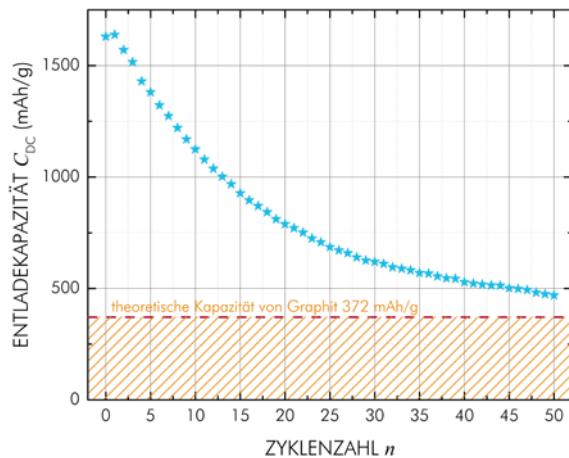
Entsprechende Interkalationsuntersuchungen wurden an FLA-behandelten Si-Metallelektronen in LIB-Knopfzellen mit 500 nm dicker Si-Aktivschicht durchgeführt. Die Abbildung 3 zeigt die Entwicklung der Entladekapazität einer solchen Si-Metallelekrode. Die LIBs mit Si-Anoden zeigen deutlich höhere Entladekapazitäten als die eigentlich theoretisch möglichen von Graphit (orange eingezeichnet). Das hergestellte System stellt damit eine exzellente Optimierung gegenüber bisherigen kommerziellen Systemen dar. Eines der noch zu behandelnden Probleme ist der Kapazitätsverlust, welcher mit zunehmender Zyklenzahl eintritt. Dies hat seine Ursache in der Ablösung der Aktivschicht vom Stromableiter. Entsprechende Optimierungsschritte werden derzeit am IEP etabliert, um hier nötige Abhilfe zu schaffen.

## Si-Vlieselektroden

Die Forschung der vergangenen Jahre zeigte, dass textile basierte Anoden das Problem der Volumenänderung von Si-Strukturen teilweise kompensieren können. Grund dafür sind vor allem die vom Material gegebene höhere



**Abbildung 2:** Rasterelektronenmikroskop-Aufnahme einer mittels FLA behandelten Metall-Einlagerungselektrode auf Si-Basis (links). Die Vergrößerungen (rechts) zeigen die beiden nebeneinander vorliegenden Phasen Si und  $\text{Cu}_x\text{Si}_y$ .



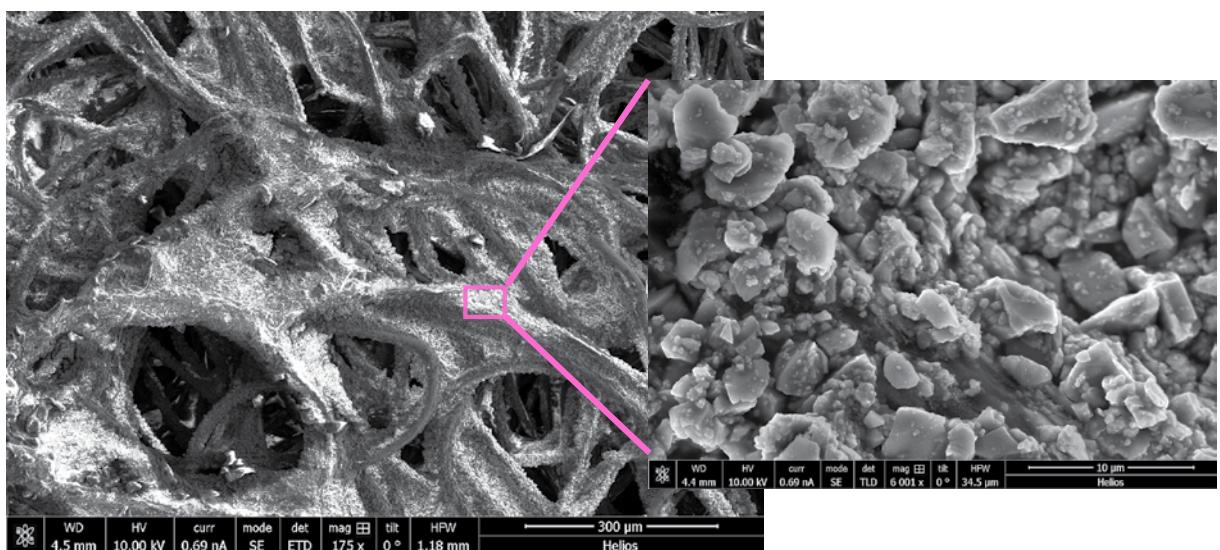
**Abbildung 3:** Entwicklung der Entladekapazität einer FLA-behandelten Si-Metallelektrode in Abhängigkeit von der Zyklenzahl. Die theoretische Entladekapazität von konventionellen Graphitanoden ist zum Vergleich eingezzeichnet.

Flexibilität und die zur Verfügung gestellten Freiräume. Zusätzlich sorgt die erhöhte innere Oberfläche für eine höhere Reaktivität mit den mobilen Lithium-Ionen. 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. Das verwendete Vlies-Material ist mit Silber überzogen, wodurch ein leitfähiger Kontakt zur tragenden Struktur vorliegt. 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 Vliesanoden werden analog zu den Si-Metallelektroden in LIBs verbaut, wobei die besten Herstellungsparameter Entladekapazitäten bis zu 300 mAh/g erzielen. Jedoch stellt die Langlebigkeit dieser Zellen ein Problem dar, deren Optimierung derzeit intensiviert wird. Erste Ansätze, die Si-Partikel auf den metallisierten Vliesanoden mittels FLA zu fixieren, zeigen vielversprechende Ergebnisse, wodurch die Zylavierbarkeit steigt und homogenere Strukturen entstehen, sodass Entladekapazitäten von bis zu 600 mAh/g resultieren.

## HZDR-Innovationswettbewerb

Die Vergabe des HZDR-Innovationswettbewerbs fand am 14.03.2019 statt. Hierbei wurden die besonderen Leistungen im Jahr 2018 gewürdigt. Ziel des Wettbewerbs ist es, neue Ideen für Produkte und Dienstleistungen



**Abbildung 4:** Rasterelektronenmikroskop-Aufnahme eines mit Si-Partikeln beladenen Vliessubstrats



**Abbildung 5:** Alle Preisträger und die Sieger des HZDR-Innovationswettbewerbs beim Gruppenbild mit dem Vorstand

kennenzulernen, die auf vielversprechenden Forschungs- und Entwicklungsergebnissen, Know-how sowie der Infrastruktur des HZDR basieren. Neben Ideen für einen klassischen Technologietransfer in die Wirtschaft sollen auch neue Ansatzpunkte für einen Wissenstransfer in die Gesellschaft geschaffen werden. Die eingereichten Ideen von 18 Bewerberteams 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. Unter dem Titel „Neuartige Si-Anodenmaterialien für Sekundärbatterien

mit höchsten Energiedichten“ beteiligte sich das SiNergy-Team, bestehend aus dem Projektkoordinator Charaf Cherkouk und dem experimentell tätigen Doktoranden Thomas Köhler, und gewann neben zwei weiteren Teams unter den insgesamt 18 Bewerbern den mit 1000 € dotierten Preis.



Europa fördert Sachsen.  
**EFRE**   
Europäischer Fonds für  
regionale Entwicklung



---

## STIPENDIEN UND PREISE

Tina Weigel: **Posterpreis REXS 2019 – 4th International Conference on Resonant Elastic X-ray Scattering** für den Beitrag „Morphology and strain field of the migration-induced field-stabilized polar phase in SrTiO<sub>3</sub>“, Riverhead, Long Island, USA

Tina Weigel: **YoungGEOMATENUM-International-Stipendium** für die Teilnahme an der „HERCULES School“

Melanie Nentwich: **Presentation Award des 1st Joint Meeting of the “Young Crystallographers” (DGK) and the “Young Crystal Growers” (DGKK)** für den Beitrag „LiTaO<sub>3</sub> defect structures by means of forbidden reflections“, Köln

Melanie Nentwich: **Posterpreis der 27. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie** für ihren Beitrag „Sample environment chamber for the manipulation of temperature and electric field during synchrotron measurements“, Leipzig

LEHRE



## PHYSIKAUFFRISCHUNG VOR STUDIENBEGINN

Neben Führungen durch den Campus und die Bibliothek, der Studentenrallye und den Vorkursen Mathematik und Chemie, ist mitunter ein Vorkurs Physik Bestandteil der Einführungstage an der TU Bergakademie Freiberg. Der Kurs entstand im Oktober 2017 im Rahmen des durch den Europäischen Sozialfonds geförderten Projektes „Ausgleich unterschiedlicher fachlicher und nicht-fachlicher Qualifikationen in der Studieneingangsphase“ (Antragsnummer 100298803). Das im Dezember 2019 ausgelaufene Projekt sah die Reduzierung der Studienabbrecherzahlen durch verschiedene didaktische Maßnahmen vor.

Der Vorkurs Physik besteht in jetziger Form aus zwei Tagen à acht Stunden mit jeweils drei bis vier Lernblöcken (siehe Tabelle). In diesen Blöcken werden die mathematischen Grundlagen wie Einheiten umrechnen, Vektorrechnung und Ableiten sowie Themen der Physik wie die Kinematik und Dynamik erörtert. Ein Themenschwerpunkt bildet die Kreisbewegung (Rotation), die in der Schule kaum behandelt wird und in unseren Kursen erfahrungsgemäß am schwersten fällt. Jeder Block beginnt mit einem bündigen Vortrag zur Theorie und zu den wichtigsten Gegebenheiten und Formeln. Anschließend gibt es eine Übungszeit, in der sich die Studienanfänger mit

Übungsaufgaben beschäftigen. Während der selbstständigen Arbeit werden sie von einigen exzellenten Studenten im dritten Semester betreut, die die physikalischen Kurse bereits fehlerfrei bestanden. Abschließend gibt es ein Quiz mittels Kahoot – Schlüsselwort Audience Response System – in dem die Kursteilnehmer ihr Verständnis auf spielerische Art und unter Konkurrenzbedingungen mit den weiteren Teilnehmern auf die Probe stellen.

Die Nachfrage nach dem Vorkurs ist hoch. Jedes Mal nehmen in etwa 200 Erstsemester aus natur- sowie ingenieurwissenschaftlichen Studiengängen teil. Die Evaluation zeigt, dass er den meisten Teilnehmern etwas bringt: die Auffrischung, insbesondere wenn die Schule schon ein paar Jahre zurückliegt. Die Studenten schätzen auch ein erstes Kennenlernen mit den Universitätsanforderungen an die Physik und das Studium im Allgemeinen. Die Evaluation gibt uns Dozenten aber auch Anlass, den Vorkurs immer weiter zu verbessern. Mit den Aufzeichnungen der Veranstaltung im Jahr 2018 wurde beispielsweise ein Onlinekurs etabliert, welcher mit Hilfe der Software H5P Vorträge mit Fragen, Tests und weiteren Links auf moderne Art verbindet. Der Onlinekurs kann als Ergänzung genutzt werden, ist aber auch eine autarke Ressource für z. B. solche Studenten, die erst zur Vorlesungszeit

nach Freiberg kommen oder für Fernstudenten. Der Vorkurs wurde bis dato von Dr. Mateo de Vivanco geleitet und von Dr. Claudia Funke vor Ort unterstützt.

Zu den weiteren didaktischen Maßnahmen am Institut für Experimentelle Physik zählten die Digitalisierung von Inhalten, was sich in Form eines semesterbegleitenden Onlinekurses mit 17 Kapiteln zu den übungsrelevanten Themen umsetzen ließ. Mitarbeiter legten das sächsische Hochschuldidaktikzertifikat ab, um neue Impulse mit nach Hause zu nehmen. Dazu gehörten aktivierende Phasen in den Präsenzübungen, ein frisches Design für die Lernmaterialien und ein neues Gesamtkonzept mit Zusatzpunktvergabe für die Klausur. Zugleich musste ein Instrument zur Quantifizierung der Klausurschwierigkeit geschaffen werden. Dies erfolgte in Zusammenarbeit mit der Graduierten- und Forschungskademie. Die Standardisierung des Anforderungsniveaus ermöglichte es erst, die studentische Leistung über die Jahre – hier vor und während der Maßnahme – zu überwachen und ein variierendes Klausurniveau – um z. B. mehr Studenten durchzuschleusen – streng zu unterbinden. Der Leistungsvergleich der Studenten, die aktiv mitmachten, mit denen, die von den Maßnahmen nicht erreicht werden konnten, war eindeutig: erheblich höhere Bestehensquoten und verbesserte Zensuren – die Folgen eines tieferen Physikverständnisses.

**Abbildung (rechts):** Impressionen vom Vorkurs Physik 2019

**Tabelle:** Programm des Vorkurs Physik 2019

**Tag 1**

- Vorstellung unserer physikalischen Kurse
- Physikalische Einheiten und Umrechnung
- Skalar- und Vektorgrößen in der Physik – Anwendungen
- Ableiten und Integrieren in der Physik / graph. Bedeutung

**Tag 2**

- Kinematik in 1D –  $x, v, a, t$
- Kinematik in 2D
- Kraft und Beschleunigung – das 2. Newtonsche Axiom
- Rotationsbewegung – Bewegungsgleichung
- Rotationsbewegung – Drehmoment

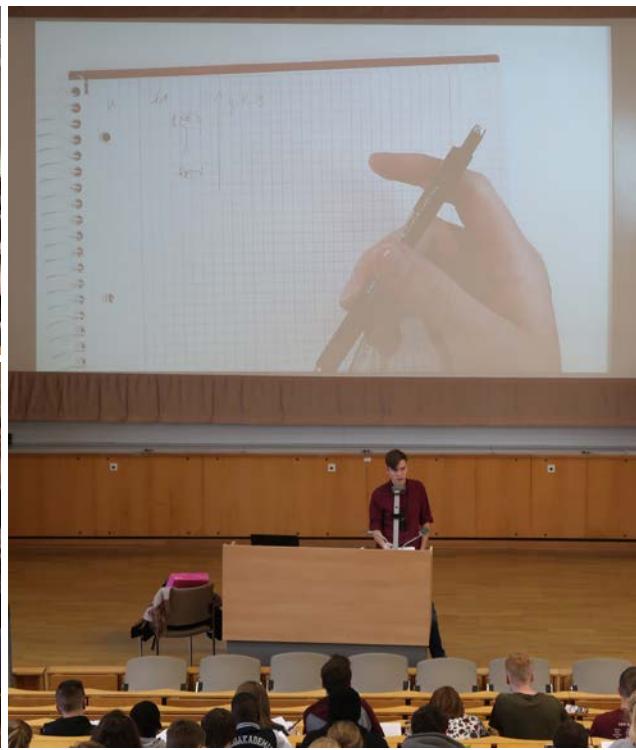


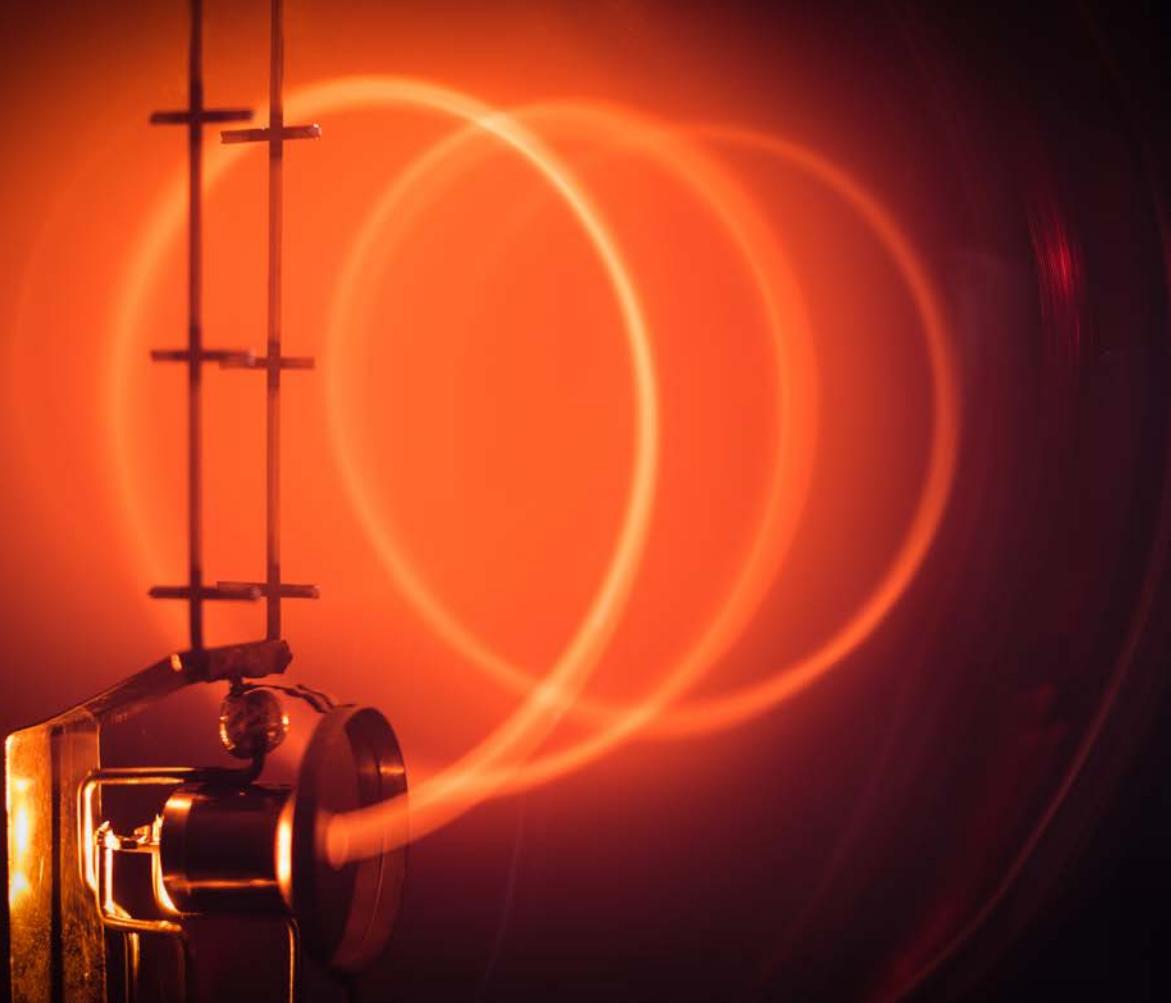
Europäische Union

Europa fördert Sachsen.



Europäischer Sozialfonds





---

## PHYSIKALISCHES GRUNDPRAKTIKUM

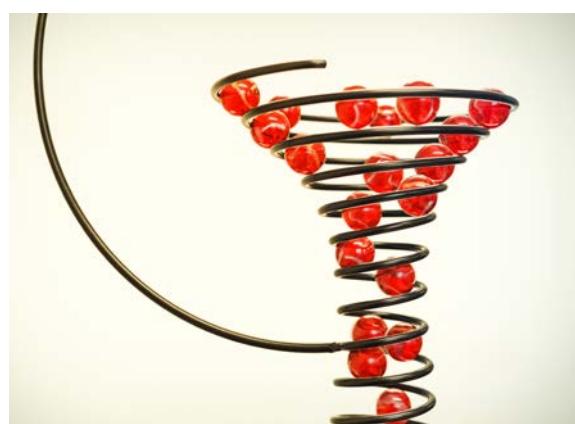
Das Physikalische Praktikum ist Pflichtbestandteil der Module „Physik für Naturwissenschaftler II“ und „Physik für Ingenieure“, die zusammen von einem Großteil der Studierenden an der TU Bergakademie Freiberg im ersten Studienjahr absolviert werden. Im Wintersemester belegen rund 130 ingenieurwissenschaftliche Studienanfänger das Praktikum im Umfang von zwei Semesterwochenstunden. Die naturwissenschaftlichen Studiengänge durchlaufen das Physikalische Praktikum im Sommersemester mit etwa 100 Teilnehmern mit einem Umfang von 4 SWS.

Im Praktikum sollen Studenten durch eigenständiges experimentelles Arbeiten den Vorlesungsstoffe in den Fachgebieten Mechanik, Elektrizitätslehre, Wärmelehre, Atomphysik und Optik vertiefen und dabei eine systematische Vorgehensweise beim experimentellen Arbeiten erlernen. Großer Wert wird dabei gelegt auf das Trainieren einer nachvollziehbaren Dokumentation und Darstellung sowie das Erfassen, Einschätzen und Beachten von Fehlerquellen.

Aktuell wird das Praktikum modernisiert und um verschiedene E-Learning-Komponenten erweitert. Ziel dabei ist, den Studenten didaktische Anreize zu geben, sich in Selbstlernphasen intensiver mit den Praktikumsinhalten

auseinander zu setzen. Für die Umsetzung der geplanten E-Learning-Tools werden neue E-Assessment-Strukturen der Lernplattform OPAL erstellt und getestet.

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-Gymnasium in Pirna, mit dem eine langjährige Partnerschaft besteht. Die Arbeitsunterlagen für die Versuche können die Studierenden und Schüler online abrufen.





---

## PROJEKTTAG LANDESSCHULE PFORTA

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

Ein besonderer Versuch war erneut die „Physik mit dem Smartphone“. Hierbei konnten die Schüler mit dem eigenen Smartphone Messungen der Erdanziehungskraft durchführen und so die zahlreichen Sensoren, die man täglich in der Hosentasche trägt, besser kennenlernen. Beispielsweise kann man die beim Fahrstuhlfahren wirkenden Beschleunigungen live auf dem Smartphone messen (siehe Foto).





---

## ANGEBOTENE LEHRMODULE

**Energiewandlung und Speicherung**, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Florian Mertens,

beteiligte Vorlesende: Prof. Dr. Florian Mertens, Dr. Matthias Müller, Übung: Dr. Wolfram Münchgesang (1 SWS),  
Wintersemester, 4 SWS Vorlesung, 2 SWS Übung

**Fundamentals of Crystallography**, Modulverantwortlicher: Jun.-Prof. Dr. Roman Gumeniuk,

beteiligte Vorlesende: Dr. Hartmut Stöcker, Dr. Volodymyr Levitskyi, Übung: Dr. Hartmut Stöcker,  
Wintersemester, 2 SWS Vorlesung, 1 SWS Übung

**Grundlagen der Halbleiterbauelemente**, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer

beteiligte Vorlesende: Dr. Barbara Abendroth  
Sommersemester, 2 SWS Vorlesung, 2 SWS Praktikum

**Halbleiterphysik**, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer,

beteiligte Vorlesende: Dr. Matthias Zschornak, Übung: Dr. Günter Gärtner, Dr. Claudia Funke  
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

**Physik für Ingenieure**, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Johannes Heitmann,  
 Praktikumsplanung durch Dr. Barbara Abendroth,  
 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, 1 SWS Übung

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

**Semiconductors**, Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer,  
 beteiligte Vorlesende: Dr. Friedrich Roth, Dr. Hartmut Stöcker  
 Wintersemester, 2 SWS Vorlesung

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

**Spectroscopy**, Modulverantwortliche: Prof. Dr. Martin Knupfer, Dr. Friedrich Roth,  
 beteiligte Vorlesende: Prof. Dr. Martin Knupfer, Dr. Friedrich Roth  
 Wintersemester, 4 SWS Vorlesung, ½ SWS Exkursion

**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

M. Zschornak, J. Hanzig, H. Stöcker, T. Leisegang, S. Gemming, D. C. Meyer: **Structural transformation of the SrTiO<sub>3</sub> surface region due to electric fields at ambient temperature**, In: Switchable Oxides, edited by K. S. Szot, W. Speier, K. Roleder, PWN, Warschau, 2019

M. Münchhalfen, J. Schreuer, C. Reuther, R. Möckel, J. Götze, E. Mehner, H. Stöcker, D. C. Meyer: **Order/disorder processes and electromechanical properties of monoclinic GdCa<sub>4</sub>O(BO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>**, Zeitschrift für Kristallographie 234 (2019) 707–723

R. A. Eremin, P. Zolotarev, A. A. Golov, N. A. Nekrasova, T. Leisegang: **Ionic Transport in Doped Solid Electrolytes by Means of DFT Modeling and ML Approaches: A Case Study of Ti-Doped KFeO<sub>2</sub>**, Journal of Physical Chemistry C 123 (2019) 29533–29542

R. Eremin, P. Zolotarev, T. Leisegang, P. Solokha: **A machine learning approach for predicting formation enthalpy: A case study of Mackay-type approximants of icosahedral quasicrystals**, AIP Conference Proceedings 2163 (2019) 020003

F. Meutzner, M. Zschornak, A. A. Kabanov, T. Nestler, T. Leisegang, V. A. Blatov, D. C. Meyer: **Sulphur- and selenium-containing compounds potentially exhibiting Al-ion conductivity**, Chemistry – A European Journal 25 (2019) 8623–8629

T. Nestler, S. Fedotov, T. Leisegang, D. C. Meyer: **Towards Al<sup>3+</sup> Mobility in Crystalline Solids: Critical Review and Analysis**, Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences 44 (2019) 298–323

T. Leisegang, F. Meutzner, M. Zschornak, W. Münchgesang, R. Schmid, T. Nestler, R. A. Eremin, A. A. Kabanov, V. A. Blatov, D. C. Meyer: **The Aluminum-Ion Battery: A Sustainable and Seminal Concept?**, Frontiers in Chemistry 7 (2019) 268

T. Nestler, F. Meutzner, A. A. Kabanov, M. Zschornak, T. Leisegang, D. C. Meyer: **Combined Theoretical Approach for Identifying Battery Materials: Al<sup>3+</sup> Mobility in Oxides**, Chemistry of Materials 31 (2019) 737–747

R. Patra, R. Mattheis, H. Stöcker, M. Monecke, G. Salvan, R. Schäfer, O. G. Schmidt, H. Schmidt: **Magnetooptical response of permalloy multilayer structures on different substrate in the IR–VIS–UV spectral range**, Journal of Physics D: Applied Physics 52 (2019) 485002

S. K. Sharma, T. Köhler, J. Beyer, M. Fuchs, R. Gloaguen, J. Heitmann: **Extending temperature sensing range using Eu<sup>3+</sup> luminescence upto 865 K in a single crystal of EuPO<sub>4</sub>**, Physical Chemistry Chemical Physics 21 (2019) 16329–16336

V. R. Rayapati, D. Bürger, N. Du, R. Patra, I. Skorupa, D. Blaschke, H. Stöcker, P. Matthes, S. E. Schulz, H. Schmidt: **Electroforming-free resistive switching in yttrium manganite thin films by cationic substitution**, Journal of Applied Physics 126 (2019) 074102

S. V. Vegešna, D. Bürger, R. Patra, J. Dellith, B. Abendroth, I. Skorupa, O. G. Schmidt, H. Schmidt: **Tunable large field magnetoconductance of ZnO, ZnMnO, and ZnCoO thin films**, Journal of Applied Physics 125 (2019) 215305

A. Vyalikh, M. Schikora, K. P. Seipel, M. Weigler, M. Zschornak, F. Meutzner, W. Münchgesang, T. Nestler, V. Vizgalov, D. Itkis, A. F. Privalov, M. Vogel, D. C. Meyer: **NMR studies of Li mobility in NASICON-type glass-ceramic ionic conductors with optimized microstructure**, Journal of Materials Chemistry A 7 (2019) 13968–13977

A. Vyalikh, V. O. Koroteev, W. Münchgesang, T. Köhler, C. Röder, E. Brendler, A. V. Okotrub, L. G. Bulusheva, D. C. Meyer: **The effect of charge transfer upon Li- and Na-ion insertion in fine-grained graphitic material as probed by NMR**, ACS Applied Materials and Interfaces 11 (2019) 9291–9300

V. Okotrub, M. A. Kanygin, V. O. Koroteev, S. G. Stolyarova, D. V. Gorodetskiy, Yu. V. Fedoseeva, I. P. Asanov, L. G. Bulusheva, A. Vyalikh: **Phosphorus incorporation into graphitic material via hot pressing of graphite oxide and triphenylphosphine**, Synthetic Metals 248 (2019) 53–58

R. Wonneberger, M. Seyring, K. Freiberg, A. Carlsson, J. Rensberg, B. Abendroth, H. Stöcker, M. Rettenmayr, A. Undisz: **Oxidation of stainless steel 316L – oxide grains with pronounced inhomogeneous composition**, Corrosion Science 149 (2019) 178–184

F. Zimmermann, G. Gärtner, H. Sträter, C. Röder, M. Barchuk, D. Bastin, P. Hofmann, M. Krupinski, T. Mikolajick, J. Heitmann, F. C. Beyer: **Green coloring of GaN single crystals introduced by Cr impurity**, Journal of Luminescence 207 (2019) 507–511

E. Richter, F. C. Beyer, F. Zimmermann, G. Gärtner, K. Irmscher, I. Gamov, J. Heitmann, M. Weyers, G. Tränkle: **Growth and Properties of Intentionally Carbon-Doped GaN Layers**, Crystal Research & Technology (2019) 1900129

Y. V. Fedoseeva, A. V. Okotrub, V. O. Koroteev, Y. M. Borzdov, Y. N. Palyanov, Y. V. Shubin, E. A. Maksimovskiy, A. A. Makarova, W. Münchgesang, L. G. Bulusheva, A. Vyalikh: **Graphitization of  $^{13}\text{C}$  enriched fine-grained graphitic material under high-pressure annealing**, Carbon 141 (2019) 323–330

## Strukturforschung mit XFELs und Synchrotronstrahlung

O. V. Molodtsova, I. M. Aristova, D. V. Potorochin, S. V. Babenkov, I. I. Khodos, S. L. Molodtsov, M. Vorokhta, V. Yu. Aristov: **Noble metal nanoparticles in organic matrix**, Applied Surface Science 506 (2019) 144980

V. Yannello, F. Guillou, A. A. Yaroslavtsev, Z. P. Tener, F. Wilhelm, A. N. Yaresko, S. L. Molodtsov, A. Scherz, A. Rogalev, M. Shatruk: **Revisiting Bond Breaking and Making in EuCo<sub>2</sub>P<sub>2</sub>: Where are the Electrons?**, Chemistry – A European Journal 25 (2019) 5813

J. Mahl, S. Neppl, F. Roth, C. Saladrigas, H. Bluhm, J. Guo, W. Yang, N. Huse, W. Eberhardt, O. Gessner: **Decomposing electronic and lattice contributions in optical pump–X-ray probe transient inner-shell absorption spectroscopy of CuO**, EPJ Web of Conferences 205 (2019) 04015

J. Mahl, S. Neppl, F. Roth, A. Shavorskiy, N. Huse, H. Bluhm, W. Eberhardt, O. Gessner: **Real-time probing of charge-transfer induced interfacial fields in a dye-semiconductor system using time-resolved XPS**, EPJ Web of Conferences 205 (2019) 05021

V. Aristov, A. Chaika, O. Molodtsova, S. Babenkov, A. Locatelli, T. Mentes, A. Sala, D. Potorochin, D. Marchenko, B. Murphy, B. Walls, K. Zhussupbekov, I. Shvets: **Layer-by-Layer Graphene Growth on  $\beta\text{-SiC/Si(001)}$** , ACS Nano 13 (2019) 526–535

M. Izquierdo, M. Karolak, D. Prabhakaran, A. T. Boothroyd, A. O. Scherz, A. Lichtenstein, S. L. Molodtsov: **Monitoring ultrafast metallization in LaCoO<sub>3</sub> with femtosecond soft x-ray spectroscopy**, Communications Physics 2 (2019) 8

H. Fukuzawa, T. Takanashi, E. Kukk, K. Motomura, Shin-ichi Wada, K. Nagaya, Y. Ito, T. Nishiyama, C. Nicolas, Y. Kumagai, D. Iablonskyi, S. Mondal, T. Tachibana, D. You, S. Yamada, Y. Sakakibara, K. Asa, Y. Sato, T. Sakai, K. Matsunami, T. Umehoto, K. Kariyazono, S. Kajimoto, H. Sotome, P. Johnsson, M.S. Schöffler, G. Kastirke, K. Kooser, X.-J. Liu, T. Asavei, L. Neagu, S.L. Molodtsov, K. Ochiai, M. Kanno, K. Yamazaki, S. Owada, K. Ogawa, T. Katayama, T. Togashi, K. Tono, M. Yabashi, H. Fukumura, N. Kishimoto, A. Rudenko, C. Miron, H. Kono, K. Ueda: **Real-Time Observation of X-ray Induced Intramolecular and Interatomic Electronic Decay in CH<sub>2</sub>I<sub>2</sub>**, Nature Communications 10 (2019) 2186

E. A. Schneidmiller, V. Balandin, W. Decking, M. Dohlus, N. Golubeva, D. Noelle, M. V. Yurkov, I. Zagorodnov, G. Geloni, Y. Li, S. Molodtsov, J. Pflueger, S. Serkez, H. Sinn, S. Tomin: **Considerations for the Ultrahard X-ray Undulator Line of the European XFEL**, Proceedings of IPAC'19 (2019) 1732–1735

E. A. Schneidmiller, V. Balandin, W. Decking, M. Dohlus, N. Golubeva, D. Noelle, M. V. Yurkov, I. Zagorodnov, G. Geloni, Y. Li, S. Molodtsov, J. Pflueger, S. Serkez, H. Sinn, T. Tanikawa, S. Tomin: **Feasibility Studies of the 100 keV Undulator Line of the European XFEL**, Proceedings of FEL'19 (2019) 172–175

I. Petrenko, A. P. Summers, P. Simon, S. Zółtowska-Aksamitowska, M. Motylenko, C. Schimpf, D. Rafaja, F. Roth, K. Kummer, E. Brendler, O. S. Pokrovsky, R. Galli, M. Wysokowski, H. Meissner, E. Niederschlag, Y. Joseph, S. Molodtsov, A. Ereskovsky, V. Sivkov, S. Nekipelov, O. Petrova, O. Volkova, M. Bertau, M. Kraft, A. Rogalev, M. Kopani, T. Jesionowski, H. Ehrlich: **Extreme biomimetics: Preservation of molecular detail in centimeter-scale samples of biological meshes laid down by sponges**, Science Advances 5 (2019) eaax2805

J. Mahl, S. Neppl, F. Roth, M. Borgwardt, C. Saladrigas, B. W. Toulson, J. K. Cooper, T. Rahman, H. Bluhm, J. Guo, W. Yang, N. Huse, W. Eberhardt, O. Gessner: **Decomposing Electronic and Lattice Contributions in Optical Pump–X-ray Probe Transient Inner-Shell Absorption Spectroscopy of CuO**, Faraday Discussions 216 (2019) 414–433

F. Roth, S. Neppl, A. Shavorskiy, T. Arion, J. Mahl, H. O. Seo, H. Bluhm, Z. Hussain, O. Gessner, W. Eberhardt: **Efficient charge generation from triplet excitons in metal-organic heterojunctions**, Physical Review B 99 (2019) 020303(R)

## Juniorprofessur Kristallphysik

F. Taubert, J. Seidel, R. Hüttl, M. Bobnar, R. Gumeniuk, F. Mertens: **The heat capacity and entropy of the four lithium stannides Li<sub>7</sub>Sn<sub>4</sub>, Li<sub>7</sub>Sn<sub>2</sub>, Li<sub>13</sub>Sn<sub>5</sub> and Li<sub>7</sub>Sn<sub>3</sub> in the temperature range (2 to 865) K**, Journal of Chemical Thermodynamics 130 (2019) 119–128

I. V. Odynets, S. Khainakov, S. Garcia-Granda, R. Gumeniuk, M. Zschornak, N. Soloviova, N. S. Slobodyanik, P. Horcaya, A. A. Babaryk: **The crystal structure of visible light absorbing piezoelectric semiconductor SrNb<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>11</sub> revisited: high-resolution X-ray diffraction, vibrational spectroscopy and computational study**, Journal of Materials Chemistry C 7 (2019) 5497–5505

P. Wyzga, I. Veremchuk, C. Himcinschi, U. Burkhardt, W. Carrillo-Cabrera, M. Bobnar, C. Hennig, A. Leithe-Jasper, J. Kortus, R. Gumeniuk: **Indium thiospinel In<sub>1-x</sub>□<sub>x</sub>In<sub>2</sub>S<sub>4</sub> – structural characterization and thermoelectric properties**, Dalton Transactions 48 (2019) 8350–8360

B. Bergk, J. Klotz, T. Förster, R. Gumeniuk, A. Leithe-Jasper, V. Lorenz, W. Schnelle, M. Nicklas, H. Rosner, Y. Grin, J. Wosnitza: **Fermi surface studies of the skutterudite superconductors LaPt<sub>4</sub>Ge<sub>12</sub> and PrPt<sub>4</sub>Ge<sub>12</sub>**, Physical Review B 99 (2019) 245115

E. Zuñiga-Puelles, R. Cardoso-Gil, M. Bobnar, I. Veremchuk, C. Himcinschi, C. Hennig, J. Kortus, G. Heide, R. Gumeniuk: **Structural stability and thermoelectric performance of high quality synthetic and natural pyrites (FeS<sub>2</sub>)**, Dalton Transactions 48 (2019) 10703–10713

V. Levytskyi, M. Feig, L. Akselrud, W. Schnelle, A. Leithe-Jasper, V. Dyadkin, D. Chernyshov, R. Gumeniuk: **Crystal structure and superconducting properties of Sc<sub>5</sub>Ir<sub>6</sub>Sn<sub>18</sub>**, Journal of Physics: Condensed Matter 31 (2019) 445603

S. Flipo, M. Kohout, F. Roth, T. Weigel, W. Schnelle, M. Bobnar, A. Ormeci, U. Burkhardt, C. Hennig, T. Leisegang, D. C. Meyer, A. Leithe-Jasper, R. Gumeniuk: **CeMo<sub>2</sub>B<sub>5</sub>: A New Type of Arrangement of Puckered Boron Hexagonal Rings**, European Journal of Inorganic Chemistry 2019 (2019) 3572–3580



---

## KONFERENZBEITRÄGE

### Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie

T. Leisegang: **From peculiarities of crystalline matter to material conversion and storage**, Università degli Studi di Milano, Dipartimento di Chimica, 12. November 2019, eingeladener Vortrag

T. Leisegang: **Identification of battery materials: demands and assessment**, Università degli Studi di Milano, Dipartimento di Chimica, 12. November 2019, eingeladener Vortrag

M. Nentwich, T. Weigel, M. Zschornak, C. Richter, T. Köhler, E. Mehner, D. Novikov, D. C. Meyer: **LiTaO<sub>3</sub> defect structures by means of forbidden reflections**, 1st Joint Meeting of the Young Crystallographers (DGK) and the Young Crystal Growers (DGKK), Köln, 19.–20. September 2019, Poster

T. Leisegang, F. Meutzner, M. Zschornak, R. A. Eremin, A. A. Kabanov, R. Schmid, M. Herrmann, T. Köhler, V. A. Blatov, D. C. Meyer: **The aluminum-ion battery – materials and perspective**, XXI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry, St. Petersburg, Russland, 9.–13. September 2019, Vortrag

A. A. Kabanov, Ye. A. Morkhova, T. Leisegang, T. Nestler, F. Meutzner, V. A. Blatov: **Identification of new high-valent ionic conductors by using combination of topological and DFT methods**, XXI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry, St. Petersburg, Russland, 9.–13. September 2019, Vortrag

M. Nentwich, T. Weigel, M. Zschornak, C. Richter, T. Köhler, E. Mehner, D. Novikov, D. C. Meyer: **LiTaO<sub>3</sub> defect structures by means of forbidden reflections**, 32nd European Crystallographic Meeting, Wien, Österreich, 18.–23. August 2019, Poster

T. Weigel, C. Richter, M. Nentwich, E. Mehner, M. Zschornak, D. C. Meyer: **Morphological analysis of the migration-induced field-stabilized polar phase in SrTiO<sub>3</sub> with Scanning X-ray Diffraction Microscopy**, 32nd European Crystallographic Meeting, Wien, Österreich, 18.–23. August 2019, Poster

M. Zschornak: **Resonantly Suppressed Diffraction – Probing structural distortions with sub-picometer spatial resolution**, 4th International Conference on Resonant Elastic X-ray Scattering (REXS 2019), Riverhead, Long Island, New York, USA, 17.–21. Juni 2019, Vortrag

T. Weigel: **Morphology and strain field of the migration-induced field-stabilized polar phase in SrTiO<sub>3</sub>**, 4th International Conference on Resonant Elastic X-ray Scattering (REXS 2019), Riverhead, Long Island, New York, USA, 17.–21. Juni 2019, Poster

R. Eremin, P. Zolotarev, A. Golov, N. Nekrasova, I. Bobrikov, P. Solokha, T. Leisegang: **Computer modeling of disordered crystals**, XXIII International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (AYSS), Dubna, Russland, 15.–19. April 2019, Plenarvortrag

T. Weigel, M. Zschornak, T. Behm, C. Funke, S. Jachalke, C. Richter, M. Nentwich, H. Stöcker, T. Leisegang, D. C. Meyer: **Assessment of Pyroelectricity in Polar Oxides from Atomic Displacements**, HERCULES School, Grenoble, Frankreich, 8.–12. April 2019, Poster

W. Münchgesang, T. Köhler, E. Mehner, H. Stöcker, D. C. Meyer: **Water splitting by pyroelectric single crystals**, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Regensburg, 31. März – 5. April 2019, Vortrag KFM 9.8

M. Zschornak: **Harmonic principles and resonance in crystals**, Skyland Meeting 2019, Sedgefield Western Cape, Südafrika, 28.–31. März 2019, eingeladener Vortrag

T. Leisegang, P. Solokha, T. G. Akhmetshina, R. A. Eremin, A. V. Gurskaya, S. De Negri, D. M. Proserpio, A. Saccone: **The Sc-Pd system – a new I/I Mackay type approximant**, 27. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Leipzig, 25.–28. März 2019, Vortrag S18-05

M. Nentwich, T. Weigel, M. Zschornak, C. Richter, E. Mehner, H. Stöcker, D. C. Meyer: **Sample environment chamber for the manipulation of temperature and electric field for synchrotron measurements**, 27. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Leipzig, 25.–28. März 2019, Poster P078

S. Jankus, H. Stöcker, J. Hanzig, E. Mehner, S. Jachalke, D. C. Meyer: **Energy harvesting with PVDF foils**, 27. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Leipzig, 25.–28. März 2019, Poster P107

T. Köhler, W. Münchgesang, E. Mehner, T. Leisegang, H. Stöcker, D. C. Meyer: **Water splitting by pyroelectric single crystals**, 27. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Leipzig, 25.–28. März 2019, Poster P108

M. Rothenberger, D. C. Meyer, T. Leisegang, F. Meutzner, T. Nestler: **Analysis of aluminum conductivity in high-valent transition metal oxides with bond-valence-site-energy calculations**, 27. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Leipzig, 25.–28. März 2019, Lightning Talk LT2-12

T. Leisegang: **Identification of battery materials: Demands and assessment**, Forum Theoretical Materials Science, Samara State Transport University, Samara, Russland, 22. Februar 2019, eingeladener Vortrag

## Strukturforschung mit XFELs und Synchrotronstrahlung

S. Molodtsov: **Brighter than Milliard of Suns**, Christmas Lecture at the National University of Science and Technology „MISiS“, Moskau, Russland, 18. Dezember 2019, Vortrag

S. Molodtsov: **Soft X-ray Instrumentation and First Results of User Experiments**, School of XFEL and Synchrotron Radiation Users SFEL2019, Liptovský Ján, Slowakei, 24.–28. November 2019, Vorlesung

F. Roth: **Licht der Zukunft – Modernste Röntgenstrahlungsquellen und die Herausforderungen unserer Zeit**, 2nd Science Session, Freiberg, 12. November 2019, Vortrag

F. Roth: **Direct observation of femtosecond charge transfer dynamics in organic heterojunctions using a Free-Electron Laser**, Russian-German Workshop 2019, Berlin, 28.–29. Oktober 2019, Poster

S. Molodtsov: **European XFEL: Status and Research Applications**, 7th Internationally Participated Congress on Particle Accelerators and Applications, Bodrum, Türkei, 2.–3. September 2019, Vortrag

S. Molodtsov: **X-ray Sources – From Röntgen’s Tube via SR Towards XFEL Facilities**, RACIRI 2019 Summer School, Svetlogorsk, Russland, 4.–11. August 2019, Vorlesung

F. Roth: **Direct observation of femtosecond charge transfer dynamics in organic heterojunctions using a Free-Electron Laser**, 40th International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics, San Francisco, USA, 1.–5. Juli 2019, Vortrag & Poster

S. Molodtsov: **XFEL: First Experiments and Russian Users**, European Conference on Neutron Scattering (ECNS 2019), St. Petersburg, Russland, 30. Juni – 5. Juli 2019, Vortrag

S. Molodtsov: **European XFEL – An Overview**, Workshop „Cooperation in Photon Science: Israel – DESY & European XFEL“, Jerusalem, Israel, 20. Juni 2019, Vortrag

S. Molodtsov: **European XFEL: Unique Possibilities for X-ray Research**, 13th European Conference on Accelerators in Applied Research and Technology (ECAART13), Split, Kroatien, 5.–10. Mai 2019, Vortrag

F. Roth: **Time-Domain In-Situ X-ray Studies of Interfacial Charge Transfer**, Institute Seminar, Institute of Organic Chemistry, TU Bergakademie Freiberg, 18. März 2019, Vortrag

S. Molodtsov: **European XFEL: Status and Research Applications**, Workshop „Time resolved science at ID09 and its synergy with EuXFEL programme“, Grenoble, Frankreich, 4.–5. März 2019, Vortrag

S. Molodtsov: **European XFEL: Status and Bio-Applications**, XX Winter School on Biophysics and Molecular Biology, Gattchina, Russland, 25. Februar – 2. März 2019, Vorlesung

F. Roth: **Monitoring charge-transfer and electron relaxation dynamics at organic donor/acceptor interfaces in organic solar cells**, DESY User Meeting, Hamburg, 22.–25. Januar 2019, 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 Be<sub>2</sub>Pt<sub>5</sub>**, 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 P.64

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

Richard Wolowski: **Natrium-Ionen-Festkörperakkumulator: Eine Alternative zur Lithium-Ionen-Technologie?**, Problemorientierte Projektarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2019

Christian Ludt: **Electronic structure of the homologous series of Ruddlesden-Popper phases  $\text{SrO}(\text{SrTiO}_3)_n$** ,  
Problemorientierte Projektarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2019

Richard Wolowski: **Charakterisierung von Festelektrolyt- und Kathodenmaterialien für Post-Lithium-Akkumulatoren**, Bachelorarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2019

Sven Grimm: **Thermoelektrische Eigenschaften von  $\text{In}_{1-x}\square_x\text{In}_2\text{S}_{4-x}\text{Se}_x$** , Bachelorarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2019

Christian Ludt: **Interactions of Ruddlesden-Popper phases and Migration-Induced Field-Stabilized Polar phase in Strontium Titanate**, Masterarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2019

Falk Meutzner: **Crystal-chemical algorithms for the identification of potentially cation-conducting materials from crystallographic databases**, Doktorarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2019

Sven Jachalke: **Characterization of Novel Pyroelectrics: From bulk GaN to Thin Film HfO<sub>2</sub>**, Doktorarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2019



---

## 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](http://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

Knopfzellenpresse zum Verschließen von selbstgefertigten Batteriegehäusen im Chemielabor der Arbeitsgruppe Meyer des Instituts für Experimentelle Physik an der TU Bergakademie Freiberg, © Hartmut Stöcker.

**Autoren**

- |       |                                              |       |                                           |
|-------|----------------------------------------------|-------|-------------------------------------------|
| 1     | Dirk C. Meyer                                | 41    | Falk Meutzner, Tilmann Leisegang          |
| 5–10  | Hartmut Stöcker                              | 42    | Tilmann Leisegang                         |
| 13–17 | Dirk C. Meyer, Hartmut Stöcker               | 43    | Sven Jachalke                             |
| 18–30 | Serguei Molodtsov, Friedrich Roth            | 44–45 | Tilmann Leisegang                         |
| 31–36 | Roman Gumeniuk, Paweł Wyżga, Manuel Feig     | 46    | Sven Jachalke                             |
| 37–38 | Barbara Abendroth                            | 47    | Tilmann Leisegang                         |
| 39–45 | Tilmann Leisegang                            | 48    | Erik Mehner                               |
| 46–47 | Hartmut Stöcker, Tilmann Leisegang           | 49    | Sven Jachalke, Erik Mehner                |
| 48–51 | Matthias Zschornak, Tina Weigel              | 50    | Erik Mehner                               |
| 52–56 | Dirk C. Meyer, Theresa Lemser                | 51    | Tina Weigel                               |
| 59–60 | Melanie Nentwich, Wolfram Münchgesang        | 52    | Heinle, Wischer und Partner               |
| 61–63 | Thomas Köhler, Sven Jachalke                 | 53–54 | Cinector GmbH                             |
| 64–65 | Erik Mehner, Sandra Jankus                   | 55–56 | Sven Jachalke                             |
| 66–67 | Juliane Hanzig, Hartmut Stöcker, Erik Mehner | 57    | Hartmut Stöcker                           |
| 68–71 | Tina Weigel, Matthias Zschornak,             | 59    | Sven Jachalke                             |
| 72–76 | Tilmann Leisegang, Hartmut Stöcker           | 60    | Melanie Nentwich                          |
| 77–80 | Thomas Köhler                                | 61–62 | Sven Jachalke                             |
| 81    | Hartmut Stöcker                              | 63    | Sven Jachalke, Thomas Köhler              |
| 83–84 | Mateo de Vivanco                             | 64    | Sven Jachalke                             |
| 86    | Barbara Abendroth, Tatjana Suworow           | 65    | Erik Mehner, Sven Jachalke                |
| 87    | Hartmut Stöcker                              | 66    | Juliane Hanzig                            |
|       |                                              | 67    | Hartmut Stöcker, Erik Mehner              |
|       |                                              | 68    | Tina Weigel                               |
|       |                                              | 69    | Carsten Richter, Melanie Nentwich         |
|       |                                              | 70    | Anton Kulikov                             |
|       |                                              | 71    | Christian Ludt, Dmitri Novikov            |
|       |                                              | 72    | Sven Jachalke                             |
|       |                                              | 73    | Tina Nestler                              |
|       |                                              | 74    | Sven Jachalke                             |
|       |                                              | 75    | Tilmann Leisegang                         |
|       |                                              | 76    | Cinector GmbH                             |
|       |                                              | 77    | Hartmut Stöcker                           |
|       |                                              | 78–79 | Thomas Köhler, Claudia Funke, Uta Fischer |
|       |                                              | 80    | HZDR                                      |
|       |                                              | 81    | European Crystallographic Association     |
|       |                                              | 83–85 | Mateo de Vivanco                          |
|       |                                              | 86    | Sven Jachalke                             |
|       |                                              | 87    | Valentin Garbe                            |
|       |                                              | 88–95 | Sven Jachalke                             |
|       |                                              | 99    | Melanie Nentwich                          |
|       |                                              | 100   | Sven Jachalke                             |

**Bildquellen**

- |       |                                          |
|-------|------------------------------------------|
| 1     | Medienzentrum TU Bergakademie Freiberg   |
| 5–10  | Sven Jachalke                            |
| 11    | Claudia Funke, Uta Fischer               |
| 13    | Erik Mehner                              |
| 15    | Sven Jachalke                            |
| 18    | European XFEL GmbH                       |
| 19    | Medienzentrum, Sven Jachalke             |
| 20    | Friedrich Roth, Iaroslav Petrenko        |
| 21–25 | Friedrich Roth                           |
| 26–27 | European XFEL GmbH                       |
| 28    | HZB, Michael Setzpfandt                  |
| 29    | European XFEL GmbH                       |
| 30    | Friedrich Roth                           |
| 31    | Sven Jachalke                            |
| 32–35 | Roman Gumeniuk, Paweł Wyżga, Manuel Feig |
| 37–39 | Sven Jachalke                            |
| 40    | Tilmann Leisegang, Sven Jachalke         |

