



Sehr geehrte Leserin, sehr geehrter Leser,

für den vorliegenden Jahresbericht 2021 des Instituts für Experimentelle Physik (IEP) steht mein herzlicher Dank für die durch alle Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter geleistete Arbeit an erster Stelle.

Im Ergebnis des Berichtszeitraums können wir erneut auf gemeinsam erzielte Erfolge in Forschung und Lehre und einen weiteren Ausbau der wissenschaftlichen Ausstrahlung und die Konsolidierung der erreichten Positionierung des IEP blicken.

Im Jahr 2021 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 den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern danken, waren doch aus gegebenem Anlass besondere Herausforderungen zu meistern. Diesbezüglich fühle ich mich insbesondere für die Umsetzung der im Zusammenhang erforderlich gewordenen Online-Lehrangebote verbunden. Daraus speiste sich auch eine sehr zu begrüßende Initiative von Frau Dr. Claudia Funke, die digitalen Praktikumsunterlagen modern wahrnehmbar zu gestalten.

Neben der aktiven Teilnahme an internationalen Fachkonferenzen und weiteren einschlägigen Veranstaltungen trugen auch in diesem Jahr unsere Publikationsaktivitäten in wissenschaftlichen Fachzeitschriften sowie durch eingeladene Buchbeiträge zur Sichtbarkeit des IEP und der gesamten Universität bei. Besonders freue ich mich, dass wir uns gemeinsam in einem international stark

bearbeiteten Gebiet, nämlich zu Aluminiumbatterien mit zuerkannten Patenten und weiteren Schutzrechtsanmeldungen sichtbar machen konnten. Damit münden mehr als ca. zehnjährige Aktivitäten in sehr gute Zukunftsperspektiven. Ich bedaure es sehr, auf Grund bestehender Regelungen hoch geschätzte Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter in Arbeitsverhältnisse an anderer Stelle übergeben zu müssen. Es beruhigt mich, dass hier nahtlose Weiterentwicklungen möglich sind, was wohl zuerst den Akteurinnen und Akteuren zukommt. Wir haben uns weiterer Verbundenheit versichert.

Die Ergebnisse der kreativen und intensiven Arbeit waren zugleich Grundlage für die Einwerbung von Projektmitteln, die uns den Erhalt und weiteren Ausbau unserer Kompetenzen sowie auch die Umsetzung des Humboldtschen Prinzips der Einheit von Forschung und Lehre ermöglichen. Nachdem das BMBF-Vorhaben *R2R-Battery* noch einmal verlängert wurde, wuchs parallel dazu das BMWi-Vorhaben „Die Aluminiumbatterie: Herausforderungen für die industrielle Fertigung – ProBaSol“ auf. Beide Vorhaben werden hier erwähnt, da sie insbesondere im Bereich der Geräteinfrastruktur einen maßgeblichen Aufbau möglich machen. Hinzu möchte ich zahlreiche DFG-Vorhaben im Einzelverfahren sowie ZIM-Projekte ohne Ausschluss weiterer Säulen nennen. Damit wird deutlich, dass es uns gelingt, den Bogen von der Grundlagenforschung bis hin zu industriellen Anwendungen zu spannen.

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 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter im Bereich der Werkstätten, der chemischen Laboratorien und der IT abstützen. Dr. Matthias Zschornak steht in einer Situation ehrenamtlichen Engagements für die sachkundige Zuteilung von Messzeiten in Hamburg am Synchrotron PETRA III und engagiert sich für weitere Vernetzungsvorhaben; die Anbindung an dieser Stelle war mir persönlich ein Anliegen bei meinem Wechsel von der TU Dresden nach Freiberg.

Seit der Anfangsphase der Antragstellung des Zentrums für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung (ZeHS) im Jahr 2013 und dem Baubeginn im Jahr 2016 habe ich in meiner Eigenschaft als Wissenschaftlicher Sprecher des ZeHS für dessen Aufbau zahlreiche Anleihen an bewährte Gedanken des IEP in diese Richtung transportiert und initiativ auch unsere Ressourcen eingesetzt. Nun sind nach der Übergabe im Jahr 2021 dem IEP zugeordnete Laboratorien und mehrere Forschungs-großgeräte am ZeHS arbeitsfähig. Damit erhielt das IEP weitere Forschungsmöglichkeiten und insgesamt einen beachtlichen Zuwachs. Eine aus *R2R-Battery* finanzierte industrieskalierte Anlage zur Schichtherstellung und -modifizierung Rolle-zu-Rolle auf Grundlage elektrothermischer Prozesse kam am ZeHS zur Aufstellung und bildet den Kern für ein angestrebtes Spitzenforschungsthema im Verbund. Die Beschäftigung mit flexiblen Stromtarifen im Rahmen eines umfassenden Energiemonitoring und -managementsystems erweitern das Spektrum unserer bisherigen Arbeitsschwerpunkte im aktuellen gesamtwirtschaftlichen Kontext.

Auch in diesem Zusammenhang bin ich allen involvierten Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern für ihren weit-sichtigen und engagierten Einsatz zum Nutzen unseres Hauses sowie der gesamten Universität sehr dankbar.

Allen Partnern des IEP bin ich sehr verbunden und freue mich auf die weitere Zusammenarbeit im Jahr 2021 und natürlich darüber hinaus sowie auf neue Gelegenheiten gemeinsam weitere Perspektiven ins Auge zu fassen. Für die vorliegende Publikation hat sich in bewährter Weise Dr. Hartmut Stöcker besonders verdient gemacht. Er ist wohl eine maßgeblich tragende fachliche Säule des Instituts und ist dabei nicht allein und – es ist wohl ein besonderes Kennzeichen des Hauses – Gemeinschaftlichkeit

zu organisieren und zu leben. Damit sind ganz viele Un-genannte erreicht. Namen stehen als Beispiele, unsere Ergebnisse sind ein kollektives Werk. Sehr gern könnten Sie uns im Rahmen angestrebter Kooperationen beitreten. Hinsichtlich der Integration gemeinsam getragener Studiengänge hat sich Dr. Tilmann Leisegang besonders sichtbar gemacht.

Lehre und Wissenschaftsvermittlung profitieren auch von Erfahrung. Entsprechend bin ich Dr. Günter Gärtner dankbar. Neue Impulse brachten uns in diesem Bereich Dr. Juliane Hanzig und Dr. Mateo de Vivanco, die insbesondere versucht haben, den Übergang an die Universität unterstützend zu gestalten. Unser geschätzter Röntgenexperte Dr. Erik Mehner hat uns unlängst aus den angegebenen Gründen heraus in eine spannende Industrieposition verlassen. Nun gilt es, dem weiteren Nachwuchs gute Entwicklungsperspektiven zu erhalten. Bis an diese Stelle schrieb ich, ohne meinen geschätzten Kollegen, Prof. Roman Gumeniuk zu konsultieren. Einfach möchte ich feststellen, dass wir das Institut gemeinsam tragen und täglich neben den erforderlichen organisatorischen Arbeiten auch kollegial Freude an der gemeinsamen wissenschaftlichen Arbeit entwickeln. Ich habe Namen genannt und dabei Beispiele geben wollen. Wir sind ein Ganzes; dazu gehören auch Prof. Serguei Molodtsov und Dr. Friedrich Roth, die uns auch in besonderer Weise an den XFEL in Hamburg anbinden. Darf ich schreiben: Wir sind miteinander sehr gut unterwegs.

Besten Dank auch an das gesamte Praktikumskollektiv und die Unterstützer für unsere Experimentalphysikvorlesung. Der Erstkontakt einer Institution wie unserer ist das Sekretariat: Auch dort sind wir wohl sehr gut repräsentiert. Zugleich vielen Dank an die „zauberhaften“ Hände in Werkstätten und Laboratorien.

Damit sollte Ihnen erneut eine ansprechende und durch die Aufsätze zahlreicher Beitragender interessante Lektüre vorliegen.

Schließlich verbleibe ich mit besten Grüßen und einem herzlichen Glückauf,



Direktor des IEP und Wissenschaftlicher Sprecher des ZeHS

Das Institut für Experimentelle Physik	4
Das Institut	5
Die Mitarbeiter des Instituts für Experimentelle Physik	7
Geräte am Institut für Experimentelle Physik	8
Bearbeitete Stoffsysteme	10

Arbeitsgruppen	12
Arbeitsgruppe „Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie“ Prof. Dirk C. Meyer	13
Arbeitsgruppe „Kristallphysik“ Prof. Roman Gumeniuk	18
Arbeitsgruppe „Strukturforschung mit XFELs und Synchrotronstrahlung“ Prof. Serguei Molodtsov	21
Arbeitsgruppe Energiematerialien	28
Freiberger Zentrum für Pyroelektrizität	36
Arbeitsgruppe Resonante Röntgenmethoden und Kristallmodellierung	38
Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung	40

Projekte	48
Die Aluminiumbatterie: Herausforderungen für die industrielle Fertigung	49
Folienartige, ressourceneffiziente, gewebebasierte Stromkollektoren für Lithium-Ionen-Zellen	52
Kontrollierte Einstellung der Atomstruktur durch akustische Wellen und elektrische Felder	54
Strukturlösung im Parameterraum	56
Rolle-zu-Rolle-Fertigung neuartiger Post-Lithium-Energiespeicher	58

Lehre	62
Das Physikalische Grundpraktikum	63
Expertise in der Online-Lehre ist gefragt	66
Angebotene Lehrmodule	68

Publikationen	70
Wissenschaftliche Publikationen	71
Konferenzbeiträge	75
Graduierungen und studentische Arbeiten	79

DAS INSTITUT FÜR
EXPERIMENTELLE PHYSIK



DAS INSTITUT

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

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

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

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

Institut für Experimentelle Physik

Anschrift

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

Institutsdirektor

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

Geschäftsführung

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

Sekretariat

Sandra Kuechler
Tel.: 03731 39 2892
Fax: 03731 39 4314
sandra.kuechler@physik.tu-freiberg.de

Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie

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

Kristallphysik

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

Strukturforschung mit XFELs und Synchrotronstrahlung

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

Arbeitsgruppen

Energiematerialien /
Energy Materials
Dr. Tilmann Leisegang
Tel.: 03731 39 3341
tilmann.leisegang@physik.tu-freiberg.de

Freiberger Zentrum für Pyroelektrizität

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

Resonante Röntgenmethoden und Kristallmodellierung

Dr. Matthias Zschornak
Tel.: 03731 39 3333
matthias.zschornak@physik.tu-freiberg.de

Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung

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

Infrastruktur

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

Elektronische Werkstatt

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

Mechanische Werkstatt

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

Physikalisches Praktikum

Esteban Zuniga Puelles
Tel.: 03731 39 3805
zuniga@physik.tu-freiberg.de

Gerätepools

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

Ofen-Pool

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

Spektroskopie-Pool

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

Vorlesungstechnik

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



DIE MITARBEITER DES INSTITUTS FÜR EXPERIMENTELLE PHYSIK

Mitarbeiter des IEP von links oben nach rechts unten:

Dr. Barbara Abendroth, Felix Bräuer, Manuel Feig, Uta Fischer, Sever Flipo, Dr. Claudia Funke, Dr. Günter Gärtner, Prof. Dr. Roman Gumenuik, Dr. Juliane Hanzig, Christoph Irmer, Thomas Köhler, Sandra Kückler, Dr. Tilmann Leisegang, Theresa Lemser, Dr. Volodymyr Levytskyi, Christian Ludt, Dr. Erik Mehner, Prof. Dr. Dirk Meyer, Amir Mohammad, Prof. Dr. Serguei Molodtsov, Dr. Jafar Momeni, Hardik Patil, Dr. Dmitrii Potorochin, Dirk Prsa, Dr. Friedrich Roth, Oliver Schmidt, Stefanie Schmidt, Dr. Hartmut Stöcker, Tatjana Suworow, Dr. Muthu Vallinayagam, Dr. Mateo de Vivanco, Tina Weigel, Patrick Zill, Dr. Matthias Zschornak, Esteban Zuñiga Puelles



GERÄTE AM INSTITUT FÜR EXPERIMENTELLE PHYSIK

Beschichtung

- Edwards Auto 306, thermischer Verdampfer
- PVD Products Titan, Magnetronsputterquelle
- Rovak Sputter-Blitz-Anlage
- Rovak R2R-Beschichtungsanlage
- 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 BCS, Batterietester
- Doppelstrahl-Laser-Interferometer zur Messung piezoelektrischer Koeffizienten
- Gamry Interface 5000, Potentiostat
- Gamry Reference 600, Potentiostat
- Hall-Messplatz mit Kryostat
- Keithley 4200, Vierspitzenmessplatz
- Land CT2001A Batterietester
- Neware BTS CT-4008, Batteriezyklierer

- Polarisierungsaufbau bis 30 kV Spannung
- Pyroelektrischer Messplatz mit HV-Kammer
- Pyroelektrischer Messplatz mit UHV-Kammer
- Quantum Design PPMS DynaCool
- Sinton WCT 120, Lebensdauermessung
- Vierpunkt-Messung im REM/FIB inkl. EBIC

Mikroskopie

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

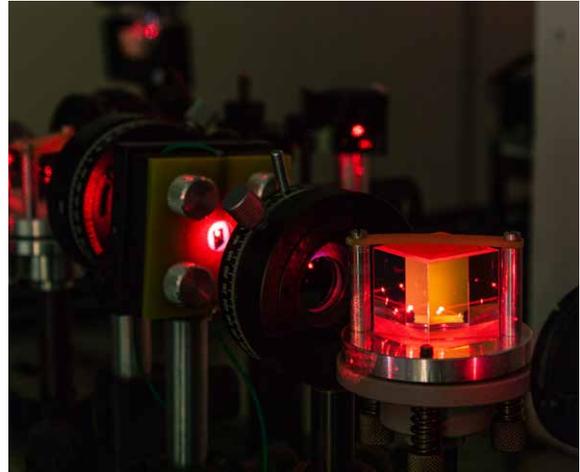
Probenbehandlung

- Glovebox MBraun LABmaster dp
- Glovebox MBraun UniLab
- Glovebox Sylatech
- Struers Accutom-5, Präparationssäge

- Struers RotoPol-35, Poliermaschine
- Struers Secotom-10, Präparationssäge
- Zwicki 2.5, Zugmaschine

Röntgendiffraktometrie

- Bruker D8 Advance, Dünnschichtdiffraktometer
- Bruker D8 Advance, Pulverdiffraktometer
- Bruker D8 Discover, Hochauflösungsdiffraktometer mit Hochtemperaturkammer
- Bruker D8 Discover, In-situ-Diffraktometer mit Drehanodenquelle
- Bruker D8 Quest, Einkristalldiffraktometer mit Tieftemperaturzusatz
- Philips X'Pert PW1830, Dünnschichtgerät



Strahlengang des Laserinterferometers

Spektroskopie

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

Temperaturbehandlung

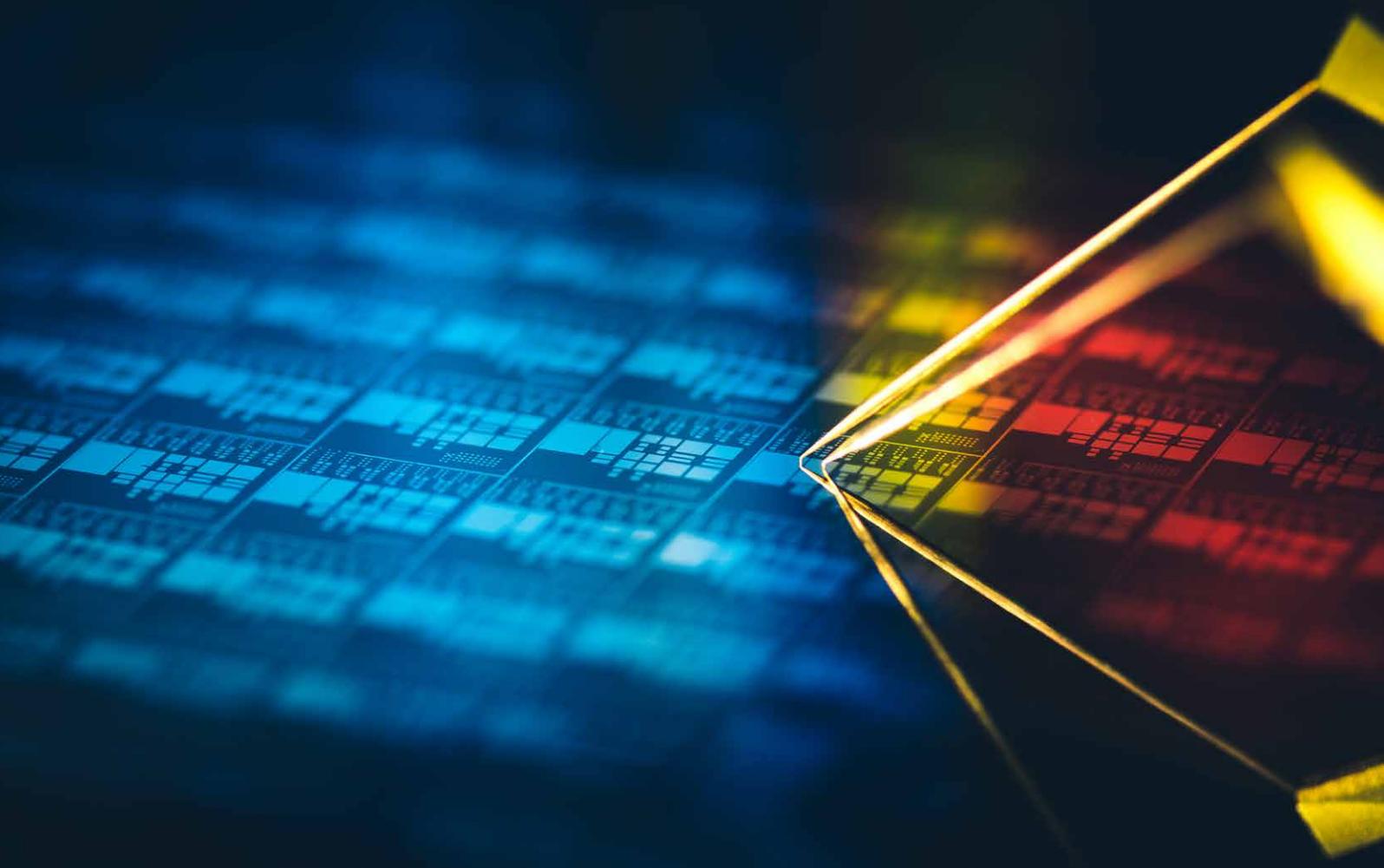
- Carbolite, Rohrofen bis 1200 °C
- Gero, Zehnzonenofen bis 1200 °C
- Heraeus, Rohrofen bis 1100 °C
- Leco FRH-80/200/1300, Rohrofen bis 1300 °C
- Memmert UF30Plus Trockenschrank
- Nabertherm LH 15/14, Kammerofen bis 1400 °C
- Xerion RO, Rohrofen bis 1100 °C
- Xerion Xtube, Dreizonenofen bis 1200 °C

Topographie

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



Vorrichtung zum Verschließen von Kondensatorgehäusen



BEARBEITETE STOFFSYSTEME

Verbindungshalbleiter

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

Batteriematerialien

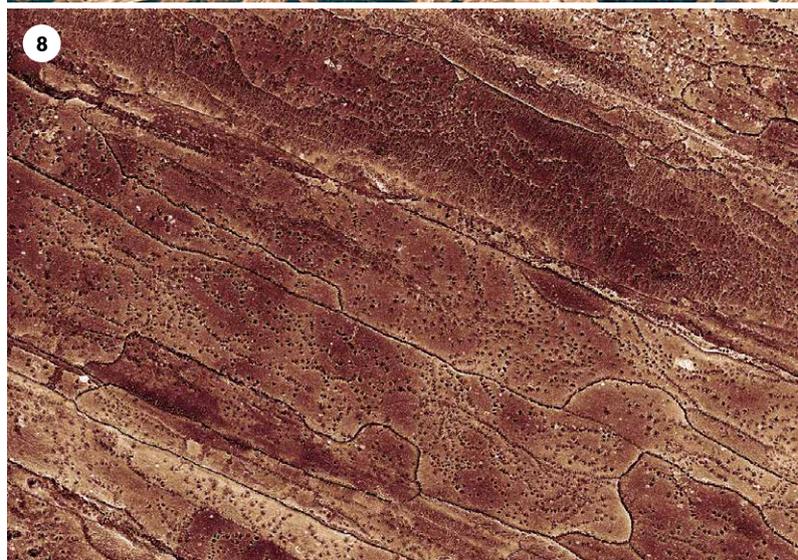
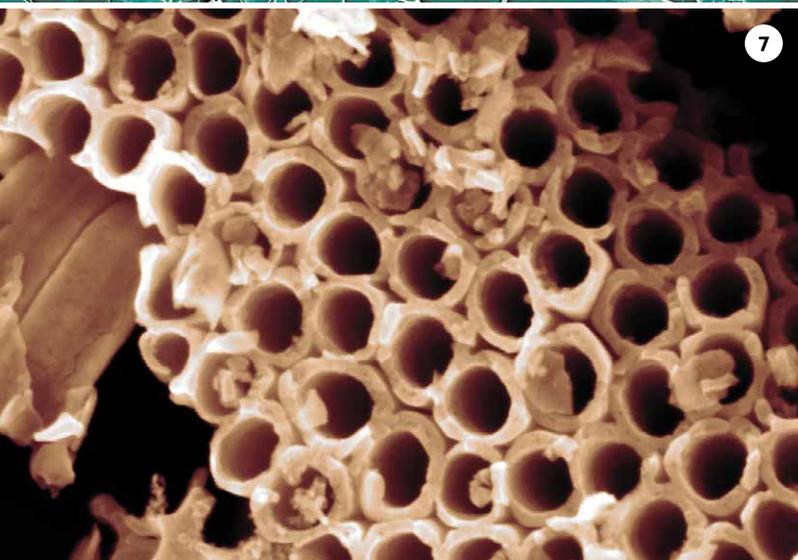
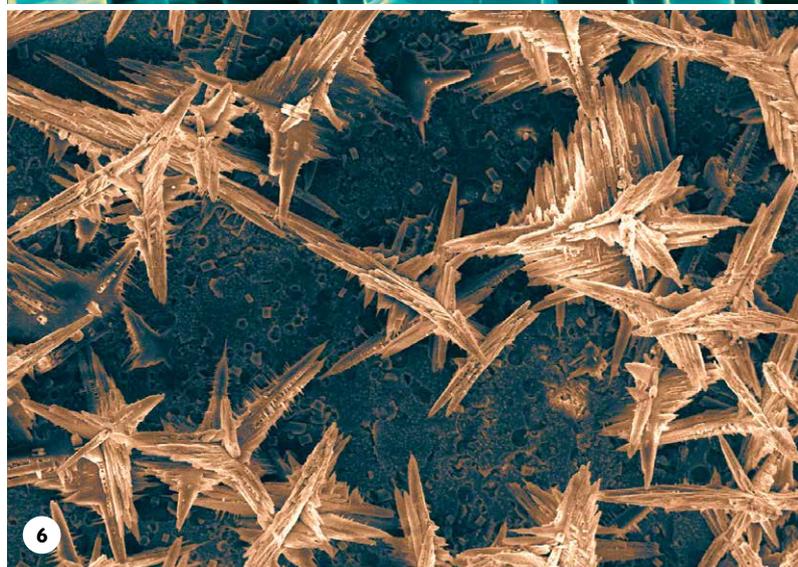
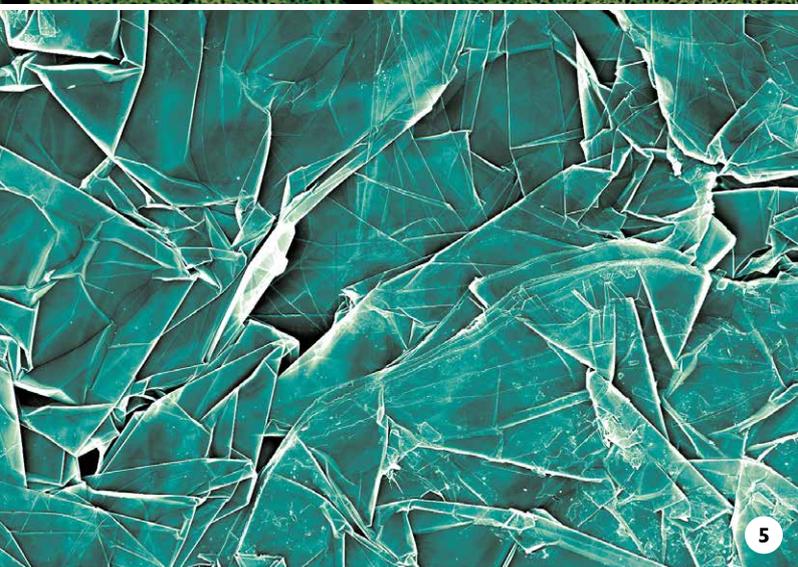
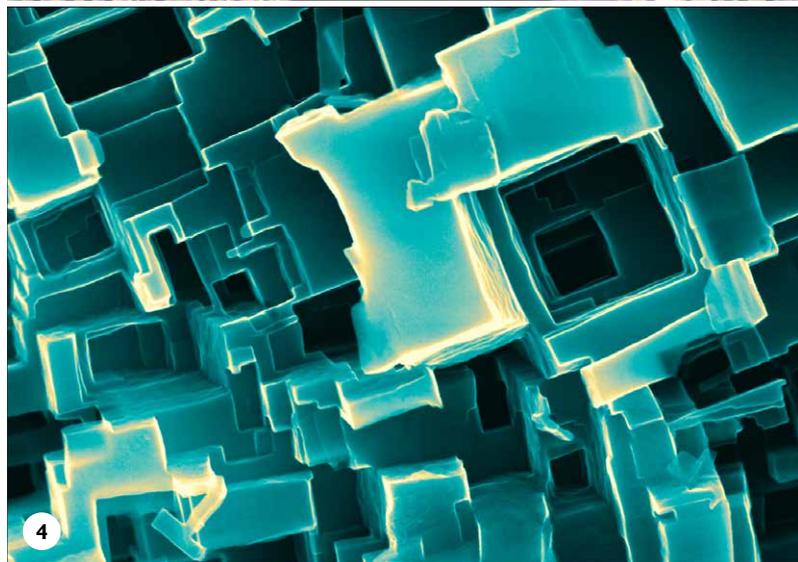
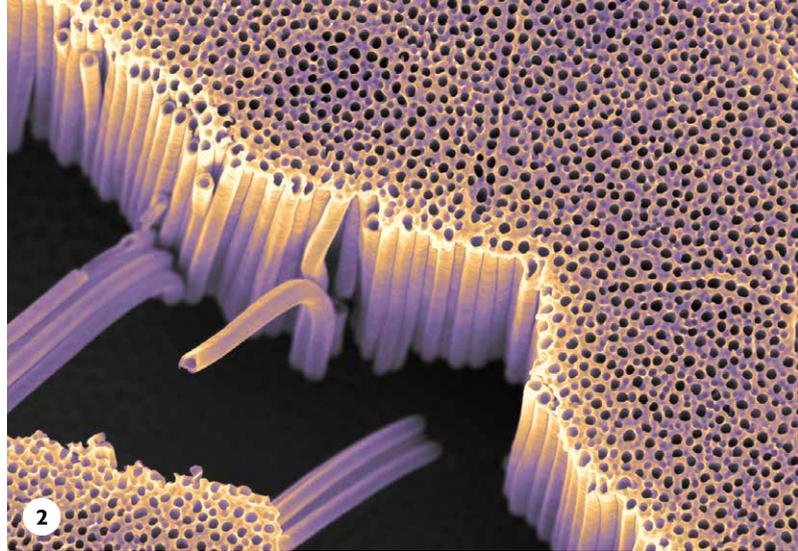
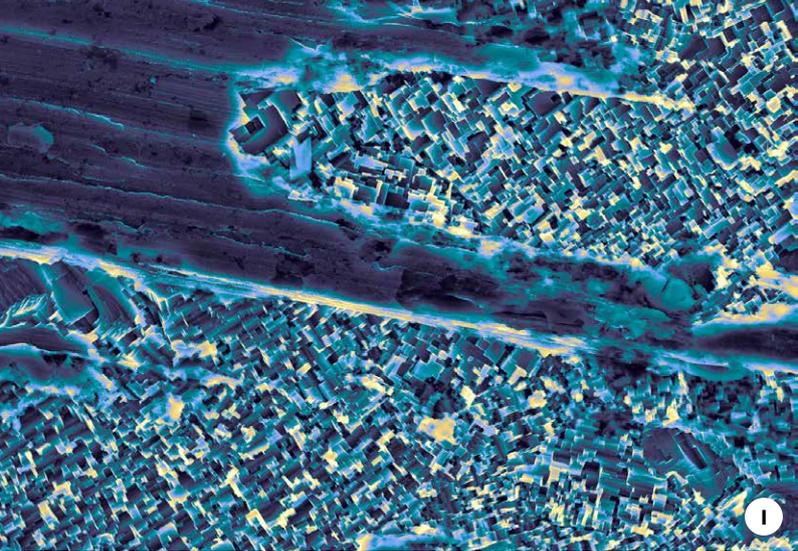
- Kathodenmaterialien: Al-, Li- und Na-basierte Systeme, u. a. Kohlenstoffnanoröhren
- Festelektrolyte: Al-, Li- und Na-Ionenleiter, Na-Y-Si-O-System, β -Aluminat, LAGP
- Anodenmaterialien: Al-, Li- und Na-Folien, Si-Verbindungen, Graphit

Kristallphysik

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

Bilder auf der rechten Seite:

- 1 Al-Elektrode in einer WIS-Zelle (Bildbreite 41,4 μm)
- 2 TiO_2 -Nanoröhren (Bildbreite 4,14 μm)
- 3 TiO_2 -Nanoröhren (Bildbreite 8,29 μm)
- 4 Al-Elektrode in einer WIS-Zelle (Bildbreite 3,19 μm)
- 5 Graphitfolie (Bildbreite 11,8 μm)
- 6 TiO_2 auf Ti-Folie (Bildbreite 41,4 μm)
- 7 TiO_2 -Nanoröhren (Bildbreite 0,829 μm)
- 8 Al auf Mo-Elektrode in einer WIS-Zelle (Bildbreite 8,29 μm)



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 neu 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 vorrangig röntgenbasierter Analytik sowie der Elektronenmikroskopie erlaubt eine umfassende Charakterisierung der im Reinraumlabor prozessierten Funktionselemente. Die Arbeitsgruppe „Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie“ ist aktuell vor allem durch ihre Forschung auf dem Gebiet

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

Die Arbeitsgruppe von Prof. Dirk C. Meyer hat intensiv 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. Seit etwa 10 Jahren haben oxidische Halbleiter sowie kristalline Materialien mit elektrisch polarer Achse einen besonderen Stellenwert der Arbeiten erlangt, wobei sich der Bogen von der Herstellung über die Modifizierung und Charakterisierung bis hin zu den Anwendungen erstreckt. Bezüglich der Synthese, Charakterisierung und Modellierung bestehen intensive Kooperationen, u. a. mit folgenden Partnern:

- Forschungsinstitut für Leder- und Kunststoffbahnen Freiberg,

- Fraunhofer-Institut für Keramische Technologien und Systeme 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 umfangreiche Erfahrungen existieren.

Herkunft der Arbeitsgruppe

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

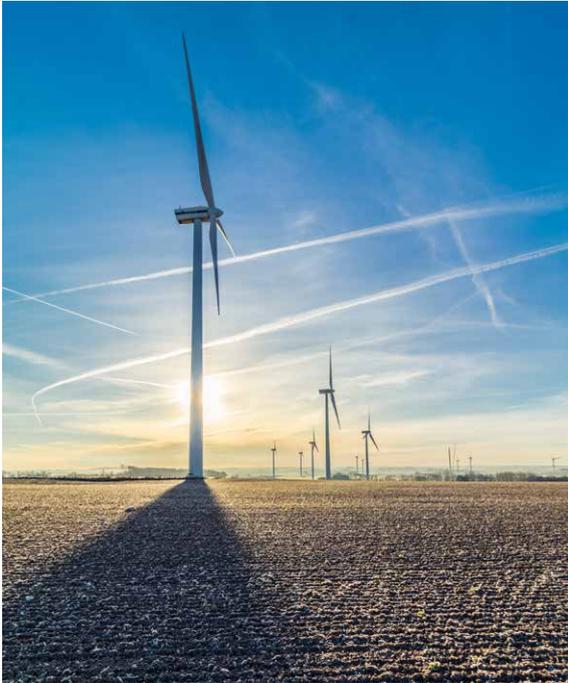
Begleitend hat Prof. Dirk C. Meyer zur methodischen Entwicklung im Bereich der Röntgenanalysemethoden, hier insbesondere mit frühen Arbeiten zur quantitativen Ausarbeitung der Methode der *Diffraction Anomalous Fine Structure* (DAFS) und der Kombination von *X-ray Absorption Fine Structure* (XAFS) und *X-ray Standing Waves* (XSW) in einem Experiment, beigetragen. Diese Arbeiten wurden durch die Verleihung des Max-von-Laue-Preises



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

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

Nach einjähriger Wahrnehmung einer Vertretungsprofessur für „Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie“ am IEP folgte Prof. Dirk C. Meyer im Jahr 2009 dem Ruf zur Übernahme dieser Professur und war sehr bald als Prorektor für Bildung und später als Prorektor für Strukturentwicklung der TU Bergakademie Freiberg tätig. 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 so die *Atomic Layer Deposition* 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 2013 auch Wissenschaftlicher Sprecher des Forschungsbaus „Zentrum für effiziente Hochtemperaturstoffwandlung“ (ZeHS), für dessen Antragstellung er federführend verantwortlich war und seither in diesem Sinne wirkt.

Die methodischen Kompetenzzentren und Schwerpunktsetzungen, zu denen im Folgenden berichtet wird, sind Bestandteil der Arbeitsgruppe. Das ZeHS hat hinsichtlich der Antragstellung im Wettbewerb und der Umsetzung im Bau maßgeblich von Erfahrungen und der 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 technologischer Lösungen untersucht. Die bei Temperaturänderung auftretenden elektrischen Felder werden dabei nicht nur als Mess-, sondern auch 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 meist im Niedertemperaturbereich und damit als konventionell nicht nutzbare 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 Polung und 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 und Schichten.

Neuartige Energiespeichermaterialien

Mit der zunehmenden Nutzung erneuerbarer Energiequellen wie Sonne, Wasser, Wind und Geothermie 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, tragen letztlich zur Vermeidung wirtschaftlicher Kosten im Milliardenbereich durch Stromausfälle bei und minimieren die 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.

Die Arbeiten am IEP zielen 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 soll durch das IEP zur Erweiterung und Verbesserung des grundlegenden Verständnisses zur Speicherung von Energie und zur verstärkten Nutzung von erneuerbaren Energieträgern beigetragen werden. Seit dem Jahr 2012 wurden durch die Arbeitsgruppe am IEP mehr als drei Verbundforschungsvorhaben federführend bearbeitet und verstärkt durch weitere Einzelmaßnahmen flankiert. Zurückliegend wurden so eine breite Wissensbasis und Infrastruktur angelegt sowie erstmals eine sogenannte *All-in-one-all-solid-state*-Batterie vorgestellt und bereits Patente kommerzialisiert. Ferner wurde ein Buch mit dem Titel *„Electrochemical Storage Materials“* im angesehenen Verlag De Gruyter herausgegeben und eine ähnlich lautende internationale Tagungsreihe *„International Freiberg Conference on Electrochemical Storage Materials“* (2013, 2015, 2017) etabliert.

Strukturelle Modifizierung von Dielektrika

In der Arbeitsgruppe „Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie“ wird weiter intensiv an Oxiden mit Perowskitstruktur und damit verwandten Strukturtypen gearbeitet. Generell besteht auch 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 mit hoher Beweglichkeit bei Raumtemperatur 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 aus einer zentrosymmetrischen in eine pyroelektrische Phase bedingen.

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 kernnahen Elektrons, wird ein Photon absorbiert und das Elektron aus dem Atomverband herausgelöst. Die an diesen spezifischen Photonenergien sprunghaft ansteigende Absorption wird als Kante bezeichnet. Röntgenographische Messungen in einem zweiten Kanal im Bereich der Absorptionskanten der zu untersuchenden Verbindungen werden als resonante Streuung bezeichnet. 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 Polarisierung der Röntgenstrahlung (der Ausrichtung der sie beschreibenden Feldvektoren). Ändert sich die Polarisierung der Photonen bezüglich des Wechselwirkungspartners – z. B. durch dessen Drehung – ergeben sich, abhängig von der Symmetrie des resonanten Atoms, charakteristische sinusförmige Oszillationen der Intensität. Diese Anisotropie kann in manchen Fällen dazu genutzt werden, Informationen auf atomarer Skala richtungsabhängig zu erhalten.

Der methodische Schwerpunkt auf der Weiterentwicklung dieser elementspezifischen und atomlagensensitiven Variante der Röntgenspektroskopie wird in der

Arbeitsgruppe insbesondere für die Charakterisierung struktureller Defekte vorangetrieben. Die im Rahmen eines BMBF-Verbundvorhabens am Synchrotron Petra III des DESY in Hamburg eingerichtete *Chemical Crystallography Beamline* ist 2018 in Betrieb gegangen. Die dabei entwickelte Kammer, welche u. a. auch temperaturabhängige Messungen ermöglicht, steht nun einem breiten Nutzerfeld zur Verfügung. Aufgrund der Personallunion des Leiters der Arbeitsgruppe, hier insbesondere mit seiner Eigenschaft als Wissenschaftlicher Sprecher des ZeHS, ergeben sich zusätzliche fachliche Synthesen und Potenziale für weitere Kooperationen mit Großforschungseinrichtungen, vorrangig auf den Gebieten der Nutzung von Synchrotron- und Neutronenstrahlung. Zu entsprechenden Industriepartnern bestehen aus bisherigen Kooperationen etablierte Kontakte hinsichtlich der Anwendung.



ARBEITSGRUPPE „KRISTALLPHYSIK“ PROF. ROMAN GUMENIUK

Bulk Metallic Glasses (BMGs) existieren in zahlreichen Legierungssystemen. Im Vergleich zu herkömmlichen Metallen und Legierungen weisen metallische Gläser aufgrund ihrer amorphen Struktur hervorragende mechanische, physikalische und chemische Eigenschaften auf [1]. In den letzten drei Jahrzehnten wurden viele Legierungssysteme untersucht, welche für verschiedenste Anwendungen geeignet sind. Allerdings sind reale Anwendungen in der Industrie durch die schlechte Plastizität und begrenzte Abmessungen der hergestellten BMGs limitiert [2, 3].

Ferromagnetische amorphe Legierungen haben einen großen Wert für die kommerzielle Nutzung gezeigt. Beispielhafte Anwendungen von diesen ferromagnetischen BMGs sind Anti-Diebstahl-Etiketten und hocheffiziente magnetische Transformatoren in der Elektronikindustrie [4, 5]. Mehrkomponentige ferromagnetische Legierungen wie Fe-(Al,Ga)-(P,C,B,Si), Fe-(Zr,Hf,Nb,Ta)-B- und Fe-(Cr,Mo)-(C,B,P)-Systeme, ermöglichen es die kritische Abkühlungsrate der Glasbildung zu verringern und erlauben somit die Bildung von massiven BMGs.

Pulvermetallurgische Prozesse sind eine Möglichkeit die bisherigen Größeneinschränkungen zu überwinden.

Insbesondere hat das feldgestützte Sintern (*Field Assisted Sintering Technique* – FAST) das Potenzial glasartige Komponenten mit geringen Anteilen an nanokristallinen Partikeln herzustellen. Im FAST-Prozess wird ein gepulster elektrischer Gleichstrom im Bereich mehrerer Kilampere genutzt, welcher direkt durch das Sinterwerkzeug und das zu verdichtende Material fließt. Dies erlaubt unter anderem hohe Heizraten und verbesserte Verdichtungsraten [6, 7]. In Zusammenarbeit mit der Universität Rostock hat die TU Bergakademie Freiberg Fe-basierte BMGs mittels FAST hergestellt und in Hinblick auf ihre strukturellen, physikalischen und mechanischen Eigenschaften untersucht.

Für $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{35}\text{Nb}_8\text{B}_4\text{Si}_3$ wurde das Verdichtungsverhalten systematisch untersucht. Abbildung 1 zeigt links das Kristallisationsverhalten des amorphen $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{35}\text{Nb}_8\text{B}_4\text{Si}_3$ -Pulvers aus dem Differentialkalorimeter. In dem Diagramm sind sowohl die Glasübergangstemperatur T_G als auch zwei exotherme Kristallisationen T_{X1} und T_{X2} erkennbar. Die Verdichtungsverläufe aus dem FAST-Prozess für verschiedene Target-Sintertemperaturen sind in Abbildung 1 rechts dargestellt. Dabei ist erkennbar, dass der

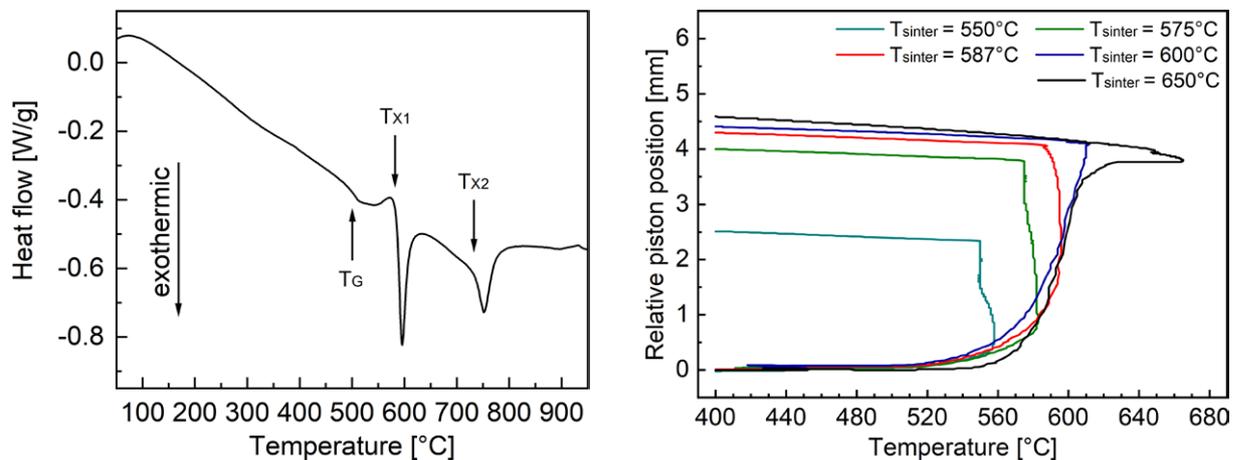


Abbildung 1: Links: Wärmefluss in Abhängigkeit der Temperatur des $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{35}\text{Nb}_8\text{B}_4\text{Si}_3$ -Pulvers einer differentialkalorimetrischen Messung. Rechts: Änderung der Stempelposition in Abhängigkeit der Temperatur für den FAST-Prozess für verschiedene Sintertemperaturen.

Sinterprozess bei spätestens 600°C bereits vollkommen abgeschlossen ist und bei höheren Temperaturen Kristallisationsprozesse dominieren.

Hochenergie- X -ray-Diffraktionsexperimente an der Beamline P07b am Synchrotron PETRA III des DESY Hamburg haben gezeigt, dass alle gesinterten Proben bis zu einer Sintertemperatur von 600°C durch eine amorphe Struktur dominiert werden und nur eine Kristallinität von bis zu 5% aufweisen. Die ermittelten Diffraktogramme sind in Abbildung 2 dargestellt. Obwohl die eigentliche Kristallisationstemperatur überschritten wurde, kam es nicht zu einer kompletten Auskristallisation unter FAST-Bedingungen. Gleichzeitig wurde beobachtet, dass bereits bei geringeren Sintertemperaturen Kristallisationsprozesse stattfanden. Dies ist ebenfalls in den Widerstandsmessungen in Abbildung 3 zu erkennen. Für eine Sintertemperatur von 550°C ist noch deutlich der typische Verlauf des spezifischen Widerstandes in Abhängigkeit der Temperatur zu erkennen, während dieser bei 600°C nicht mehr so deutlich hervortritt. Weiterhin fällt auf, dass bei steigender Sintertemperatur der spezifische Widerstand abnimmt, was auf die auftretenden Nanokristallite in den gesinterten Proben zurückgeführt werden kann.

Durch die erarbeiteten Sinterprozesse bis 600°C konnte gezeigt werden, dass eine meist amorphe Struktur mit nur wenigen Nanokristalliten erhalten werden konnte. Dies zeigt, dass der FAST-Prozess geeignet ist,

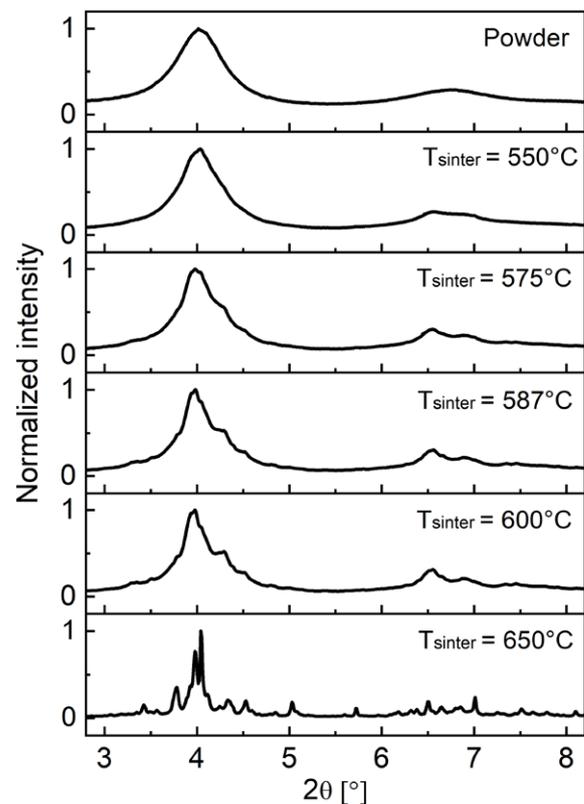


Abbildung 2: Hochenergie- X -ray-Diffraktogramme vom Ausgangspulver $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{35}\text{Nb}_8\text{B}_4\text{Si}_3$ und bei verschiedenen Sintertemperaturen T_{sinter} verdichteten Proben. Die verwendete Wellenlänge betrug $0,1424 \text{ \AA}$.

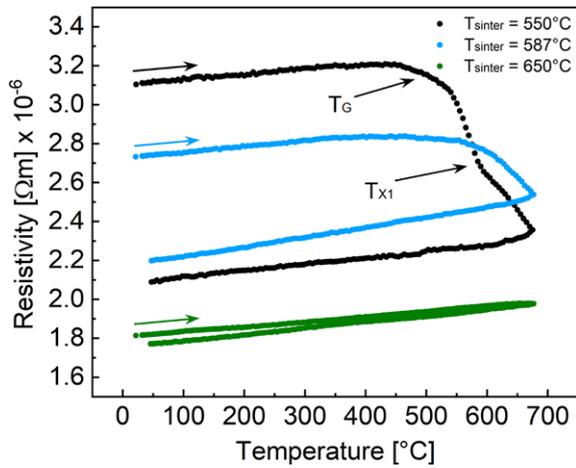
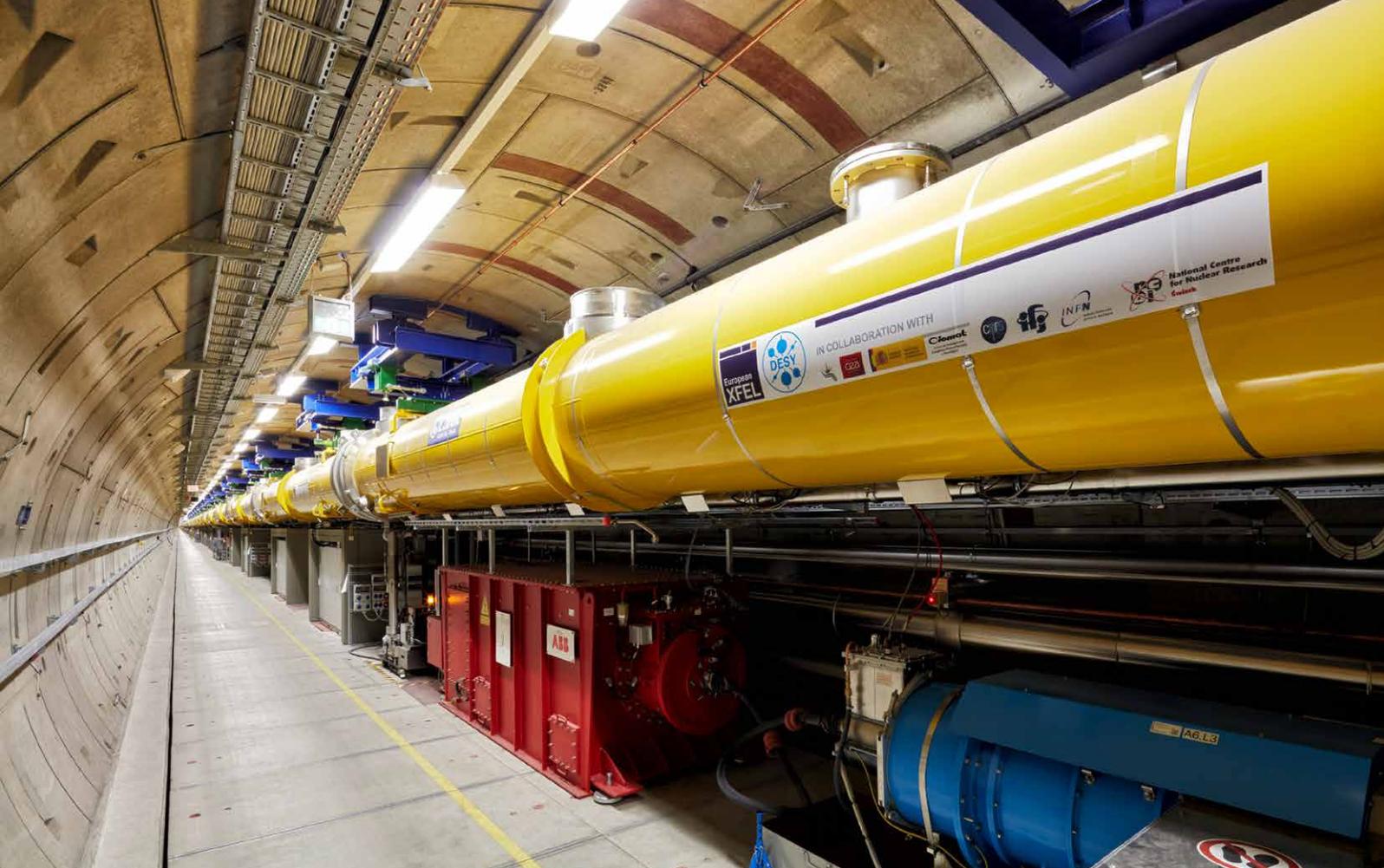


Abbildung 3: Spezifischer Widerstand in Abhängigkeit der Temperatur für Fe₅₀Co₃₅Nb₈B₂Si₃-Proben, welche bei verschiedenen Sintertemperaturen T_{sinter} verdichtet wurden.

um teilkristalline große Sinterwerkstücke zu erhalten, welche sich durch eine hauptsächlich amorphe Struktur auszeichnen. Die erhaltenen Ergebnisse werden zur Zeit aufgearbeitet und zur Veröffentlichung eingereicht.

- [1] A. Inoue: Acta Mater. 48 (2000) 279
- [2] A. L. Greer: Science 267 (1995) 1947
- [3] H. A. Bruck et al.: J. Mater. Res. 11 (2011) 503
- [4] M. Stoica et al.: J. Alloys Compd. 504 (2010) 123
- [5] P. Tiberto et al.: Adv. Eng. Mat. 9 (2007) 468
- [6] G. Xie: J. Powder Metall Min. 2 (2013) 2
- [7] J.E. Garay: Annu. Rev. Mater. Res. 40 (2010) 445



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, www.xfel.eu) in Hamburg 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 (siehe Titelbild) 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 Spitzenforschung 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“.

Es ist hervorzuheben, dass seit Juni 2018 ein bilateraler Kooperationsvertrag zwischen dem EuXFEL und der TU Bergakademie Freiberg besteht, welcher es Freiburger Studenten seitdem ermöglicht, Bachelor- und Masterarbeiten gemeinschaftlich in Freiberg und Hamburg anzufertigen.

Aktuell fokussiert sich die Forschung der Arbeitsgruppe auf zeitaufgelöste (Pikosekunden sowie Femtosekunden) Photoemission an Ladungstransfer-Systemen, wie zum Beispiel Halbleiter/Molekül-, Halbleiter/Metallnanopartikel- sowie Molekül/Molekül-Grenzflächen. Die

Demonstration des weltweit einzigartigen Messprinzips und die damit erlangten Ergebnisse konnten bereits in mehreren Publikationen veröffentlicht werden und wurden als *Highlight* beim DESY-Nutzertreffen 2022 präsentiert. In Zukunft soll diese Messmethodik auf die Untersuchung von Ladungstransferdynamiken bei photokatalytischen Reaktionen (*photoelectrochemical water splitting*) erweiterte werden.

Forschungstätigkeiten am Institut für Experimentelle Physik

Das Labor der Arbeitsgruppe am Institut für Experimentelle Physik ist mit einem modernen Photoemissionsspektrometer – Escalab 250Xi (siehe Abbildung 1) – ausgestattet, das zur Untersuchung der elektronischen Struktur hochentwickelter Materialien geeignet ist. Röntgenphotoelektronenspektroskopie-Messungen (XPS) dienen verschiedensten Fragestellungen innerhalb des IEP, insbesondere zu Energiewandler- 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 „Biominerologie und Extreme Biomimetik“ von Prof. Hermann Ehrlich.

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 Journalen veröffentlicht worden.

Neben den bereits genannten Tätigkeitsfeldern ist die Professur Molodtsov direkt und maßgeblich am Aufbau und dem Betrieb eines neuen Hochtemperatur-Photoemissionsspektrometers (HT-PES) im ZeHS beteiligt (siehe Abbildung 2). Dieses neue Großgerät wird die bereits an der TU Bergakademie Freiberg vorhandenen spektroskopischen Möglichkeiten erweitern und zur Bündelung von vorhandenen Kompetenzen sowie instituts- und

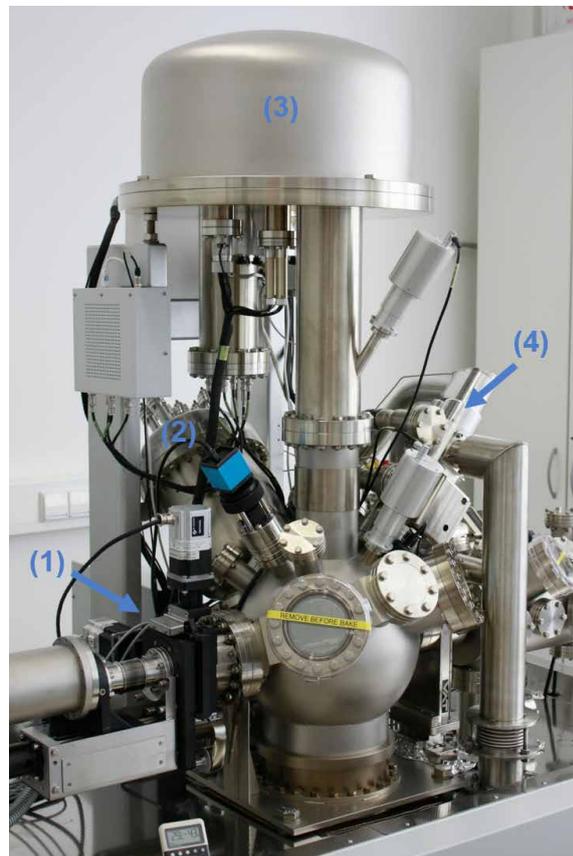


Abbildung 1: Photoelektronenspektrometer Escalab 250Xi von Thermo Scientific mit Al-Anode (1), Monochromator (2), Halbkugelanalysator (3) und Ionenquelle (4)

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. Der Fokus wird dabei zum einen auf Probencharakterisierungen mittels XPS (auch 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 die Bandstruktur der untersuchten Materialien herauszufinden. So eröffnet das neue Spektrometer im Rahmen der studentischen Ausbildung ganz neue Optionen und Perspektiven. Es ist weiterhin hervorzuheben, dass

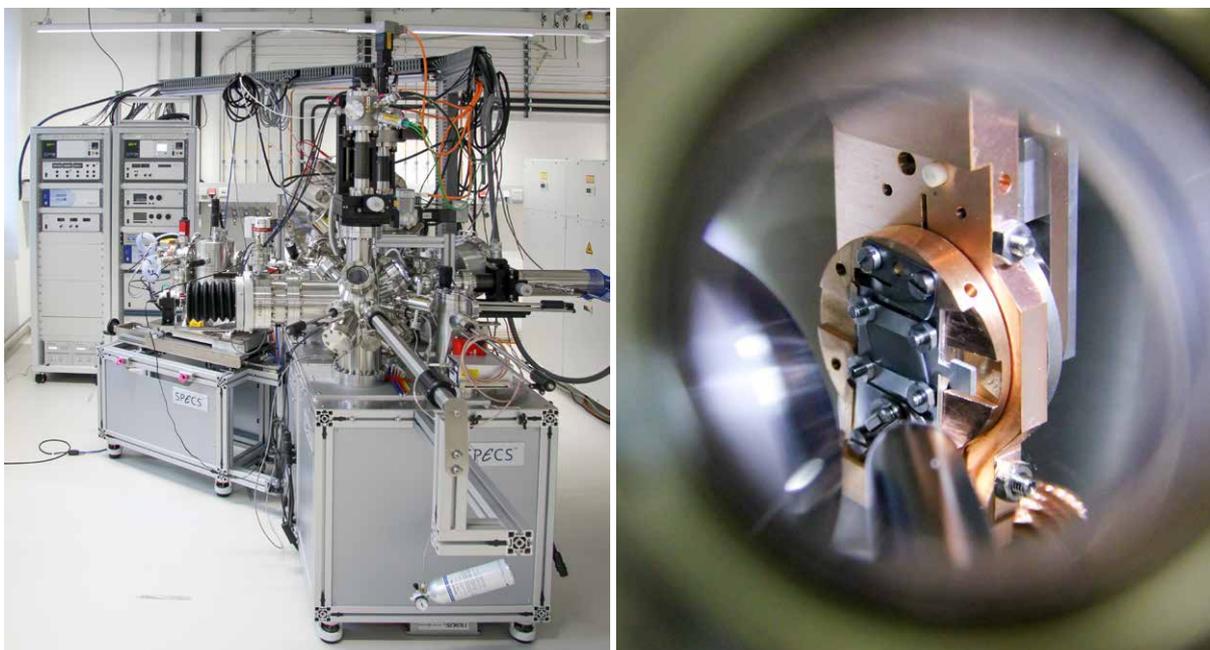


Abbildung 2: HT-PES nach Inbetriebnahme (links) sowie detaillierter Blick auf die Messposition (rechts).

Proben in Freiberg hergestellt, unter Vakuumbedingungen gereinigt sowie charakterisiert werden können und anschließend mittels eines Vakuumkoffers ohne Kontamination an Großforschungseinrichtungen transportiert werden können. Kooperationen mit den Arbeitsgruppen von Prof. Joseph, Prof. Heitmann und Prof. Plamper haben bereits begonnen und gemeinsame Projektanträge sind eingereicht oder in Vorbereitung.

Seit dem 18.09.2017 verstärkt Dmitrii Potorochin als erster PhD-Student die Arbeitsgruppe. Seine Doktorarbeit konnte er im Dezember 2021 erfolgreich unter dem Titel „Synthesis and study of the correlation between the atomic and electronic structure of low-dimensional carbon-based nanomaterials“ verteidigen. Er wird ab Februar 2022 als Post-Doktorand in der Arbeitsgruppe tätig sein. In der Doktorarbeit von Herrn Potorochin werden seine Ergebnisse zur Untersuchung der Morphologie und der elektronischen Struktur mehrerer verwandter niedrig-dimensionaler Kohlenstoff-Nanomaterialien behandelt. Im Detail hat er mit einer Kombination modernster spektroskopischer Techniken und unter Verwendung von Synchrotronstrahlungsquellen der dritten Generation drei Arten von Proben untersucht: (i) Graphen, das epitaktisch auf der (001)-Oberfläche des kubischen Polymorphs von

SiC gewachsen wurde, (ii) Graphen auf SiC(001), das chemisch mit einem organischen Farbstoff modifiziert wurde sowie (iii) Hybridstrukturen, die aus einer organischen Matrix aus einem Tetrafluor-substituierten Kupferphthalocyanin (CuPcF_4) und darin selbstorganisierten Indium-Nanopartikeln bestehen. Diese zweidimensionalen π -konjugierten Strukturen können in van-der-Waals-Heterostrukturen eingebettet werden und haben das Potenzial, auf ihrer Grundlage nanoelektronische Bauelemente zu schaffen.

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 die zeitliche Auflösung des Synchrotrons (ca. 60 ps) – der zeitliche Versatz zwischen *Laser Pump* und *X-ray Probe* variabel eingestellt werden kann. Im Jahr 2019 wurde 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.

Die meisten Echtzeit-Messtechniken beruhen auf der Methode, die Dynamik durch ein Pumpsignal (z. B. durch einen optischen Laser) auszulösen, gefolgt von einem Röntgenpuls mit einer Vielzahl unterschiedlicher Verzögerungen, um die Reaktion zu messen. Diese Methode ist per Definition auf Prozesse beschränkt, die durch einen genau definierten Stimulus ausgelöst werden können. Im Gegensatz dazu geschieht der größte Teil der Chemie spontan, wenn Moleküle genau im richtigen Moment mit den richtigen Geschwindigkeiten, Ausrichtungen und inneren Energien zusammenstoßen. Im Jahr 2021 konnten Mitglieder der Arbeitsgruppe gemeinsam mit Kollegen aus Berkeley einen wichtigen ersten Schritt zur Überwachung von Dynamiken ohne einen zeitlichen Auslöser machen. Die neue Messtechnik kombiniert die Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS) mit der Korrelationsspektroskopie – einer statistischen Methode, die in der Lage ist, Muster in mikroskopischen Fluktuationen über Raum und Zeit zu erkennen. Die Technik, die als Zeitkorrelations-XPS (TCXPS) bezeichnet wird, wurde an der ALS demonstriert und mit *Pump-Probe*-Ansätzen verglichen. Die Dynamik Laser-induzierter *Surface Photovoltage* in Silizium wurde an der ALS-Beamline 11.0.2 unter nahezu identischen Bedingungen mit der *Pump-Probe*- und der TCXPS-Methode gemessen. Es wurde eine sehr gute

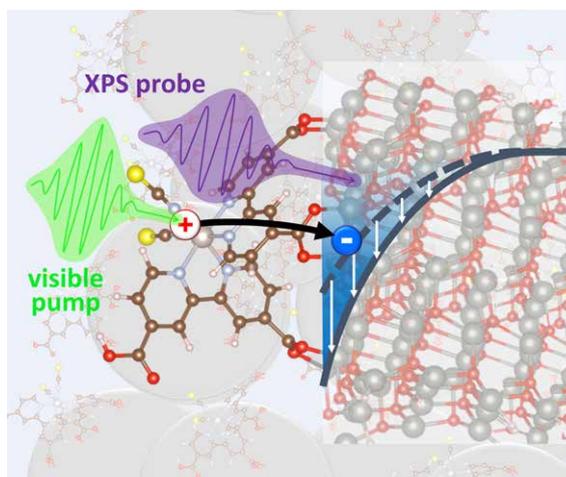


Abbildung 3: Sichtbare Laserpulse regen Elektronen in Molekülen an, die an ein Nanopartikelsubstrat gebunden sind. Kurze Röntgenpulse verfolgen die Elektronen auf ihrer Reise zwischen den Molekülen und den Nanopartikeln, um zu zeigen, wann, wo und warum sich die Elektronen bewegen oder stecken bleiben (© Lawrence Berkeley National Laboratory).

Übereinstimmung zwischen den dynamischen Trends gefunden, die direkt mit beiden Methoden gemessen wurden. Weitere Informationen können der Publikation *Struct. Dyn.* 8 (2021) 044301 entnommen werden.

Um Sonnenlicht in Elektrizität oder Kraftstoff umzuwandeln, muss ein Material das Licht der Sonne absorbieren und die Lichtenergie an Elektronen weitergeben. Anschließend müssen diese Elektronen eine gerichtete Bewegung ausführen, um einen Strom zu erzeugen oder chemische Reaktionen zu ermöglichen. Eine Möglichkeit, beide Schritte zu erreichen, besteht darin, Moleküle zu verwenden, die das Sonnenlicht sehr gut einfangen können, und diese Moleküle an ein Substrat (z. B. Zinkoxid) zu binden, in dem die Elektronen sehr beweglich sind. Mittels zeitaufgelöster Röntgenphotoelektronenspektroskopie an der ALS konnte nun der Weg der Elektronen von den Molekülen zu den Substraten und zurück verfolgt werden. Hauptergebnis der Untersuchung war, dass die Elektronen lange Zeit zwischen den Molekülen und dem Zinkoxid festsitzen. Diese Studie hilft zu erklären, warum Zinkoxid-Substrate nicht so gut funktionieren wie erhofft und liefert auch ein neues Testschema für künftige Materialien. Weitere Informationen können der Publikation *J. Phys. Chem. Lett.* 12 (2021) 11951 entnommen werden.



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

Forschungs- und Bautätigkeiten am European XFEL

In der Metropolregion Hamburg ist in den letzten Jahren eine internationale Forschungseinrichtung der Superlative (siehe Abbildung 5) entstanden. Der Röntgenlaser *European XFEL* erzeugt 27 000 Lichtblitze pro Sekunde, mit einer Leuchtstärke, 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 EuXFEL 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 Freiburger Studenten ermöglicht, ihre Master- und Bachelorarbeiten gemeinschaftlich in Freiberg und Hamburg anzufertigen. Dies eröffnet die einzigartige Möglichkeit, dass Studenten bereits

in ihrer Ausbildungsphase direkten Zugang zu diesen weltweit einzigartigen Großgeräten haben und Spitzenforschung betreiben können.

Harte, kurzweilige Röntgenstrahlung in Pulsen von weniger als 100 Femtosekunden Dauer, wie sie beispielsweise am EuXFEL erzeugt werden, eröffnen völlig neue wissenschaftliche Möglichkeiten, um Materie und Materialien auf atomarer Ebene in ultrakurzen Zeitskalen zu untersuchen. Als einziger Freie-Elektronen-Röntgenlaser weltweit ist der *European XFEL* jetzt in der Lage, intensive Röntgenblitze mit Energien von 25 Kilo-Elektronenvolt (25 keV) und darüber hinaus zu erzeugen, und so in unbekannte Welten vorzudringen und komplexe Phänomene zu untersuchen. Mit der Photonenenergie von 25 keV – das entspricht einer Wellenlänge von 0,5 Angström (0,05 Nanometer) – stellte die DESY-Betriebsmannschaft, die den EuXFEL-Beschleuniger betreibt, einen neuen Wellenlängenrekord für Laserlicht auf.

Lehre in Hamburg

Digitaler Kurs zwischen der TU Bergakademie Freiberg und dem *European XFEL*

Neben der Spitzenforschung 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,



Abbildung 5: Luftaufnahme des Betriebsgeländes Schenefeld vom 11. August 2020 (© European XFEL).

auf der anderen Seite die Vermittlung von Wissen in einer Spezialvorlesungsreihe mit dem Titel „Materialforschung mit Freie-Elektronen-Röntgenlasern (XFELs)“. Während dieses einwöchigen Kurses werden den Studenten direkt vor Ort in Hamburg und von leitenden Wissenschaftlern des EuXFEL Kenntnisse über den Aufbau und die Anwendung der neuesten Generation von Röntgen-Lichtquellen sowie deren vielseitigen Anwendungsmöglichkeiten im Rahmen der Material-, Werkstoffcharakterisierung und -forschung vermittelt. Der Kurs beinhaltet neben Vorträgen und Diskussionen auch Besuche der EuXFEL-Experimentierhalle sowie der DESY-Röntgenlichtquellen PETRA III und FLASH.

In den letzten Jahren konnte die Arbeitsgruppe dieses neue Modul erfolgreich an der TU Bergakademie Freiberg etablieren, was auch durch konstant hohe Teilnehmerzahlen (trotz der Lage in der vorlesungsfreien Zeit) widerspiegelt wird. Seit dem Sommersemester 2020

ist die Blockvorlesung auch fester Bestandteil des neuen Masterprogrammes „Advanced Materials Analysis“ der Fakultät 5. Darüber hinaus konnten im Jahr 2020 auch Studentinnen und Studenten anderer Institutionen wie der Universitäten Hamburg und Kassel teilnehmen. Aufgrund der weltweiten COVID 19-Pandemie war im Jahr 2021 eine Exkursion nach Hamburg erneut nicht möglich. Alternativ konnte eine digitale Variante der Vorlesungsreihe mit Online-Vorträgen organisiert sowie virtuelle Rundgänge durch die einzelnen Großgeräte ermöglicht werden.

Ankündigung Blockvorlesung 2022

Die nächste Blockvorlesung „Materialforschung mit Freie-Elektronen-Röntgenlasern (XFELs)“ ist vom 26.09. bis 30.09.2022 geplant. Die Vorlesungsreihe zeigt die Darstellung von konventionellen und ultrahoch zeitaufgelösten spektroskopischen Methoden und Methoden zur Bestimmung der strukturellen Eigenschaften:

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

Die Anwendung der genannten Methoden wird während den Führungen durch den weltweiten Freie-Elektronen-Röntgenlaser FLASH bei DESY illustriert. Es wird außerdem einen Besuch des EuXFEL 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

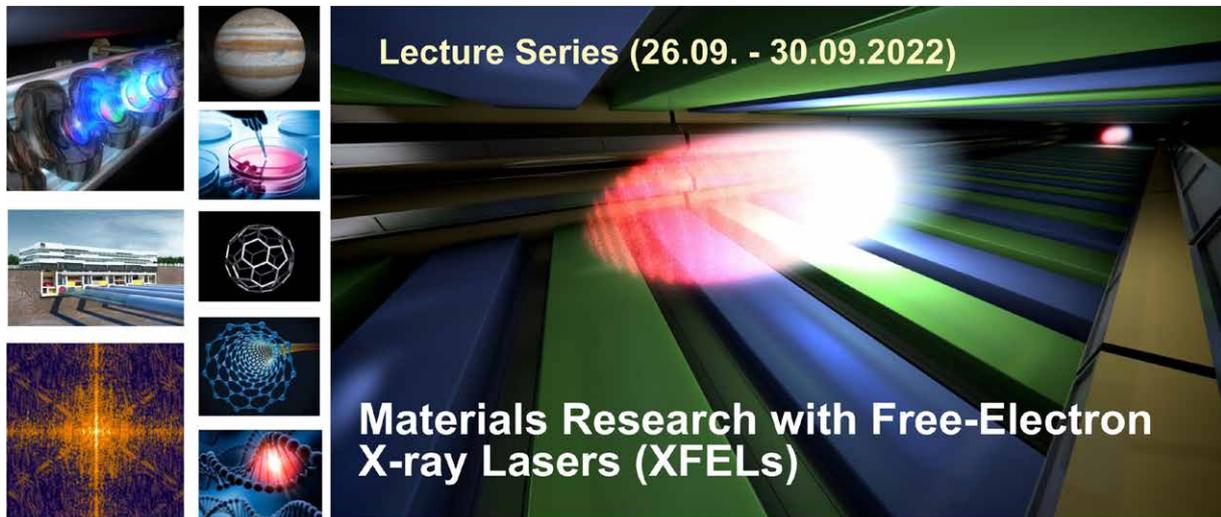


Abbildung 6: Ankündigung der Blockvorlesung 2022 am DESY in Hamburg

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.

Die Studenten können sich gerne bis zum 20.08.2022 via OPAL registrieren.



ARBEITSGRUPPE ENERGIEMATERIALIEN

Angesichts der beunruhigenden globalen klimatischen Entwicklungen werden immer konkretere Eindämmungsmaßnahmen diskutiert und eingeführt – wie die globale Energiewende, die unser Leben zunehmend beeinflusst. Doch wie Mary Wollstonecraft Shelley in ihrem 1818 erschienenen Roman „Frankenstein“ schrieb: „Nichts ist für den menschlichen Geist so schmerzhaft wie eine große und plötzliche Veränderung.“ Der Roman greift kritisch die Entdeckungen zur Elektrizität von Galvani, Volta und Ritter zu dieser Zeit auf. 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 im folgenden 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, der drängenden Überwindung der Abhängigkeiten von Öl

und Gas sowie dem notwendigen Ausbau der Elektromobilität und erneuerbarer Energien, wird die Energiekonversion mit anschließender Energiespeicherung zum wichtigsten Treiber für neue Energiespeichermaterialien. Dies spiegelt sich wider in der Politik Europas – allen voran z. B. 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). Im Jahr 2021 wurden weltweit rund 600 GWh an wiederaufladbaren elektrochemischen Zellen (Lithium-Ionen-Zellen) produziert. Bis 2030 wird eine Verfünfachung vorausgesagt. 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.

Der Lithium-Ionen-Akkumulator ist zurzeit der attraktivste Akkumulator für portable Geräte und die Elektromobilität. 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 Sprunginnovationen erforderlich, um die Energiedichte weiter zu erhöhen oder die Kosten pro kWh weiter 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 und bereits Lieferengpässe auftreten. Während Lithium oft im Zentrum von Diskussionen über Ressourcenverfügbarkeit, Versorgungsgpässe und Kostensteigerungen steht, ist die Nachfrage nach anderen Materialien für Lithium-Ionen-Akkumulatoren wie Kobalt und Phosphor (Teil der positiven Elektrode), aber auch Kupfer (ein Stromkollektor) beträchtlich und spürbar.

Ein wichtiger Nachteil der Lithium-Ionen-Technologie ist, dass für den Ionentransfer ein flüssiger Elektrolyt erforderlich ist, der hauptsächlich aus aprotischen (nicht-wässrigen, organischen) Lösungsmitteln besteht. Viele der Probleme, mit denen diese Akkumulatoren 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 erforderlich (siehe Abbildung 1). 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 auch in Deutschland geben.

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 höheren Energiedichten, verbesserter

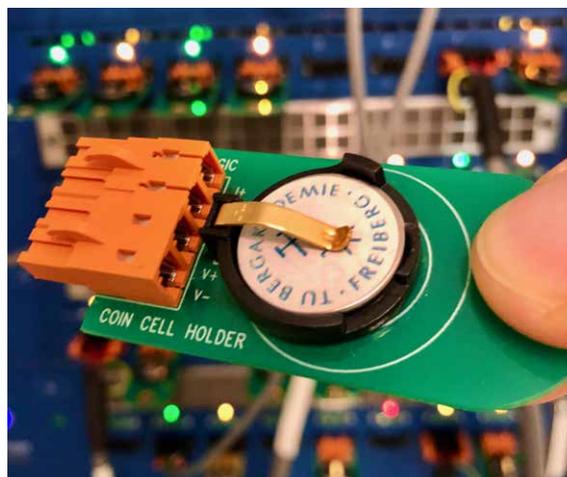


Abbildung 1: Lithium-Ionen-Zelle mit neuartigen Materialien

Sicherheit und ressourceneffizienten Materialkonzepten (Natur, Energie und Materialien betreffend) notwendig sein, um den prognostizierten hohen Bedarf nachhaltig zu decken. Hierbei bieten sich gut verfügbare chemische Elemente wie Aluminium, Magnesium, Eisen, Titan, Natrium, Kalium, Kalzium oder Zink als Kandidaten an.

Das Auffinden von Festkörperelektrolyten und positiven Interkalationselektroden bleibt dabei eine der Hauptherausforderungen auf dem Weg zu Hochvalente-Ionen-Festkörperakkumulatoren. 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 2). Dementsprechend werden die Kristallstrukturen der chemischen Verbindungen zunächst mit einer geometrischen, aber schnellen Methode – der Voronoi-Partitionierung – analysiert, gefolgt von Berechnungen der *Bond Valence Site Energy* (BVSE) und schließlich der Modellierung der vielversprechendsten Verbindungen durch die Dichtefunktionaltheorie, um den Rechenaufwand bei steigender Berechnungszeit der Algorithmen zu verringern. Mit diesem Ansatz konnten bereits 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* gesammelt und einfach zugänglich gemacht werden.

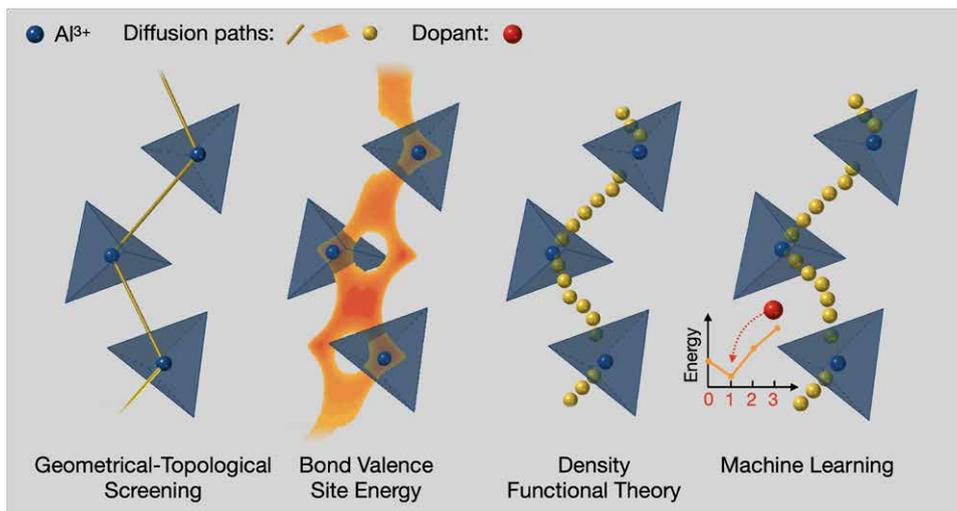


Abbildung 2: Algorithmen zur Identifizierung potenzieller Ionenleiter aus kristallographischen Datenbanken

Ein anderer Ansatz zur Ressourcenschonung befasst sich mit der Reduzierung von bislang verwendeten Materialien in Lithium-Ionen-Batterien. Hierbei wurde eine neue Technologieplattform auf Basis metallisierten Glasgewebes als Stromkollektoren etabliert. Diese Stromkollektoren reduzieren den Bedarf an Kupfer und Aluminium um mehr als eine Größenordnung und erhöhen somit gleichzeitig die spezifische Energie und Energiedichte der Batterien (siehe unten).

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. Mit besonderem Schwerpunkt werden Batteriematerialien, 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. Im Fokus der Arbeiten stehen Materialien aus den Bereichen der Energiewandlung und -speicherung: Ionenleiter, Interkalationselektroden, Stromkollektoren sowie Pyroelektrika, intermetallische Phasen und dünne Schichten. Weitere Themen betreffen methodische Arbeiten zur Röntgendiffraktometrie und der Anwendung von textilen Geweben zur Verminderung der Strahlenexposition.

Ionenleiter für Aluminiumionen

Das Forschungsgebiet der Aluminium-Ionen-Akkumulatoren hat sich in den letzten 10 Jahren als ein wichtiges Thema neben der Aluminium-Luft-Technologie entwickelt und etabliert. Dementsprechend gehört die „Aluminium-based Energy“ zu den von der Europäischen Kommission benannten „100 Radical Innovation Breakthroughs for the future“. Eine Vielzahl von vielversprechenden Systemen wurde entdeckt und die Herausforderungen wurden herausgearbeitet. Für einen Aluminium-Ionen-Akkumulator sprechen neben der hohen Energiedichte und guten Verfügbarkeit von Aluminium viele weitere Vorteile. Allerdings bestehen wegen der hohen Valenz des dreifach geladenen Aluminiumions Herausforderungen hinsichtlich der Ionenleitung und Interkalation bzw. Deinterkalation. Der in 2019 in der Fachzeitschrift „Frontiers in Chemistry – Inorganic Chemistry“ erschienene Review-Artikel „The Aluminum-Ion Battery: A Sustainable and Seminal Concept?“ fasst die Entwicklungen zusammen. Er hat sich zum meistgelesenen Artikel in der Rubrik „Inorganic Chemistry“ entwickelt und befindet sich unter den zehn meistgelesenen Artikeln des Journals.

Gemeinsam mit dem SCTMS wurde das Screening weiterer Materialklassen fortgeführt. Es wurde damit begonnen, die vorhergesagten Ionenleiter zu synthetisieren und elektrochemisch zu charakterisieren. Im Rahmen der in 2021 begonnene Masterarbeit „Kationenleitfähigkeit in

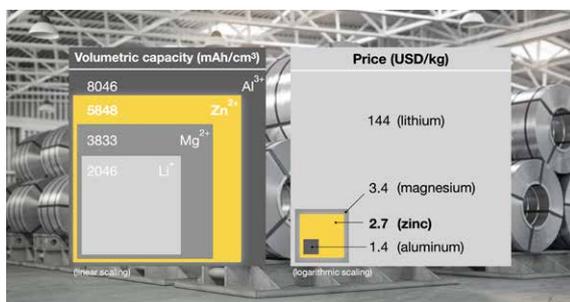


Abbildung 3: Graphischer Vergleich zwischen den volumetrischen Kapazitäten und den Preisen von Lithium, Magnesium, Zink und Aluminium

sauerstoffhaltigen kristallinen Festkörpern: von der theoretischen Bewertung zur experimentellen Bestimmung“ untersucht Manuel Rothenberger die Eignung verschiedener Verbindungen als neuartige Kathodenmaterialien.

Zink-Ionenleiter

Zink als negative Elektrode hat bereits eine mehr als 200-jährige Historie hinter sich. So sind die elektrochemischen Zellen auf Zinkbasis ein immer wiederkehrendes Thema gewesen, die von Voltas Säule über die Daniell- und Leclanché-Elemente, die Alkali-Batterien, bis hin zum Antrieb moderner Raumfahrzeuge reichen. Auch Freiberg hat seinen Platz in der Geschichte der zinkbasierten Energiespeicher: Im Jahr 2003 beschloss die Zoxy Energy Systems AG, die wiederaufladbare Zink-Luft-Brennstoffzelle in Freiberg zu produzieren. Allerdings waren die Rahmenbedingungen damals deutlich andere als heute, sodass die Entwicklungen gestoppt wurden.

Neben vielen positiven Eigenschaften des Zinks haben wiederaufladbare Zink-Ionen-Batterien das Potenzial, besonders umweltfreundlich zu sein und die volumetrische Kapazität im Vergleich zu Lithium-Ionen-Batterien um den Faktor drei zu erhöhen (siehe Abbildung 3). In den letzten Jahren konnte daher ein wachsendes Interesse an Zink-Ionen-Batterien beobachtet werden. Bis heute erfolgte noch keine Kommerzialisierung einer wiederaufladbaren Festkörper-Zink-Ionen-Batterie. Daher wurden gemeinsam mit dem SCTMS und der *National University of Singapore* Arbeiten durchgeführt, um neue mögliche Zn²⁺-Ionenleiter (Interkalationselektroden

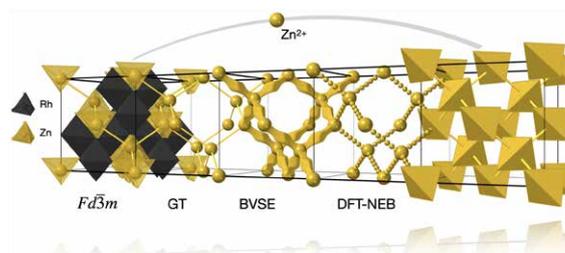


Abbildung 4: Leitfähigkeitspfade von Zn²⁺-Ionen in der Verbindung ZnRh₂O₄, die mittels geometrisch-topologischer Analyse (GT), der *Bond-Valence-Site-Energy*-Berechnung (BVSE) und der Dichtefunktionaltheorie (DFT) gewonnen wurden.

und Festkörperelektrolyte) für solche Batterien zu identifizieren.

Dazu wurde die *Inorganic Crystal Structure Database* (ICSD) gescreent, um Verbindungen zu identifizieren, die als Zn²⁺-Ionenleiter nutzbar wären (siehe Abbildung 4). In seiner studentischen Arbeit wandte Manuel Rothenberger BVSE-Berechnungen auf die identifizierten Verbindungen an, die bisher als mögliche Zn²⁺-Ionenleiter unbekannt waren, und konnte so 27 potenzielle Kandidaten finden. Die vielversprechendsten Verbindungen wurden mittels der Dichtefunktionaltheorie erfolgreich verifiziert und die Ionenleitfähigkeiten mit dem kinetischen Monte-Carlo-Ansatz simuliert. Die interessantesten identifizierten Verbindungen sind ZnM₂O₄ (M = Fe, Cr, V) und ZnP₂O₆ mit Migrationsenergien von weniger als 0,7 eV pro Ion, wobei Ionenleitfähigkeiten von bis zu 10⁻³ S/cm bestimmt wurden. Manuel Rothenberger untersuchte auch die Komplexität der vielversprechenden Strukturen. Alle Ergebnisse wurden 2021 im *Journal of Physical Chemistry C* veröffentlicht und in die Datenbank *batterymaterials.info* hochgeladen. Die vielversprechendsten Verbindungen wurden bereits am SCTMS synthetisiert und am *Department of Electrochemistry* der Staatlichen Universität Sankt Petersburg in elektrochemischen Experimenten verifiziert.

Lithium-Ionen-Technologie

Sprunginnovationen im Bereich der Lithium-Ionen-Technologie sind über verschiedene Ansätze denkbar – zuvorderst die Ausarbeitung von Festkörperakkumulatoren

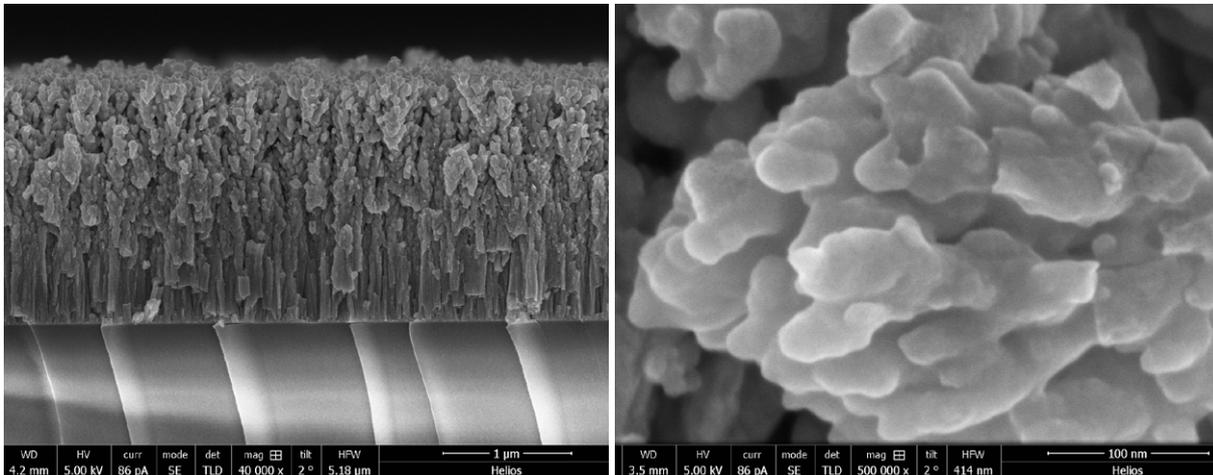


Abbildung 5: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen der Morphologie eines neuartigen Stromkollektors für Lithium-Ionen-Akkumulatoren mit dendritischen Strukturen zur verbesserten Anbindung des Aktivmaterials

mit einer Lithium-Metallelektrode. Gemeinsam mit der elfolion GmbH geht die Arbeitsgruppe aber einen anderen Weg. Hierbei lässt ein von der elfolion patentierter Ansatz deutlich gesteigerte Energiedichten bzw. spezifische Energien mit gleichzeitig signifikant reduziertem Metallbedarf für die Lithium-Ionen-Technologie erwarten. Dieser Ansatz basiert auf einer Lithium-Ionen-Zelle mit metallisierten gewebebasierten Stromkollektoren. Seit 2020 arbeiten die elfolion GmbH, das Institut für Textilmaschinen und Textile Hochleistungswerkstofftechnik der TU Dresden und das IEP im Rahmen des Projekts „Entwicklung von folienartigen, ressourceneffizienten gewebebasierten Stromkollektoren für Elektroden für Lithium-Ionen-Zellen mit hoher Energie- und Leistungsdichte aus feinsten Glasmultifilamentgarnen und Metalldrähten“ zusammen. Das Projekt wird mit Mitteln des Zentralen Innovationsprogramms Mittelstand, des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie gefördert.

Ziel ist es, neuartige ressourceneffiziente Stromkollektoren für Lithium-Ionen-Zellen zu entwickeln, herzustellen, hochzuskalieren und zu verifizieren, die eine 15 % höhere Energie- und Leistungsdichte im Vergleich zu konventionellen Zellen ermöglichen und dabei 85 % weniger Metall benötigen. Dazu sollen Drehergewebe auf Basis feinsten Multi- und Monofilamentgarne aus Glas, Kohlenstoff, Polymer und Metall entwickelt und deren Herstellbarkeit auf dafür zu modifizierenden Webmaschinen verifiziert werden. In einem Rolle-zu-Rolle-Verfahren sollen Stromkollektorbänder hergestellt und in einem zweiten

Schritt in einem neuartigen Vakuumbeschichtungsverfahren mit Kupfer und Aluminium zu Ausgangskomponenten für Zellelektroden beschichtet werden (siehe Abbildung 5). Diese Stromkollektoren ermöglichen eine dreidimensionale Kombination der elektrisch und der ionisch leitfähigen Materialkomponenten, was zu einer Metalleinsparung und einer verbesserten Anbindung des Elektrodenmaterials führt. Weiterhin werden komplette Zellen assembliert und deren elektrochemische Parameter charakterisiert.

Stromkollektoren dienen funktionell als Brücke zwischen externer Elektronik und elektrochemischen Prozessen innerhalb der Lithium-Ionen-Zellen. Sie haben keinen Beitrag zur Gesamtkapazität, machen aber 15 % bis 50 % der Gesamtmassen von Kathoden und Anoden aus. Damit reduzieren sie signifikant die Energiedichten der Zellen. Während Lithium im Zusammenhang mit der Elektromobilität oft im Fokus der Diskussion um Ressourcenverfügbarkeit, Lieferengpässe und Kostensteigerungen steht, ist ebenso der Bedarf an Kupfer für Stromkollektoren bereits deutlich spürbar.

Im Rahmen der Masterarbeit „Current collectors for resource-efficient lithium-ion batteries“ von Yen-Ming Li wurden Elektroden gefertigt und zu Knopf- und Pouchzellen zusammengefügt (siehe Abbildungen 6 und 7). Die besten Knopfzellen erreichten bereits mehr als 300 Zyklen. Die gravimetrische Kapazität konnte bisher für Vollzellen aus gewebebasierten Stromkollektoren anodenseitig um einen Faktor 1,8 und kathodenseitig um



Abbildung 6: Im Rahmen der Masterarbeit von Yen-Ming Li gefertigte Knopfzellen

einen Faktor 1,1 im Vergleich zu kommerziellen Materialien erhöht werden. Die spezifische Energie der Knopfzellen erhöht sich damit um einen Faktor von etwa 1,3, die Energiedichte um einen Faktor 1,2 bezogen auf beide Elektroden. Die weiteren Arbeiten zielen auf die Fertigung von Elektroden mit noch dünneren Stromkollektorgeweben und höheren Zyklenfestigkeiten sowie auf den Einfluss der Gewebe- und Metallisierungsmorphologie.

Seit September 2021 ergänzt Mohammad Jafar Momeni die Arbeiten des Projekts. Er hat an der *Iran University of Science and Technology* (IUST) in physikalischer Chemie promoviert und war als Gastdoktorand an der *National Taiwan University* (NTU). In den letzten Jahren konzentrierte sich seine Forschung auf die experimentelle und rechnerische Untersuchung von Materialien in verschiedenen Energiespeichersystemen, wie Lithium-Ionen- und Blei-Säure-Batterien sowie in Superkondensatoren. An der NTU beschäftigte er sich mit der Synthese neuer Anodenmaterialien auf Zinnbasis für Lithium-Ionen-Batterien. Nach Abschluss seines Studiums arbeitete er in der Industrie an *Valve-Regulated Lead Acid*-Batterien. Sein breites Wissen bringt er nun in das Projekt ein.

Verschiedenes

Die Arbeitsgruppe konnte in 2021 den Batterietester der Firma LAND (siehe Abbildung 8) von der ehemaligen Arbeitsgruppe Physikalische Chemie und Elektrochemie der

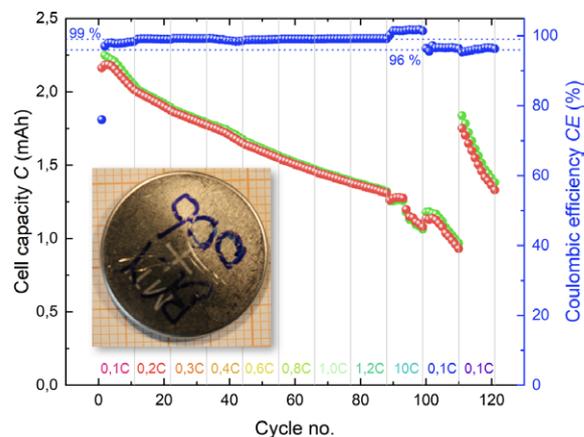


Abbildung 7: Lithium-Ionen-Zelle Nr. 6, welche die erste funktionstüchtige Zelle mit neuartigen gewebebasierten Stromkollektoren auf Anoden- und Kathodenseite darstellt.

Technischen Universität Chemnitz, deren Leiter Rudolf Holze war, als Dauerleihgabe übernehmen. Dieser wurde sofort in Betrieb genommen, da vorhandene Kapazitäten bereits nicht mehr ausreichten.

Rudolf Holze studierte von 1973 bis 1979 Chemie an der Universität Bonn und diplomierte mit einer Arbeit über „Neue Kathodenmaterialien für Lithiumbatterien“. Als akademischer Schüler von Wolf Vielstich promovierte er vier Jahre später zum Thema „Impedanzmessungen an porösen Elektroden“.

Von 1983 bis 1984 war Holze Postdoktorand bei Ernest B. Yeager am *Case Center for Electrochemical Sciences* der *Case Western Reserve University* in Cleveland, USA. Zu dieser Zeit war auch Doron Aurbach Mitglied der Gruppe. 1989 habilitierte sich Holze im Fach Physikalische Chemie an der Universität Oldenburg.

1993 nahm er einen Ruf auf eine Professur für Physikalische Chemie/Elektrochemie an der Technischen Universität Chemnitz an. Dort gründete er 1995 den Arbeitskreis Elektrochemie in Sachsen (AKES). 2011 wurde Holze als erster Elektrochemiker zum ordentlichen Mitglied der Sächsischen Akademie der Wissenschaften zu Leipzig ernannt. Seit 2018 ist er Professor an der Staatlichen Universität St. Petersburg und seit 2019 Professor an der *Nanjing Tech University*. Er ist der Gründungsherausgeber der Zeitschrift *Electrochemical Energy Technology*. Zu seinen Arbeitsgebieten gehören Spektroelektrochemie, intrinsisch leitfähige Polymere, Korrosion sowie elektrochemische Energiewandlung und -speicherung.

Die Arbeitsgruppe dankt Rudolf Holze für seine Leihgabe, die auch für die gemeinsamen Aktivitäten zu elektrochemischen Energiespeichern eingesetzt werden.

Datenbank zu Festkörperelektrolyten und Interkalationsmaterialien

Zur Sicherung und Bereitstellung von Wissen zu Ionenleitern und Interkalationsmaterialien sowie um die in den gemeinsamen Aktivitäten der letzten Jahre vorhergesagten Ionenleiter und Interkalationsmaterialien zu sammeln, zu systematisieren und bereitzustellen, schuf das SCTMS die *Battery Materials Plattform* unter 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. Der über das Internet zugänglichen Datenbank wurden in 2021 weitere Datensätze hinzugefügt.

Einladung zur Teilnahme am 11. Indo-German Frontiers of Engineering Symposium

Tilmann Leisegang wurde zum 11. *Indo-German Frontiers of Engineering Symposium* (INDOGFOE) eingeladen, um an der Energy Materials Session mit dem Beitrag „The conversion and storage of energy: pyroelectrics and solid electrolytes“ teilzunehmen.

Das INDOGFOE 2021 fand virtuell vom 24. bis 26. Februar 2021 statt. Es ist Teil einer Reihe von interdisziplinären, binationalen Konferenzen, die gemeinsam vom indischen Ministerium für Wissenschaft und Technologie (DST) und der Alexander von Humboldt-Stiftung organisiert werden. Die Veranstaltung bringt herausragende deutsche und indische Nachwuchsingenieure und Naturwissenschaftler aus Industrie, Universitäten und anderen Forschungseinrichtungen zusammen, um ihre ingenieurwissenschaftlichen Forschungsgebiete und technischen Arbeiten vorzustellen und so einen interdisziplinären Wissens- und Methodentransfer zu ermöglichen,

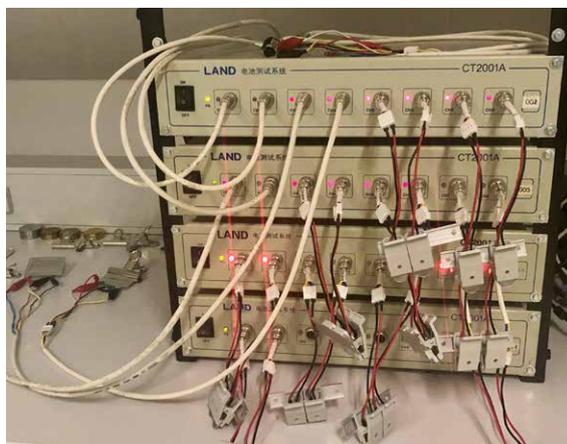


Abbildung 8: LAND-Batterietester der Arbeitsgruppe Rudolf Holze der Technischen Universität Chemnitz, die als Dauerleihgabe übergeben wurde.

der schließlich zum Aufbau kooperativer Netzwerke von Nachwuchswissenschaftlern aus beiden Ländern führt.

Die diesjährige Konferenz befasste sich mit folgenden Themen: Fortgeschrittene Kommunikation und 5G-Technologien, Energiematerialien, maschinelles Lernen und Big-Data-Analytik sowie nachhaltige Erde. Co-Vorsitzende waren Rabibrata Mukherjee vom *Department of Chemical Engineering* des *Indian Institute of Technology Kharagpur* und Benedikt Schmüling, Lehrstuhl für Elektromobilität und Energiespeichersysteme der Bergischen Universität Wuppertal. Die besondere Atmosphäre der Tagung, die exzellenten Vorträge und das professionelle und vielseitige Tagungsprogramm sorgten für eine qualitativ hochwertige, sehr angenehme und kurzweilige Veranstaltung.

Die Alexander von Humboldt-Stiftung wird die Zusammenarbeit zwischen deutschen und indischen Teilnehmern mit ihrem speziellen Programm CONNECT unterstützen, das Aufenthaltsstipendien für Arbeitsaufenthalte im Partnerland für bis zu 30 Tage vergibt.

Alternative Kategorisierungsmöglichkeiten für kristalline anorganische Verbindungen

Im Dezember 2021 begann ein gemeinsames Projekt zwischen der *Inorganic Crystal Structure Database* (ICSD), die vom FIZ Karlsruhe entwickelt und betreut wird, dem



SCTMS und dem IEP. Hierbei sollen alternative Kategorisierungsmöglichkeiten von Kristallstrukturen in der ICSD geeignet implementiert werden. In einem ersten Schritt ist geplant, die topologischen Parameter aller in der ICSD enthaltenen Kristallstrukturen zu berechnen und zu integrieren. Das Projekt ist auf zwei Jahre ausgelegt und ist das erste Projekt zur groß angelegten topologischen Analyse anorganischer Verbindungen. Die ICSD wird damit die erste kristallographische Datenbank sein, in der für jede Kristallstruktur zusätzlich zu den geometrischen Standarddaten (z. B. Raumsymmetriegruppe, Parameter der Elementarzelle, Atomkoordinaten) Informationen über chemische Bindungen verschiedener Art und topologische Parameter, die die Konnektivität der Struktur als Ganzes charakterisieren, enthalten sind. Das IEP wirkt hierbei als Test- und Endanwender mit und bringt seine Erfahrungen im *Screening* kristallographischer Datenbanken und in der Kristallographie mit ein.

Nachwuchspreis für junge Kristallographen

Am 16. März 2021 wurde Tilmann Leisegang im Rahmen der Mitgliederversammlung der 29. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) zusammen mit Holger Kohlmann und Tobias Beck in das Komitee des Lieselotte-Templeton-Preises gewählt, für

das er auch als Vorsitzender fungiert. Dieser Preis wurde von den „Jungen Kristallographen“ initiiert und von der Mitgliederversammlung der DGK bestätigt.

Mit diesem Studierendenpreis sollen herausragende wissenschaftliche Leistungen gewürdigt werden, bei denen Methoden und Aspekte der Kristallographie erfolgreich angewendet wurden. Der Preis wird jährlich im Gedenken an Lieselotte Templeton vergeben und soll erstmals anlässlich der 30. Jahrestagung der DGK im Jahr 2022 verliehen werden.

Lieselotte Templeton ist bekannt für ihre Forschungen in der Kristallographie. Sie arbeitete mit der Absorptionskorrektur von Röntgenbeugungsdaten, um Kristallstrukturen von Verbindungen mit schweren Elementen zu lösen. Sie arbeitete auch an Themen wie der anomalen Dispersion von Synchrotronstrahlung an Absorptionskanten, anomaler Beugung und Röntgendiffraktion.

Weitere Informationen dazu finden sich auf der Internetpräsenz der DGK oder in Heft 51 der Mitgliederzeitschrift der DGK.

Danksagung

Die Arbeitsgruppe dankt für die finanzielle Unterstützung der Arbeiten im Rahmen des ZIM-Verbundprojekts LilonSK (ZF4751502J09).



FREIBERGER ZENTRUM FÜR PYROELEKTRIZITÄT

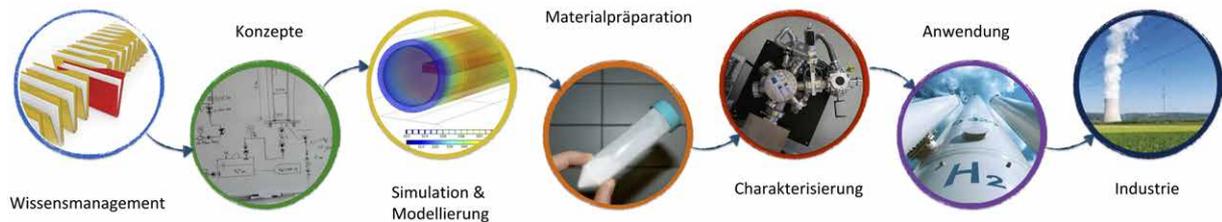
Nach Schätzungen unterschiedlicher Energieagenturen und Institutionen gehen heutzutage weltweit mehr als 72 % des für die technische Nutzung gewandelten Energieaufkommens in Form von Abwärme verloren. Das entspricht einer Energiemenge von 246 EJ oder 68 PWh und damit etwa dem Dreifachen des europäischen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

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

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

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

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



- 2012–2014: ESF-Nachwuchsforschergruppe „Pyroelektrische Funktionsmaterialien für die Energie- und Stoffwandlung (PyroConvert)“. In der interdisziplinären Gruppe wurden auf Pyroelektrika basierende Konzepte für die Nutzung von Niedertemperaturabwärme für Energie- und Stoffwandlungsprozesse erarbeitet.
- 2013: Messaufbau zur Bestimmung pyroelektrischer Koeffizienten mit der Sharp-Garn-Methode im Temperaturbereich von 0 °C bis 170 °C.
- 2013–2015: VIP-Vorhaben „Pyroelektrisch funktionalisierte Schichten zur aktiven Schaltung von Oberflächeneigenschaften (PyroFunk)“. Ziel war die Entwicklung und Optimierung neuartiger eisabweisender Oberflächenbeschichtungen auf der Basis pyroelektrischer Materialien.
- 2013–2014: Bau eines Demonstrators zur Wasserstoffherzeugung im Rahmen der ESF-Nachwuchsforschergruppe PyroConvert.
- 2014: Vakuumkammer zur Polarisierung pyroelektrischer Proben bei Spannungen bis zu 30 kV.
- 2015: Erstmaliger Nachweis von Pyroelektrizität der MFP-Phase von Strontiumtitanat mittels elektrischem Feld und Defektmigration.
- 2016: UHV-Vakuumkammer zur Bestimmung pyroelektrischer Koeffizienten bei hohen Temperaturen bis 1000 °C.
- 2016–2019: DFG-Paketantrag 921 „Pyro- und dielektrische Eigenschaften von Hochtemperaturpiezoelektrika der Oxoborat-Familie $RX_2Z_2O(BO_3)_3$ “ zusammen mit dem Institut für Mineralogie und der Ruhr-Universität Bochum.
- 2017–2019: AiF-Forschungsvorhaben „Pyroelektrische Polymere für die Abwärmenutzung – PyroFol“.
- 2017: Korona-Aufbau zur kontaklosen Polung von pyroelektrischen Polymerproben.
- 2019: Portabler Messplatz zur Bestimmung pyroelektrischer Koeffizienten an Polymerproben.

Charakterisierung pyroelektrischer Materialien

Die im FZP bearbeiteten Projekte reichen von der Kristallzucht über die Strukturaufklärung bis zur Charakterisierung dielektrischer und pyroelektrischer Eigenschaften. Beispielhaft zeigt die Abbildung einen am Institut für Mineralogie gezüchteten $PrCOB$ -Einkristall und einen zugehörigen Schnitt durch den reziproken Raum, der per Röntgendiffraktometrie gemessen wurde.

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

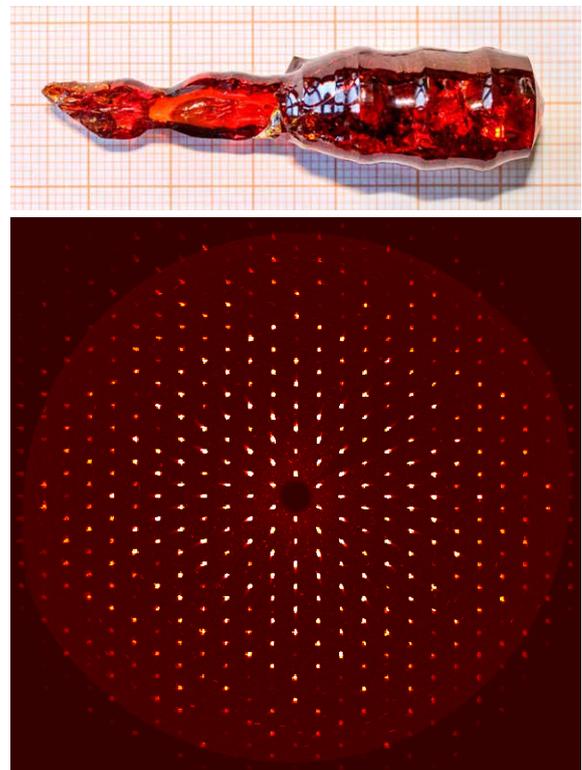
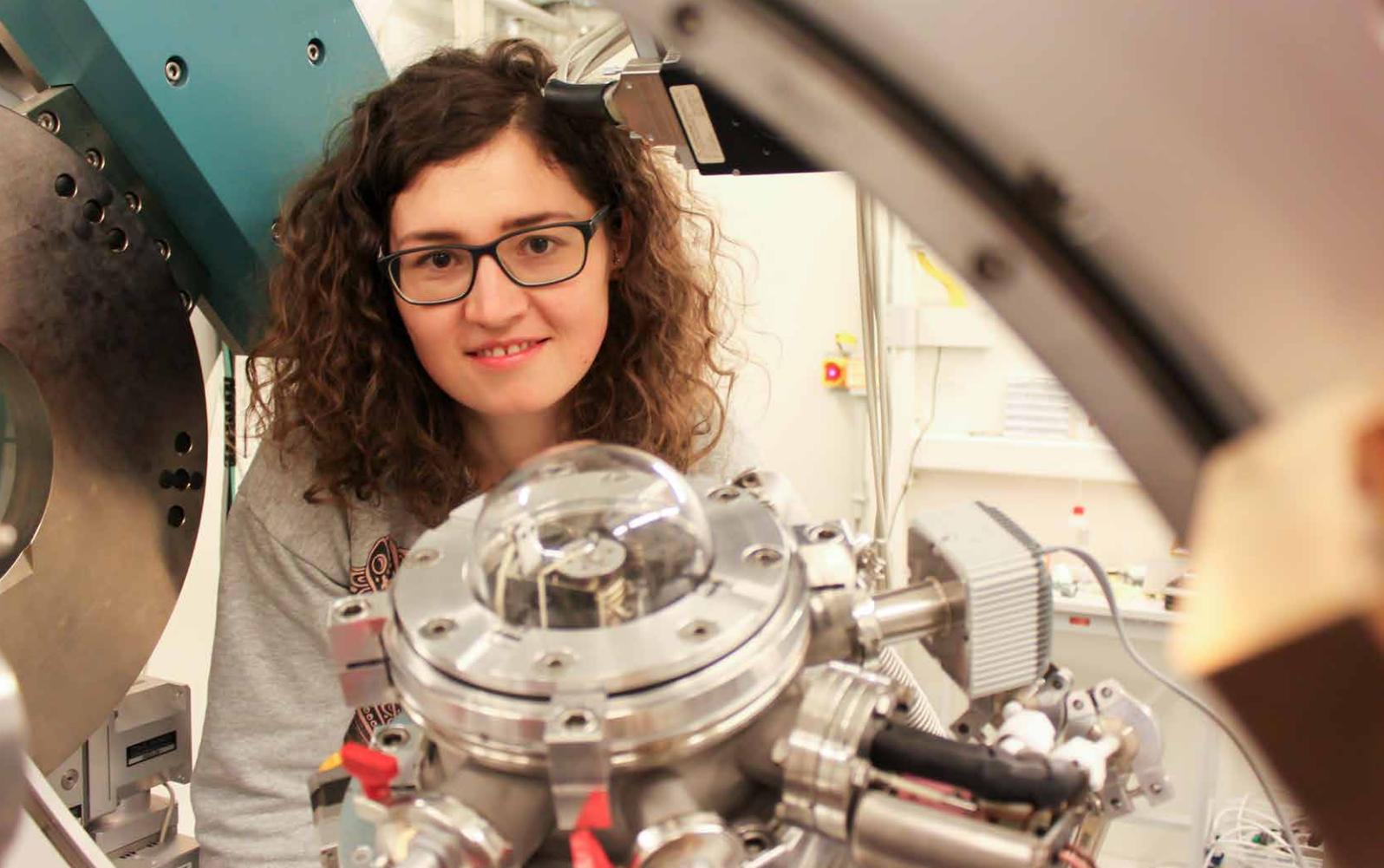


Abbildung: Foto eines $PrCa_4O(BO_3)_3$ -Einkristalls (oben) und $hk0$ -Schnitt durch den reziproken Raum (unten)



ARBEITSGRUPPE RESONANTE RÖNTGEN-METHODEN UND KRISTALLMODELLIERUNG

Die Tätigkeiten der Arbeitsgruppe unter der Leitung von Dr. Matthias Zschornak beinhalten sowohl die experimentellen und theoretischen Aspekte resonanter Röntgenmethoden, die Weiterentwicklung entsprechender Probenumgebungen und Methoden, als auch die Modellierung der elektronischen Struktur von Kristallen und abgeleiteten Eigenschaften.

Derzeit laufen zwei DFG-Projekte und zwei Doktorarbeiten in der Arbeitsgruppe. Im Projekt „AcoustREXS“ liegt der Fokus auf der atomaren und elektronischen Struktur kristalliner Materialien unter dem Einfluss akustischer und elektrischer Felder sowie der Vorhersage von einhergehender Symmetriebrechung und entsprechender Eigenschaftsänderungen des Materials. Im Projekt „Parameter Space Concept“ steht ein neuartiger Ansatz zur hochpräzisen Kristallstrukturbestimmung basierend auf Einkristall-Röntgendiffraktometriedaten ohne den Gebrauch von Fouriertransformationen im Mittelpunkt.

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 (SrTiO_3 und dessen Ruddlesden-Popper-Phasen $\text{SrO}(\text{SrTiO}_3)_n$, TiO_2 , RbH_2PO_4 , Nb_2O_5), Halbleitermaterialien (GaAs, InP, CdSe), Seltenerdverbindungen (R_2TSi_3 , YMn_2O_5 , $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$, $\text{Pr}_x\text{Sr}_{1-x}\text{MnO}_3$), Pyroelektrika (LiNbO_3 , LiTaO_3) sowie ferroelektrischen Dünnschichten (SrTiO_3).

Genutzt werden dafür vor allem resonante Synchrotronmethoden wie *Resonant X-ray Diffraction* (RXD), *X-ray Absorption Fine Structure* (XAFS, XANES, EXAFS), *Diffraction Anomalous Fine Structure* (DAFS), *Anisotropic Anomalous Scattering* (AAS) sowie 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 Synchrotronexperimenten. Dies beinhaltet unter anderem die Ausgestaltung und Konstruktion einer individuell angepassten Probenkammer, der sogenannten



Abbildung 1: Tina Weigel, Matthias Zschornak, Christian Ludt und Melanie Nentwich beim Konferenzdinner zum 25th IUCr Congress in einem Prager Ballhaus.

„Nordseekammer“. Diese Kammer wurde im Rahmen eines vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Verbundprojekts 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 und *in situ* zu untersuchen.

Ein besonderes Ereignis im Jahr 2021 war der Bezug der neuen Laborräume im Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung (ZeHS), welche zukünftig für die Ansteuerung, Weiterentwicklung und Optimierung der Nordseekammer genutzt werden. Die Kammer war auch 2021 wieder an P23 des DESY im Einsatz. So wurden – zusammen mit Dr. Carsten Richter und Dr. Melanie Nentwich als *Local Contact* – während einer ergänzenden Messzeit zu einer Ende 2020 remote durchgeführten Strahlzeit das resistive Schalten von Strontiumtitanatfilmen vom IKZ sowie die Temperaturabhängigkeit der atomaren Verrückungen der Migrations-induzierten Feld-stabilisierten polaren (MFP) Phase in Strontiumtitanat untersucht. Zum Ende des Jahres 2021 wurde die elektrische Kontaktierung der Nordseekammer umgebaut, wodurch nun Spannungen bis 10 kV angelegt werden können. Damit sollen bei einer gemeinsamen Messzeit 2022 mit Partnern vom DESY ferroelektrische Polymerschichten geschaltet werden.

Die Arbeitsgruppe besteht neben dem Leiter Dr. Matthias Zschornak aus den beiden Doktoranden Christian



Abbildung 2: Matthias Zschornak während eines eingeladenen Vortrags auf dem *Lab Meeting of the Young Crystallographers @ STOE* in Darmstadt.

Ludt und Tina Weigel, sowie dem Post-Doktoranden Dr. Muthu Vallinayagam. Als ehemalige Mitglieder der Gruppe unterstützen die externen Wissenschaftler Dr. Carsten Richter (Leibniz-Institut für Kristallzüchtung IKZ in Berlin), Dr. Melanie Nentwich (DESY in Hamburg) und Dr. Christian Wagner (Fraunhofer-Institut für Elektronische Nanosysteme ENAS in Chemnitz) die Forschung, sowohl bei der Durchführung und Datenanalyse der Synchrotronexperimente als auch bei der Modellierung, und arbeiten in gemeinsamen Kooperationen weiterhin eng mit der Arbeitsgruppe zusammen.

Im Jahr 2021 war die Arbeitsgruppe wieder auf nationalen und internationalen Fachtagungen stark vertreten. So wurden die Forschungsergebnisse der Gruppe auf dem *DESY User Meeting* und der 29. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) erstmals auf Online-Konferenzen vorgestellt. Erst im Sommer 2021 waren Konferenzteilnahmen in Person wieder möglich und so war die Arbeitsgruppe auch auf dem *25th Congress of the International Union of Crystallography (IUCr)* in Prag. Aufgrund der Nähe des Austragungsortes zu Freiberg haben Matthias Zschornak und Tina Weigel einen Teil der Anreise per Rad absolviert. Weiterhin war Matthias Zschornak für einen Vortrag auf dem *3rd Lab Meeting of the Young Crystallographers @ STOE* in Darmstadt eingeladen. Organisiert wurde dieses Treffen von Tina Weigel, der aktuellen Vorsitzenden des Arbeitskreises „Junge Kristallographen“ der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie.



ZENTRUM FÜR EFFIZIENTE HOCHTEMPERATUR-STOFFWANDLUNG

Mit der Förderempfehlung des Wissenschaftsrates für einen in Freiberg zu errichtenden Forschungsbau nach erfolgreicher Teilnahme am bundesweiten Wettbewerb gemäß Art. 91b Grundgesetz begann im Mai 2015 die Realisierung eines den Wissenschaftskorridor der TU Bergakademie Freiberg besonders prägenden Bauvorhabens: die des Zentrums für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung (ZeHS). Seitdem wurden viele Etappen durchlaufen. Der nachstehende Überblick benennt wichtige Zeitmarken der Umsetzung dieses Großvorhabens.



Von der Beantragung bis zur Eröffnung

- 28. Juni 2013 – Vorlage der Bedarfsanmeldung
- 13. September 2013 – Einreichung der Antragskizze
- 05. November 2013 – Verteidigung der Antragskizze
- 09. Januar 2014 – Einreichung des Vollartrags
- 21. Februar 2014 – Verteidigung des Vollartrags
- 16. Januar 2015 – Einreichung der erweiterten Version des Vollartrags
- 04. März 2015 – Verteidigung der erweiterten Version des Vollartrags
- 24. April 2015 – Förderempfehlung des Wissenschaftsrats
- 27. Mai 2015 – Planungsauftrag des Sächsischen Staatsministeriums der Finanzen (SMF) an das Sächsische Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst (SMWK)
- 18. Juni 2015 – Anerkennung der Bedarfsanmeldung durch den Staatsbetrieb Sächsisches Immobilien- und Baumanagement (SIB) und das SMF
- 19. Juni 2015 – Förderbeschluss der Gemeinsamen Wissenschaftskonferenz
- 25. Juni 2015 – Auftakt der Bauberatungen im SMWK und SIB

- 12. Mai 2017 – Symbolischer „Baggerbiss“ zum Baubeginn
- 22. März 2019 – Richtfest
- 22. Februar 2021 – Übergabe des Baus an die TU Bergakademie Freiberg (TU BAF)
- 01. April 2021 – Aufnahme der Arbeit durch das neu gebildete Direktorium
- 4. Mai 2021 – Eröffnung durch die Nutzer
- 4. Mai 2021 – Verleihung der Goldenen Ehrennadel der TU Bergakademie Freiberg an Prof. Dirk C. Meyer

Am 22. Februar 2021 ist das ZeHS nach nur vierjähriger Bauzeit offiziell an die TU BAF übergeben worden. Unter der Regie des SIB war es plankonform unter Beteiligung aller erforderlichen Gewerke errichtet worden. Erste Teilbereiche konnten schon ab dem Frühjahr des Jahres 2020 sukzessive an die TU BAF übergeben und von den Nutzern in Betrieb genommen werden. Die reinen Baukosten beliefen sich auf 34,2 Mio. Euro. Über 80 Prozent der Aufträge wurden von sächsischen Planungs- und Bauunternehmen ausgeführt. Parallel zum Baugeschehen erfolgte die Installation der im Zuge des Antragsverfahrens mitverteidigten Forschungsgrößgeräte im Gesamtwert von 9,75 Mio. Euro. Damit erhält der Forschungsstandort Freiberg – im bundesweiten Vergleich und erfolgreich im internationalen Wettbewerb stehend – einen maßgeblichen Aufwuchs.

Im Zusammenhang mit der Übergabe des Zentrums hielt Sachsens Wissenschaftsminister Sebastian Gemkow fest: „Mit der Konzentration der an der TU Bergakademie Freiberg vorhandenen Kompetenzen wird am ZeHS interdisziplinäres Forschen auf höchstem Niveau ermöglicht. Im Fokus der wissenschaftlichen Arbeit stehen Ressourcen- und Energieeffizienz zur Schaffung nachhaltiger Industrieprozesse. Nicht ohne Grund hat der Wissenschaftsrat diesen technologischen Zielstellungen des ZeHS eine ‚sehr hohe gesellschaftliche und wirtschaftliche Relevanz‘ bescheinigt, gehören sie doch zu den drängenden Aufgaben der Zukunft. Gleichzeitig steht die Forschung am ZeHS in der Tradition der Kern-Forschungsbereiche der ältesten montanwissenschaftlichen Hochschule der Welt.“

Dem Wissenschaftlichen Sprecher, Herrn Professor Dirk C. Meyer, war es ein besonderes Anliegen, hervorzuheben, dass „das Zusammenwirken aller Beteiligten, darunter auch das Sächsische Staatministerium für

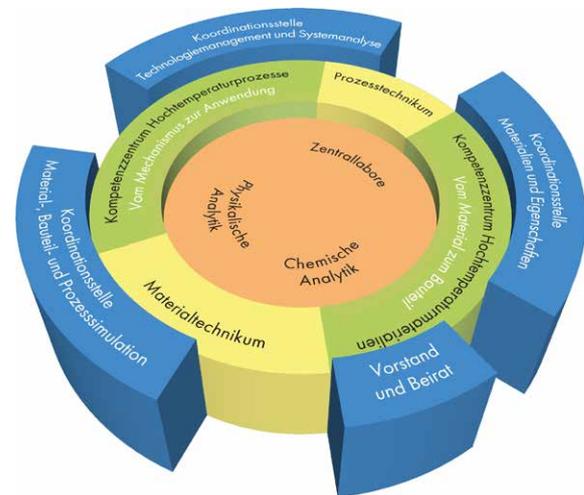


Abbildung 1: Teilbereiche des ZeHS

Wissenschaft, Kultur und Tourismus sowie das Baudezernat der TU BAF, unter Moderation des SIB in einer ausgesprochen konstruktiven Weise erfolgte, womit die Intentionen der Nutzeranforderungen sowie des gesamten Wettbewerbs hervorragend umgesetzt und die vorgesehene Bauzeit eingehalten werden konnten.“

Mit dem wissenschaftlichen Auftakt am 4. Mai 2021 wurden die Arbeiten im ZeHS offiziell gestartet – wozu teilweise langjährige Vorausplanungen wie auch weitere Forschungen gehörten und gehören. Im Rahmen einer feierlichen Veranstaltung würdigte der Rektor der Bergakademie, Prof. Klaus-Dieter Barbknecht, besonders die Verdienste des Wissenschaftlichen Sprechers des Zentrums, Prof. Dirk C. Meyer, für die Bergakademie, insbesondere sein unermüdliches Engagement für das ZeHS mit der Verleihung der Goldenen Ehrennadel der Universität. „Mit Prof. Dr. Dirk Meyer ehren wir einen begabten Leiter sowie international ausgezeichneten Wissenschaftler, der sich seit seiner Berufung an die TU Bergakademie Freiberg im Jahr 2009 für ihre Weiterentwicklung in Forschung und Lehre einsetzt“. Prof. Dirk C. Meyer war von 2010 bis 2016 als Prorektor tätig und engagierte sich in den Bereichen Bildung und Strukturentwicklung, wo er sich unter anderem maßgeblich an der Einwerbung des vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Vorhabens MESIOR zu strukturellen Maßnahmen und zur Personalstärkung im Bildungsbereich sowie für den Antrag für das hier dargestellte Vorhaben erfolgreich



Abbildung 2: Blick in das Treppenhaus im Kopfbau des ZeHS mit angrenzenden Teeküchen und Büros

einsetzte. Im mehrstufigen Antragsprozess für das ZeHS gelang es ihm, die Interessen von zirka 25 Professoren und damit die Forschungsprogrammatische der gesamten TU BAF vor Kommissionen des Wissenschaftsrats erfolgreich zu vertreten und die Fördermittel für den Bau des ZeHS mit persönlichem Einsatz einzuwerben. Auch nach seiner Prorektorenzeit begleitete Prof. Dirk C. Meyer das Projekt während der gesamten, fünfjährigen Bauphase mit besonderer Intensität weiter. Vorbilder für die am ZeHS vorgesehene Zusammenarbeit waren für ihn die im Zentralen Reinraumlabor bereits gelebte Kooperation, klug konzipierte Infrastrukturen, wie die Kompetenzzentren der Sächsischen Landesexzellenzinitiative und das tägliche Erleben der stetigen Fortentwicklung der Universität. In besonderer Weise setzt er sich auch für die Vernetzung des ZeHS mit internationalen Großforschungseinrichtungen ein, wie dem Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) und dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR).

Die Forschungsschwerpunkte am ZeHS werden maßgeblich durch die beiden Kompetenzzentren „Hochtemperaturprozesse – Vom Mechanismus zur Anwendung“ und „Hochtemperaturmaterialien – Vom Material zum Bauteil“ bestimmt und sollen durch deren Leiter

vorangebracht werden. Ergänzt wird deren Arbeit durch drei fachspezifische Koordinationsstellen in den Bereichen „Materialien und Eigenschaften“, „Material-, Bauteil- und Prozesssimulation“ sowie „Technologiemanagement und Systemanalyse“, die die methodischen Kompetenzen mit der Geräteinfrastruktur innerhalb des ZeHS repräsentieren (siehe Abbildung 1). In der damit gegebenen Matrix aus Methoden-, Stoff-, Prozess- und Systemkompetenz ist eine Qualität des Zusammenspiels sich gegenseitig ergänzender und durchdringender Wissenschaftsgebiete möglich, wie sie nur in einem Forschungszentrum dieser Größe und strategischen Ausrichtung zu erreichen ist.

Im Wintersemester 2021/22 fand eine Ringvorlesung statt, in deren Rahmen Vorträge aus dem Forschungs- und Lehrgebietsfundus der Mitglieder des ZeHS präsentiert wurden. Die Veranstaltung sollte im 100 Plätze bietenden Vortragssaal im Erdgeschoss des ZeHS stattfinden, musste aber ab dem zweiten Vortrag online durchgeführt werden. Die Auftaktrunde umfasste ausschließlich Vorträge in deutscher Sprache und ermöglichte damit auch im Freiburger Umfeld einen direkten Zugang zur Arbeit dieser für die Region bedeutenden Einrichtung. Der Einladung eines internationalen Fachverlages folgend ist angedacht, die Beiträge dann auch in englischer Sprache in



Abbildung 3: Teeküche und Begegnungsraum im ZeHS

Buchform zu veröffentlichen. Dazu ist vorgesehen, eine Übersicht der während der gesamten Entwicklungszeit des ZeHS bisher geleisteten wissenschaftlichen Arbeiten unter dem Arbeitstitel „High-Temperature Processes and Materials Conversion – Future Prospect Demand“ in kompakter Form international zu kommunizieren.

Hinzugefügt sei an dieser Stelle, dass der moderne Forschungsbau gemäß Initiative des Wissenschaftlichen Sprechers und auf Zuwendungen maßgeblicher Wissenschaftlerpersönlichkeiten gestützt eine Sammlung wertvoller wissenschaftlicher Nachlässe beherbergt, so u. a. die Sammlungen von Fr. A. Haake, Prof. T. Hahn und Prof. P. Paufler, die dem Gebäude einen besonderen Geist und damit verbundene Verwurzelung gewähren. Auch diesbezüglich sind wissenschaftliche Untersuchungen zum Erkenntnisgewinn in Arbeit.

Am Rande von Veranstaltungen sowie zu Gruppenbesuchen, etwa für ganze Schulklassen vorgesehene Praktika, kann der Zusammenhang zwischen baulicher Infrastruktur sowie Architektur, „Kunst am Bau“ und der Forschungsvision für eine breite Öffentlichkeit erfahrbar werden. Ein diesbezüglich guter Auftakt war sicherlich die Präsentation des Forschungsbaus im Rahmen des Tages der Architektur am 26. Juni 2021 unter Beteiligung der wesentlichen Mitwirkenden. In der „Freien Presse“ vom 29.06.2021 gab der verantwortliche Architekt des ausführenden Büros Heinle, Wischer und Partner Freie Architekten GbR aus Dresden, Jens Krauß, zum harmonischen Bauablauf u. a. an: „Fünf Jahre habe ich mit

Professor Meyer und dem Staatsbetrieb Sächsisches Immobilien- und Baumanagement eng zusammengearbeitet. Das war fast wie eine Ehe geworden, und zwar wie eine gute Ehe.“

Die nachfolgenden Texte zu „Architektur“ und „Kunst am Bau“ sind in enger Anlehnung an, auch für Besucher offen am ZeHS ausliegende, Faltblatt-Informationen in Abstimmung mit den Urhebern verfasst. Weiteres findet sich unter www.zehs-freiberg.de.

Architektur

Die Innovationskette der Forschungsprogrammatisierung des ZeHS bildet sich im Neubau auch architektonisch ab. Die Büros, die Labore und die Versuchshalle sind in separaten Gebäudeteilen untergebracht. Sie folgen der städtebaulichen Leitidee des „Wissenschaftskorridors“ und fügen sich durch ihre abgestufte Geschossigkeit in die Proportionen des Campus ein. Die einzelnen Kettenglieder sind in ihrer Abfolge räumlich – und im übertragenen Sinne auch gedanklich – miteinander verbunden. Aus den „Denkzellen“ im Kopfbau gibt es Sichtbeziehungen auf alle tiefer liegenden Teile des Hauses – bis in die Versuchshalle hinein – und umgekehrt. Die effiziente, flexible Unterteilung des Raumprogrammes in Labortrakt, Versuchshalle und Büros ermöglicht durch kurze Wege und Aufweitungen an hochfrequentierten Bereichen die Nutzung des ZeHS als Forschungs- und Gedankenaustauschzentrum für alle Fakultäten (siehe Abbildungen 2 und 3).

In die Gestaltung des Hauses sind viele Assoziationen zum Bergbau und Montanwesen eingeflossen. Wie ein aufgespaltenes Mineral, dessen äußere steinerne Hülle den inneren kristallinen Kern schützt, liegt der Neubau topographisch geschichtet am Wissenschaftskorridor. Der Neubau übersetzt das Karge und Schroffe der bergbaulichen Hütten und Halden in ein gestalterisches Gesamtkonzept und verortet sich damit auf dem Campus der Bergakademie und im Herzen der Bergstadt Freiberg. Er mutet von außen durch seine steinerne Fassade wehrhaft und kraftvoll an; gleichwohl geht die Fassade durch die ablesbare Schichtung der Geschosse sensibel mit den topographischen Verhältnissen um und lässt durch die regelmäßig, präzise gesetzten Fenster eine behütete Nutzung erahnen. Im Inneren entfalten sich Wärme und zurückhaltender Glanz. Der räumliche Kontrast zwischen



Abbildung 4: Das Kunstwerk „Solaris“ von Axel Anklam im Atrium des ZeHS

dem großzügigen Atrium und den engen, stollenartigen Gängen knüpft ebenfalls an die Bergbautraditionen unserer Stadt an. Alle diese Räume umkreisen den Kern des Hauses: einen Innenhof – der gefasst wird mit Farben, die von sehr hellen über leicht rosafarbene bis zu sehr dunklen Violett-Tönen an Amethyste erinnern. So wird der in sich abgeschlossene Hof räumlich zur verbindenden Mitte des Hauses. Die Materialien und Farben der Innenausbauten folgen diesen Themen ebenso: In den Büros, wo die „hohe Theorie“, die übergeordnete Planung der Dinge, passiert, kommen helle, glatte Oberflächen zum Einsatz. Die feine, praktische Arbeit in den Laborflügeln wird visuell in das Thema „Stollen“ übertragen und findet seine Entsprechung in bronzefarbenen, erdigen Tönen für Türen, Treppengeländer, Fenster oder Profile der Innenraumverglasungen. Die Teeküchen mit den Eichenverkleidungen interpretieren das Thema „Schutzhütten“ in den Bergbaustollen. Die robuste Versuchshalle, in der die groben, schwergewichtigen Arbeiten stattfinden werden, ist gestalterisch durch roh belassene Materialien, wie Beton, Estrich oder verzinktes Metallblech, bestimmt.

Kunst am Bau

Mit „Kunst am Bau“ fördert der Freistaat Sachsen auf Grundlage seines baukulturellen Anspruchs die

zeitgenössische Kunst, indem er bei Baumaßnahmen ab einer bestimmten Größenordnung Aufträge an bildende Künstler vergibt. Für das ZeHS wurde durch eine Jury im Rahmen eines dazu vom SMF ausgelobten Wettbewerbs der Entwurf „Solaris“ des Künstlers Axel Anklam ausgewählt (siehe Abbildung 4). Die ausgewählten Kunstwerke sollen dauerhaft fest im Inneren oder außerhalb der(s) Gebäude(s) mit diesem verbunden sein.

Licht und Bewegung sind fundamentale Bestandteile unserer Erde und damit Gegenstand der Wissenschaft. Das Licht zum bildnerischen Medium zu machen – dieser Gedanke war Ausgangspunkt des künstlerischen Entwurfs „Solaris“ für den ZeHS-Neubau. Die von diesem Objekt ausgesandten goldenen Lichtreflexe bedecken die Wände des Foyers. Von einer großflächigen, goldschimmernden und partiell auch selbst hell strahlenden Wand wird der Besucher des Forschungsbaus empfangen. An der goldverspiegelten Oberfläche einer vielfach gebrochenen Reliefstruktur werden Lichtstrahlen reflektiert. Das erzeugt unzählige weitere Reflexionen. Folgt der Blick des Betrachters dem Lichtschein, wird er schnell gewahr, dass dieses Licht im Treppenhauseingang eingefangen und über mehrere Spiegel durch das Treppenhaus ins Foyer geleitet wird. In der Tat ist es das Sonnenlicht, das hier gebündelt ins Innere übertragen wird. Der so gerichtete Lichtstrahl teilt sich prismenartig auf der fragmentarisch gebrochenen Metalltextur.

Funktionsschichten mittels flexibel strombasierter Abscheide- und Modifizierungsprozesse

Eine maßgebliche Aufgabenstellung des ZeHS ist die Ablösung fossiler Energieträger für die Bereitstellung von Aktivierungsenergie und Prozesswärme. Damit ist die Forderung nach neuen Hochtemperatur-Prozessen verbunden, die elektrischen Strom als Energiequelle nutzen. Die Nutzung erneuerbarer Energiequellen erfordert im besten Falle einen zeitlich flexiblen Einsatz nach Maßgabe der angepassten Stromtarife bzw. des tagesaktuellen Preises an der Energiebörse. Zugleich werden bei der diesbezüglich möglichen Bilanzierung auch neue Prozesswege wirtschaftlich. Eine entsprechend angepasste Führung von Syntheserouten kann materialwissenschaftlich

beispielsweise auf die Entwicklung und Optimierung neuartiger Hochtemperatur-Stoffsysteme für Funktionsschichten fokussieren. Die für die Hochtemperatur-Synthese spezifischen und teils extremen Prozessbedingungen – nicht nur hinsichtlich hoher Temperaturen – stellen fundamentale Herausforderungen an die Materialstabilität. Geforderte Funktionsschichten realisieren Lösungen für Anwendungsbereiche in der Sensorik, als Transportbarrieren, Elektroden oder Haftvermittler. Sie bieten aber auch neue, alternative Wege für die Materialentwicklung:

- **Reaktivschichten:** Mehrlagenkomposite aus im thermodynamischen Gleichgewicht mischbaren Komponenten für die Aktivierung von Fügeprozessen.
- **Wärmedämmschichten/Diffusionsbarrieren:** Mehrlagenkomposite aus hochschmelzenden Metallen, getrennt durch Oxidschichten, oder Metall-Keramik-Verbünde zur Vervielfachung des Temperatursprungs

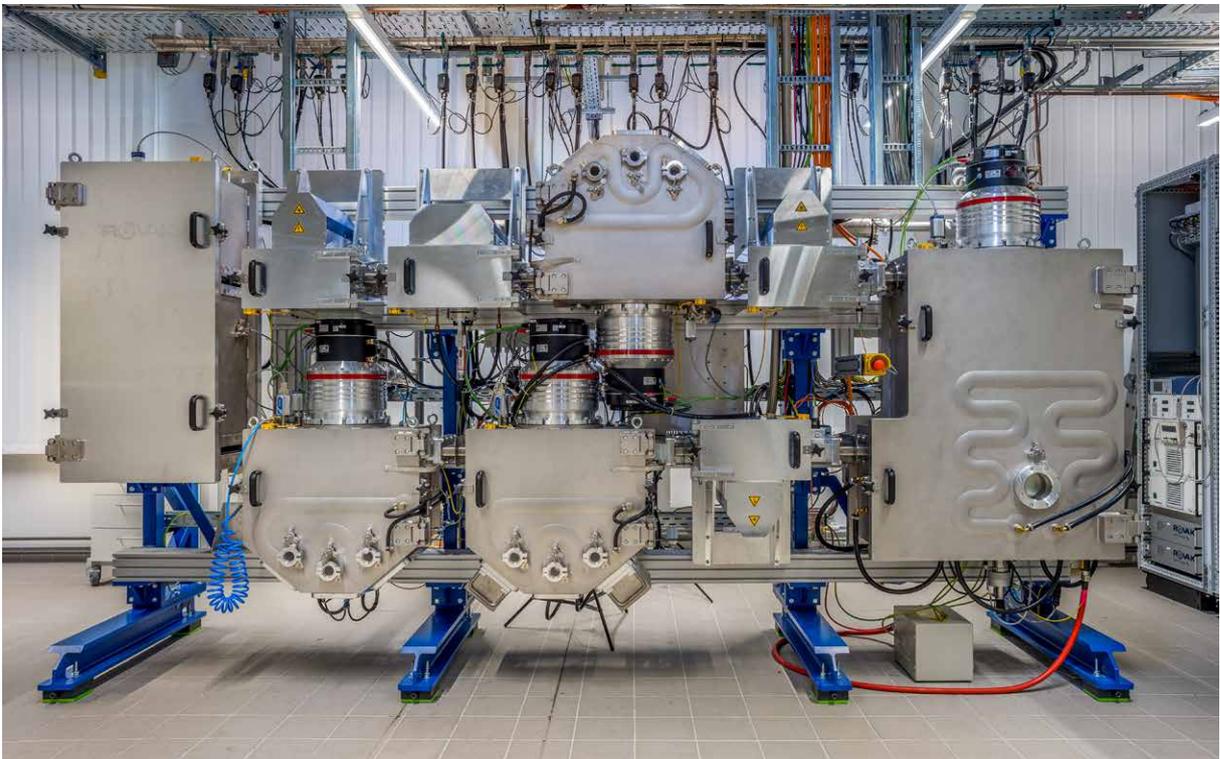


Abbildung 5: Der Hersteller und Projektpartner ROVAK GmbH realisierte die Aufstellung einer unikalen R2R-Beschichtungsanlage am ZeHS. Auf der linken Seite befinden sich die Depots der flexiblen Träger für die Ausgangs- und Produktrollen, die geschlossen zwischen den acht verschiedenen Behandlungsstationen auf zwei Etagen (Kammern) hin und her gefahren werden können. Zusätzlich erfolgt ein umfassendes Energiemonitoring und Energiemanagement, das in dieser Form neuartig ist. Die Fertigungsstationen umfassen Plasma-Reinigung, Elektronenstrahl-Verdampfen, Magnetronspütern, Blitzlampen- und Infrarot-Wärmebehandlung. Damit wird ein weiter Bogen thermo-chemo-physikalischer Prozesse abgebildet.

an den Grenzflächen bei Wärmedurchgang bzw. Unterdrückung von Diffusion.

- **Elektroden:** Modifizierte Mehrlagensysteme für elektrochemische Speicheranwendungen, z. B. Nutzung metallinduzierter Kristallisationsprozesse infolge Blitzlampen-Wärmebehandlung für die Einstellung hochstabiler Einlagerungsstrukturen mit gleichzeitig optimierter Oberflächenmorphologie.

Die adressierten Syntheserouten lassen sich im Kern am Beispiel einer multifunktionalen Anlage, die die Autoren im Rahmen des BMBF-Verbundvorhabens *R2R-Battery* (FKZ: 03SF0542A) an das ZeHS gebracht haben, erläutern. Diese Anlage realisiert zahlreiche, strombasierte physikalische Beschichtungs- und Modifizierungsprozesse, die auf flexiblen Trägern fortlaufend, d. h. Rolle-zu-Rolle (R2R) angewendet werden können (siehe Abbildung 5). Primär wurde die Anlagenauslegung für die Fertigung von Batterieelektroden konzipiert, wobei die Forderung nach einem möglichst hohen Grad von Anpassbarkeit an weitere Fragestellungen berücksichtigt wurde. Ein Energiemonitoring und Energiemanagementsystem soll das oben genannte Ziel unter Einsatz künstlicher Intelligenz ermöglichen. Die Anlage wird ergänzt durch einen unter Verantwortung der Autoren realisierten Geräteverbund, u. a. durch eine CBPLD (*Crossed Beam Pulsed Laser Deposition* – Materialabscheidung aus gekreuzten Laser-Fackeln), eine zusätzliche Einheit zur Ionen-Zerstäubung und Blitzlampen-Wärmebehandlung, ein HT-Röntgen-

diffraktometer sowie ein HT-Röntgenphotoelektronen-Spektrometer (beide für Temperaturen bis ca. 1200 °C), die ein auch international beachtliches Forschungssystem darstellen.

Die vorgesehenen Arbeiten umfassen mehrere Pakete, für die bereits konkrete Umriss existieren und im Sinne der Kooperation am ZeHS die Grundlage für gemeinsame Entwicklungen bilden. Darin eingeschlossen sind auch Betrachtungen zum Technologiemanagement, zur Ressourcenverfügbarkeit sowie zur Rückführung erzeugter Funktionselemente nach deren Einsatzzeit in den Stoffkreislauf. Der geschilderte Sachstand steht exemplarisch für das besondere Potenzial des ZeHS, das gesamte Innovationsvermögen der TU Bergakademie Freiberg auch gemäß der traditionell belegten Leistungen wirkungsvoll auszuschöpfen.

Danksagung

Zu dem hier beschriebenen Aufwuchs am ZeHS haben verschiedene Projektträger beigetragen. Besonderer Dank geht an Frau Kerstin Annassi, Projektträger Jülich, für die profunde Unterstützung einschlägiger Verbundprojekte. Der Gesamtzusammenhang des ZeHS wird durch eine kooperative Unterstützung des Bundes und des Freistaates Sachsen ermöglicht.

PROJEKTE



DIE ALUMINIUMBATTERIE: HERAUSFORDERUNGEN FÜR DIE INDUSTRIELLE FERTIGUNG

Das BMWi-Verbundprojekt „Die Aluminiumbatterie: Herausforderungen für die industrielle Fertigung – ProBaSol“ verfolgt das Ziel der Implementierung einer neuartigen Technologie zur Fertigung elektrochemischer Energiespeicher als Alternative zu Li-basierten Batteriesystemen. Dabei soll es innerhalb der Arbeitsgruppe Prof. Meyer von den Ergebnissen eigener abgeschlossener bzw. aktuell laufender Verbundvorhaben profitieren und den systematischen Aufbau einschlägiger Kompetenzen im Sinne eines Transfers vervollständigen. Schwerpunktmäßig wird auf eine Festkörperbatterie für mobile hochvalente Ionen sowie die dazugehörige Fertigungstechnologie für Festkörperelektrolyte und Elektroden, insbesondere mittels Kurzzeittempern mit Blitzlampen sowie anodischem Oxidieren gesetzt. Wesentliche Vorteile sind die erzielbaren Energiedichten, die hohe Sicherheit, die umfassende Verfügbarkeit der Materialien sowie die Recycelbarkeit der Systeme. Im Ergebnis soll neben einer detaillierten Komponente-Eigenschaft-Matrix sowie Zellstudien, ein Prototyp in Einsatzumgebung als Voraussetzung für die



industrielle Fertigung vorliegen. Die volumetrische Energiedichte kann potentiell doppelt bis viermal so hohe Werte im Vergleich zu kommerziellen Li-Ionen-Batterien erreichen. Zudem ist ein Kostensenkungspotential von bis zu 20% bezogen auf den Preis pro kWh gegeben. Das Erreichen der Ziele soll durch begleitendes Technologiemanagement und Systemanalyse unterstützt werden.

Die Arbeiten wurden planmäßig im Januar 2020 aufgenommen, wobei das Vorläuferprojekt R2R-Battery eine ideale Katalysesituation bot. Projektpartner der AG Meyer sind die FROLYT Kondensatoren und Bauelemente GmbH, die ROVAK GmbH, das Fraunhofer-Institut für Organische Elektronik, Elektronenstrahl- und Plasmatechnik (FEP) sowie das Forschungsinstitut für Leder und Kunststoffbahnen (FILK).

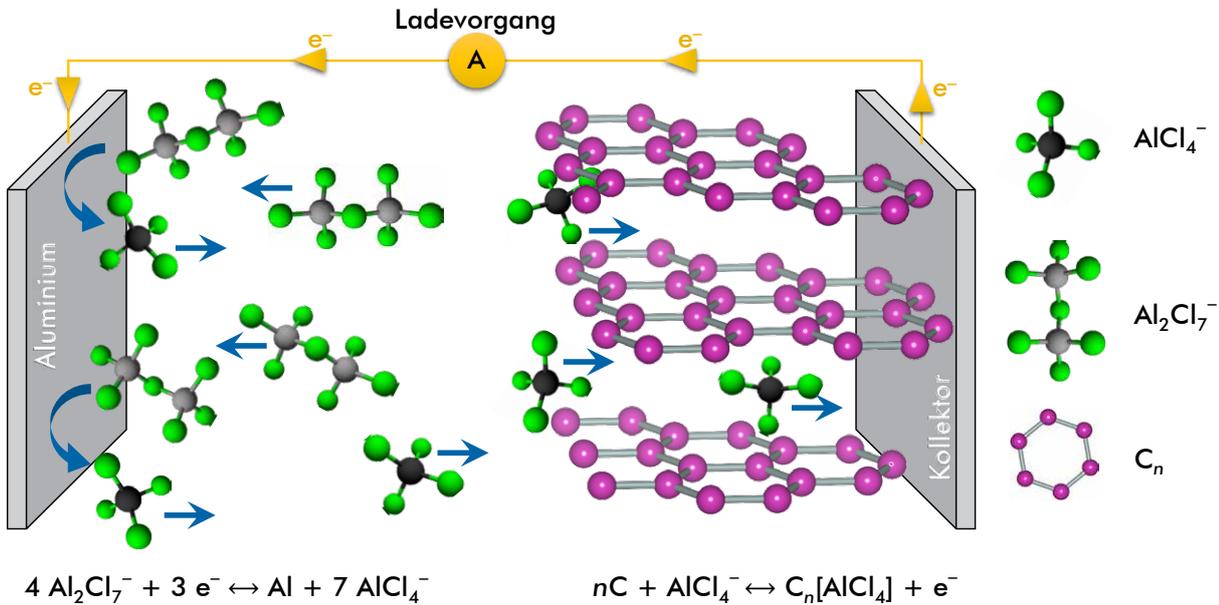


Abbildung 1: Schematische Darstellung des Ladevorgangs einer Tetrachloroaluminat-Graphit-Batterie mit nichtwässrigem Elektrolyten

Die untersuchten Elektrolytsysteme für Aluminium-Batterien basieren meist auf dem Aluminiumsalz Aluminiumchlorid (AlCl_3). Am IEP werden vier verschiedene Ansätze verfolgt: wasserfreie Flüssigelektrolyte, Polymere, Gele und Hydratsalz-Festelektrolyte. Als Basis für die wasserfreien Elektrolyte werden stark eutektische Lösungsmittel (engl. *deep eutectic solvents* – DES) und ionische Flüssigkeiten (engl. *ionic liquids* – IL) verwendet. Die Hydratsalz-Festelektrolyte sind Wasser-in-Salz-Ansätze, die mit einem sehr hohen Überschuss an Salz hergestellt werden. Die Elektrolyte sind nicht im Wasser gelöst, sondern nur damit benetzt, weshalb sie einen Festkörperelektrolyten darstellen.

Insbesondere die wasserfreien Flüssigelektrolyt-Systeme sind seit den letzten Jahren in der Literatur gut erforscht. Abbildung 1 zeigt beispielhaft den schematischen Aufbau einer elektrochemischen Zelle mit AlCl_3 -[EMIm]Cl (1-Ethyl-3-methylimidazoliumchlorid). Der dargestellte Anionenmechanismus bestimmt auch in vergleichbaren IL-Systemen, wie AlBr_3 -[EMIm]Br, $\text{Al}(\text{OTf})_3$ -[EMIm]OTf oder AlCl_3 -[Py]Cl die vorliegende Zellchemie. Für die Elektrolyte wird AlCl_3 im Überschuss zugegeben, damit sich Al_2Cl_7^- Ionen bilden können. Das höchste molare Verhältnis r_M eines AlCl_3 : [EMIm]Cl-Elektrolyten, der noch eine ionische Flüssigkeit bildet, ist ca. 2:1. Oberhalb

dieses Verhältnisses löst sich weiteres AlCl_3 nicht mehr in der Lösung. Beim Betrieb einer solchen Zelle wird die reversible Oxidation des Graphitnetzwerks, d. h. seine kathodische Funktionalität ausgenutzt, wohingegen hochreines Aluminium als Anode eingesetzt wird.

Neben den flüssigen und festen Elektrolyten existieren als Zwischenstufe noch die sogenannten Gelelektrolyte, welche in Kombination mit IL als Ionogele (IG) bezeichnet werden. Diese stellen einen gelartigen, höher viskosen Mischzustand dar (siehe Abbildung 2), wobei je nach verwendeten Gelbildnern unterschiedliche Optimierungen der Zelleigenschaften beobachtet werden konnten. So wurde in der Literatur bei Polyethylenoxid-(PEO)-basierten Gelelektrolyten eine Erweiterung des Spannungsfensters berichtet und bei Polyamid (PA) überzeugte die reduzierte Feuchtigkeitsempfindlichkeit. Eine Kombination von Et_3NHCl als zweite Salzkomponente und PA als Gelbildner ermöglichte im Projekt den Bau einer Aluminium-Chlor-Graphit-Vollzelle, die über 100 Zyklen mit einem Entladekapazitätsverlust von ca. 50% nebenreaktionsfrei betrieben werden konnte.

Die Herstellung von Elektroden auf Slurry-Basis ist eine der etablierten Methoden in der kommerziellen Batterieproduktion und wird nun auch am IEP zur Herstellung der für die Forschung an Aluminium-Ionen-Batterien

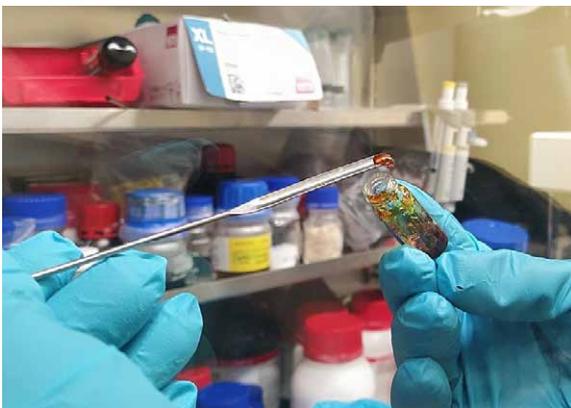


Abbildung 2: Bildung eines hochviskosen Gelelektrolyten aus der ionischen Flüssigkeit $\text{AlCl}_3:4\text{EYPL}$ mit $r_M = 1,3:1$ und als Gelbildner 5 Gew.-% Polyamidpulver

benötigten Kathoden verwendet (siehe Abbildung 3). Die Slurry besteht aus vier Komponenten: Aktivmaterial (z. B. Graphit), Polymerbinder (z. B. PMMA), Leitadditiv (z. B. *Carbon Black*, d. h. Ruß bzw. Nanopartikel aus Kohlenstoff) und Lösungsmittel (z. B. NMP), die homogen zusammengemischt werden. Die beteiligten Mengen einer Komponente können jederzeit geändert werden und gemäß den Anforderungen hin zu maximalen Kapazitäten optimiert werden.

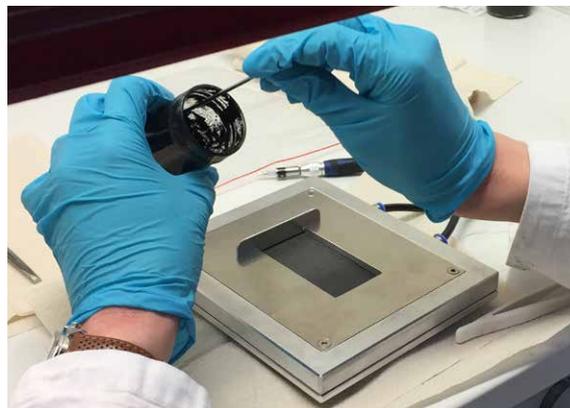
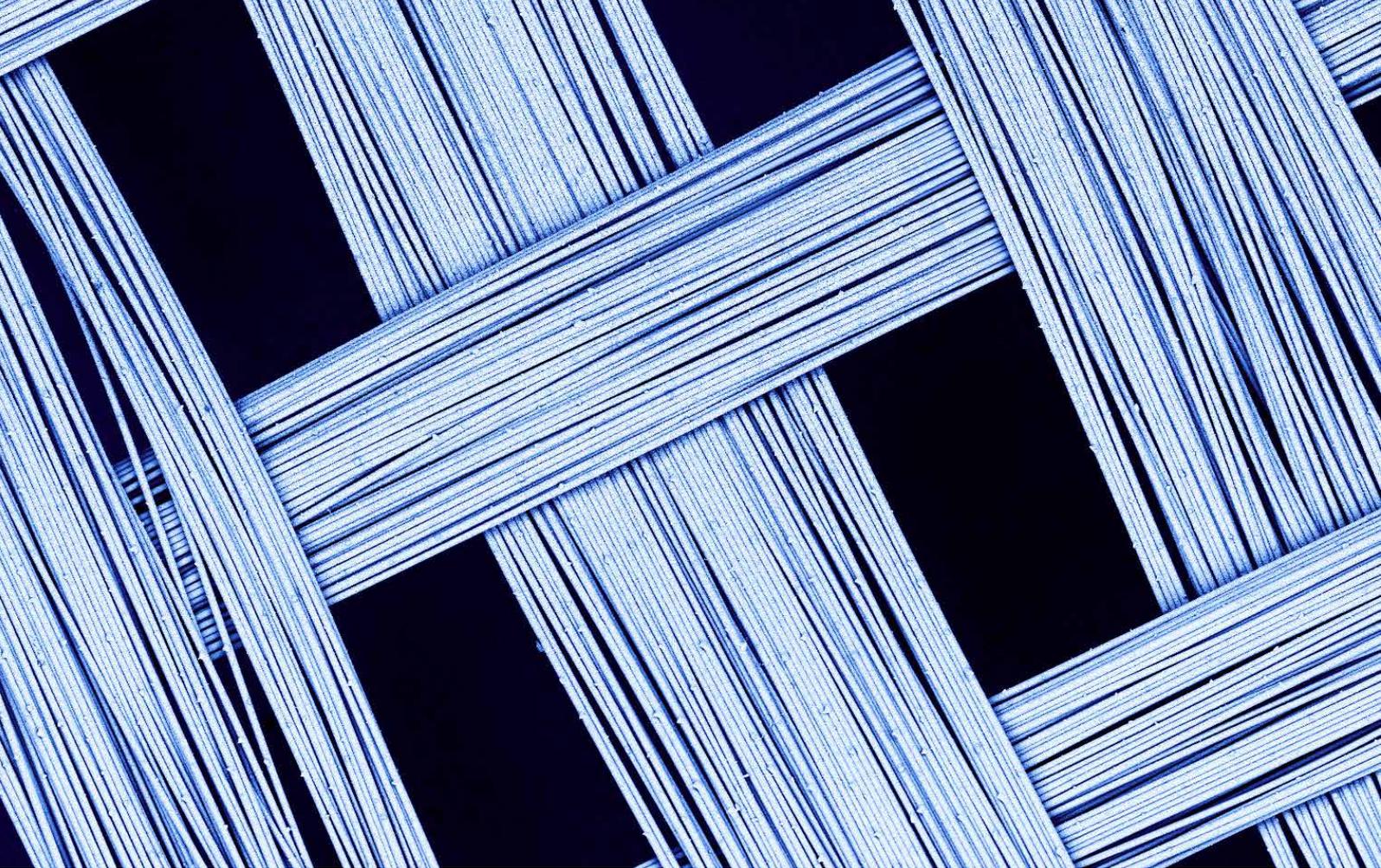


Abbildung 3: Aufrakeln einer Kathodenslurry im Beschichtungsrahmen, unter dem Abzug zum Absaugen des verdampfenden Lösungsmittels, als wichtigster Schritt der Kathodenherstellung

Wir danken dem Bundesministerium für Wirtschaft und Energie für die Übernahme der Finanzierung des Projektes (Förderkennzeichen: 03EI3014A).



Bundesministerium
für Wirtschaft
und Energie



FOLIENARTIGE, RESSOURCENEFFIZIENTE, GEWEBEBASIERTE STROMKOLLEKTOREN FÜR LITHIUM-IONEN-ZELLEN

Die Arbeitsgruppe Energiematerialien des Instituts für Experimentelle Physik arbeitet seit August 2020 gemeinsam mit dem Institut für Textilmaschinen und Textile Hochleistungswerkstofftechnik (ITM) der Technischen Universität Dresden und der elfolion GmbH – als Projektleiter – an der „Entwicklung von folienartigen, ressourceneffizienten, gewebebasierten Stromkollektoren für Elektroden für Lithium-Ionen-Zellen hoher Energie- und Leistungsdichte aus feinsten Glasmultifilamentgarnen und Metalldrähten“. Das Projekt LilonSK (ZF4751502JO9) wird durch das „Zentrale Innovationsprogramm Mittelstand“ finanziert.

Ziel des Konsortiums ist es, neuartige ressourceneffiziente Stromkollektoren für Lithium-Ionen-Zellen zu entwickeln, herzustellen, hochzuskalieren und zu verifizieren, die eine um 15% höhere Energie- und Leistungsdichte im Vergleich zu konventionellen Zellen ermöglichen und dabei 85% weniger Metall benötigen. Dazu sollen Drehergewebe auf Basis feinsten Multi- und Monofilamentgarne aus Glas, Kohlenstoff, Polymer und Metall entwickelt und deren Herstellbarkeit auf dafür

zu modifizierenden Webmaschinen verifiziert werden. In einem Rolle-zu-Rolle-Verfahren sollen Stromkollektorbänder hergestellt und in einem zweiten Schritt in einem neuartigen Vakuumbeschichtungsverfahren mit Kupfer und Aluminium beschichtet werden, um Ausgangskomponenten für Zellelektroden zu bilden. Diese Stromkollektoren ermöglichen eine dreidimensionale Kombination der elektrisch leitenden und der ionisch leitenden Materialkomponenten, was zu einer Metalleinsparung und verbesserter Anbindung des Elektrodenmaterials führt. Die elektrochemische Performance wird in Pouchzellen-Geometrie charakterisiert. Der Projektpartner ITM entwickelt die ultraleichten Drehergewebe aus ultrafeinen Glas- und Metallgarnen, während die elfolion GmbH die Stromkollektoren herstellt, die dann am IEP beschichtet, zu Knopf- und Pouchzellen zusammengefügt und elektrochemisch charakterisiert werden (siehe Abbildungen 1 und 2).

Der Stand des Projekts wurde am 23. Februar 2021 von Tilmann Leisegang auf dem 31. Seminar des



Abbildung 1: Pouchzelle mit gewebebasierten Elektroden zur Hochskalierung der mit Knopfzellen gewonnenen Ergebnisse

Arbeitskreis Elektrochemie in Sachsen sowie am 18. November 2021 von Mohammad Jafar Momeni auf dem 32. Seminar des Arbeitskreis Elektrochemie in Sachsen vorgestellt.

Eine Masterarbeit wurde im Rahmen des Projekts begonnen. In dieser soll Yen Ming Li verschiedene Gewebe miteinander vergleichen. Hierfür sind entsprechende Slurry-Rezepturen, der Beschichtungsvorgang, die Trocknung und die Assemblierung der Einzelkomponenten zu Knopfzellen zu erarbeiten.

ZIM ist ein Förderprogramm des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie mit dem Ziel, die Innovationsfähigkeit des Mittelstands zu stärken. ZIM fördert innovative Unternehmen mit Geschäftsbetrieb in Deutschland, die neue Produkte, Verfahren oder technische Dienstleistungen entwickeln oder bestehende deutlich verbessern wollen.

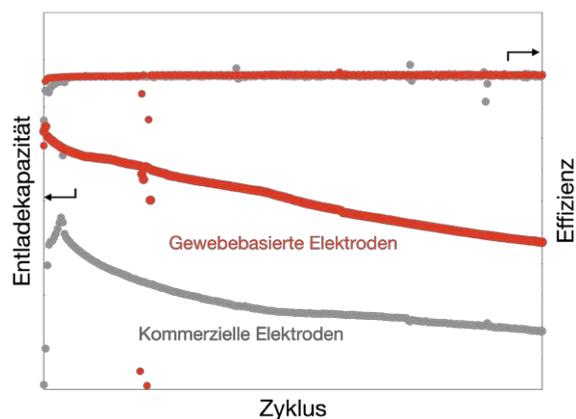


Abbildung 2: Vergleich der elektrochemischen Performance (Kapazität und Coulombeffizienz) von kommerziellen und gewebebasierten Elektroden. Letztere haben das Potential bei signifikanter Metalleinsparung gleichzeitig höhere spezifische Energien zu ermöglichen.



Bundesministerium
für Wirtschaft
und Energie



KONTROLLIERTE EINSTELLUNG DER ATOMSTRUKTUR DURCH AKUSTISCHE WELLEN UND ELEKTRISCHE FELDER

Das deutsch-russische Kooperationsprojekt AcoustREXS betrifft die Untersuchung des Einflusses von akustischen Wellen und elektrischen Feldern auf strukturelle Charakteristiken, wie z.B. kleinste atomare Verrückungen und Vakanzmigration in polaren Materialsystemen. Hierdurch werden die physikalischen Eigenschaften gezielt durch die äußeren Einflüsse kontrolliert bzw. geschaltet oder neue Materialeigenschaften erzeugt. Dies geschieht insbesondere durch stehende akustische Druckwellenfelder oder elektrische Potentialgradienten, die die Materialrandbedingungen lokal variieren und Kristallsymmetrien brechen. Die AG Resonante Röntgenmethoden und Kristallmodellierung führt gemeinsam mit den russischen Partnern der Lomonossow-Universität Moskau (MSU) resonante Beugungsexperimente am Synchrotron durch und unterstützt im Bereich der theoretischen Modellierung mittels DFT die Auswertung. Die Gruppe um Frau Prof. Dr. Elena Ovchinnikova bringt zudem das Knowhow für die Einkopplung akustischer Wellen in die Materialsysteme mit ein. In dem Projekt wird Herr Dr. Matthias Zschornak bei

AcoustREXS

den Modellierungen von Doktorand Christian Ludt und bei den Experimenten durch Doktorandin Tina Weigel unterstützt.

Im Jahr 2021 konnten weitere Messzeiten am DESY in Hamburg durchgeführt werden. Dabei gelang es dem internationalen Team im stationären Druckwellenfeld der stehenden akustischen Anregung in einem Experiment am optoakustischen Material TeO_2 an der Beamline P23 *in situ* und zeitaufgelöst die beabsichtigte Symmetriebrechung nachzuweisen. Durch Kopplung der Phase der akustischen Welle mit dem zeitlichen Integrationsfenster des Detektors (siehe Abbildung 1) konnten RXD-Spektren für die verschiedenen Druckzustände im oszillierenden Probenbereich getrennt erfasst werden.

Neben den erfolgreichen Messzeiten sind in diesem Jahr die ersten Veröffentlichungen im Rahmen

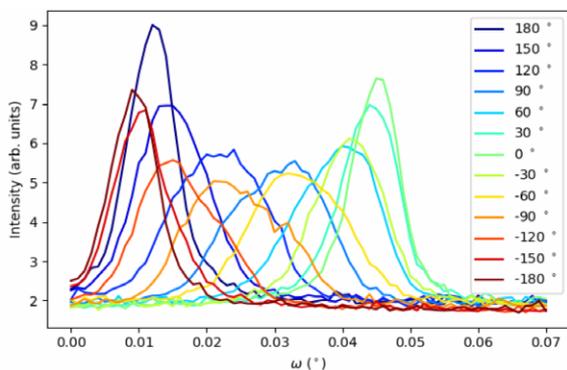


Abbildung 1: Die Winkelverschiebung des 104-Reflexes ist ein direkter Nachweis für die zeitlich oszillierenden Druckphasen im piezoelektrischen Material TeO_2 in Korrelation mit dem stehenden akustischen Wellenfeld.

des Projekts entstanden. Unter dem Titel „Interactions of Ruddlesden-Popper Phases and Migration-Induced Field-Stabilized Polar Phase in Strontium Titanate“ konnte gezeigt werden, wie interne Spannung, in diesem Fall durch Ruddlesden-Popper-Phasen induziert (siehe Abbildung 2), Einfluss auf benachbarte Zellen nimmt und lokale Änderungen in Atomposition und Gitterparametern hervorruft, die eine elektrische Polarisierung im externen elektrischen Feld begünstigen. Des Weiteren wurde die elektronische Struktur der Ruddlesden-Popper-Phasen genauer unter die Lupe genommen. In einem verfassten Fachartikel werden Bandstrukturen und effektive Massen präsentiert und damit eine Lücke in der bisherigen Literatur geschlossen.

Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die Übernahme der Finanzierung des Projektes (Förderkennzeichen: DFG 409743569, ZS 120/1-1, 2019-22).

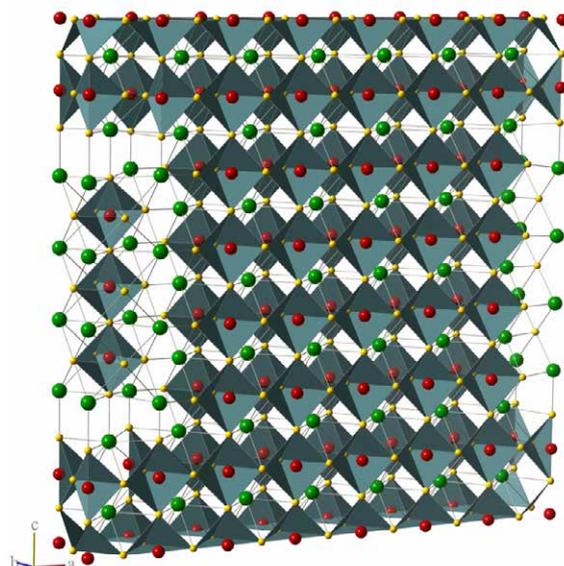
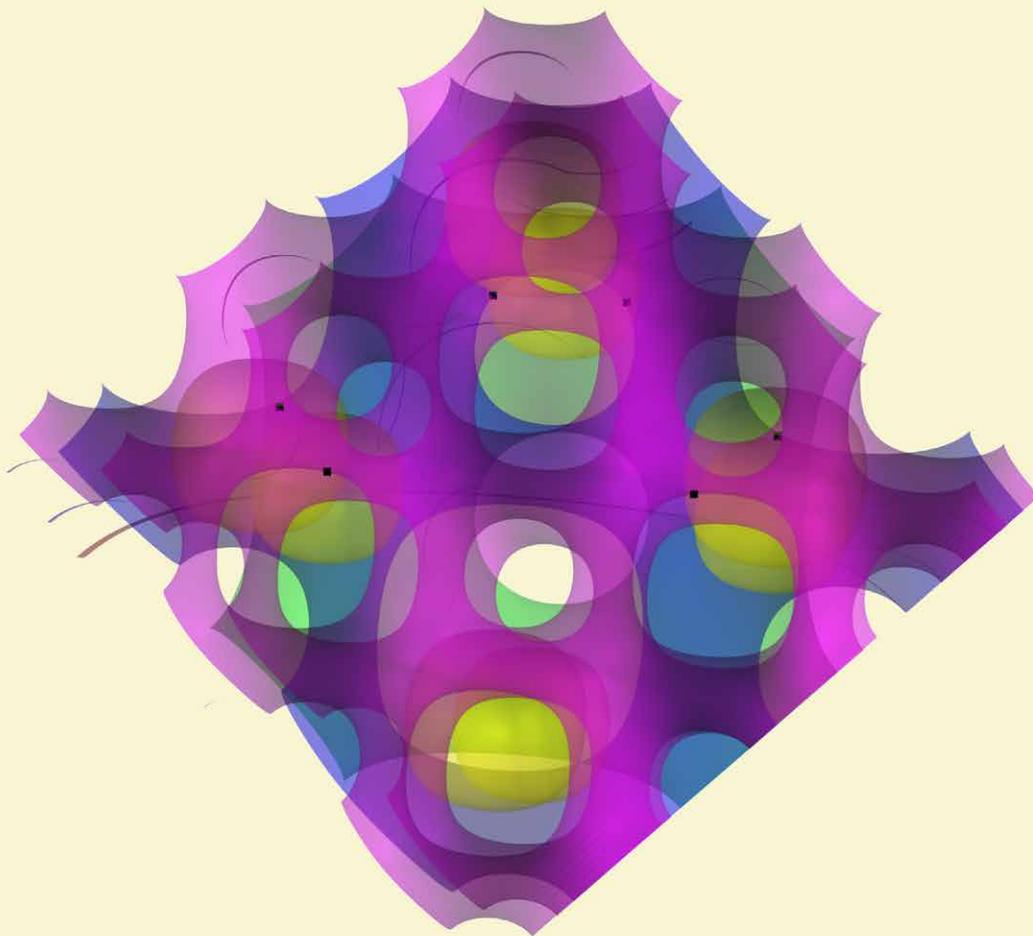


Abbildung 2: Struktur der Ruddlesden-Popper-Phase $n=3$ eingebettet in SrTiO_3 .



STRUKTURLÖSUNG IM PARAMETERRAUM

Die in diesem Projekt von der AG Resonante Röntgenmethoden und Kristallmodellierung zusammen mit Emeritus Prof. Karl Fischer (Saarbrücken) verfolgte Methodik des *Parameter Space Concept* (PSC) zur Kristallstrukturbestimmung wurde während der letzten 15 Jahre durch K. Fischer, A. Kirfel und H. Zimmermann theoretisch ausgearbeitet, bis hin zur Anwendung formuliert und bereits an zahlreichen Beispielen für teilweise herausfordernde Probleme der Strukturlösung getestet.

Allgemein ist die Kristallstrukturbestimmung aus Beugungsdaten in vielen Bereichen der Festkörperforschung, wie z. B. der Physik, der Chemie, der Mineralogie und den Materialwissenschaften bis hin zur Biologie und Pharmazie, eine fundamentale Basis um Eigenschaften von Materialien sowie deren Wirkung und Funktionalität zum einen verstehen und zum anderen gezielt modifizieren zu können. Die entsprechenden Datenbanken wachsen jährlich um mehrere zehntausend Strukturen. Die gängige Methodik zur Bestimmung von Kristallstrukturen beruht dabei auf Fourier-Transformationen der streuenden Dichte (z. B. Elektronendichte für die Röntgendiffraktion, Kerndichte für die Neutronendiffraktion). Hierbei ist die experimentelle Datenbasis im Allgemeinen unvollständig, da nur die quadratischen Amplituden der

**PARAMETER
SPACE
CONCEPT**

Fourier-Koeffizienten, also der Strukturfaktoren über die Reflexintensitäten, nicht aber ohne weiteres ihre Phasen erfassbar sind (Phasenproblem der Kristallographie). Die experimentelle Phasenbestimmung, z. B. über resonante Streumethoden, ist zumeist sowohl aufwendiger als auch anspruchsvoller. Es gibt etablierte Methoden, um die Phasen mit zusätzlichem Wissen über die Eigenschaften der zu rekonstruierenden Dichte (Positivität, Spitzigkeit) zu gewinnen und die Struktur zu lösen, u. a. die so genannten direkten Methoden, die Patterson-Methode und die isomorphe Substitution.

Während aktuelle Methoden zur Bestimmung der atomistischen Kristallstruktur umfangreiche Informationen über die vom Kristall gebeugten Röntgenwellen, die sogenannten Reflexe, benötigen, hat das neue Konzept einen entscheidenden Vorteil: Es müssen weniger Reflexe im Kristall gemessen werden, um ein qualitativ hochwertigeres Modell zu berechnen. Dank des neuen Ansatzes

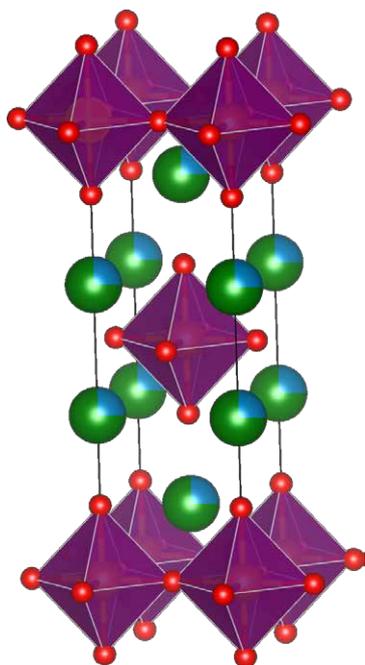


Abbildung 1: Kristallstruktur von $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ mit La/Sr-Split-Position (O: rot, Mn: orange, Sr: grün, La: blau).

erhält man unter den Randbedingungen gemessener Reflexintensitäten Hyperflächen, sogenannte Isoflächen, im hochdimensionalen Parameterraum, die sich an bestimmten Punkten schneiden. Diese Schnittpunkte legen die Position jedes Atoms der Elementarzelle fest. Ein weiterer Vorteil ist, dass dafür keine inverse Fouriertransformation benötigt wird. Nachteil der Methode: Für die Lösung hochdimensionaler Parameterproblematiken sind hohe Rechenkapazitäten erforderlich, was die Zahl der strukturellen Freiheitsgrade derzeit begrenzt.

Im Projekt werden verschiedene Ansätze verfolgt, um die Isoflächen im Parameterraum zu beschreiben, die notwendigen Schnitte durchzuführen und das Lösungsvolumen durch Messung ausgewählter Reflexintensitäten optimal zu begrenzen. Ein speichersparender Ansatz ist die lineare Parametrisierung der Isoflächen (siehe Abbildung 2), ein speicherintensiver die Gitter-basierte Berechnung der Flächen.

In einem ersten Beispiel wurde die Auflösungsgrenze der PSC-Methodik in Abhängigkeit des experimentellen Fehlers anhand einer potentiellen La/Sr-Split-Position in $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ (blau/grün in Abbildung 1) untersucht und eine Genauigkeit der Strukturbestimmung von wenigen Pikometern auch bei moderaten Intensitätsfehlern nachgewiesen. Die Simulation im Parameterraum für dieses zweidimensionale Problem ist bis zur fünften Streuordnung in Abbildung 3 dargestellt.

Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die Übernahme der Finanzierung des Projektes (Förderkennzeichen: DFG 442646446, ZS 120/5-1, 2021-24).

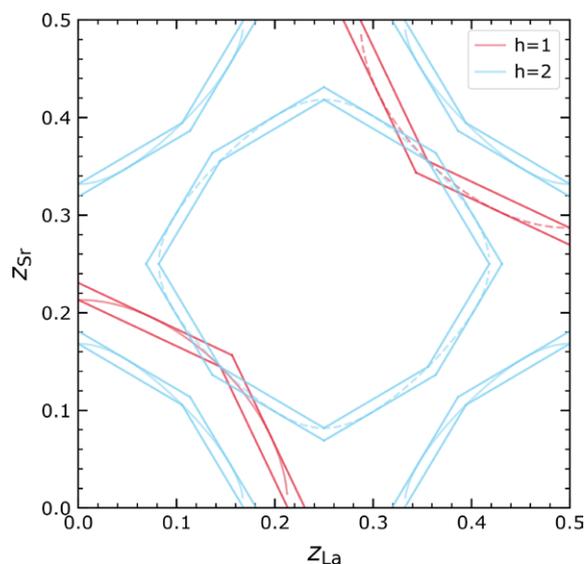


Abbildung 2: Innere und äußere lineare Approximation der Isoflächen für die Reflexordnungen 1 und 2. Die Schnittflächen beider Zwangsbedingungen definieren die möglichen Lösungen der La/Sr-Split-Position in $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$.

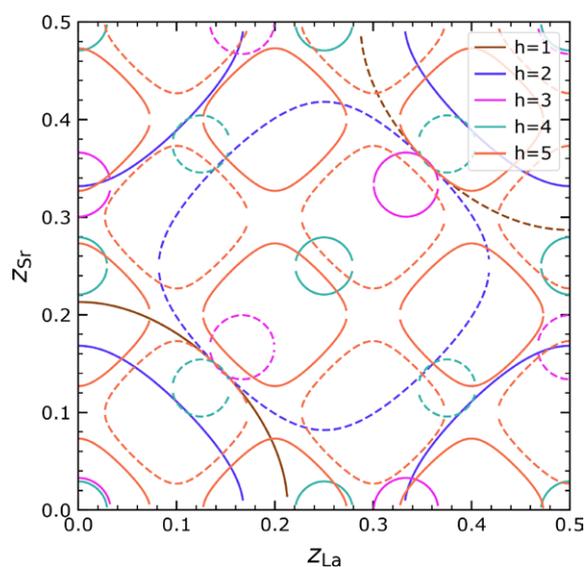


Abbildung 3: Isoflächen von La-Sr-Atomkoordinaten im idealisierten permutationssymmetrischen $P2$ -Raum für die Reflexordnungen $l = 1 \dots 5$.



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

Ziel von R2R-Battery ist es, ein Post-Lithium-Energiespeichersystem auf Basis hochvalenter Ionen in Kooperation mit lokalen Industrie- und Forschungspartnern zu entwickeln und maßgeschneiderte Lösungen für deren potenzielle großtechnische Produktion zu erarbeiten. In dem vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderten Projekt arbeiten insgesamt vier Verbundpartner (Fraunhofer FEP Dresden, KSI Meinsberg, Vowalon GmbH Treuen) unter Leitung der TU Bergakademie Freiberg (Koordinator: Prof. Dirk C. Meyer, Projektmanager: Dr. Matthias Zschornak) an der Umsetzung dieser neuen Post-Lithium-Ansätze für die elektrochemische Energiespeicherung. Weitere Partner sind das Forschungsinstitut für Leder- und Kunststoffbahnen (FILK) Freiberg, die Froylt Kondensatoren und Bauelemente GmbH Freiberg, die Rovak GmbH, die Gesellschaft zur Förderung von Medizin-, Bio- und Umwelttechnologien Radeberg und die Cinector GmbH Mittweida.

Die weltweite Nachfrage nach Energiespeichern steigt mit dem Ausbau erneuerbarer Energien und der wachsenden Anzahl an Elektrofahrzeugen, mobilen Elektrogeräten und stationären Energiespeichern. Überwiegend



große japanische (z. B. Panasonic) oder koreanische (z. B. LG Chem) Elektronikunternehmen treiben die Lithium-Ionen-Technologie voran, seit einigen Jahren intensiv auch chinesische Unternehmen (z. B. CATL), was die exponentiell steigende Zahl von Patenten ebenso wiedergibt. 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 R2R-Battery 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-

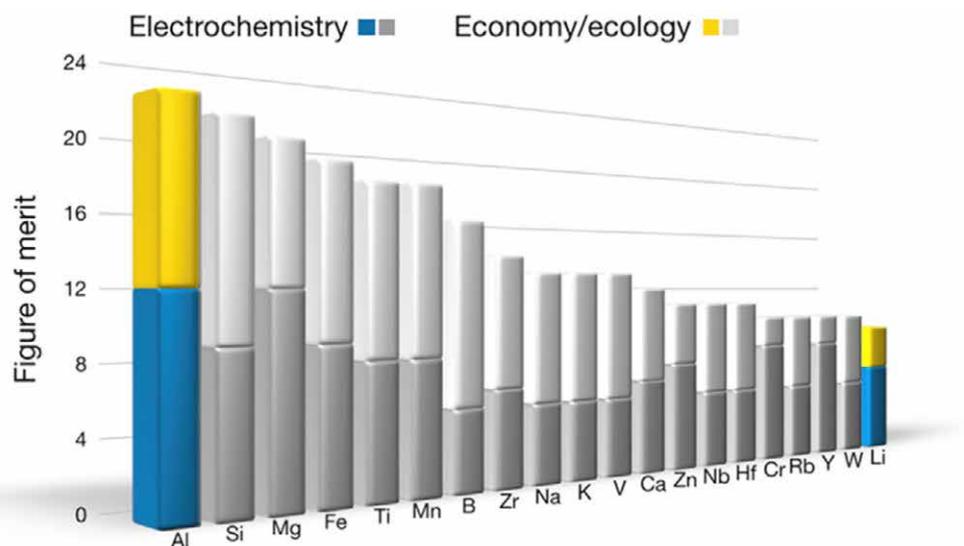


Abbildung 1: Ergebnis der Bewertung der Elemente bis Ordnungszahl 94 nach elektrochemischen (dunkle Balken) sowie ökonomischen und ökologischen Parametern (helle Balken). Aluminium steht als negative Elektrode für eine Aluminium-Ionen-Batterie an erster Stelle und ist vergleichend mit Lithium farblich hervorgehoben.

Mega factories deutlich auf die Rohstoffnachfrage für wichtige Batterierohstoffe für die Energiespeicherung auswirken. Aktuell findet ein globales Wettrennen zu Batterieprodukten und -technologien statt. So stieg die Anzahl von Lithium-Ionen-Batterie-Mega factories 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 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 Rohstoffnachschieb der meisten dieser Stoffe bereits abgesichert. Dies veranschaulicht, dass die Umsetzung der Energiewende, die elektrochemische Energiespeicher nicht nur für die Elektromobilität, sondern auch für stationäre Anwendungen vorsieht, allein mit der Lithium-Ionen-Technologie kaum möglich sein wird. Deshalb werden zusätzliche alternative Materialsysteme für eine Technologie-Diversifizierung benötigt, auch um Deutschland im Bereich der Energiespeicher wettbewerbsfähig zu halten.

Doch welche Materialien sind dafür sinnvoll? Die Auswahl und Bewertung geeigneter Materialien wurden zurückliegend mit einem in Freiberg entwickelten Bewertungsalgorithmus, der auf einem ausgedehnten

Parameterfeld basiert, durchgeführt. Die Bewertungskriterien schließen neben elektrochemischen Parametern, Ressourcenverfügbarkeit, Umweltverträglichkeit, Recycling, Materialkosten und Betriebssicherheit ein. Im Ergebnis erscheint das Konzept einer wiederaufladbaren Hochvalente-Ionen-Festkörperbatterie auf Aluminium-Basis als aussichtsreich (siehe Abbildung 1). 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

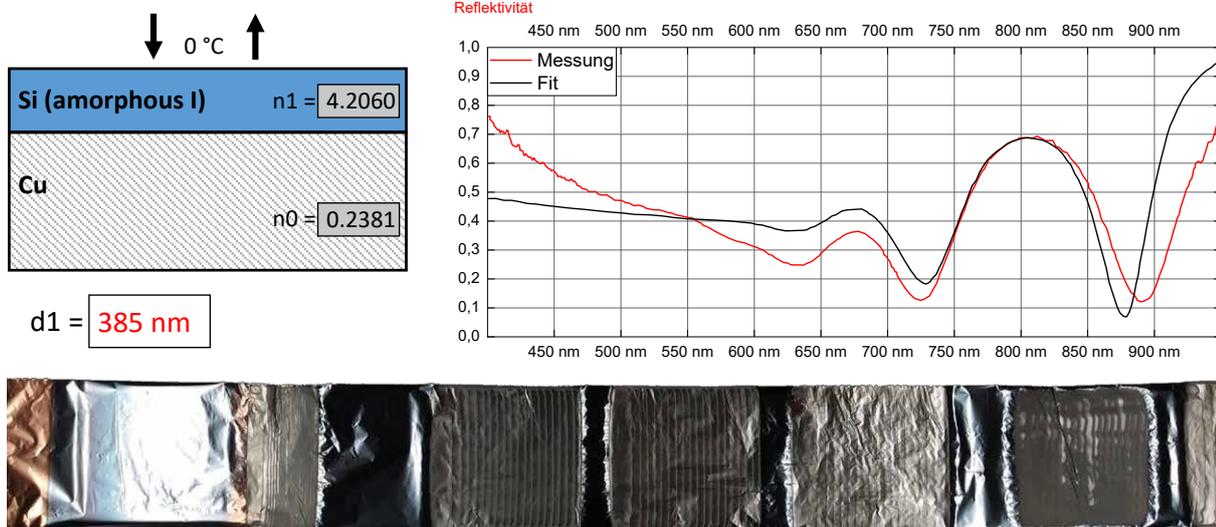


Abbildung 2: Ermittlung der Schichtdicke einer Siliziumschicht (385 nm) auf Kupferfolie. Die simulierte Reflexionskurve (schwarz) wird durch Variation der angenommenen Schichtdicke an die gemessene Kurve (rot) angepasst. Anschließend wird die Folie (unten) mehrfach bei unterschiedlichen Blitzfrequenzen Wärme-behandelt.

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 BMBF-Verbundvorhaben „Maßgeschneiderte Materialsysteme und Technologien für die Rolle-zu-Rolle-Fertigung elektrochemischer Energiespeicher auf flexiblen Trägern – Hochvalente Ionen für die Energiewende (R2R-Battery)“ an.

Erweiterungen und Ergebnisse der Beschichtungsanlagen

Im Verlauf des Jahres 2021 wurden am ZeHS die kombinierte Sputter-Blitz-Anlage und die R2R-Bandanlage von der Firma ROVAK technisch erweitert.

Das FLA-Modul (*Flash Lamp Annealing*) der Sputter-Blitz-Anlage ist um eine Pulsmodulation ergänzt worden. Mithilfe der Pulsmodulation kann der scharfe FLA-Hauptpuls (bis 2,7 ms lang) um einen zeitlich langgezogenen Vorpuls (bis 8,3 ms) ergänzt werden. Auf diese Weise lässt sich deutlich mehr Energie in das Probenmaterial einbringen, da die Probe bereits durch den Vorpuls stark erwärmt wird. Der Hauptpuls sorgt anschließend für die

gewünschte strukturelle Modifikation der Schicht durch kurzzeitiges Erreichen der Maximaltemperatur.

Die Prozessführung und Module bei der R2R-Anlage wurden sowohl optimiert als auch teilweise erweitert. Ergänzt wurden zusätzliche Messstationen für die Schichtdicke. Nach erfolgter Abscheidung einer Schicht kann deren Dicke nun direkt innerhalb der R2R-Anlage ermittelt werden. Für dünne Schichten (bis ca. 500 nm) wird hierbei das Prinzip der Dünnschicht-Interferenz genutzt und mithilfe eines Reflektometers gemessen und ausgewertet (siehe Abbildung 2). Für dickere Schichten steht ein konfokal-chromatisches Sensorsystem zur Verfügung.

Weiterhin wurde das Modul für die Vorbehandlung der Folie mithilfe eines Argon-Wasserstoff-Mikrowellenplasmas in Betrieb genommen. Mithilfe dieses Plasmas (siehe Abbildung 3) wird die Folie innerhalb der R2R-Anlage von dünnen Oxidschichten und anderen Verunreinigungen befreit. Des Weiteren wird adsorbierte Feuchtigkeit entfernt. Auf diese Weise erhöht sich die Haftung der im Anschluss aufgetragenen Beschichtung. Bisher erfolgte die Vorbehandlung der Folie durch Blitzlampentempern bei geringen Energien mithilfe des FLA-Moduls.

Im Berichtszeitraum wurden vor allem Siliziumschichten auf Kupferfolie (als Stromkollektor) abgeschieden und anschließend Blitzlampen-getempert (siehe Abbildung 2). Dabei kommt es zur Diffusion der Kupferatome in die

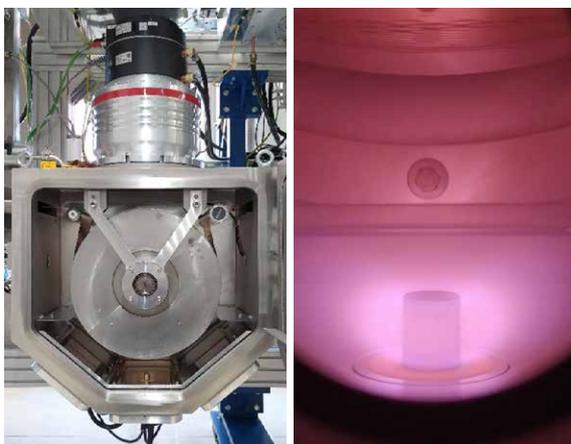


Abbildung 3: Links: Modul Mikrowellenreinigung, Rechts: Nahaufnahme des gezündeten Argon-Wasserstoff-Plasmas. Im oberen Bereich ist die Kupferfolie zu sehen.

Siliziumschicht und es entstehen intermetallische Phasen. Interessant sind hierbei verschiedene Kupfersilicide (Cu_3Si , Cu_5Si , Cu_7Si), welche die Zyklenstabilität der Anoden in Lithium-Zellen erhöhen sollen.

Ungeblitzte Siliziumanoden mit einer Schichtdicke von $2\ \mu\text{m}$ weisen bereits eine ähnlich hohe Kapazität wie Kohlenstoffreferenzanoden auf. Die Siliziumanoden degradieren jedoch deutlich schneller.

In Aluminium-Batterien hingegen eignet sich Kupferfolie nicht als Stromkollektor. Reines Kupfer ist unter dem Einfluss von ionischen Flüssigkeiten, welche als Elektrolyt in Al-Batterien fungieren, nicht stabil. Als Ersatzstromkollektor wurde daher leitfähiges Polyimid (*Conductive Polyimide* – CPI) genutzt. Mit Silizium beschichtetes CPI wurde testweise in Li-Zellen als Anoden verbaut.

In Abbildung 4 ist die Zyklenstabilität verschiedener Lithium-Knopfzellen dargestellt. Eine Referenzzelle mit Graphitanode besitzt eine maximale Kapazität von etwa $1,95\ \text{mAh}$ und degradiert im Verlauf von 50 Zyklen nur geringfügig. Im Vergleich dazu erreicht eine Li-Zelle mit

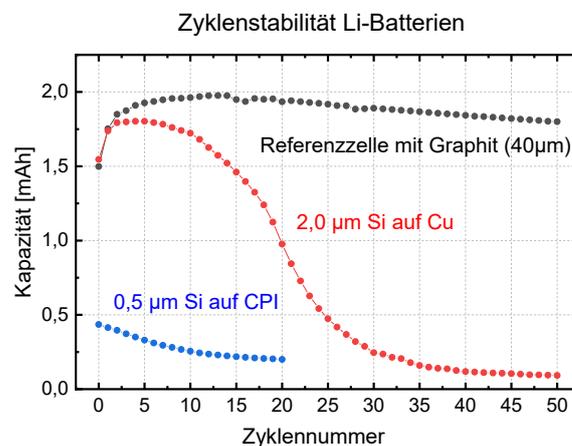


Abbildung 4: Vergleich der Zyklenstabilität von Li-Zellen mit verschiedenen Anoden.

Siliziumanode (Schichtdicke $2\ \mu\text{m}$) eine Kapazität von etwa $1,8\ \text{mAh}$. Nach zehn Zyklen setzt jedoch bereits eine starke Degradation der Anode ein, sodass deren Kapazität schnell fällt. Bei einer Silizium-Anode auf CPI ist ein ähnliches Verhalten zu beobachten. Aufgrund der geringen Schichtdicke des Siliciums von $0,5\ \mu\text{m}$ ist deren Kapazität jedoch viel niedriger.

In näherer Zukunft soll das Energiemonitoring der Anlage auch für das Energiemanagement genutzt werden, um den Verbrauch der stromintensiven Prozesse zu analysieren und zu optimieren.

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

LEHRE



DAS PHYSIKALISCHE GRUNDPRAKTIKUM

Das Physikalische Praktikum ist Pflichtbestandteil der Module „Physik für Naturwissenschaftler II“, „Grundlagen der Physik für Engineering“ und „Physik für Ingenieure“, die zusammen von einem Großteil der Studierenden an der TU Bergakademie Freiberg im ersten Studienjahr absolviert werden. Die naturwissenschaftlichen Studiengänge durchlaufen das Physikalische Praktikum im Sommersemester mit etwa 100 Teilnehmern mit einem Umfang von vier Semesterwochenstunden. Im Wintersemester belegen rund 120 Studienanfänger der ingenieurwissenschaftlichen Studienrichtungen das Praktikum im Umfang von zwei SWS.

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

Nach zwei Online-Semestern bedingt durch die Corona-Pandemie, konnte im Sommersemester 2021 ein hybrides Praktikum stattfinden. Dabei wurde den

Studierenden angeboten drei der zu absolvierenden Versuche in Präsenz durchzuführen. Im Gegensatz zu zwei bis drei Studenten pro Versuchsplatz, führten sie nun ihre Versuche einzeln durch, damit der Abstand zwischen den Studenten gewahrt werden konnte. Das Wintersemester 2021/22 fand erstmalig wieder komplett in Präsenz statt, wobei auch hier jedem Studenten ein Einzelversuchsplatz zur Verfügung stand. Die Studierenden profitierten auch 2021 von den während der Online-Semester erstellten Video-Tutorials.

Im Jahr 2021 ist es der TU Bergakademie Freiberg gelungen, bei der Stiftung „Innovation in der Hochschullehre“ Fördermittel für das Projekt „Entwicklung innovativer Lehr- und Lernumgebungen an der Technischen Universität Bergakademie Freiberg im Rahmen der Virtuellen Fakultät“ (VirtFa@TUBAF) einzuwerben. Das IEP ist hier Projektpartner im Arbeitspunkt „Praxislehre digital“ und hat in diesem Rahmen für 2,5 Jahre Personalmittel für eine halbe Stelle beginnend ab Januar 2022 erhalten. In dem geförderten Teil-Projekt sollen u. a. digitale Elemente im Präsenz-Physik-Praktikum und hybride Formen für Vorbereitung und Durchführung etabliert werden. Den Studierenden soll damit eine bessere Strukturierung der Selbstlernphasen ermöglicht und ein diagnostisches

Assessment zur Seite gestellt werden. Gleichzeitig wird die Medienkompetenz der Studierenden gestärkt.

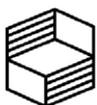
Hierfür wurde ein detailliertes Konzept für die in 2022 anstehenden Veränderungen erstellt. Zukünftig wird es einen überarbeiteten OPAL-Kurs auf unserer Lernplattform geben, in dem alle zur Praktikumsvorbereitung benötigten Materialien zur Verfügung gestellt werden. Die Antestate werden nach einer inhaltlichen Überarbeitung und Ergänzungen von der Papierform in Online-Tests und Selbsttests überführt, die über den OPAL-Kurs zugänglich sind. Die einzelnen Versuche sollen durch ergänzende Lehrvideos vorgestellt werden. Dabei sollen natürlich viele der in der Corona-Zeit erstellten digitalen Inhalte weiterverwendet werden.

Damit die nötige Hardware fit für die angestrebten Digitalisierungs-Komponenten ist, wurden mit Hilfe von Fördermitteln des Sächsischen Staatsministeriums für Wissenschaft, Kultur und Tourismus 14 neue PCs für das Praktikum beschafft. Die zugehörigen Monitore wurden über den Fakultätsfonds für Lehre finanziert. Ferner hat uns der Fakultätsfonds die Ersatzanschaffung von zwei Fadenstrahlröhren ermöglicht. Wir danken allen Geldgebern für die Unterstützung.

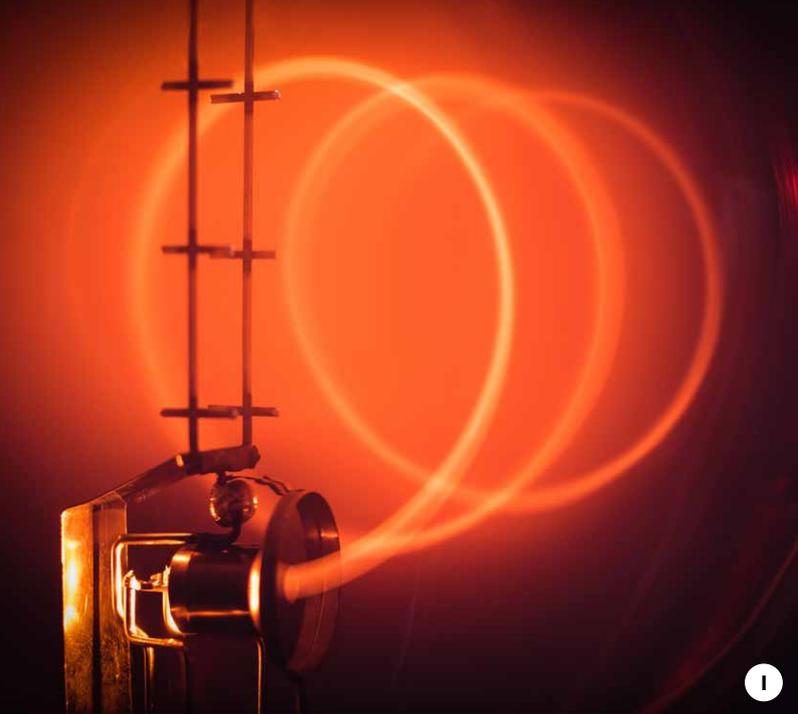
Das Praktikum zeichnet sich insgesamt durch eine moderne Geräteausstattung aus, die auch Schülern zum Kennenlernen der Uni zur Verfügung steht. Das Praktikumsteam betreut spezielle Experimente für die „Schüleruniversität“ und für das Schülerlabor „Science meets School“. Für einen Besuch des Herder-Gymnasiums in Pirna, mit dem eine langjährige Partnerschaft besteht, waren 2021 die Bedingungen noch nicht gegeben. Wir hoffen jedoch, dass im Wintersemester 2022/23 der Besuch des Praktikums wieder möglich sein wird.

Bilder auf der rechten Seite:

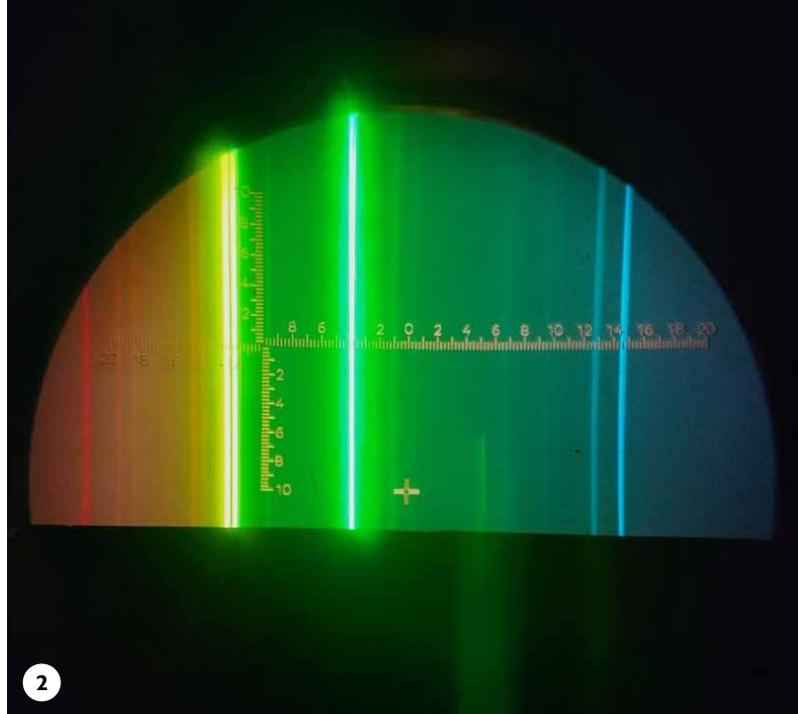
- 1 Elektronenstrahl in der Vakuumröhre des Versuchs A4
- 2 Optisches Spektrum einer Hg-Lampe im Versuch O4/5
- 3 Versuchsplatz A4 – spezifische Ladung des Elektrons
- 4 Versuchsplatz W2 – Stirlingmotor
- 5 Versuchsplatz O4/5 – Lichtbrechung/Lichtbeugung



Stiftung
Innovation in der
Hochschullehre



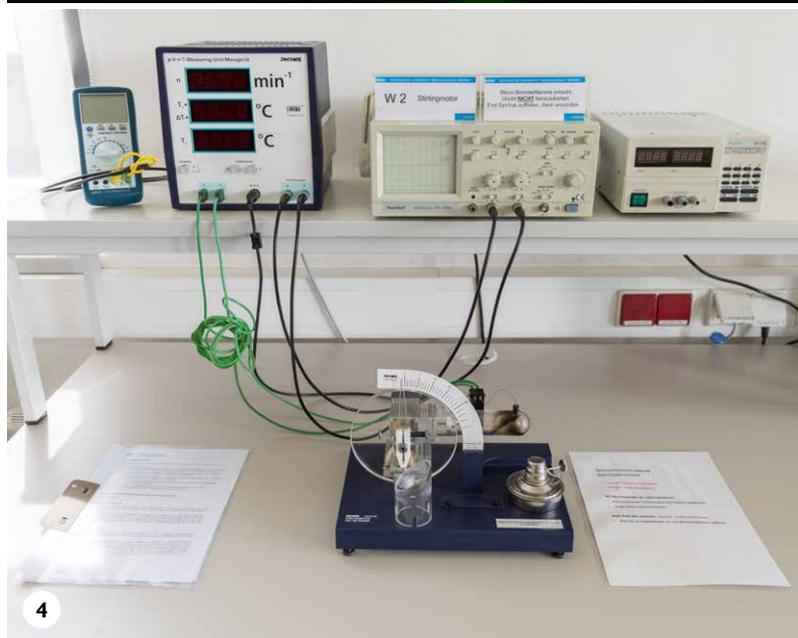
1



2



3



4



5



EXPERTISE IN DER ONLINE-LEHRE IST GEFRAGT

Das Jahr 2021 war von Corona-Wellen geprägt und brachte eine entsprechende wellenartige Nachfrage nach Online-Formaten. Die Expertise des IEP auf dem Gebiet der Online-Lehre – von der bereits letztes Jahr ausführlich berichtet worden ist – wurde sowohl universitäts- als auch sachsenweit mehrmals angefragt.

Universitätsintern machten wir einmal als *Best-Practise*-Beispiel beim *Digital Workspace* mit. Da ging es um die vielfältigen asynchronen Online-Angebote für die Grundlagenphysikkurse, die sich an die unterschiedlichen Lerntypen (visuell, spielerisch, analytisch usw.) richten und den Lernprozess je nach Lernzieltaxonomie vertiefen. Wir erhielten eine Einladung der „Jungen Kristallographen“, in deren Pandemieblog von unseren Bemühungen für die Lehre zu berichten. Dabei entstand der folgende Beitrag: <https://dgk-home.de/oyp-digitalisation-of-physics-course-and-its-examination/>. Im späteren Verlauf des Jahres gewann das Thema Online-Prüfen wieder mehr an Relevanz, so dass wir mit einem e-Klausur-Erfahrungsbericht anderen Hochschullehrern der TU Bergakademie Freiberg in einem *e-teach@Talk* und einer *Round-Table* „Digitale Prüfungen“ zur Seite standen. Das

Thema, wie man digitale Physikklausuren für große Teilnehmerzahlen (ca. 150) schummelsicher gestalten kann, stieß auch in anderen Unis auf großes Interesse. So berichteten wir für ein sächsisches Publikum auf einem von der TU Chemnitz organisierten *Digital Workspace* „Werkstatt | Schriftliches Online-Prüfen“. Nicht zuletzt teilten wir unsere Erfahrungen mit einem hybriden Ansatz für den Vorkurs Physik mit anderen Akteuren der Einführungswochen, um zu einem inklusiven und möglichst für alle sicheren Einstieg in das Unileben beizutragen. Dabei profitierte das IEP von dem durch Dr. Mateo de Vivanco 2020 erbrachten Hochschuldidaktikzertifikat des Hochschuldidaktischen Zentrums Sachsen sowie der begleitenden Mentoringenerfahrung durch Dr. Claudia Funke.

Eine zentrale Veranstaltung im Transferkontext war das 17. Netzwerktreffen der Arbeitsgruppe Mathematik/Physik/e-Learning, welches am 14.09.2021 an der Hochschule Mittweida stattfand (<https://www.hs-mittweida.de/news/aktuell/7131/>). Dort wurde eine Podiumsdiskussion zum Thema „Digitale Lehre nach(?) Corona – lesson learned oder zurück auf Start?“ mit Gästen aus der sächsischen Hochschullandschaft (inkl. Claudia Funke vom IEP)

veranstaltet. Neben einem Austausch über die ersten Corona-Lehrmaßnahmen, die Treffer und Fehlschläge bei der Umstellung auf digitale Lehre, digitale Prüfungen und die Studentensicht auf das digitale Studium, ging es um die Frage: „Wie viel digitale Lehre bleibt nach Corona?“.

Die Podiumsteilnehmer waren der Meinung, dass asynchrone Angebote eine Bereicherung der Lehre darstellen. Insbesondere die Möglichkeit, sich wiederholt mit Vorlesungsaufzeichnungen oder Online-Tests zu beschäftigen, wurde hervorgehoben. Aber die Präsenzlehre ermöglicht den Aufbau einer Lehrer-Student-Bindung, wie sie übers Internet nicht möglich ist, weil z. B. stille Studenten im digitalen Raum abtauchen. Es herrschte zudem Einigkeit über den Nutzen von Online-Prüfungen in der Coronazeit. Bei der Frage, ob die Prüfungen auch nach Corona weiterhin digital stattfinden sollen, waren sich alle Teilnehmer einig: Nein. Der Technik- sowie Personal-

aufwand für große Prüfungen wäre zu groß. Für mündliche Prüfungen mit wenigen Prüflingen wäre dies jedoch auf jeden Fall eine Alternative, da sich für keine der Parteien ein Nachteil ergäbe.

Ein kleiner Teil unseres Engagements in der digitalen Lehre kann auch auf der Plattform „Open Pattern Tool for Higher Education Research and Practice“ nachgelesen werden:

- Forenarbeit effektiv initiieren (ISSN: 2628-829X): <https://www.patternpool.de/pattern/forenarbeit-effektiv-initiieren>
- Forenarbeit für die Lehre aktivieren (ISSN: 2628-829X): <https://www.patternpool.de/pattern/forenarbeit-fuer-die-lehre-aktivieren>

Unser bisheriges Fazit aus diesen Aktivitäten: Das Institut für Experimentelle Physik ist auf etwaige künftige Pandemiewellen gut vorbereitet!



ANGEBOTENE LEHRMODULE

Fundamentals of Crystallography

Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Roman Gumeniuk, Übung: Dr. Volodymyr Levitskyi
Wintersemester, 2 SWS Vorlesung, 1 SWS Übung

Grundlagen der Halbleiterbauelemente

Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer, beteiligte Vorlesende: Dr. Matthias Zschornak
Praktikumsplanung: Dr. Günter Gärtner
Sommersemester, 2 SWS Vorlesung, 2 SWS Praktikum

Halbleiterphysik

Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer, beteiligte Vorlesende: Dr. Matthias Zschornak
Übung: Dr. Günter Gärtner
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

Physik für Ingenieure

Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Johannes Heitmann
Praktikumsplanung: Dr. Manuel Feig, Esteban Zuñiga Puelles
Wintersemester (Teil I): 2 SWS Vorlesung, 2 SWS Praktikum
Sommersemester (Teil II): 2 SWS Vorlesung, 1 SWS Übung

Grundlagen der Physik für Engineering

Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Johannes Heitmann, beteiligte Vorlesende: Prof. Dr. Daniel Hiller
 Praktikumsplanung: Dr. Manuel Feig, Esteban Zuñiga Puelles
 Wintersemester: 2 SWS Vorlesung, 2 SWS Praktikum

Physik für Naturwissenschaftler I

Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer, beteiligte Vorlesende: Dr. Matthias Zschornak
 Übungsplanung: Dr. Mateo de Vivanco
 Wintersemester, 4 SWS Vorlesung, 2 SWS Übung

Physik für Naturwissenschaftler II

Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer, beteiligte Vorlesende: Dr. Matthias Zschornak
 Praktikumsplanung: Dr. Manuel Feig, Übungsplanung: Dr. Mateo de Vivanco
 Sommersemester, 2 SWS Vorlesung, 4 SWS Praktikum, 1 SWS Übung

Physik und Chemie stark korrelierter Materie

Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Roman Gumeniuk
 Wintersemester, 2 SWS Vorlesung, 2 SWS Praktikum

Semiconductors

Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Roman Gumeniuk, beteiligte Vorlesende: Dr. Friedrich Roth
 Wintersemester, 2 SWS Vorlesung

Solarzellen: Technologie und industrielle Produktion

Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer, beteiligte Vorlesende: Prof. Dr. Ralf Lüdemann
 Wintersemester, 2 SWS Vorlesung

Spectroscopy

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

Struktur der Materie I: Festkörper

Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Roman Gumeniuk, Übung: Dr. Günter Gärtner
 Wintersemester, 4 SWS Vorlesung, 2 SWS Übung

Struktur der Materie II: Elektronische Eigenschaften

Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Roman Gumeniuk, Übung: Dr. Günter Gärtner
 Sommersemester, 4 SWS Vorlesung, 2 SWS Übung

Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit kristallinen Materialien

Modulverantwortlicher: Prof. Dr. Dirk C. Meyer, Übung: Dr. Hartmut Stöcker
 Wintersemester, 2 SWS Vorlesung, 1 SWS Übung, 2 SWS Praktikum

PUBLIKATIONEN



WISSENSCHAFTLICHE PUBLIKATIONEN

Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie

- T. Köhler, M. Zschornak, M. Zbiri, J. Hanzig, C. Röder, C. Funke, H. Stöcker, E. Mehner, D. C. Meyer: **Defect formation in chemically reduced congruent LiTaO₃: ab initio simulations and inelastic neutron scattering**, Journal of Materials Chemistry C 9 (2021) 13484–13499
- B. Mahltig, T. Leisegang, M. Jakubik, H. Haufe: **Hybrid sol-gel materials for realization of radiation protective coatings—a review with emphasis on UV protective materials**, Journal of Sol-Gel Science & Technology (2021)
- Ye. A. Morkhova, A. A. Kabanov, T. Leisegang: **The theoretical evaluation of new promising solid ion conductors for zinc-ion batteries**, Journal of Physics: Conference Series 1967 (2021) 012059
- Ye. A. Morkhova, M. Rothenberger, T. Leisegang, S. Adams, V. A. Blatov, A. A. Kabanov: **Computational search for novel Zn-ion conductors—a crystallochemical, bond valence, and density functional study**, Journal of Physical Chemistry C 125 (2021) 17590–17599
- M. Münchhalfen, J. Schreuer, C. Reuther, E. Mehner, H. Stöcker: **Elastic, piezoelectric, and dielectric properties of rare-earth calcium oxoborates RCa₄O(BO₃)₃ (R = Er, Y, Dy, Gd, Sm, Nd, La)**, Journal of Applied Physics 130 (2021) 095102
- F. Zimmermann, J. Beyer, F. C. Beyer, G. Gärtner, I. Gamov, K. Irmscher, E. Richter, M. Weyers, J. Heitmann: **A carbon-doping related luminescence band in GaN revealed by below bandgap excitation**, Journal of Applied Physics 130 (2021) 055703

- C. Ludt, E. Ovchinnikova, A. Kulikov, D. Novikov, S. Gemming, D. C. Meyer, M. Zschornak: **Interactions of Ruddlesden-Popper Phases and Migration-Induced Field-Stabilized Polar Phase in Strontium Titanate**, *Crystals* 11 (2021) 693
- T. Köhler, E. Mehner, J. Hanzig, G. Gärtner, C. Funke, Y. Joseph, T. Leisegang, H. Stöcker, D. C. Meyer: **Kinetics of the hydrogen defect in congruent LiMO_3** , *Journal of Materials Chemistry C* 9 (2021) 2350–2367
- M. Nentwich, T. Weigel, C. Richter, H. Stöcker, E. Mehner, S. Jachalke, D. V. Novikov, M. Zschornak, D. C. Meyer: **Sample chamber for synchrotron based in-situ X-ray diffraction experiments under electric fields and temperatures between 100 K and 1250 K**, *Journal of Synchrotron Radiation* 28 (2021) 158–168
- A. Blagov, N. Marchenkov, A. Kulikov, M. Zschornak, E. N. Ovchinnikova: **Study of changes in the atomic crystal structure of functional materials under the influence of acoustic waves and electric fields**, *Bulletin of the Russian Foundation for Basic Research* 109/110 (2021) 13–22
- M. Zschornak, D. C. Meyer: **Evolution of Symmetry in Elemental Crystals**, In: *Theory and Practice of Mathematics and Computer Science*, Vol. 6, pp. 21–37, edited by H. M. Srivastava, Book Publisher International (2021)
- M. Zschornak, J. Hanzig, H. Stöcker, T. Leisegang, S. Gemming, D. C. Meyer: **Structural transformation of the SrTiO_3 surface region due to electric fields at ambient temperature**, In: *Switching Effects in transition metal oxides*, edited by K. Roleder, W. Speier, K. Szot, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warschau (2021)

Kristallphysik

- M. Feig, L. Akselrud, M. Motylenko, M. Bobnar, W. Jörg, K. O. Kvashnina, V. Levytskyi, D. Rafaja, A. Leithe-Jasper, R. Gumeniuk: **Valence fluctuations in the 3D+3 modulated $\text{Yb}_3\text{Co}_4\text{Ge}_{13}$ Remeika phase**, *Dalton Transactions* 50 (2021) 13580–13590
- V. Levytskyi, J. Wagler, C. Hennig, M. Feig, T. Weigel, A. Leithe-Jasper, D. C. Meyer, R. Gumeniuk: **$\text{Sc}_3\text{Ir}_4\text{Si}_{13+x}$ and $\text{Sc}_4\text{Ir}_7\text{Ge}_6$ – the perovskite-related crystal structures**, *Zeitschrift für Kristallographie – Crystalline Materials* 236 (2021) 313–323
- M. Feig, W. Carrillo-Cabrera, M. Bobnar, P. Simon, C. Curfs, V. Levytskyi, A. A. Tsirlin, A. Leithe-Jasper, R. Gumeniuk: **Composition dependent polymorphism and superconductivity in $\text{Y}_{3+x}\{\text{Rh, Ir}\}_4\text{Ge}_{13-x}$** , *Dalton Transactions* 51 (2022) 4734–4748
- V. Levytskyi, E. Svanidze, A. Leithe-Jasper, R. Gumeniuk: **Crystal, electronic structure and physical properties of $\text{U}_3\text{Rh}_4\text{Ge}_{13}$ and $\text{Th}_2\text{Rh}_3\text{Ge}_5$** , *Journal of Alloys and Compounds* 911 (2022) 165017
- S. Flipo, H. Rosner, M. Bobnar, K. O. Kvashnina, A. Leithe-Jasper, R. Gumeniuk: **Thermoelectricity and electronic properties of $\text{Y}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CrB}_4$** , *Physical Review B* 103 (2021) 195121
- P. Wyzga, I. Veremchuk, P. Koželj, A. Leithe-Jasper, R. Gumeniuk: **Mn-for-Fe substitution in $\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{In}_2\text{S}_4$ thiospinel – Crystal structure and thermoelectric properties**, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 152 (2021) 109984

- E. Zuñiga-Puelles, R. Cardoso-Gil, M. Bobnar, I. Veremchuk, G. Heide, R. Gumeniuk: **Electrical and thermal transport properties of natural and synthetic $\text{FeAs}_x\text{S}_{2-x}$ ($x \leq 0.01$)**, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 150 (2021) 109809
- P. Wyzga, S. Grimm, V. Garbe, E. Zuñiga-Puelles, C. Himcinschi, I. Veremchuk, A. Leithe-Jasper, R. Gumeniuk: **Improving thermoelectric performance of indium thiospinel by Se- and Te-substitution**, *Journal of Materials Chemistry C* 9 (2021) 4008–4019
- J. Wang, I. Kaban, V. Levytskyi, R. Li, J. Han, M. Stoica, R. Gumeniuk, K. Nielsch: **Ultra-high strength Co–Ta–B bulk metallic glasses: Glass formation, thermal stability and crystallization**, *Journal of Alloys and Compounds* 860 (2021) 158398
- V. Levytskyi, O. Isnard, R. K. Kremer, V. Babizhetskyy, B. Fontaine, X. Rocquefelte, J.-F. Halet, R. Gumeniuk: **Crystal, electronic and magnetic structures of a novel series of intergrowth carbometalates $\text{R}_4\text{Co}_2\text{C}_3$ ($\text{R} = \text{Y, Gd, Tb}$)**, *Dalton Transactions* 50 (2021) 4202–4209

Strukturforschung mit XFELs und Synchrotronstrahlung

- F. Roth, M. Borgwardt, L. Wenthaus, J. Mahl, S. Palutke, G. Brenner, G. Mercurio, S. Molodtsov, W. Wurth, O. Gessner, W. Eberhardt: **Direct observation of charge separation in an organic light harvesting system by femtosecond time-resolved XPS**, *Nature Communications* 12 (2021) 1196
- O. V. Molodtsova, I. M. Aristova, D. V. Potorochin, I. I. Khodos, A. N. Chaika, S. V. Babenkov, S. L. Molodtsov, A. A. Makarova, D. A. Smirnov, V. Yu. Aristov: **In-situ study of multi-phase indium nanoparticle growth on/into CuPcF_4 organic thin film in ultra-high vacuum conditions**, *Applied Surface Science* 546 (2021) 149136
- D. Tsurkan, P. Simon, C. Schimpf, M. Motylenko, D. Rafaja, F. Roth, D. S. Inosov, A. A. Makarova, I. Stepniak, I. Petrenko, A. Springer, E. Langer, A. A. Kulbakov, M. Avdeev, A. R. Stefankiewicz, K. Heimler, O. Kononchuk, S. Hippmann, D. Kaiser, C. Viehweger, A. Rogoll, A. Voronkina, V. Kovalchuk, V. V. Bazhenov, R. Galli, M. Rahimi-Nasrabadi, S. L. Molodtsov, Y. Joseph, C. Vogt, D. V. Vyalikh, M. Bertrau, H. Erlich: **Extreme Biomimetics: Designing of the First Nanostructured 3D Spongin–Atacamite Composite and its Application**, *Advanced Materials* (2021) 2101682
- F. Brausse, M. Borgwardt, J. Mahl, M. Fraund, F. Roth, M. Blum, W. Eberhardt, O. Gessner: **Real-time interfacial electron dynamics revealed through temporal correlations in x-ray photoelectron spectroscopy**, *Structural Dynamics* 8 (2021) 044301
- V. Yu. Aristov, A. N. Chaika, O. V. Molodtsova, I. M. Aristova, D. V. Potorochin: **Nanostructured graphene on $\beta\text{-SiC/Si(001)}$: Atomic and Electronic Structures, Magnetic and Transport Properties (Brief Review)**, *JETP Letters* 113 (2021) 176–193
- V. Yu. Aristov, O. V. Molodtsova, I. M. Aristova, S. V. Babenkov, D. V. Potorochin: **Study of the Formation and Properties of In– CuPcF_4 Nanocomposite Materials in the Mode of the Millisecond Recording of Photoelectron Spectra**, *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques* 15 (2021) 1129–1132

S. Neppl, J. Mahl, F. Roth, G. Mercurio, G. Zeng, F. M. Toma, N. Huse, P. Feulner, O. Gessner: **Nanoscale Confinement of Photo-Injected Electrons at Hybrid Interfaces**, Journal of Physical Chemistry Letters 12 (2021) 11951–11959

Lehre und Didaktik

M. de Vivanco, C. Funke: **Forenarbeit effektiv initiieren**, Patternpool (2021) <https://www.patternpool.de/pattern/forenarbeit-effektiv-initiieren>

M. de Vivanco, C. Funke: **Forenarbeit für die Lehre aktivieren**, Patternpool (2021) <https://www.patternpool.de/pattern/forenarbeitfuer-die-lehre-aktivieren>



KONFERENZBEITRÄGE

Verbindungshalbleiter und Festkörperspektroskopie

- T. Leisegang, M. Rothenberger, Y. A. Morkhova, S. Adams, V. A. Blatov, A. A. Kabanov: **Computational search for novel Zn-ion conductors — a crystallochemical, bond valence, and density functional study**, 32. Seminar des Arbeitskreises Elektrochemie in Sachsen, 18. November 2021, Vortrag
- M. Momeni, Y.-M. Li, H. Nguyen Dang Duc, M. Danziger, T. Leisegang: **Novel super-light current collectors for lithium-ion batteries**, 32. Seminar des Arbeitskreises Elektrochemie in Sachsen, 18. November 2021, Vortrag
- M. Zschornak: **How to functionalize a perovskite?**, 3rd Lab Meeting of the Young Crystallographers @ STOE, Darmstadt, 28.–30. September 2021, eingeladener Vortrag
- M. Vallinayagam: **Influence of Si on hydrogen adsorption in SMOSe Janus host layer**, 3rd Lab Meeting of the Young Crystallographers @ STOE, Darmstadt, 28.–30. September 2021, Poster
- M. Zschornak: **Advances in the Parameter Space Concept for Crystal Structure Determination – a maximum resolution study**, 25th Congress of the International Union of Crystallography, Prag, Tschechische Republik, 14.–22. August 2021, Poster
- T. Weigel, C. Richter, M. Nentwich, M. Zschornak, D. C. Meyer: **Structure of ferroelectric low temperature phase of yttrium manganate YMn_2O_7 revisited**, 25th Congress of the International Union of Crystallography, Prag, Tschechische Republik, 14.–22. August 2021, Poster

- C. Ludt, A. Kulikov, E. Ovchinnikova, D. Novikov, D. C. Meyer, M. Zschornak: **Controlled tuning of atomic structure in functional materials by acoustic standing waves and electric fields**, 25th Congress of the International Union of Crystallography, Prag, Tschechische Republik, 14.–22. August 2021, Poster
- Y. Morkhova, A. Kabanov, T. Leisegang, M. Rothenberger, V. Blatov: **Combined crystallochemical and quantum-chemical search for new high-valent chalcogen-containing ionic conductors**, 25th Congress of the International Union of Crystallography, Prag, Tschechische Republik, 14.–22. August 2021, Vortrag
- M. Zschornak: **Switching effects in strontium titanate**, Seminar Geomaterialien, Institut für Kristallographie, RWTH Aachen, 6. Juli 2021, eingeladener Vortrag
- M. Zschornak: **Atomistic Electronic Structure and derived Properties of Crystals by means of DFT using VASP**, Scientific Seminar Series „Hardware & Numerics“, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, 25. Mai 2021, eingeladener Vortrag
- Y. Morkhova, A. Kabanov, T. Leisegang: **The theoretical evaluation of new promising solid ion conductors for zinc-ion batteries**, International Scientific Practical Conference on materials science, shape-generating technologies and equipment (ICMSSTE 2021), Yalta, Russland, 17.–20. Mai 2021, Vortrag
- M. Zschornak: **From the perturbation of crystal symmetry towards functionality**, 29. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Hamburg, 15.–18. März 2021, Max-von-Laue-Preisvortrag
- T. Weigel, C. Richter, M. Nentwich, D. Novikov, M. Zschornak, D. C. Meyer: **Structure of ferroelectric low temperature phase of yttrium manganate $Y\text{Mn}_2\text{O}_7$ revisited**, 29. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Hamburg, 15.–18. März 2021, Poster
- C. Ludt, A. Kulikov, E. Ovchinnikova, D. Novikov, D. C. Meyer, M. Zschornak: **Controlled tuning of atomic structure in functional materials by acoustic standing waves and electric fields**, 29. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Hamburg, 15.–18. März 2021, Poster
- T. Leisegang, M. de Vivanco, M. Rothenberger, A. A. Kabanov, Y. A. Morkhova, R. A. Eremin, V. A. Blatov: **The conversion and storage of energy: pyroelectrics and solid electrolytes**, 11th German Frontiers of Engineering Conference – INDOGFOE 2021, Indian Department of Science and Technology & Alexander von Humboldt Foundation, 25. Februar 2021, eingeladener Postervortrag
- T. Leisegang, H. Nguyen Dang Duc, Y. M. Li, M. Danziger, W. Voituz: **Resource-efficient current collectors for lithium-ion batteries**, 31. Seminar des Arbeitskreises Elektrochemie in Sachsen, 23. Februar 2021, Vortrag
- T. Weigel, C. Richter, M. Nentwich, D. Novikov, M. Zschornak, D. C. Meyer: **Structural characterization of a commensurate low temperature phase of yttrium manganate oxide in picometer range with resonant X-ray diffraction**, DESY Photon Science User Meeting, Hamburg, 25.–29. Januar 2021, Poster

Kristallphysik

H. Michor, M. Roman, L. Reisinger, M. Fritthum, D. Weichselbaum, S. Steiner, V. Levytskyy, V. Babizhetskyy, B. Ya. Kotur, B. Stöger: **Crystal growth and studies of charge density wave physics in quasi-1D metals RNiC₂**, The International Conference on Solid Compounds of Transition Elements, Warschau, Polen, 12.–15. April 2021, Vortrag

Strukturforschung mit XFELs und Synchrotronstrahlung

F. Roth: **Direct observation of charge separation in an organic light-harvesting system by femtosecond time-resolved XPS**, DESY Photon Science Users' Meeting 2021, Hamburg, 25.–29. Januar 2021, Poster

D. Potorochin: **Study of layered graphene-based nanocomposite obtained via diazonium chemistry**, DESY Photon Science Users' Meeting 2021, Hamburg, 25.–29. Januar, 2021, Poster

F. Roth: **Time-Domain In-Situ X-ray Studies of Interfacial Charge Transfer Dynamics**, BESSY II ErUM-Pro Workshop, 22. September 2021, Vortrag

F. Roth: **Time-Domain In-Situ X-ray Studies of Interfacial Charge Transfer Dynamics**, FHI ErUM-Pro Seminar, 8. Oktober 2021, Vortrag

S. Molodtsov: **Brighter than milliard suns**, Seminar of Institute of Nuclear Physics, Lomonosov State University, Moskau, 9. Februar 2021, Vortrag

S. Molodtsov: **European XFEL: How does it work and solid-state applications**, Graduate school on Advanced Characterisation of Materials at Imperial College London and Trinity College Dublin, London, 28. Mai 2021, Webinar

S. Molodtsov: **European XFEL: Excellent Tool for Superior Science**, Workshop of Graduate School "Partnership for Innovation, Education and Research", Hamburg, 16. November 2021, Vortrag

S. Molodtsov: **European XFEL: Unique possibilities for X-ray research**, Workshop "20 Years of Russian-German Laboratory at BESSY II", Berlin, 18.–19. November 2021, Vortrag

Lehre und Didaktik

R. Börner, D. Nebel, C. Funke, G. Reuther: **Digitale Lehre nach(?) Corona – lesson learned oder zurück auf Start?**, 17. Netzwerktreffen der Arbeitsgruppe Mathematik/Physik/e-Learning, Mittweida, 14. September 2021, Podiumsdiskussion

C. Funke, M. de Vivanco: **Digitale Klausur für große Studierendengruppen**, Werkstatt | Schriftliches Online-Prüfen, Chemnitz, 28. Juni 2021, Vortrag

- M. de Vivanco, C. Funke: **One Year of Pandemic: The Digitalisation of a Physics Course along with its Examination**, Blog der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, 10. Juni 2021, <https://dgk-home.de/dgkzweinull>
- C. Funke, M. de Vivanco: **Digitale Klausur für große Studierendengruppen**, Round-Table „Digitale Prüfungen“, Freiberg, 26. Mai 2021, Vortrag
- C. Funke, M. de Vivanco: **Digitale Klausur für große Studierendengruppen**, e-teach@Talk, Freiberg, 20. Mai 2021, Vortrag
- C. Funke, M. de Vivanco: **Physik-Übungen: spannende und abwechslungsreiche Begleitung**, Digital Workspace „Einstieg in die Gestaltung von elektronischen Übungen mit OPAL und ONYX“, Freiberg, 20. April 2021, Vortrag



GRADUIERUNGEN UND STUDENTISCHE ARBEITEN

Lukas R. G. Braune: **Polymerelektrolyte – der erste Schritt in Richtung Festkörperbatterie**, Forschungsbezogenes Projektseminar, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2021

Markus Schmidt: **Katalyse für sauberes Wasser – Schadstoffe abbauen mit funktionellen Oberflächen**, Forschungsbezogenes Projektseminar, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2021

Manuel Rothenberger: **Promising novel Zn²⁺ ion conductors – a bond valence study**, Problemorientierte Projektarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2021

Manuel Feig: **Synthesis, crystal structure and physical properties of Chevrel, Remeika and some related phases**, Doktorarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2021

Sever Flipo: **Thermoelectric properties of intermetallic high borides**, Doktorarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2021

Dmitrii Potorochin: **Synthesis and study of the correlation between the atomic and electronic structure of low-dimensional carbon-based nanomaterials**, Doktorarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2021

Paweł Wyzga: **Thermoelectric properties of mineral-like compounds containing sulfur**, Doktorarbeit, Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, 2021



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

Redakteur

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

Hochtemperatur-Röntgendiffraktometer Bruker D8 Advance für temperaturabhängige Röntgenbeugung der Arbeitsgruppe Meyer des Instituts für Experimentelle Physik an der TU Bergakademie Freiberg, aufgestellt am ZeHS, © Hartmut Stöcker.

Autoren

1–2	Dirk C. Meyer	24	Oliver Gessner, Johannes Mahl
5–10	Hartmut Stöcker	25–26	European XFEL GmbH
13–17	Dirk C. Meyer, Hartmut Stöcker	27	Friedrich Roth
18–20	Roman Gumeniuk, Wiktor Bodnar	28	Sven Jachalke
21–27	Serguei Molodtsov, Friedrich Roth	29–31	Tilmann Leisegang
28–35	Tilmann Leisegang	32	Uta Fischer, Claudia Funke
36–37	Hartmut Stöcker	33–34	Tilmann Leisegang
38–39	Matthias Zschornak, Tina Weigel	35	Tilmann Leisegang, Sven Jachalke
40–46	Dirk C. Meyer, Theresa Lemser	36	Sven Jachalke
49–51	Thomas Köhler, Hartmut Stöcker	37	Tilmann Leisegang, Juliane Hanzig, Tina Weigel
52–53	Tilmann Leisegang	38	Melanie Nentwich
54–55	Tina Weigel, Christian Ludt, Matthias Zschornak	39	Constantin Buyer, Christian Ludt
56–57	Muthu Vallinayagam, Matthias Zschornak	40	Theresa Lemser
58–61	Tilmann Leisegang, Oliver Schmidt, Felix Bräuer	41	Cinector GmbH
63–64	Esteban Zuñiga Puelles, Tatjana Suworow, Claudia Funke	42–43	Sven Jachalke
66–67	Mateo de Vivanco, Claudia Funke	44	Axel Anklam
68–79	Hartmut Stöcker	45	Erik Mehner
		49–50	Thomas Köhler
		51	Thomas Köhler, Hardik Patil
		52	Uta Fischer
		53	Tilmann Leisegang
		54	Anton Kulikov
		55	Matthias Zschornak, Christian Ludt
		56	Matthias Zschornak
		57	Matthias Zschornak, Muthu Vallinayagam
		58	Sven Jachalke
		59	Tilmann Leisegang, Falk Meutzner
		60–61	Oliver Schmidt
		63	Manuel Feig
		65	Sven Jachalke, Esteban Zuñiga Puelles, Tatjana Suworow
		66	Richard Börner
		68	Mateo de Vivanco
		71–75	Sven Jachalke
		79	Hartmut Stöcker
		80	Sven Jachalke

Bildquellen

1	Medienzentrum TU Bergakademie Freiberg
5	Sven Jachalke
7	Sven Jachalke, Hartmut Stöcker
8	Thomas Köhler
9	Sven Jachalke, Thomas Köhler
10	Sven Jachalke
11	Juliane Hanzig, Uta Fischer, Claudia Funke
13	Hartmut Stöcker
15	Sven Jachalke
16	Thomas Köhler
18	Manuel Feig
19–20	Wiktor Bodnar
21	European XFEL GmbH
22	Sven Jachalke
23	Friedrich Roth