

HIGHLIGHTS 2021

Helmholtz-Zentrum Berlin
für Materialien und Energie



INHALT

VORWORT

Interview: BESSY II als internationale Quelle	4
Stiferverband zertifiziert HZB für Umgang mit Vielfalt	6
CatLab – Startschuss für eine neue Katalysator-Generation	7
bERLinPro – HF-Koppler zeigen sich belastbar	8
HZB nutzt Strom produzierende Hauswand als Real-Labor	9

HIGHLIGHTS AUS DER FORSCHUNG – ENERGIE

Weltrekord für Tandem-Solarzellen wieder beim HZB	11
Solarzellen: Verluste auf der Nanoskala sichtbar gemacht	12
Defekte fangen Ladungsträger in Perowskit-Solarzellen ein	12
Wie Fluor-Additive die Qualität verbessern	13
Rolle der Wasserstoffbrückenbindungen beleuchtet	14
Einsichten in die Frühstadien der Strukturbildung	14
Perowskit-Spektrometer mit Tintenstrahldrucker	14
Zerstörerischen Lithium-Dendriten auf der Spur	15
Prozesse in Kupfer-Zinn-Katalysatoren entschlüsselt N	15
Solarer Wasserstoff für die Antarktis	16
Warum werden bestimmte Katalysatoren im Betrieb besser?	16
Israelisch-deutsches Team löst das Rätsel um Rost	17
Katalysatorstabilität durch kobaltselektive Selbstheilung N	18

Die Rolle von Chrom in stabilisierten Gerbereischlämmen N	18
Ein stabiler Katalysator für die Wasserstoffproduktion N	18

HIGHLIGHTS AUS DER FORSCHUNG – INFORMATION

Topologische Materialien für die ultraschnelle Spintronik	20
Weltweit erste Videoaufnahme eines Raum-Zeit-Kristalls N	20
Exotische ferromagnetische Ordnung nachgewiesen	21
Supraleitung trifft Spintronik	22
Scharfer Blick in winzige ferroelektrische Kristalle	22
Unordnung bringt quantenphysikalische Talente hervor	22
Wie Quantenpunkte miteinander „sprechen“ können	23

HIGHLIGHTS AUS DER FORSCHUNG – MATERIE

Neue Optionen für Synchrotronlicht-Quellen	25
Strahlendiagnostik für zukünftige Beschleuniger im Tischformat	26
Wasser als Metall an BESSY II nachgewiesen	27
Neue Einblicke in schaltbare MOF-Strukturen	28
Wie Licht MoS ₂ -Dünnschichten katalytisch aktiviert	28
Einblicke in die mechanochemische Synthese N	29
Schnappschuss von Gitterschwingungen	30
Kandidaten für Corona-Medikamente identifiziert N	30
Wenn beim Abkühlen die Vibrationen zunehmen	30

Blackbox-Verfahren für superschnelle Ergebnisse	31
Neuer Weltrekord in der Röntgenmikroskopie	31
Einblicke in die Evolution der Knochen N	31

VERSCHIEDENES

Zahlen und Fakten aus dem HZB	32
HZB Graduate Center für Promovierende	34
4000. Augentumor-Patient am HZB behandelt	34
Neue Forschungsgruppe im Aufbau	34
Berufungen, Auszeichnungen und Preise	35
BMBF fördert Batterieforschungsprojekt SkaLiS	36
HZB koordiniert Entwicklung von Corona-Wirkstoffen	36
Ein Wiki für die Perowskit-Solarzellenforschung	37
MYSTIIC an BESSY II: Neues Röntgenmikroskop in Betrieb	37
VIPERLAB soll Perowskit-Solarindustrie beflügeln	38
DAPHNE macht Experimentdaten nachhaltig verfügbar	38
Lageplan und Impressum	39

Hinweis: Nutzereperimente sind mit dem Symbol **N gekennzeichnet**

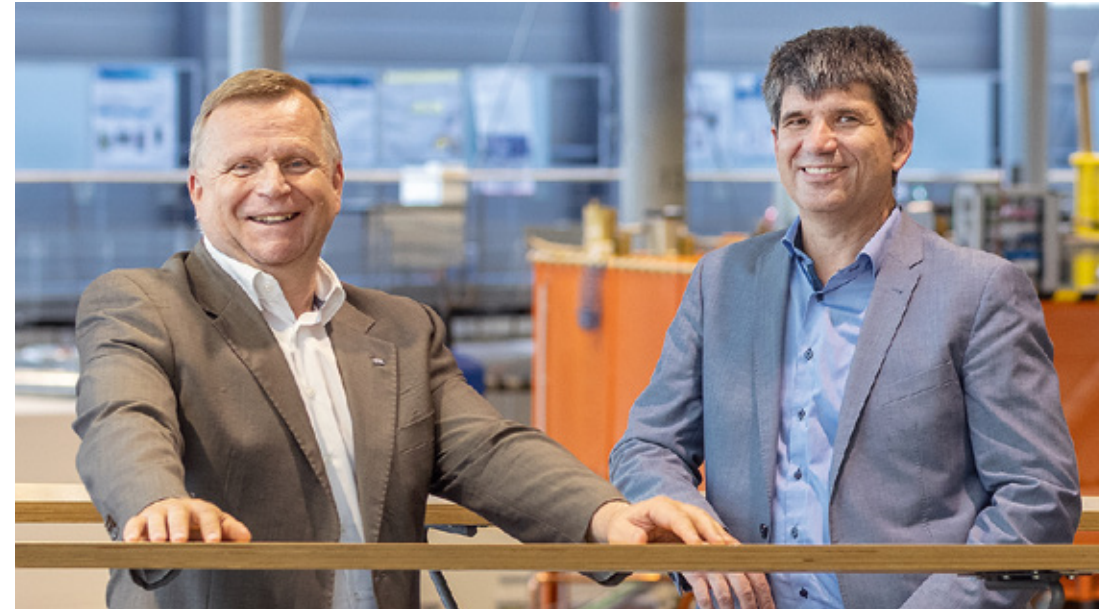


VORWORT

Unsere Mitarbeitenden, ob in der Forschung, der Technik oder in der Verwaltung, haben auch in Pandemiezeiten höchst produktiv gearbeitet. So konnten wir im vergangenen Jahr mit finanzieller Unterstützung des BMBF ein großes Projekt starten: Gemeinsam mit zwei Max-Planck-Instituten bauen wir die Forschungsplattform Catlab auf, um neue Katalysatormaterialien auf Basis von Dünnschichttechnologien zu entwickeln. Solche Katalysatoren werden zum Beispiel benötigt, um grünen Wasserstoff zu produzieren, aber auch um ihn zu speichern, zu transportieren und in der chemischen Industrie weiter zu verarbeiten. Grüner Wasserstoff ist Energiespeicher und Rohstoff in einem und wird daher ein wichtiger Baustein im künftigen Energiesystem sein, das auf erneuerbaren, klimaneutralen Ressourcen basieren muss.

In diesem Jahresrückblick haben wir eine kleine Auswahl aus den 966 wissenschaftlichen Fachpublikationen zusammengestellt, die Forschergruppen aus dem HZB sowie externe Nutzergruppen an HZB-Einrichtungen publiziert haben. Gegliedert in die drei Forschungsbereiche Energie, Information und Materie liefern sie einen Einblick in die Vielfalt der Forschung am HZB und an unserer Röntgenquelle BESSY II. Dabei fällt sicher auf, dass die Forschung zu Solarzellen auf Perowskit-Basis besonders stark vertreten ist. Darauf sind wir stolz, denn am HZB forschen inzwischen mehrere Gruppen mit ganz unterschiedlichem Fokus an dieser spannenden Materialklasse. Der rege Austausch zwischen ihnen trägt Früchte: 2021 haben wir zum wiederholten Mal einen neuen Weltrekord für den Wirkungsgrad einer Tandemzelle aus Silizium und Perowskit erreicht, erst Mitte 2022 wurde der letzte Rekordwert von 29,8 Prozent durch ein Schweizer Team getoppt. Das Rennen um immer höhere Effizienzen geht weiter.

Gleichzeitig entwickeln HZB-Teams aber auch Herstellungsverfahren, die industrie-kompatibel sind, steigern die Stabilität oder suchen nach noch umweltfreundlicheren Alternativen. Um das rasch anwachsende Wissen übersichtlich zu erschließen, hat eine Gruppe am HZB gemeinsam mit über 30 internationalen Partnereinrichtungen ein „Wiki“ mit Ergebnissen aus der Perowskit-Forschung konzipiert.



Thomas Frederking (li.), kaufmännischer Geschäftsführer und Prof. Dr. Bernd Rech, wissenschaftlicher Geschäftsführer des Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie.

© P. Dera/HZB

Ein wichtiges Tätigkeitsfeld am HZB bleibt die Beschleunigerphysik. Wir arbeiten am Design von neuen Komponenten für ein baldiges Upgrade von BESSY II und entwickeln die Instrumente und Messmethoden stetig weiter. Aktuell ist die Röntgenquelle BESSY II ein starker Attraktor für Messgäste aus dem In- und Ausland. Damit das so bleibt und wir auch künftig modernste oder sogar einzigartige Messplätze anbieten können, ruhen wir uns nicht auf dem Erreichten aus, sondern planen die Zukunft.

Thomas Frederking
Kaufmännischer Geschäftsführer

Bernd Rech
Wissenschaftlicher Geschäftsführer

„MICH FREUT ES WAHNSINNIC, WIE INTERNATIONAL WIR AN BESSY II INZWISCHEN SIND“

Synchrotronstrahlungsquellen sind seit 75 Jahren unverzichtbar für den Erkenntnisgewinn in der Forschung. **Antje Vollmer**, die am HZB die Abteilung Nutzerkoordination an BESSY II leitet, spricht über die internationale Vernetzung und wie sie schon an den Forschungsanträgen ablesen kann, welche gesellschaftlichen Probleme gerade besonders drängend sind.

Frau Vollmer, Sie haben 1994 zum ersten Mal an BESSY gearbeitet ...

Ja, das war während meiner Doktorarbeit, schon in der ersten Woche hatte ich da Messzeit bekommen. Und seitdem hat sich richtig viel verändert.

Erzählen Sie mal!

Die Nutzung der Synchrotronstrahlungsquellen ist deutlich breiter geworden. An BESSY I kamen damals 90 Prozent der Projekte aus der Physik. Heute sind es bei BESSY II 45 Prozent, der ganze Rest verteilt sich vor allem auf Nutzerinnen und Nutzer aus der Chemie, Biologie, Biochemie, Medizin oder auch Archäologie.

Bedeutet das auch, dass sich die wissenschaftlichen Fragen verändert haben, auf die man mit Hilfe der Synchrotronstrahlung Antworten sucht?

Ganz klar. Heute ist die Motivation ausgeprägter, aus wissenschaftlichen Erkenntnissen einen praktischen, einen gesellschaftlichen Nutzen zu ziehen. Besonders deutlich



Die Welt zu Gast am HZB: Aus sehr vielen Ländern der Welt reichen Forscher*innen Anträge auf Messzeit bei BESSY II ein. © J. Politt/HZB

sieht man das bei großen Problemen wie etwa der Corona-Pandemie: In deren erstem Jahr ist durchschnittlich alle fünf Tage eine Publikation zu Corona erschienen, hinter der Arbeiten an einem Synchrotron standen – nicht nur, aber auch hier bei uns.

Haben Sie an BESSY II gleich zu Beginn der Pandemie systematisch Messzeit für die Forschung an Corona-Viren verfügbar gemacht?

Wir haben sofort einen Fast-Track dafür an allen Experimenten eingeführt. Der wurde nicht nur für die Forschung an Proteinstrukturen genutzt, wo er bereits seit Jahren praktiziert wird, sondern es ging zum Beispiel auch um Aerosolverteilung in der Luft. In der Phase haben wir übrigens einen neuen Rekord aufgestellt: Da vergingen von der Antragsstellung bis zur Messung gerade einmal drei Tage – normalerweise liegt der Vorlauf bei einem halben Jahr.

Spiegeln sich auch sonst die gesellschaftlich brendenden Themen in den Anträgen wider?

Wir sehen tatsächlich, welche Fragen gerade besonders spannend und relevant sind. Da kommt beispielsweise das Thema Graphen, und auf einmal schnellt die Zahl der Anträge nach oben, bis sie dann irgendwann wieder nachlässt. Ein solcher Zyklus dauert ungefähr zehn Jahre. Momentan steht die Energieforschung hoch im Kurs, und ich bin mir sicher, dass sie uns viel, viel länger beschäftigen wird als die üblichen zehn Jahre. Aber natürlich verschieben sich innerhalb dieses großen Themenfeldes die Schwerpunkte. Anfangs ging es vor allem um die Solarzelle, derzeit stehen alle Aspekte rund um die Energiespeicherung im Fokus. Wasserstoff, Batterieforschung, Elektromobilität, synthetische Kraftstoffe – all das sind Themen, die wir vor 20 Jahren noch nicht bei uns fanden.

Wie verhält es sich denn mit den Nutzenden-Gruppen, werden die auch diverser?

Oh ja! Ich habe neulich mal auf die 30 Jahre alten Nutzungsdaten geschaut, da hatten wir in einem Jahr zum

Beispiel 114 deutsche Nutzenden-Gruppen verzeichnet, zwei österreichische und eine australische. Heute machen die internationalen Nutzerinnen und Nutzer fast die Hälfte aus. Mich freut es einerseits wahnsinnig, wie international wir hier inzwischen sind.

Das hört sich so an, als gäbe es auch noch eine andere Seite. Welche?

Leider ist es so, dass zum überwiegenden Teil die nördliche Hemisphäre in unserer Nutzenden-Community vertreten ist. Manchmal ist jemand aus Nord- oder aus Südafrika dabei, aber aus Zentralafrika haben wir nach wie vor keine Nutzenden-Gruppen.

Warum ist das so?

Das hängt sicherlich mit den Gesellschaften dort zusammen. In Afrika gibt es unter einer Million Einwohnern 169 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler. In Europa ist dieser Anteil 20 Mal höher. Mich erinnert das auch immer an das TNA-Programm der Europäischen Union, das es früher einmal gab ...

... TNA steht für trans-national access ...

... und bei dem die EU die Kosten trug, wenn Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler für ein Experiment eine Landesgrenze überschritten. Es sollte die maximale Mobilität in Europa fördern. Ich bin damals quer durch Europa gereist und habe bei Forschenden für BESSY II geworben – in Rumänien, in Bulgarien, in Kroatien, in Portugal und etlichen anderen Ländern. Und überall

„Heute machen die internationalen Nutzerinnen und Nutzer fast die Hälfte aller Forschenden aus, die Messzeit an BESSY II erhalten.“

traf ich auf Vorbehalte. In Osteuropa war die verbreitete Haltung, dass man sich Aufenthalte in Deutschland sowieso nicht leisten könne – obwohl sämtliche Kosten einschließlich der Reise gedeckt waren. Und in Südeuropa gingen die Vorbehalte eher in die Richtung, dass „wir im Norden“ ein eingespielter Club seien und sowieso die Anträge aus dem Süden nicht ernst nähmen.

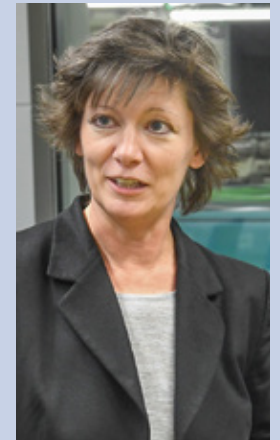
Für das, was Sie damit ansprechen, hat sich der Begriff „Science Diplomacy“ eingebürgert.

Und als Paradebeispiel dafür gilt auch ein Teilchenbeschleuniger: Das CERN, das nach dem Zweiten Weltkrieg entstanden ist und so dimensioniert war, dass es für jedes einzelne beteiligte Land allein zu groß war und es nur alle gemeinsam stemmen konnten. Ein jüngeres Beispiel ist das Synchrotron SESAME in Jordanien. Auch das soll Forschende aus der ganzen Region zusammenbringen, einschließlich Israel. Das ist tatsächlich bahnbrechend, auch wenn es im Alltag natürlich nicht immer ganz einfach ist.

SESAME will ja zum Synchrotron auch für afrikanische Forschende werden ...

... und da schließt sich der Kreis zu meiner Beobachtung,

Dr. Antje Vollmer leitet die Abteilung Nutzerkoordination an der Röntgenquelle BESSY II und ist seit 2021 Sprecherin der Facility BESSY II. Schon 2003 hat die promovierte Chemikerin einen Messplatz an BESSY II aufgebaut und acht Jahre lang geleitet, bevor sie vor zehn Jahren in die Nutzerkoordination gewechselt ist. Sie beschäftigt sich intensiv mit dem gesellschaftlichen Nutzen der Forschung an Röntgenquellen. © D. Ausserhofer/HZB



dass hier in Berlin nur wenige afrikanische Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler arbeiten. Ich hatte übrigens ein Aha-Moment bei einer Tagung der Humboldt-Stiftung. Da waren Kolleginnen und Kollegen aus Kenia, Bangladesch und Myanmar mit dabei, die zum Beispiel an der Wasserspaltung arbeiten, an nachhaltiger Energie. Viele waren zum ersten Mal auf einer internationalen Konferenz, weil sie sich das sonst gar nicht leisten können. Weil es aber wegen Corona ein virtuelles Format war, konnten sie auf einmal dabei sein. Da ist mir klar geworden: Oft haben wir einfach ganz Afrika aus dem Prozess ausgeschlossen, der bei Helmholtz „brain circulation“ heißt – einfach, weil viele Menschen dort aus finanziellen Gründen nicht reisen können. Um sie einzubinden, sollten wir solche Meetings in Zukunft auf jeden Fall hybrid machen, damit sie sich zumindest online einklinken können. Das wäre schon einmal ein wichtiger Schritt.

Den vorhergehenden Teil dieses Interviews haben wir im Januar 2022 geführt. Was würden Sie heute, im Sommer 2022, angesichts des Krieges in der Ukraine hinzufügen?

Der Angriffskrieg des russischen Staates gegen die Ukraine schockiert uns alle und zeigt, wie uns Entwicklungen, die wir in Europa nicht mehr für möglich gehalten hätten, überrollen. Dieser Krieg verlangt eine klare Haltung gegen die Aggression und hat zu deutlichen,

sichtbaren Maßnahmen wie der sofortigen Einstellung jeglicher Zusammenarbeit mit russischen Institutionen geführt.

Die Wissenschaft ist in der Verantwortung, sich klar gegen das Verhalten des russischen Staates zu positionieren – und das haben wir als HZB getan. Dabei möchte ich betonen, dass es hierbei um die institutionellen russischen und belarussischen Einrichtungen geht, nicht um die Nationalität der Kolleginnen und Kollegen. Unsere Solidarität

gilt den Ukrainerinnen und Ukrainern, aber auch den kritischen russischen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern, die sich mutig gegen den Krieg positionieren.

Eine Sache, von der ich fest überzeugt bin, hat der Präsident der Deutschen Physikalischen Gesellschaft gut auf den Punkt gebracht: „Wir lassen uns nicht in unserem Glauben an die verbindende Wirkung von Wissenschaft erschüttern!“

Das Gespräch führte Kilian Kirchgessner



Dr. Volker Meyer-Guckel (li.), stellvertretender Generalsekretär des Stifterverbandes, überreichte Dr. Jennifer Schevarado, HZB-Projektleiterin Diversity-Audit, und Prof. Dr. Jan Lüning, Sprecher der HZB-Geschäftsführung, das Zertifikat „Vielfalt gestalten“.

© HZB

STIFTERVERBAND ZERTIFIZIERT HZB FÜR STRATEGIEN IM UMGANG MIT VIELFALT

Als erste außeruniversitäre Forschungseinrichtung hat das HZB das **Diversity Audit „Vielfalt gestalten“** des Stifterverbandes erfolgreich absolviert.

Egal ob Mitarbeitende aus dem Ausland, mit Migrationsgeschichte oder in Teilzeit, egal welches Alter, Geschlecht oder welche Weltanschauung – alle Beschäftigten sollen mit ihren Fähigkeiten gleichberechtigt am Arbeitsalltag teilnehmen können. Um das zu gewährleisten, hat das HZB ein 18-monatiges Verfahren durchlaufen. Dabei wurden die bestehenden Konzepte, um Vielfalt zu fördern, erweitert und neue Maßnahmen umgesetzt. Diese betreffen sowohl organisatorische Strukturen als auch das Personalmanagement. Serviceleistungen für Mitarbeitende und eine diversitätssensible Kommunikation sind ebenfalls Teil der Diversity-Strategie.

„Das Diversity Audit hat uns wichtige Impulse gegeben und Themen, die uns als Organisation schon länger beschäftigen, vorangebracht“, sagt Thomas Frederking, kaufmännischer Geschäftsführer des HZB. „So haben wir unseren Code of Conduct aktualisiert, Auswahl- und Einstellungsprozesse diversitätssensibler gestaltet und überarbeiten aktuell die Prozesse für das Konfliktmanagement. Zudem haben wir uns intensiv mit unserer Arbeits- und Führungskultur auseinandergesetzt und werden entsprechende Leitlinien etablieren. Viele Mitarbeitende des HZB haben sich im Rahmen des Diversity Audits mit Ideen eingebracht, was uns besonders freut.“

red./sz

CATLAB – STARTSCHUSS FÜR EINE NEUE KATALYSATOR-GENERATION

Mit dem **Katalysezentrum CatLab** nahm im Sommer 2021 die gemeinsame Forschungsplattform des HZB und der Max-Planck-Gesellschaft den Betrieb auf. Ziel ist die **effiziente Erzeugung und Weiterverarbeitung von grünem Wasserstoff** mithilfe von neuen Katalysatoren.

Wasserstoff ist ein Schlüsselbaustein für eine erfolgreiche Energiewende. Damit der vielseitige Energieträger jedoch wirklich nachhaltig ist, muss er mit erneuerbaren Energien hergestellt werden. Gleichzeitig braucht es für die Weiterverarbeitung von grünem Wasserstoff neue nachhaltige Technologien. Die hierfür notwendigen Prozesse haben eine Gemeinsamkeit: Sie sind mit herkömmlichen Katalysatoren nicht realisierbar, sondern benötigen eine neuartige Generation. Genau da liegt das Herzstück von CatLab. Ziel der Forschenden am Katalysezentrum ist es, mit Dünnschichttechnologien und leicht verfügbaren chemischen Elementen nicht nur neuartige, maßgeschneiderte Katalysatoren zu entwickeln, sondern auch die notwendigen Katalyse-Apparaturen neu zu entwerfen. Dies soll zu bahnbrechenden Innovationen und in eine nachhaltige Wasserstoffwirtschaft führen.

Das HZB und zwei Max-Planck-Institute, das Fritz-Haber-Institut (FHI) und das Institut für Chemische Energiekonversion (MPI CEC), bündeln dafür ihre Kompetenzen. Gemeinsam bauen sie mit universitären und industriellen

Partnern das Katalysezentrum auf. CatLab soll eine Brücke zwischen Grundlagenforschung und Industrie schlagen und wird vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) im Rahmen der Nationalen Wasserstoffstrategie mit rund 58 Millionen Euro gefördert.

Robert Schlögl, wissenschaftlicher Direktor am FHI und MPI CEC, betonte beim Festakt, wie zügig die Forschung in diesem Bereich vorankomme: „Mit unserem bei der MPG vorhandenen Verständnis für Katalysatoren und Materialsynthese und der Expertise des HZB für Dünnschichttechnologien und der Möglichkeit, am Synchrotron BESSY II zu experimentieren, haben wir die einmalige Chance, sehr schnell in das neue Gebiet vorzustoßen. CatLab wird unsere Fähigkeit, hochleistungsfähige Katalysatoren zu entwerfen, in eine neue Dimension bringen; nun können wir Erkenntnisse der Grundlagenforschung in einen dringend benötigten Technologieschub überführen.“

Bernd Rech, wissenschaftlicher Geschäftsführer des HZB, sagte bei der Eröffnung: „Durch unsere Solarzellen-For-



Eröffneten das CatLab (v.l.n.r.): Prof. Dr. Bernd Rech, wissenschaftlicher Geschäftsführer des HZB, Dr. Stefan Kaufmann, MdB und Innovationsbeauftragter Grüner Wasserstoff des BMBF, sowie Prof. Dr. Robert Schlögl, wissenschaftlicher Direktor am FHI und MPI CEC. © M. Setzpfandt/HZB

schung bringt das HZB viel Know-how beim Design von dünnen Schichten ein. Und die Forschung an BESSY II hat bereits wesentliche Erkenntnisse zum Verständnis von Katalysatoren geliefert. Wir arbeiten seit vielen Jahrzehnten mit Katalyse-Forschern aus aller Welt zusammen. Dies alles trägt dazu bei, dass wir mit der nun gestarteten Kooperation beim CatLab eine kritische Masse erreichen. Mit der starken Einbindung der Humboldt-Universität und des Berliner Exzellenzclusters UniSysCat sowie der frühen Beteiligung von industriellen Partnern werden wir maßgeblich zur Gestaltung eines zukünftigen nachhaltigen Energiesystems beitragen.“

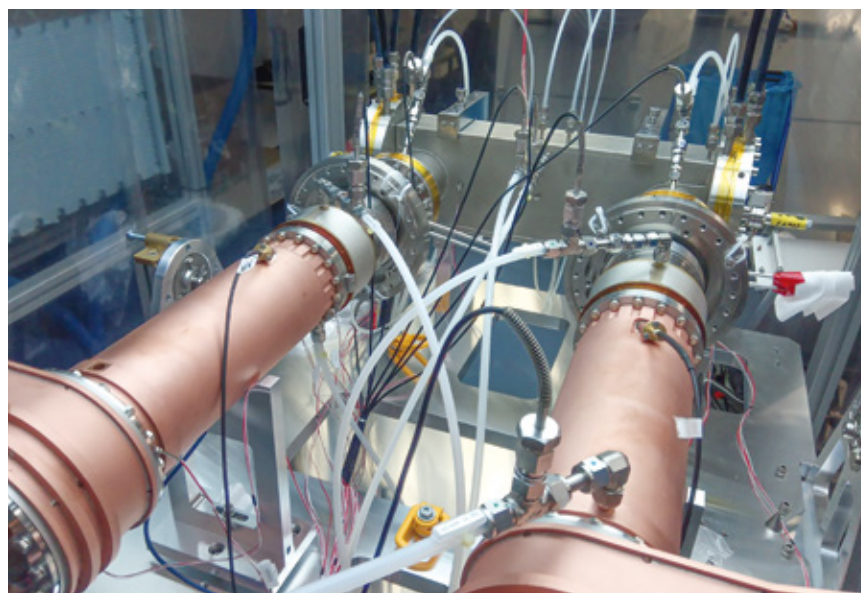
Die Labore im IRIS-Forschungsbau der HU auf dem Campus Adlershof in Berlin bieten optimale Bedingungen für den Start von CatLab. Parallel dazu wird das Katalysezentrum seit 2022 in mehreren Bauabschnitten aufgebaut.

BERLINPRO – HF-KOPPLER ZEIGEN SICH BELASTBAR

Am HZB-Standort in Adlershof haben Forschende einen Prototyp eines **Linearbeschleunigers mit Energierückgewinnung (bERLinPro)** gebaut. Bei der Entwicklung der weltweit einzigartigen Schlüsselkomponenten, die für die Anlage benötigt werden, konnten sie einen weiteren wichtigen Schritt machen, ehe das Projekt zum Jahresende 2021 abgeschlossen wurde.

In Synchrotronlichtquellen bringt ein Elektronenbeschleuniger Elektronenpakete auf nahezu Lichtgeschwindigkeit, damit diese das besondere „Synchrotronlicht“ abgeben können. Ihre extrem hohe Energie und ihre besondere Form erhalten die Elektronenpakete durch ein stehendes elektromagnetisches Wechselfeld in sogenannten Kavitäten. Bei hohen Elektronenströmen, wie sie im Projekt bERLinPro gefordert sind, ist die benötigte Leistung für die stabile Anregung dieses Hochfrequenz-Wechselfelds enorm. Das Einkoppeln dieser hohen Leistung gelingt mit speziellen Antennen, sogenannten Kopplern, und gilt als große wissenschaftlich-technische Herausforderung.

Diese Koppler sollen bei 1,3 Gigahertz die Kavitäten mit 230 Kilowatt im Dauerbetrieb versorgen. Zusätzlich muss die Verbindung zwischen dem Ultrahochvakuum der Kavitäten und der Hochfrequenzübertragungsstrecke gewährleistet werden, und zwar sowohl bei Flüssigeliumtemperatur (minus 269 Grad Celsius oder 4 Kelvin) als auch bei Raumtemperatur. Außerdem sind Reinraumbedingungen einzuhalten: Partikel bis hinunter in



Für die Messkampagne wurden zwei Koppler in horizontaler Testposition unter einem lokalen Reinraumzelt montiert.
© A. Neumann/HZB

den Mikrometerbereich müssen entfernt und abgesaugt werden. Die Leistung soll von jeweils zwei Kopplern in die Kavität übertragen werden, um die individuelle Last zu reduzieren, aber auch um die Stabilität der Elektronen-Trajektorie im Beschleuniger zu verbessern.

Das Team um Axel Neumann vom HZB-Institut SRF (Supraleitende Hochfrequenz-Technologien) konnte zeigen, dass dieses Ziel realistisch ist. Sie haben dafür das Design der Hochleistungskoppler einer Gruppe aus dem nationalen Forschungszentrum für Hochenergiephysik in Japan (KEK) modifiziert. Die Messungen starteten mit niedriger Leistung, die nach und nach auf bis zu 45 Kilowatt erhöht wurde.

Die Wärmeentwicklung betrug 0,25 Kelvin pro Kilowatt Leistung. Bei einer Endleistung von 120 Kilowatt würde sich das Material um etwa 30 Grad Kelvin aufheizen. Dies ist eine gute Nachricht, denn solche Wärmemengen sind technisch durch die eingeplante Kühlung abführbar. „Beim japanischen Originaldesign war die Wärmeentwicklung um den Faktor vier höher als bei unserer adaptierten Form“, erklärt Neumann. „Wir haben zunächst die Messungen auf Leistungen unter 45 Kilowatt begrenzt. Erst wenn alle Koppler erfolgreich bei diesen Leistungen getestet sind, kommen die nächsten

Schritte. Wir sind nun jedoch sehr optimistisch. Extrapoliert man die Zahlen, dann sollte der Koppler in der Tat 120 Kilowatt im Dauerbetrieb problemlos schaffen“, sagt Jens Knobloch, der das HZB-Institut SRF Wissenschaft und Technologie leitet. arö

STROM PRODUZIERENDE HAUSWAND ALS REAL-LABOR

Im Beisein des Staatssekretärs für Wirtschaft, Energie und Betriebe des Landes Berlin, Christian Rickerts, hat das HZB im Herbst 2021 die **Solarfassade eines Forschungsneubaus** offiziell in Betrieb genommen. Das Besondere daran: Die elegante Fassade erzeugt in der Spitze nicht nur bis zu 50 Kilowatt Strom, sondern liefert gleichzeitig wichtige Erkenntnisse über das Verhalten der Solar-Module bei verschiedenen Witterungsbedingungen.

Solarenergie gilt als eine der vielversprechendsten erneuerbaren Energien. Immer mehr Häuser haben eine Photovoltaik-Anlage auf dem Dach, und vermehrt sind große Freiflächenanlagen zu sehen. Doch Solarmodule lassen sich auch vielfältiger integrieren, zum Beispiel in Gebäudefassaden. Durch die solare Aktivierung der gesamten Gebäudehülle wird die Photovoltaik zum Bauelement und macht Gebäude zu Stromerzeugern. Dabei lassen sich die Solarmodule auch optisch ansprechend integrieren. Seit drei Jahren berät die am HZB angesiedelte Beratungsstelle für bauwerkintegrierte Photovoltaik (BAIP) genau zu diesem Thema.

Messungen bei verschiedenen Wetterverhältnissen

Seit September 2021 macht das HZB selbst den Praxistest. „Erstmals wird ein komplettes Bauwerk mit einer fassadenintegrierten Photovoltaikanlage als Real-Labor betrieben. Die umfangreiche Messtechnik ermöglicht neue Erkenntnisse über das reale Verhalten von Solarmodulen in einer Fassade bei verschiedenen Jahreszeiten und Witterungsbedingungen, über einen langen Zeitraum“, sagt Björn Rau, der die Beratungsstelle BAIP am HZB leitet.

Das Real-Labor besteht aus 360 Dünnschicht-Solarmodulen aus Kupfer-Indium-Gallium-Diselenid (CIGS), die an drei Fassadenseiten installiert sind. Die Leistung beträgt je Modul circa 135 Watt. Die Peak-Leistung der gesamten Fassade liegt bei knapp 50 Kilowatt. Als zusätzliche Sensortechnik wurden unter anderem 72 Temperatur-, zehn Bestrahlungs- und vier Windsensoren installiert. Die Fassade dient zur langfristigen Untersuchung der PV-Erträge in Abhängigkeit von Umweltfaktoren (Verschmutzungen), Witterungsbedingungen (Sonne, Wind, Reflexion) und Himmelsrichtung. Damit ist ein Vergleich zwischen realen Daten und Simulationswerten von Ertragsprognosen möglich.

Eine Besonderheit besteht in der verdeckten Aufhängung. Sie ermöglicht eine rahmenlose Ausführung ohne zusätzliche Einfassung am Modulrand. Dadurch lassen sich die Module ideal mit der Metallvorhangfassade des Gebäudes kombinieren. Björn Rau betont: „Ganz bewusst haben wir auch Wert auf die gestalterische Integration der Module in die Gebäudehülle gelegt und mit der CIGS-Technologie das Materialsystem ausgewählt, über das am HZB eine sehr



Startklar! Prof. Dr. Bernd Rech (li.) und Christian Rickerts drückten den symbolischen roten Knopf zum Start des Real-Labors in Berlin-Adlershof.
© M. Setzpfandt/HZB

große Expertise existiert.“ Viele Forschungsgruppen am HZB arbeiten mit CIGS-Dünnschichten, von der Materialforschung bis hin zur Entwicklung von Bauelementen.

Im Gebäude wird an Beschleunigern geforscht

Die Fassade dient der Photovoltaik-Forschung als Real-Labor, doch im Gebäude passiert etwas ganz anderes: Hier entwickeln und bauen Forscherinnen und Forscher weltweit einzigartige Komponenten für BESSY II und andere Synchrotronstrahlungsquellen. Das Gebäude beherbergt einen Reinraum sowie diverse Labore und Montageplätze für die international renommierte Beschleunigerforschung des HZB.

red.

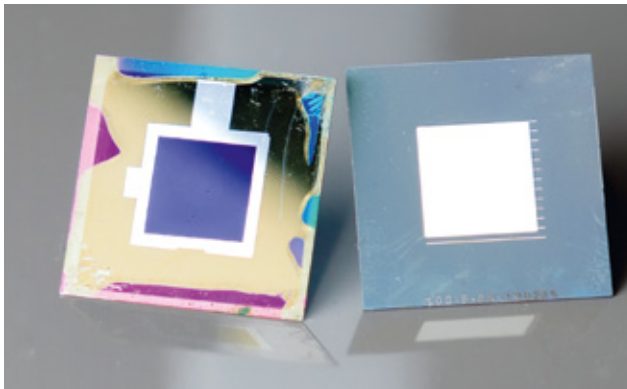
HIGHLIGHTS AUS DER FORSCHUNG – ENERGIE

Das HZB hat international eine Spitzenposition in der Photovoltaik-Forschung, liefert aber auch wichtige Beiträge auf dem Gebiet der Energiespeicherung. So arbeiten Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler zum Beispiel in der Batterieforschung und an der Entwicklung katalytisch aktiver Materialien, etwa um über eine Elektrolyse grünen Wasserstoff zu erzeugen. **Zu fast jeder Meldung gibt es einen ausführlicheren Text im HZB-Newsroom. Klicken Sie dafür auf dieses Symbol: ➔ Dort können Sie auch nach Daten und Stichworten suchen.**



WELTREKORD FÜR TANDEM-SOLARZELLEN

Drei HZB-Teams unter der Leitung von Christiane Becker, Bernd Stannowski und Steve Albrecht haben es gemeinsam geschafft, den Wirkungsgrad von komplett in-house hergestellten Perowskit-Silizium-Tandem-Solarzellen auf den neuen Rekordwert von 29,8 Prozent* zu steigern. Der Wert wurde offiziell zertifiziert und in den Charts des National Renewable Energy Laboratory verzeichnet. Damit rückt die 30-Prozent-Marke in greifbare Nähe. Am



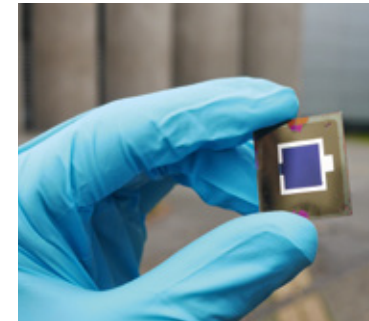
Die Perowskit-Silizium-Tandem-Solarzelle beruht auf zwei Innovationen: Einer nanotexturierten Frontseite (links) und einer Rückseite mit dielektrischem Reflektor (rechts).
© A. Cruz/HZB

HZB arbeiten mehrere Forschungsgruppen seit 2015 intensiv sowohl an den Perowskit-Halbleitern, als auch an Siliziumtechnologien und der Kombination von beiden zu innovativen Tandem-Solarzellen. „Ein Wirkungsgrad von 30 Prozent ist wie eine psychologische Grenze für diese faszinierende neue Technologie. Das könnte die Photovoltaikindustrie in naher Zukunft revolutionieren“, erklärt

Steve Albrecht, der die Perowskit-Dünnschichten im Hy-SPRINT-Innovationslab am HZB untersucht.

Nanotexturiertes Silizium

Für die Tandem-Solarzelle wurde der Fokus auf die optische Verbesserung der Silizium-Heterojunction Bottomzelle gelegt. Für die neue Arbeit untersuchten Philipp Tockhorn (Gruppe Albrecht) und Doktorand Johannes Sutter (Gruppe Becker), wie sich Nanostrukturen an verschiedenen Grenzflächen auf die Leistung einer Tandem-Solarzelle auswirken. Zunächst berechneten sie mit einer Computersimulation die Photostromdichte in den Perowskit- und Silizium-Subzellen für verschiedene Geometrien mit und ohne Nanotexturen. Anschließend stellten sie Perowskit-Silizium-Tandem-Solarzellen mit verschiedenen Strukturierungen her: „Schon die einseitige Nanotexturierung verbessert die Lichtabsorption und ermöglicht einen höheren Kurzschlussstrom im Vergleich zu einer planen Referenz“, sagt Sutter. Und Tockhorn ergänzt: „Bemerkenswert ist, dass die Nanotexturen auch zu einer leichten Verbesserung der elektronischen Qualität der Tandem-Solarzelle und zu einer besseren Filmbildung der Perowskit-Schichten führen.“ Auch an der Rückseite der Zelle, die das infrarote Licht zurück in den Silizium-Absorber reflektieren soll, wurden Verbesserungen erreicht. „Durch den Einsatz eines dielektrischen Reflektors konnten wir diesen



Die Weltrekordzelle (hier vor dem Elektronenspeicherring BESSY II) besitzt die für Forschungszwecke übliche Fläche von etwa einem Quadratmeter und erreicht einen Wirkungsgrad von 29,8 Prozent.

© A. Al-Ashouri/HZB

Teil des Sonnenlichts effizienter nutzen, was zu einem höheren Photostrom führt“, sagt Alexandros Cruz Bournazou, Postdoc in Bernd Stannowskis Gruppe.

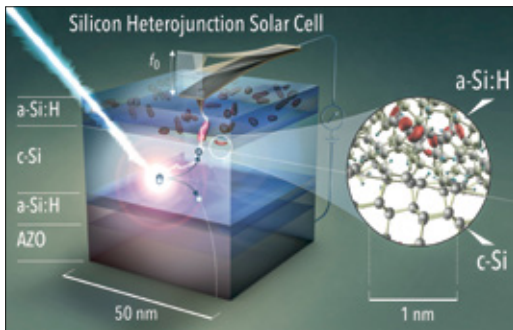
Die Ergebnisse zeigen den Weg für weitere Verbesserungen auf. Denn die Simulationen legen nahe, dass sich die Leistung durch eine beidseitige Nanostrukturierung der Absorberschichten noch weiter steigern ließe. Ein Wirkungsgrad von mehr als 30 Prozent könne erreichbar sein, davon sind die Forschenden überzeugt. Das Rennen um die beste Tandem-Solarzelle bleibt spannend. arö ↻

*Dieser Weltrekordwert galt bis Sommer 2022. Inzwischen liegt er bei mehr als 30 Prozent (erzielt von der EPFL in Lausanne).

Publikation zur vorherigen „Weltrekordzelle“:

Science (2020): Monolithic perovskite/silicon tandem solar cell with >29% efficiency by enhanced hole extraction. A. Al-Ashouri, E. Köhnen, A. Magomedov, H. Hempel, P. Caprioglio, J.A. Márquez, A. Belen Morales Vilches, E. Kasparavicius, J.A. Smith, N. Phung, D. Menzel, M. Grischek, L. Kegelmann, D. Skroblin, C. Gollwitzer, T. Malinauskas, M. Jošt, G. Matič, B. Rech, R. Schlatmann, M. Topič, L. Korte, A. Abate, B. Stannowski, D. Neher, M. Stoltefoht, T. Unold, V. Getautis, and S. Albrecht. DOI: 10.1126/science.abd4016

SOLARZELLEN: VERLUSTE AUF DER NANOSKALA SICHTBAR GEMACHT



Mit einer leitfähigen AFM-Spitze wird die Probenoberfläche einer a-Si:H/c-Si-Grenzfläche unter Ultrahochvakuum auf der nm-Skala abgetastet. So werden die Transportkanäle der Ladungsträger über Defekte im a-Si:H (rote Zustände im vergrößerten Ausschnitt) sichtbar gemacht. © M. Künsting /HZB

die Solarzellenoberflächen im Ultrahochvakuum ab, und wiesen winzige, nanometergroße Kanäle für die nachteiligen Dunkelströme nach, die auf Unordnung in der a-Si:H Schicht beruhen.

Die Ergebnisse weisen darauf hin, dass hier eine kurzfristige Stromblockade zu sehen ist, die durch lokale Ladung entsteht, die in benachbarten Defekten eingefangen wird. Diese Ladung kann auch dafür sorgen, dass die lokale Photospannung an einem Stromkanal auf oberhalb von einem Volt steigt, was weit oberhalb dessen liegt, was an einem makroskopischen Kontakt abgreifbar ist. „An dieser Schnittstelle von der Nano- zur Makrowelt liegt nicht nur die spannende Physik der Heterokontakte sondern auch das Verständnis, wie sich der Wirkungsgrad von Siliziumsolarzellen noch gezielter verbessern lässt“, sagt Bernd Stannowski, der für die Entwicklung industrieller Silizium-Heterojunction-Solarzellen am HZB verantwortlich ist. arö →

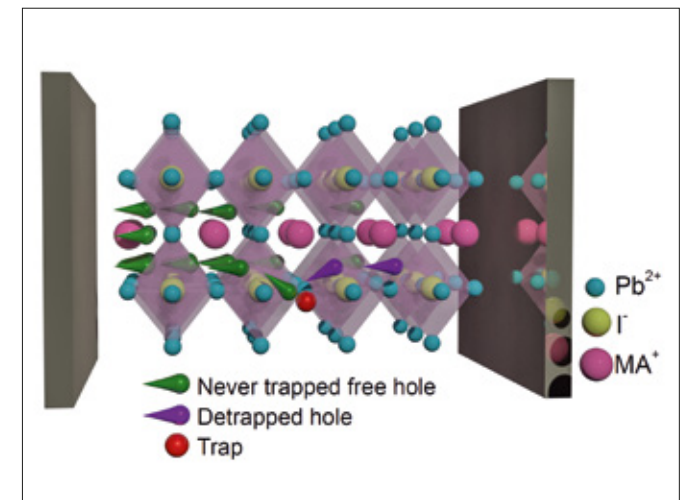
ACS Applied Nano Materials (2021): Imaging of Bandtail States in Silicon Heterojunction Solar Cells: Nanoscopic Current Effects on Photovoltaics. M. Y. Teferi, H. Malissa, A. Belen Morales-Vilches, C. T. Trinh, L. Korte, B. Stannowski, C. C. Williams, C. Boehme, and K. Lips. DOI: 10.1021/acsanm.0c02704

Solarzellen aus kristallinem Silizium erreichen in Verbindung mit selektiven Kontakten aus amorphem Silizium (a-Si:H) Spitzenwirkungsgrade. Ihre Effizienz wird jedoch durch Verluste in diesen Kontaktschichten begrenzt. Nun hat ein Team am HZB und der University of Utah, USA, experimentell gezeigt, wie solche Kontaktschichten auf der Nanometerskala Verlustströme generieren und was deren physikalischer Ursprung ist. Mit einem leitfähigen Atom-Kraftmikroskop tasteten sie

DEFEKTE FANGEN LADUNGSTRÄGER IN PEROWSKIT-SOLARZELLEN EIN – UND GEBEN SIE WIEDER FREI

Ein Team des HZB und der Karls-Universität in Prag hat untersucht, wie in den sogenannten MAPI-Perowskit-Halbleitern Ladungsträger mit unterschiedlichen Defekten wechselwirken. Die Studie zeigt, dass ein großer Teil der Defekte eingefangene Ladungsträger schnell wieder freigibt. Die Messergebnisse ermöglichen die zuverlässige Unterscheidung zwischen Elektronen- und Löchertransport und die Bestimmung ihrer wichtigsten Parameter: Mobilitäten, Lebensdauern und Diffusionslängen. „Damit gibt diese Arbeit Antworten auf Fragen, die schon lange Zeit im Bereich der Perowskit-Solarzellen diskutiert wurden“, sagt Artem Musiienko, Erstautor der Publikation und Postdoc am HZB.

Eine wichtige Erkenntnis: Ein großer Teil der Defekte gibt die eingefangenen Ladungsträger nach kurzer Zeit wieder frei. „Das könnte eine Erklärung für die besonders hohen Wirkungsgrade der MAPI-Perowskite sein“, sagt Musiienko. Diese Ergebnisse ebnen den Weg, MAPI-Perowskite hinsichtlich der Defektkonzentration zu optimieren, um hohe Wirkungsgrade mit guter Stabilität zu kombinieren. arö →



Fünf verschiedene Arten von Defekten in MAPI-Perowskiten wurden untersucht und charakterisiert. Das Ergebnis: Ein großer Teil der Defekte hält die Ladungsträger nicht lange fest. © HZB

Advanced Functional Materials (2021): Defects in Hybrid Perovskites: The Secret of Efficient Charge Transport. A. Musiienko, D. R. Ceratti, J. Pipek, M. Brynza, H. Elhadidy, E. Belas, M. Betušiak, G. Delpont, and P. Praus. DOI: 10.1002/adfm.202104467

BLEIFREIE PEROWSKIT-SOLARZELLEN – WIE FLUOR-ADDITIVE DIE QUALITÄT VERBESSERN

Blei-Halogenid-Perowskit-Solarzellen versprechen sehr hohe Wirkungsgrade zu geringen Herstellungskosten. Die Toxizität von Blei wirft jedoch ernsthafte Umweltprobleme auf. Die Suche nach bleifreien Alternativen ist in vollem Gang. Zinn gilt derzeit als die beste Wahl, neigt aber zur Oxidation und unkontrollierten Kristallisation, was die Fertigung, Leistung und Stabilität der Solarzellen einschränkt. Eine der gängigsten Strategien, um Zinn-basierte Perowskit-Schichten guter Qualität zu erhalten, besteht in der Verwendung von Zinnfluorid (SnF_2) als Additiv im lösungsbasierten Herstellungsprozess. Viele Studien zeigen, dass SnF_2 die optoelektronischen und morphologischen Eigenschaften der Perowskit-Schichten verbessert. Die Ursache für diese Wirkung war bisher nicht erforscht.

Einlagerung in die Perowskit-Struktur beobachtet

Ein Team um Antonio Abate hat erstmals die chemische Rolle von SnF_2 in der Perowskit-Vorläuferlösung aufgeklärt, die für diese Verbesserungen verantwortlich ist. Der Schlüssel liegt in den chemischen Eigenschaften der Fluoridanionen. Zinn oxidiert leicht von Sn(II) zu Sn(IV) und erzeugt in dieser Form Defekte in der Halbleiterschicht. Ergebnisse der Kernspinresonanz-Analyse zeigten nun, dass die Fluoridanionen aus SnF_2 eine starke Affinität zu Sn(IV) aufweisen und die Verbindung SnF_4 bilden. Mit Photoelektronenspektroskopie an BESSY II konnte das Team nachweisen, dass SnF_4 eine geringere Tendenz zeigt, in die Perowskit-Struktur eingelagert zu werden. Durch wird der

Sn(IV) -Gehalt in der Dünnschicht deutlich reduziert. Schließlich zeigten Messungen der Röntgen-Kleinwinkelstreuung an BESSY II, dass das Fluorid den Keimbildungsprozess in der Vorläuferlösung positiv beeinflusst und so die Kristallisation verbessert.

„Vereinfacht gesagt binden Fluoridanionen oxidiertes Sn(IV) in der Lösung, als SnF_4 . Die verminderte Bindungsbereitschaft dieses Materials an perowskitähnliche Spezies verhindert seinen Einschluss in den Perowskitfilm“, sagt Jorge Pascual, ein Postdoc aus Abates Gruppe, der an Zinn-Halogenid-Perowskiten forscht. „Darüber hinaus verbessert Fluorid die Kolloidstabilität von Zinn-Halogenid-Perowskit-Vorläuferlösungen, wobei die Vorläufer-Untereinheiten eine gleichmäßiger verteilte Vorordnung bilden, was zu einem homogeneren Kristallwachstum führt“, erläutert Marion Flatken, die die Untersuchungen als Teil ihrer Promotion durchführte.

Diese Ergebnisse kommen zur richtigen Zeit. Auf Basis dieser Studie könnten sich noch andere Additive finden las-



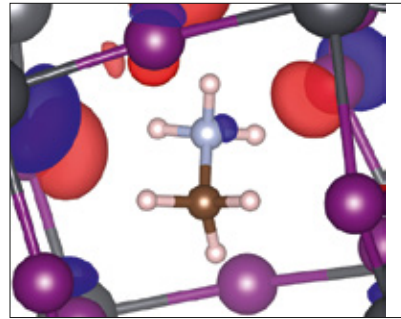
Die Beigabe von Fluor-Additiven steigert die Qualität der Perowskit-Schicht. Analysen an BESSY II zeigen nun, warum. © M. Künsting/HZB

sen, mit denen die Eigenschaften von bleifreien Perowskit-Solarzellen gezielt weiter verbessert werden. arö →

Angewandte Chemie, international Edition (2021): Fluoride Chemistry in Tin Halide Perovskites. Jorge Pascual, Marion Flatken, Roberto Félix, Guixiang Li, Silver-Hamill Turren-Cruz, Mahmoud H. Aldamasy, Claudia Hartmann, Meng Li, Diego Di Girolamo, Giuseppe Nasti, Elif Hüsam, Regan G. Wilks, André Dallmann, Marcus Bär, Armin Hoell, Antonio Abate. DOI: 10.1002/anie.202107599

ROLLE DER WASSERSTOFFBRÜCKENBINDUNGEN BELEUCHTET

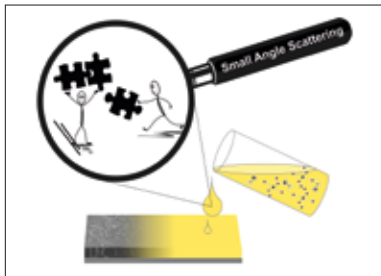
Auf der Basis von Röntgenmessungen an Methylammonium-Perowskit-Halbleitern hat ein HZB-Team gezeigt, welche Rolle Wasserstoffbrückenbindungen in diesen Materialien spielen. Außerdem fand die Forschungsgruppe, dass Strahlenschäden durch weiche Röntgenstrahlung bei dieser empfindlichen Materialklasse noch schneller auftreten als erwartet. Beide Ergebnisse liefern wichtige Hinweise für die Perowskit-Materialforschung für Solarzellen.



Der Ausschnitt zeigt ausgewählte Orbitale in MAPI-Perowskit im Grundzustand. © HZB arö →

Journal of Physical Chemistry Letters (2021): Dynamic Effects and Hydrogen Bonding in Mixed-Halide Perovskite Solar Cell Absorbers. R. G. Wilks, A. Erbing, G. Sadoughi, D. E. Starr, E. Handick, F. Meyer, A. Benkert, M. Iannuzzi, D. Hauschild, W. Yang, M. Blum, L. Weinhardt, C. Heske, H. J. Snaith, M. Odelius, and M. Bär. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.1c00745

EINSICHTEN IN DIE FRÜHSTADIEN DER STRUKTURBILDUNG



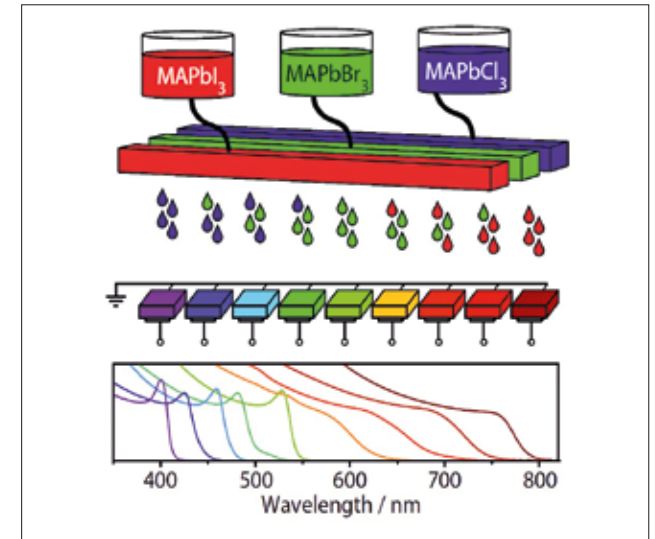
Mit Kleinwinkelstreuung wurden Perowskit-Solarzellen untersucht. © M. Flatken/HZB

J. Mater. Chem. A. (2021): Small-angle scattering to reveal the colloidal nature of halide perovskite precursor solutions. Marion A. Flatken, Armin Hoell, Robert Wendt, Eneli Härk, André Dallmann, Albert Prause, Jorge Pascual, Eva Unger, and Antonio Abate. DOI: 10.1039/D1TA01468D

Mit der Methode der Kleinwinkelstreuung an der PTB-Röntgen-Beamline von BESSY II konnte ein HZB-Team um Antonio Abate experimentell die kolloidale Chemie von Perowskit-Vorläuferlösungen für Solarzellen untersuchen. Die Ergebnisse sind hilfreich, um die Herstellungsverfahren weiter zu optimieren und die Qualität solcher Perowskit-Dünnschichten bei der Herstellung besser und systematischer zu kontrollieren. arö →

PEROWSKIT-SPEKTROMETER MIT TINTENSTRAHLDRUCKER

Metallhalogenid-Perowskite sind eine faszinierende Materialklasse mit einem breiten Spektrum von möglichen Anwendungen in der Optoelektronik und Photovoltaik. Die Herstellung elektronischer Bauteile mit diesem Material ist besonders attraktiv, weil sie aus einer Lösung, das heißt aus einer Tinte, möglich ist. Dazu werden kommerziell erhältliche Salze in einem Lösungsmittel gelöst und dann auf ein Substrat aufgebracht. Mit einem Tintenstrahl-druckverfahren haben Teams aus dem Innovation Lab HySPRINT am HZB und der Humboldt-Universität zu Berlin Photodetektoren auf Basis von hybriden Perowskit-Halbleitern produziert. Durch gezieltes Abmischen von nur drei „Tinten“ konnten sie die Eigenschaften des Halbleiters während des Druckvorgangs präzise einstellen. Der Tintenstrahl-druck ist in der Industrie eine etablierte Herstellungsmethode, die eine schnelle und kostengünstige Verarbeitung von Lösungen ermöglicht. Die Ausweitung von der großflächigen Beschichtung auf die kombinatorische Material-synthese eröffnet neue Möglichkeiten für die Herstellung verschiedener elektronischer Komponenten in einem einzigen Druckschritt. V. Schröder / F. Hermerschmidt →

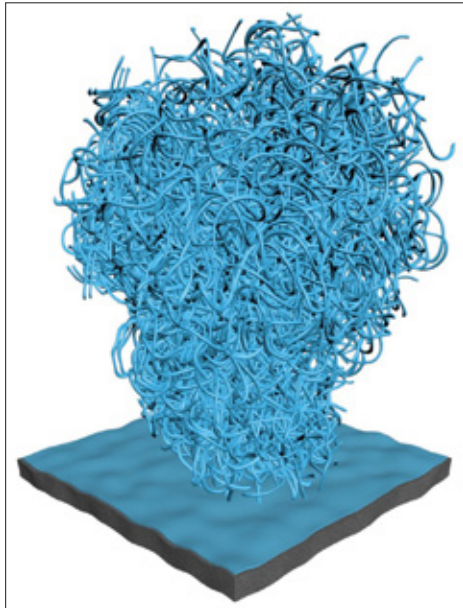


Mit drei gezielt abgemischten „Tinten“ können jetzt Metallhalogenid-Perowskite auch gedruckt werden. © DOI: 10.1002/adem.202101111

Advanced Engineering Materials (2021): Using Combinatorial Inkjet Printing for Synthesis and Deposition of Metal Halide Perovskites in Wavelength-Selective Photodetectors. Vincent R. F. Schröder, Felix Hermerschmidt, Sabrina Helper, Carolin Rehermann, Giovanni Ligorio, Hampus Näsström, Eva L. Unger, Emil J. W. List-Kratochvil. DOI: 10.1002/adem.202101111

ZERSTÖRERISCHEN LITHIUM-DENDRITEN AUF DER SPUR

Im Inneren von Lithium-Batterien können sich Dendriten bilden. Die kleinen Nadeln oder Bäumchen gleichen den verästelten Fortsätzen unserer Nervenzellen, von denen sie ihren Namen erhalten haben. Sie entstehen, wenn die Ionen des Alkalimetalls beim Laden und Entladen zwischen den beiden Polen der Batterie hin und herwandern und auf winzige



Während des Betriebes von Batteriespeichern wachsen die baumartigen Lithium-Dendriten kontinuierlich und können in Batterien irreparable Schäden verursachen. © I. Manke/HZB, K. Dong

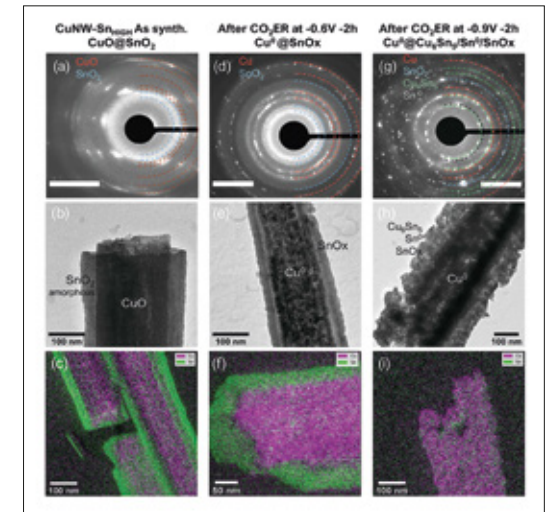
Kristallisationskeime treffen. Mit jedem Lade- und Entladezyklus wachsen sie und schließen irgendwann die Batterie kurz. Die wird dadurch zerstört – in manchen Fällen sogar mit einer Explosion. Noch ist nicht klar, wie sich diese Gefahr bannen und die Lebensdauer der Energiespeicher erhöhen lässt. Denn wie genau die Dendriten entstehen und wachsen, ist bis heute nicht vollständig verstanden. Um das Geheimnis von Keimbildung und Wachstum im Lithium zu lüften, hat eine Forschergruppe einen tiefen Blick ins Innere der Batterie geworfen und dafür zwei besondere Untersuchungsmethoden am HZB genutzt. Mit der fokussierten Ionenstrahl-Rasterelektronenmikroskopie und der kryogenen Transmissionselektronenmikroskopie gelang den Forschern ein detailgetreuer, hoch aufgelöster Einblick in die inneren Strukturen der Lithium-Ablagerungen. Um zu verstehen, welche Mechanismen bei der Ablagerung wirken, sind diese dreidimensionalen Bilder ein Meilenstein.

Kai Dürfeld 

ACS Energy Letter (2021): Unravelling the Mechanism of Lithium Nucleation and Growth and the Interaction with the Solid Electrolyte Interface. K. Dong, Y. Xu, J. Tan, M. Osenberg, F. Sun, Z. Kochovski, D. Tung Pham, S. Mei, A. Hilger, E. Ryan, Y. Lu, J. Banhart, and I. Manke. DOI: 10.1021/acsenerylett.1c00551

PROZESSE IN KUPFER-ZINN-KATALYSATOREN ENTSCHLÜSSELT

Das klimaschädliche Gas CO_2 lässt sich elektrochemisch in nützliche Ausgangsstoffe für die Industrie umwandeln. Dafür benötigt man jedoch Katalysatoren, die über längere Zeit stabil sind. Bimetallische Kupfer-Zinn-Katalysatoren ermöglichen eine selektive CO_2 -Reduktion, bei der entweder Kohlenmonoxid oder Formiat entsteht. Eine internationale Forschungsgruppe hat am HZB aus Oxiden hergestellte Kupfer-Zinn-Katalysatoren untersucht, die auf die Produktion von Kohlenmonoxid oder Formiat abgestimmt werden können. Ziel war es, das komplexe Zusammenwirken von Kupfer und Zinn zu verstehen, die zu den unterschiedlichen Endprodukten bei der Katalyse führen. Die Gruppe fand heraus, dass sich die beiden Metalle während der Elektroreduktion von CO_2 erheblich verändern. Die sich dynamisch verändernden Massen- und Oberflächenstrukturen konnten durch die Vielzahl der am HZB verfügbaren präzisen Messmethoden offengelegt werden. Das Ergebnis: Sowohl bei der Reduktion von CO_2 zu Kohlenmonoxid als auch der zu Formiat wandelt sich das Kupfer des Katalysators in metallisches Cu_0 um. Für die Frage, welches Endprodukt am Ende der Katalyse herauskommt, ist der Gehalt des Zinndioxids im Katalysator entscheidend.



Mit drei unterschiedlichen Messmethoden verfolgten die Forschenden die dynamischen Veränderungen von Kupfer und Zinn in Katalysatoren zur Elektroreduktion von CO_2 .

© DOI: 10.1002/aenm.202103328

Advanced Energy Materials (2021): Determining Structure-Activity Relationships in Oxide Derived Cu-Sn Catalysts During CO_2 Electroreduction Using X-Ray Spectroscopy. L. C. Pardo Pérez, A. Arndt, S. Stojkovic, I. Y. Ahmet, J. T. Arens, F. Dattila, R. Wendt, A. Guilherme Buzanich, M. Radtke, V. Davies, K. Höflich, E. Köhnen, P. Tockhorn, R. Golnak, J. Xiao, G. Schuck, M. Wollgarten, N. López, and M. T. Mayer. DOI: 10.1002/aenm.202103328

SOLARER WASSERSTOFF FÜR DIE ANTARKTIS

Wie sich am Südpol mit Sonnenlicht Wasserstoff erzeugen lässt und welche Methode dafür am meisten verspricht, hat ein Team vom HZB-Institut für Solare Brennstoffe, der Universität Ulm und der Universität Heidelberg untersucht. Ausgangspunkt war ein Forschungsbesuch der Umweltphysikerin Kira Rehfeld, Universität Heidelberg, in der Antarktis. Dabei fiel ihr das intensive Licht der Region auf, das theoretisch für die Erzeugung von Wasserstoff genutzt werden könnte. „Unsere Idee war, mithilfe von Solarmodulen vor Ort während des antarktischen Sommers klimaneutralen Wasserstoff zu produzieren, indem man Wasser durch Elektrolyse in Wasserstoff und Sauerstoff aufspaltet“, sagt Matthias May, zu jener Zeit Postdoc am HZB-Institut für Solare Brennstoffe. Dafür ver-

Forschungsstationen wie Neumayer III im antarktischen Königin-Maud-Land, betrieben vom Alfred-Wegener-Institut der Helmholtz-Gemeinschaft, könnten künftig polar erzeugten Wasserstoff als Energiequelle nutzen.
© F. Riess/wikipedia
CC BY-SA 3.0 de

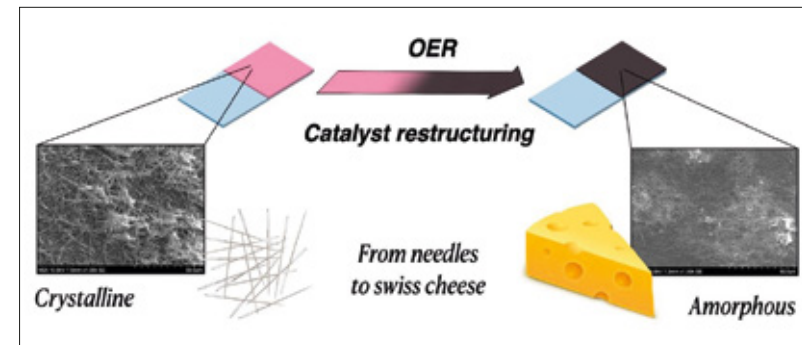


glich das Team experimentell zwei unterschiedliche Ansätze miteinander: Einen konventionellen Aufbau und einen neueren, thermisch gekoppeltem Aufbau, in welchem das Photovoltaik-Modul in engem Kontakt mit der Wand des Elektrolysebehälters steht, sodass ein Wärmeaustausch stattfindet. Die von der Volkswagen-Stiftung unterstützte Studie bekräftigt, dass thermische gekoppelte Systeme eine potenziell höhere Effizienz besitzen, als thermisch entkoppelte. Ob diese Vorteile wirtschaftlich genutzt werden können, muss sich aber erst noch zeigen.

arö →

Energy & Environmental Science (2021): Efficiency gains for thermally coupled solar hydrogen production in extreme cold. Moritz Kölbach, Kira Rehfeld, and Matthias M. May. DOI: 10.1039/D1EE00650A

WARUM WERDEN BESTIMMTE KATALYSATOREN IM BETRIEB BESSER?



Schema der elektrochemischen Restrukturierung von Kobalt-Arsenid. Die feinen nadelartigen Strukturen schmelzen bei der Umwandlung in ein Material, das porös wie ein Schweizer Käse ist. © HZB

In der Regel werden Katalysatormaterialien für die Sauerstoffentwicklung bei der elektrolytischen Wasserspaltung mit der Zeit schlechter, sie altern. Kristallines Kobalt-Arsenid gilt dagegen als Modellsystem für eine interessante Gruppe von Katalysatoren zur Wasserstoffherzeugung, deren Leistungen sich im Lauf der Elektrolyse unter bestimmten Bedingungen sogar steigern. Nun hat ein Team um Marcel Risch an BESSY II aufgeklärt, dass zwei gegenläufige Entwicklungen dafür verantwortlich sind. Einerseits nimmt die katalytische Aktivität der einzelnen Katalysezentren im Verlauf der Elektrolyse ab, doch gleichzeitig verändert sich auch die Morphologie der Katalysatorschicht. Unter günstigen Bedingungen kommen dadurch wesentlich mehr Katalysezentren in Kontakt mit den Elektrolyten, sodass die Leistungsfähigkeit des Katalysators insgesamt steigen kann. Marcel Risch hat dafür eine anschauliche Erklärung: „Das Material wird mit der Zeit zu einem Schweizer Käse mit vielen Löchern und einer großen Oberfläche, an der sehr viel mehr Reaktionen stattfinden können.“ Der Verlust an Aktivität wird durch die steigende Zahl an Reaktionen überkompensiert. Risch schätzt, dass sich solche Mechanismen auch in vielen anderen Materialklassen finden lassen, die zu geeigneten Katalysatoren entwickelt werden können.

arö →

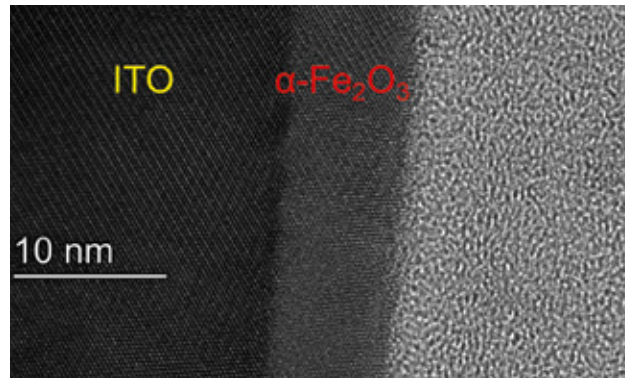
Advanced Energy Materials (2021): Requirements for beneficial electrochemical restructuring: A model study on a cobalt oxide in selected electrolytes. J. Villalobos, D. González-Flores, R. Urcuyo, M. L. Montero, G. Schuck, P. Beyer, M. Risch. DOI: 10.1002/aenm.202101737

GRÜNER WASSERSTOFF: ISRAELISCH-DEUTSCHES TEAM LÖST DAS RÄTSEL UM ROST

Metalloxide wie Rost (Hämatit) eignen sich als Photoelektroden, um „grünen“ Wasserstoff mit Sonnenlicht zu erzeugen. Doch trotz jahrzehntelanger Forschung an diesem preisgünstigen Material sind die Fortschritte begrenzt. Ein Team am HZB hat nun gemeinsam mit Partnern von der Ben-Gurion-Universität und dem Technion in Israel die optoelektronischen Eigenschaften von Rost und anderen Metalloxiden in bisher nicht gekanntem Detail analysiert. Die Gruppe am Technion untersuchte, wie die Wellenlänge des absorbierten Lichts die photoelektrochemischen Eigenschaften der Hämatit-Dünnschichten beeinflusst, während das HZB-Team mit zeitaufgelösten Mikrowellenmessungen die Beweglichkeit der Ladungsträger in dünnen Rostschichten bestimmte.

Durch die Kombination ihrer Ergebnisse gelang es den Forschenden, eine grundlegende physikalische Eigenschaft des Materials zu extrahieren, die bei der Betrachtung anorganischer Solarabsorber bisher vernachlässigt wurde: Das Spektrum der Photogenerationsausbeute. „Grob gesagt bedeutet dies, dass nur ein Teil der absorbierten Licht-Energie im Hämatit auch mobile Ladungsträger erzeugt, der Rest erzeugt eher lokalisierte Ladungsträger und geht somit verloren“, erklärt Daniel Grave von der Ben-Gurion-Universität.

„Dieser neue Ansatz gibt einen experimentellen Einblick in die Wechselwirkung zwischen Licht und Material in

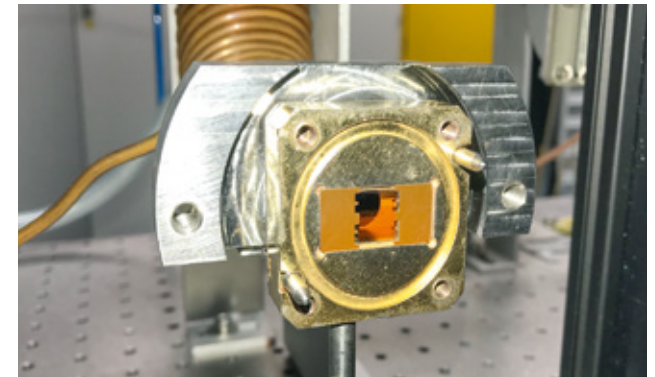


Photoelektroden aus „Rost“ wären eine preiswerte und stabile Lösung, um grünen Wasserstoff zu erzeugen. Aber ihre Effizienz ist begrenzt. Die TEM-Aufnahme zeigt eine Photoanode mit einer dünnen photoaktiven Rostschicht. © Technion

Hämatit und erlaubt es, das Spektrum in produktive und nicht-produktive Absorption zu unterscheiden“, erklärt Avner Rothschild vom Technion. „Damit konnten wir zeigen, dass die effektive Obergrenze für die Umwandlungseffizienz von Hämatit-Photoanoden deutlich niedriger ist als bisher berechnet“, sagt Grave. Nach der neuen Berechnung kommen die heutigen „Champions“ unter den Hämatit-Photoanoden schon recht nahe an das theoretisch mögliche Maximum heran.

Potenzial von Anodenmaterial schneller ermitteln

Der Ansatz wurde auch erfolgreich auf das Modellmaterial TiO_2 und das derzeit beste Metalloxid-Photoanodenmaterial BiVO_4 angewendet. „Mit diesem neuen Ansatz haben wir unserem Arsenal ein mächtiges Werkzeug hin-

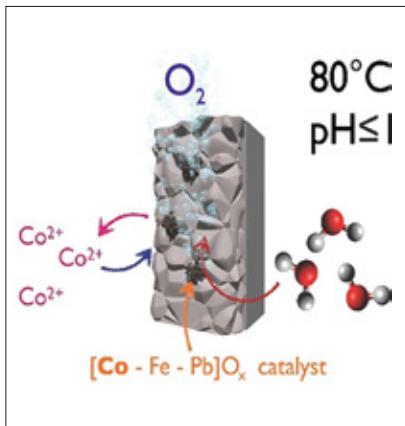


Das HZB-Team konnte mit zeitaufgelösten Mikrowellenmessungen die Photoleitfähigkeit in den dünnen Rostschichten bestimmen. Hier eine Aufnahme während der Messungen. © HZB

zugefügt, das es uns ermöglicht, das tatsächliche Potenzial von Photoelektrodenmaterialien zu ermitteln. Wenn wir dies auf neuartige Materialien anwenden, wird dies hoffentlich die Entdeckung und Entwicklung der idealen Photoelektrode für die solare Wasserspaltung beschleunigen. Es würde uns auch erlauben, ‘schnell zu scheitern’, was bei der Entwicklung neuer Absorbermaterialien wohl ebenso wichtig ist“, sagt Dennis Friedrich vom Institut für Solare Brennstoffe des HZB. arö ↻

Nature Materials (2021): Extraction of mobile charge carrier photogeneration yield spectrum of ultrathin-film metal oxide photoanodes for solar water splitting. Daniel A. Grave, David S. Ellis, Yifat Piekner, Moritz Kölbach, Hen Dotan, Asaf Kay, Patrick Schnell, Roel van de Krol, Fatwa F. Abdi, Dennis Friedrich and Avner Rothschild. DOI: 10.1038/s41563-021-00955-y

KATALYSATORSTABILITÄT DURCH KOBALTSELEKTIVE SELBSTHEILUNG N

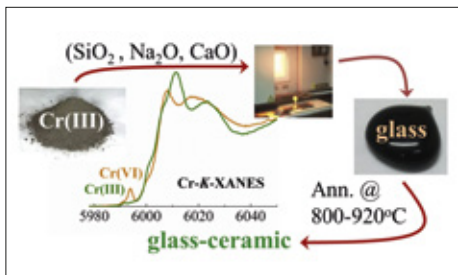


Instabilität und Kosten von Anoden für die katalytische Oxidation von Wasser mit sauren Elektrolyten können durch den Einsatz eines Kobalt-Eisen-Bleioxid-Elektrokatalysators gesenkt werden. Der Grund: Der Katalysator stabilisiert sich durch einen kobaltselektiven Selbstheilungsmechanismus. Den dauerhaften Betrieb eines solchen Katalysators hat ein internationales Forscherteam an BESSY II bewiesen. cn

Angewandte Chemie (2021): Stable Acidic Water Oxidation with a Cobalt-Iron-Lead Oxide Catalyst Operating via a Cobalt-Selective Self-Healing Mechanism. D. Simondson, M. Chatti, S. A. Bonke, M. F. Tesch, R. Golnak, J. Xiao, D. A. Hoogeveen, P. V. Cherepanov, J. L. Gardiner, A. Tricoli, D. R. MacFarlane, A. N. Simonov. DOI: 10.1002/anie.202104123

Mit dem $[\text{Co-Fe-Pb}] \text{O}_x$ -Anodenkatalysator könnte Wasserstoff kostengünstig produziert werden. © DOI: 10.1002/anie.202104123

CHROM IN STABILISIERTEN GERBEREISCHLÄMMEN N



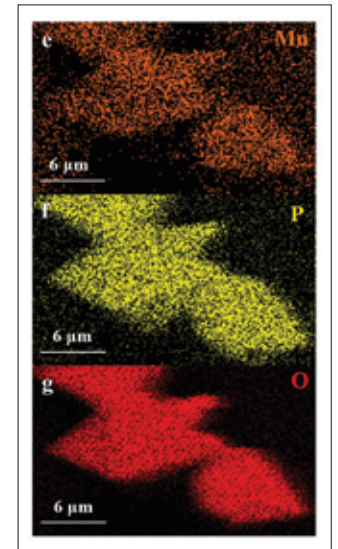
An BESSY II wurde die Reduktion von Chrom-(VI) untersucht. © DOI: 10.1016/j.jhazmat.2020.123734

Journal of Hazardous Materials (2021): Probing the structural role of Cr in stabilized tannery wastes with X-ray absorption fine structure spectroscopy. F. Pinakidou, M. Katsikini, S. Varitis, Ph. Komninou, G. Schuck, E.C. Paloura. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2020.123734

Sogenannte Chrom-VI-Verbindungen, wie sie etwa beim Gerben von Leder entstehen, wirken allergen bis akut toxisch. Eine Forschergruppe der Aristoteles Universität Thessaloniki hat am HZB mithilfe von Röntgen-Absorptions-Feinstruktur-Spektroskopie (XAFS) gezeigt, dass die effektive Reduktion von Chrom-(VI) und die strukturelle Rolle von Chrom stark von der chemischen Zusammensetzung des Abfalls abhängen. cn

EIN STABILER KATALYSATOR AUF MANGANBASIS FÜR DIE WASSERSTOFFPRODUKTION N

Eine der wichtigsten katalytischen Reaktionen für das Leben auf der Erde, die Oxidation von Wasser zu molekularem Sauerstoff, findet im sauerstoffentwickelnden Komplex des Photosystems II statt. Sie wird durch ein manganhaltiges Cluster ermöglicht. Um diesen Prozess künstlich nachzubilden und für die Produktion von Wasserstoff als regenerativem Energieträger in großen Mengen zu nutzen, wird weltweit intensiv an Katalysatoren auf Manganbasis geforscht. Bislang sind deren katalytische Leistung und Stabilität unbefriedigend. Ein internationales Forschungsteam hat erstmals ein Anodenmaterial auf Manganbasis entwickelt, das die elektrokatalytische Wasseroxidation und die selektive Oxygenierung von organischen Stoffen mit der bisher höchsten Effizienz kombiniert. Das gelang ihnen durch den Einsatz von spiralförmigen Manganborophosphaten, die eine neue Materialklasse darstellen. Die einzigartig hohe katalytische Aktivität und Haltbarkeit (mehr als fünf Monate) des Materials in alkalischen Medien sind auf ihre unerwartete Oberflächenumwandlung in eine amorphe MnO_x -Phase mit einer Birnessit-ähnlichen Kurzstreckenordnung und oberflächenstabilisierten MnIII-Stellen unter verlängerter elektrischer Vorspannung zurückzuführen. Diesen Prozess konnte das Team durch eine Kombination aus In-situ-Raman- und Quasi-In-situ-Röntgenabsorptionsspektroskopie sowie Ex-situ-Methoden an der Röntgenquelle BESSY II am HZB eindeutig nachweisen. cn



EDX-Mapping von hexagonalen LiMnBPO -Kristallen, bei dem eine gleichmäßige Verteilung von Mangan (orange), Phosphor (gelb) und Sauerstoff (rot) erreicht wurde, was die Phasenreinheit des Produkts bestätigt.

© DOI: 10.1002/adma.202004098

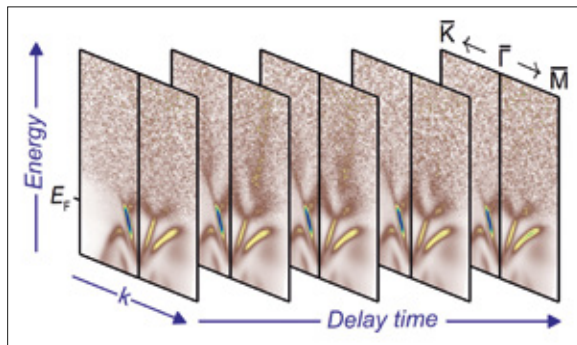
Advanced Materials (2021): Combination of Highly Efficient Electrocatalytic Water Oxidation with Selective Oxygenation of Organic Substrates using Manganese Borophosphates. Prashanth W. Menezes, Carsten Walter, Biswarup Chakraborty, Jan Niklas Hausmann, Ivelina Zaharieva, Achidi Frick, Elizabeth von Hauff, Holger Dau, Matthias Driess. DOI: 10.1002/adma.202004098

HIGHLIGHTS AUS DER FORSCHUNG – INFORMATION

Am HZB wird intensive Grundlagenforschung im Bereich der Informationstechnologien betrieben. Ziel ist es, ein besseres Verständnis von Prozessen und Strukturen auf atomarer Ebene oder von Elektronenspins zu gewinnen. Mit diesem Wissen können die Speicherkapazitäten und der Energieverbrauch von Informationstechnik verbessert und neue Anwendungsgebiete erschlossen werden. **Zu fast jeder Meldung gibt es einen ausführlicheren Text im HZB-Newsroom. Klicken Sie dafür auf dieses Symbol:** ➡ **In unserem Newsroom finden Sie darüber hinaus noch weitere Nachrichten aus unserer Forschung im Bereich Information.**



TOPOLOGISCHE MATERIALIEN FÜR DIE ULTRASCHNELLE SPINTRONIK



Schnappschüsse der elektronischen Struktur von Antimon (Sb) mit Zeitauflösung im Femtosekundenbereich. Besonders zu beachten ist die Region oberhalb der Fermi-Energie E_F .

© DOI: 10.1038/s42005-021-00657-6

Elektronen im Materialvolumen nicht beweglich sind. Darüber hinaus sind die Leitungselektronen in der „Haut“ des Materials grundsätzlich spinpolarisiert und bilden robuste, metallische Oberflächenzustände, die als Kanäle genutzt werden könnten, um Spinströme auf Femtosekunden-Zeitskalen ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$) zu erzeugen.

Ein Team um den HZB-Physiker Jaime Sánchez-Barriga hat neue Einblicke in die ultraschnelle Anregung von topologischen Zuständen in einkristallinem Antimon (Sb) gewonnen. Mit zeit- und spinaufgelösten Methoden untersuchten die Physiker an BESSY II, wie das komplexe Wechselspiel im Verhalten angeregter Elektronen im Volumen und an der Oberfläche nach optischer Anregung zu einer ungewöhnlichen Spindynamik führt. Die Arbeit ist ein wichtiger Schritt auf dem Weg zu spintronischen Bauelementen auf Basis topologischer Materialien für die ultraschnelle Informationsverarbeitung.

arö →

Nature Communication Physics (2021): Observation of a giant mass enhancement in the ultrafast electron dynamics of a topological semimetal. O. J. Clark, F. Freyse, I. Aguilera, A. S. Frolov, A. M. Ionov, S. I. Bozhko, L. V. Yashina, and J. Sánchez-Barriga. DOI: 10.1038/s42005-021-00657-6

Die Gesetze der Quantenphysik bestimmen, wie leicht sich Elektronen durch ein Kristallgitter bewegen und ob das Material metallische Eigenschaften hat, ein Halbleiter oder ein Isolator ist. Das führt in bestimmten Materialien zu exotischen Eigenschaften: In topologischen Isolatoren bewegen sich Elektronen in bestimmten Quantenzuständen wie masselose Teilchen an der Oberfläche völlig frei, während

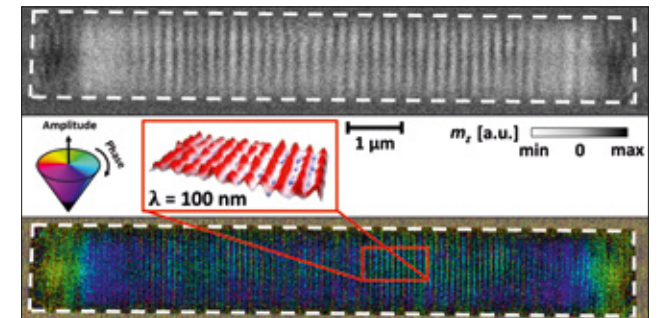
WELTWEIT ERSTE VIDEOAUFNAHME EINES RAUM-ZEIT-KRISTALLS GELUNGEN N

Ein Kristall ist ein Festkörper, dessen Atome oder Moleküle regelmäßig in einer bestimmten Struktur angeordnet sind. Bei Raum-Zeit-Kristallen verhält es sich ähnlich: die wiederkehrende Struktur gibt es allerdings nicht nur im Raum, sondern auch in der Zeit. Die kleinsten Bestandteile sind ständig in Bewegung, bis sie nach einer bestimmten Periode wieder

exakt dem ursprünglichen Anordnungsmuster entsprechen. Der Nobelpreisträger Frank Wilczek entdeckte 2012 die Symmetrie von Materie in der Zeit und traf die Annahme, dass die Forschung Raum-Zeit-Kristalle bald werden erzeugen können.

Einem deutsch-polnischen Forschungsteam ist der Versuch gelungen, bei Raumtemperatur einen mikrometergroßen Raum-Zeit-Kristall aus Magnonen zu erzeugen. Mithilfe des Rasterröntgenmikroskops MAXYMUS an BESSY II konnten sie die periodische Magnetisierungsstruktur in einem Kristall sogar filmen. Dieses weltweit erste Video eines Raum-Zeit-Kristalls bei Raumtemperatur sowie das Forschungsprojekt an sich stellten die Wissenschaftler des Max-Planck-Instituts für Intelligente Systeme (MPI-IS) in Stuttgart, der Adam Mickiewicz University und der Polish Academy of Sciences in Poznań in *Physical Review Letters* vor.

MPI-IS/red. →



Das Graustufenbild (oben) zeigt eine Momentaufnahme der zeitaufgelösten Röntgenmikroskopie des magnonischen Raum-Zeit-Kristalls. Durch dessen Interaktionen mit weiteren Magnonen entstehen ultrakurze Spinwellen, die auf der unteren Abbildung dargestellt sind. Dabei beschreibt der Farbraum die Phase, und die Helligkeit zeigt die Amplitude der erzeugten Spinwellen an.

Phys. Rev. Lett. (2021): Real-Space Observation of Magnon Interaction with Driven Space-Time Crystals. N. Träger, P. Gruszecki, F. Lisiecki, F. Groß, J. Förster, M. Weigand, H. Głowiński, P. Kuświk, J. Dubowik, G. Schütz, M. Krawczyk, and J. Gräfe. DOI: 10.1103/PhysRevLett.126.057201

EXOTISCHE FERROMAGNETISCHE ORDNUNG IN ZWEI DIMENSIONEN NACHGEWIESEN

Die feinsten Werkstoffe der Welt sind so dünn wie ein einzelnes Atom. Solche zweidimensionalen oder 2D-Materialien elektrisieren Forscherteams weltweit, denn sie versprechen ungewöhnliche neue Eigenschaften. Ein besonderes Interesse wecken sogenannte Van-der-Waals-Einzelschichten: Kombinationen von zwei oder mehr atomar dünnen Materialien, die durch schwache elektrostatische Van-der-Waals-Kräfte zusammengehalten werden. Durch die Auswahl der Materialschichten und ihre Anordnung zueinander lassen sich elektrische, magnetische oder optische Merkmale einstellen und variieren. Allerdings: Die großflächige, homogene Abscheidung von van-der-Waals-Einzelschichten mit ferromagnetischer Eigenschaft war bislang nicht möglich.

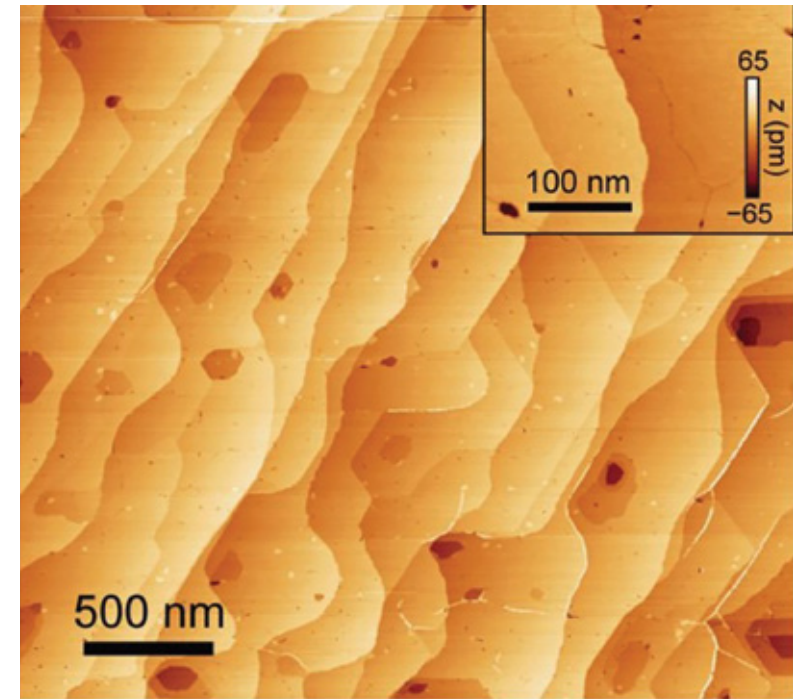
Einem Team des Max-Planck-Instituts für Mikrostrukturphysik in Halle, der Synchrotron-Lichtquelle ALBA in Barcelona und des HZB ist es erstmals gelungen, ein gleichförmiges zweidimensionales Material zu erzeugen – und ein exotisches ferromagnetisches Verhalten darin nachzuweisen: den „Easy-plane“-Magnetismus. Als Werkstoff verwendeten die Forschenden Chromchlorid (CrCl_3). Ziel war es, die Frage zu klären, wie sich die magnetische Ordnung in Chromchlorid zeigt, wenn dieses nur noch aus einer monoatomaren Schicht besteht.

Das gelang der Gruppe durch einen detaillierten Blick auf die magnetischen Eigenschaften des 2D-Materials. Dazu

nutzten sie die einzigartigen Möglichkeiten der an BESSY II installierten Vektormagnetanlage VEKMAG. „Die Einrichtung ermöglicht Materialuntersuchungen mit weicher Röntgenstrahlung in einem starken Magnetfeld – und das bei Temperaturen bis nahe dem absoluten Nullpunkt“, sagt Florin Radu, der Leiter des für die VEKMAG-Anlage verantwortlichen Teams am HZB. Die Messungen zeigten, wie sich unterhalb der sogenannten Curie-Temperatur eine ferromagnetische Ordnung in dem zweidimensionalen Werkstoff bildete. „In der monoatomaren Chromchlorid-Schicht fand ein Phasenübergang statt, der für Easy-plane-Magneten charakteristisch ist, aber an einem solchen 2D Material zuvor noch nie beobachtet worden war“, berichtet Amilcar Bedoya-Pinto.

Rückenwind für die Entwicklung der Spintronik

Die Entdeckung bietet nicht nur neue Einsichten in das magnetische Verhalten zweidimensionaler Materialien. „Wir haben damit nun auch eine exzellente Plattform, um eine Vielzahl physikalischer Phänomene zu erforschen, die es nur in zweidimensionalen magnetischen Materialien gibt“, erklärt Bedoya-Pinto: beispielsweise den widerstandslosen Transport von Spins. Sie sind die Grundlage einer neuen Form der Datenverarbeitung – der sogenann-

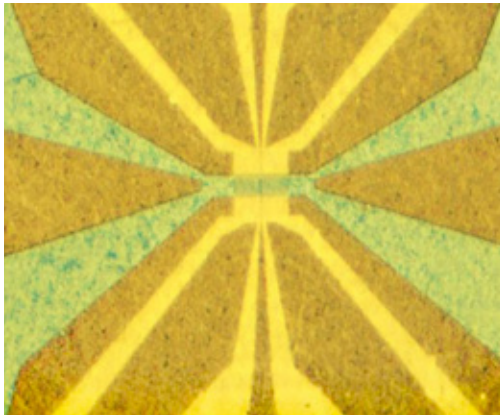


STM-Topographie einer einatomaren Lage von CrCl_3 auf Graphen/6H-SiC(0001). Die Vergrößerung zeigt die Korngrenzen. © DOI: 10.1126/science.abd5146

ten Spintronik. Sie könnte künftig eine deutlich schnellere und energiesparende Speicherung von Daten ermöglichen. rb ↻

Science (2021): Intrinsic 2D-XY ferromagnetism in a van der Waals monolayer. Amilcar Bedoya-Pinto, Jing-Rong Ji, Avanindra Pandeya, Pierluigi Gargiani, Manuel Valvidares, Paolo Sessi, James Taylor, Florin Radu, Kai Chang and Stuart S.P. Parkin. DOI: 10.1126/science.abd5146

SUPRALEITUNG TRIFFT SPINTRONIK



In diesem Materialsystem wurde die langreichweitige Josephson-Kopplung nachgewiesen. Supraleitende $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ -Regionen (gelb) sind durch einen halbmetallischen $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$ -Ferromagneten (grün) getrennt.

© DOI: 10.1038/s41563-021-01162-5

Ein internationales Forscherteam hat eine Kopplung zwischen zwei supra-leitenden Regionen nachgewiesen, die durch ein ferromagnetisches Material von einem Mikrometer Breite getrennt sind. Dieser makroskopische Quanteneffekt ist als Josephson-Effekt bekannt und erzeugt einen Strom aus supra-leitenden Cooper-Paaren innerhalb der ferromagnetischen Region. Mit Hilfe von Magneto-Transportmessungen konnte die Gruppe nachweisen, dass ein supra-leitender Strom durch die Trennschicht aus Manganit zirkuliert – hervorgerufen durch die Kopplung zwischen den beiden supra-

leitenden Bereichen als Manifestation eines Josephson-Effekts mit makroskopisch großer Reichweite. Darüber hinaus erforschten sie eine weitere interessante Eigenschaft: In Supraleitern paaren sich Elektronen zu sogenannten Cooper-Paaren. In der überwiegenden Mehrheit der supra-leitenden Materialien bestehen diese Paare aus Elektronen mit entgegengesetztem Spin, um das magnetische Austauschfeld zu minimieren, das die Supraleitung schwächt. Im hier verwendeten ferromagnetischen Material zeigten Messungen an BESSY II, dass der Spin der Cooper-Elektronen gleich ist. Die Ergebnisse weisen den Weg für supra-leitende spintronische Anwendungen mit sehr geringem Energiebedarf, bei denen spinpolarisierte Ströme durch Quantenkohärenz geschützt sind.

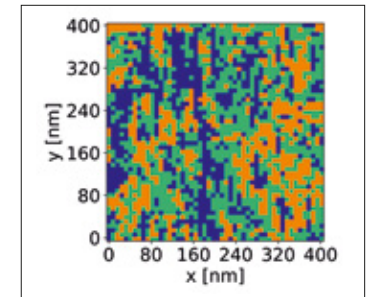
red. →

Nature Materials (2021): Extremely long range, high-temperature Josephson coupling across a half metallic ferromagnet. D. Sanchez-Manzano, S. Mesoraca, F. Cuellar, M. Cabero, V. Rouco, G. Orfila, X. Palermo, A. Balan, L. Marcano, A. Sander, M. Rocci, J. García-Barricocanal, F. Gallego, J. Tornos, A. Rivera, F. Mompean, M. García-Hernández, J. M. González-Calbet, C. León, S. Valencia, C. Feuillet-Palma, N. Bergeal, A.I. Buzdin, J. Lesueur, Javier E. Villegas, and J. Santamaría. DOI: 10.1038/s41563-021-01162-5

SCHARFER BLICK IN WINZIGE FERROELEKTRISCHE KRISTALLE

Ferroelektrische Materialien haben eine besondere innere Struktur, die man für die Speicherung von großen Datenmengen auf engem Raum nutzen könnte. Doch im Nanometerbereich verändert sich die ferroelektrische Polarisation. Nun hat ein Team um Catherine Dubourdieu einen Weg aufgezeigt, um das Polarisationsmuster in dünnen ferroelektrischen Schichten präzise und zudem zerstörungsfrei zu kartieren.

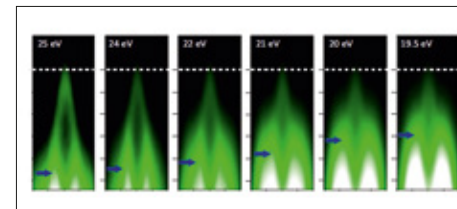
rb →



Karte eines dünnen Bariumtitanat-Films aus Messdaten der Kontakt-Kelvin-Sonden-Kraftmikroskopie (cKPFM). Diese Daten wurden durch maschinelles Lernen geclustert, um detaillierte Informationen über ferroelektrische Domänen zu gewinnen.

© HZB

ACS Appl. Electron. Mater. (2021): Sub-10 nm Probing of Ferroelectricity in Heterogeneous Materials by Machine Learning Enabled Contact Kelvin Probe Force Microscopy. S. W. Schmitt, R. K. Vasudevan, M. Seifert, A. Y. Borisevich, V. Deshpande, S. V. Kalinin, and C. Dubourdieu. DOI: 10.1021/acsaelm.1c00569



Der Dirac-Kegel ist typisch für Topologische Isolatoren und auf allen sechs Bildern praktisch unverändert (ARPES-Messungen an BESSY II). Der blaue Pfeil zeigt die Valenzelektronen im Volumen. © HZB

UNORDNUNG MIT QUANTENPHYSIKALISCHEN TALENTEN

Quanteneffekte machen sich vor allem bei extrem tiefen Temperaturen bemerkbar, was ihren praktischen Nutzen einschränkt. Dünnschichten aus MnSb_2Te_4 zeigen neue Talente, weil sie zu einem Überschuss an Mangan neigen. Offenbar sorgt diese Unordnung für spektakuläre Eigenschaften, wie eine Forschergruppe durch Messungen an BESSY II nachweisen konnte.

arö →

Advanced Materials (2021): Mn-rich MnSb_2Te_4 : A topological insulator with magnetic gap closing at high Curie temperatures of 45-50 K. S. Wimmer, J. Sánchez-Barriga, P. Küppers, A. Ney, E. Schierle, F. Freyse, O. Caha, J. Michalička, M. Liebmann, D. Primetzhofer, B. Lake, E. V. Chulkov et. al. DOI: 10.1002/adma.202102935

WIE QUANTENPUNKTE MITEINANDER „SPRECHEN“ KÖNNEN

Sogenannte Quantenpunkte sind eine neue Materialklasse mit vielen Anwendungsmöglichkeiten. Um Quantenpunkte zu realisieren, nutzt man winzige Halbleiterkristalle mit Abmessungen im Nanometerbereich. Über die Größe dieser Kristalle lassen sich die optischen und elektrischen Eigenschaften kontrollieren. Als QLEDs sind sie bereits in den neuesten Generationen von Flachbildschirmen auf dem Markt, wo sie für eine besonders brillante und hochaufgelöste Farbwiedergabe sorgen. Doch nicht nur als „Farbstoffe“ werden Quantenpunkte genutzt, sondern auch in Solarzellen oder als Halbleiterbauelemente, bis hin zu Rechenbausteinen, den Qubits, in einem Quantencomputer.

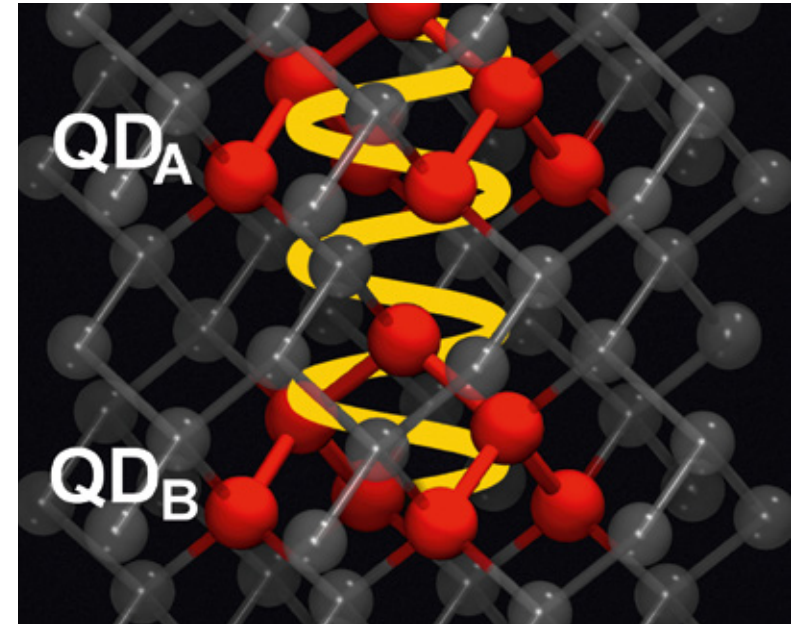
Ein Team um Annika Bande, Leiterin der Nachwuchsgruppe „Theorie der Elektronendynamik und Spektroskopie“ am HZB, hat mit einer theoretischen Arbeit das Verständnis der Wechselwirkung zwischen mehreren Quantenpunkten mit einer atomistischen Betrachtung erweitert. Auch wenn es sich bei Quantenpunkten um extrem winzige Nanokristalle handelt, bestehen diese doch aus Tausenden von Atomen mit wiederum einem Vielfachen von Elektronen. Selbst mit Supercomputern ließe sich die elektronische Struktur eines solchen Halbleiterkristalls kaum berechnen, betont die Wissenschaftlerin der Theoretischen Chemie. „Wir entwickeln aber Methoden, um das Problem näherungsweise zu beschreiben“, erklärt Bande. „In diesem Fall haben wir im

Computer mit verkleinerten Quantenpunktversionen aus nur etwa hundert Atomen gearbeitet, die aber trotzdem die wesentlichen Eigenschaften realer Nanokristalle besitzen.“

Mit diesem Ansatz ist es der Gruppe in Zusammenarbeit mit Jean Christophe Tremblay von der CNRS-Universität de Lorraine in Metz gelungen, zwei Quantenpunkte aus jeweils hundert Atomen miteinander Energie austauschen zu lassen. Konkret hat die Gruppe untersucht, wie diese beiden Quantenpunkte kontrolliert die Energie des Lichts aufnehmen, austauschen und dauerhaft speichern können. Dabei dient ein erster Lichtpuls zur Anregung, während der zweite Lichtpuls die Abspeicherung bewirkt.

Elektronenstruktur in höchster Präzision berechnet

Insgesamt wurden drei verschiedene Quantenpunkt-paare untersucht, um den Effekt von Größe und Geometrie zu erfassen. Dabei berechneten die Forschenden die Elektronenstruktur mit höchster Präzision und simulierten die Bewegungen der Elektronen in Echtzeit bei einer Auflösung von Femtosekunden ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$). Die Ergebnisse sind auch für die experimentelle Forschung und Entwicklung in vielen Anwendungsfeldern sehr interessant, zum Beispiel für die Entwicklung von Qubits oder als Baustein

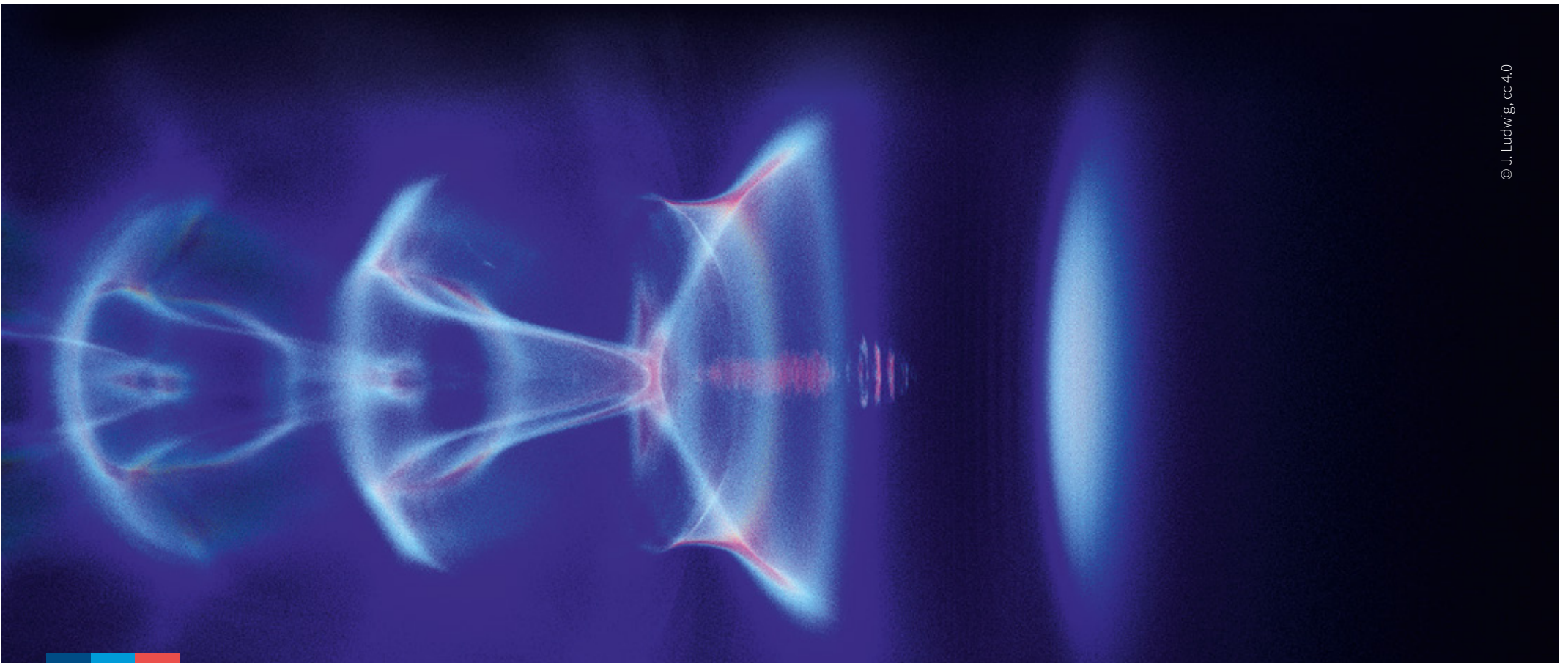


Die Illustration zeigt zwei Quantenpunkte, die über Lichtpulse miteinander kommunizieren. © HZB

für die sogenannte Photokatalyse, bei der mit Sonnenlicht grüner Wasserstoff erzeugt wird. „Wir arbeiten stetig daran, unsere Modelle hin zu noch realistischeren Beschreibungen von Quantenpunkten zu erweitern“, sagt Bande, „zum Beispiel, um den Einfluss von Temperatur und Umgebung zu erfassen“.

Pascal Krause 

J. Phys. Chem. A (2021): Atomistic Simulations of Laser-controlled Exciton Transfer and Stabilization in Symmetric Double Quantum Dots. Pascal Krause, Jean Christophe Tremblay, and Annika Bande. DOI: [10.1021/acs.jpca.1c02501](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c02501)



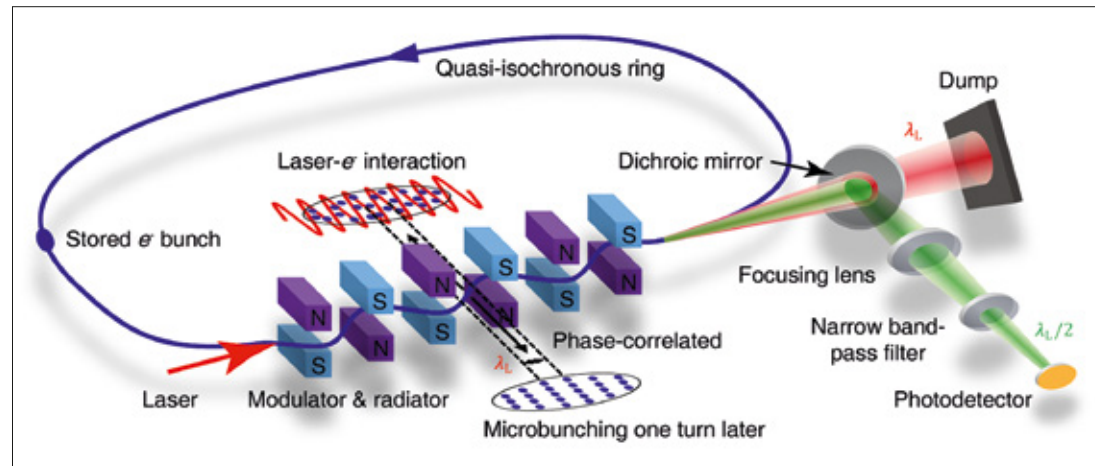
HIGHLIGHTS AUS DER FORSCHUNG – MATERIE

Um tiefe Einblicke in die Materie zu ermöglichen, wird die Röntgenquelle BESSY II mit ihren Instrumenten stetig weiterentwickelt. Daran arbeiten Gruppen aus der Beschleunigerphysik und der Materialforschung. Die vielseitigen Messgeräte und der leistungsstarke Betrieb von BESSY II ermöglichen erstklassige Materialforschung am HZB und locken zahlreiche Forschungsgäste aus dem In- und Ausland nach Berlin. **Zu fast jeder Meldung gibt es einen ausführlicheren Text im HZB-Newsroom. Klicken Sie dafür auf dieses Symbol: ➔ In unserem Newsroom finden Sie darüber hinaus noch weitere Nachrichten aus unserer Forschung im Bereich Materie.**

NEUE OPTIONEN FÜR SYNCHROTRONLICHT-QUELLEN

Die modernsten Lichtquellen für die Forschung basieren auf Teilchenbeschleunigern. Es handelt sich um große Anlagen, in denen Elektronen auf nahezu Lichtgeschwindigkeit beschleunigt werden, um dann Lichtpulse in einer besonderen Qualität abzugeben. In speicherringbasierten Synchrotronstrahlungs-Quellen zirkulieren die Elektronenpakete über Milliarden Umläufe in einem Ring und erzeugen in dessen Ablenkmagneten eine rasche Folge von sehr hellen Lichtpulsen. In Freien-Elektronenlasern (FELs) dagegen werden die Elektronenpakete linear beschleunigt und geben dann einen einzelnen superhellen Lichtblitz mit laserartiger Qualität ab. Sowohl Speicherring-Quellen als auch FELs haben in den vergangenen Jahren Fortschritte in vielen Bereichen ermöglicht, von tiefen Einblicken in biologische und medizinische Fragestellungen über die Materialforschung und Technologie-Entwicklung bis hin zur Quantenphysik.

Beschleunigerexperten des HZB, der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt (PTB) und der Tsinghua Universität in Peking haben an der Metrology Light Source (MLS) der PTB gezeigt, dass sich an einer Synchrotronstrahlungs-Quelle ein Muster von Pulsen erzeugen lässt, das die Vorteile von beiden Systemen vereinigt: Es liefert kurze, intensive „Mikropakete“, welche Strahlungspulse mit einer laserartigen Qualität wie bei FELs erzeugen, die aber außerdem wie bei Synchrotronlicht-Quellen dicht aufeinanderfolgen können.



Aufbau des Experiments: Die Elektronenpakete werden durch einen Laser im Undulator moduliert; nach einer weiteren Runde im Speicherring geben sie als Mikropakete kohärente Strahlung ab. © PTB/HZB

Aufspaltung in Microbunche

Der führende Beschleuniger-Theoretiker Alexander Chao und sein Doktorand Daniel Ratner von der Stanford University entwickelten die Idee vor rund zehn Jahren unter dem Schlagwort „Steady-State Microbunching (SSMB)“. Der deutsch-chinesischen Forschungsgruppe ist es gelungen, das SSMB-Prinzip experimentell zu bestätigen. Die HZB- und PTB-Experten benutzten dafür einen optischen Laser, dessen Lichtwelle räumlich und zeitlich präzise synchronisiert zu den Elektronenpaketen in der MLS eingekoppelt wurde. Dadurch wurden die Energien der Elektronen in den Paketen moduliert. „Das führt dazu, dass sich die einige Millimeter langen Elektronenpakete nach exakt einer Runde im Speicherring in sogenannte Microbunche aufspalten, die nur ein Mikrometer lang sind, und dann Lichtpulse abgeben, die sich kohärent

verstärken wie in einem Laser“, erläutert Jörg Feikes, Beschleuniger-Physiker am HZB.

Das Beste aus zwei Welten

„Im Endausbau könnte eine SSMB-Quelle Strahlung einer neuen Qualität liefern. Die Pulse sind intensiv, fokussiert und schmalbandig, sie vereinigen sozusagen die Vorteile von Synchrotronlicht mit den Vorteilen von FEL-Pulsen“, erklärt Markus Ries, Beschleuniger-Experte am HZB. Diese Strahlung ist potenziell für industrielle Anwendungen geeignet.

arö →

Nature (2021): Experimental demonstration of the mechanism of steady-state microbunching. Xiujie Deng, Alexander Chao, Jörg Feikes, Arne Hoehl, Wenhui Huang, Roman Klein, Arnold Kruschinski, Ji Li, Aleksandr Matveenko, Yuriy Petenev, Markus Ries, Chuanxiang Tang and Lixin Yan. DOI: 10.1038/s41586-021-03203-0

STRAHLDIAGNOSTIK FÜR ZUKÜNFTIGE BESCHLEUNIGER IM TISCHFORMAT

Seit Jahrzehnten werden Teilchenbeschleuniger immer größer. Inzwischen haben Ringbeschleuniger mit Umfängen von vielen Kilometern eine praktische Grenze erreicht. Auch Linearbeschleuniger im Gigahertz-Bereich erfordern sehr große Baulängen. Seit einigen Jahren gibt es jedoch eine Alternative: „Teilchenbeschleuniger

im Tischformat“, die das Prinzip der Laser-Wakefield-Beschleuniger nutzen: Ein Hochleistungslaser regt in einem Plasma eine Ladungswelle an, die sich mit der Geschwindigkeit des Laserpulses fortpflanzt und in ihrem „Kielwasser“ Elektronen hinterherzieht und so beschleunigt. Elektronenenergien im Gigaelektronenvolt-Bereich können mit dieser Technik schon seit Längerem erreicht werden. Allerdings sind die so erzeugten Elektronenpakete bisher zu klein und zu schlecht fokussiert, um die von ihnen abgegebene Synchrotronstrahlung für die Forschung zu nutzen.

Präzise Messung der Elektronenpakete

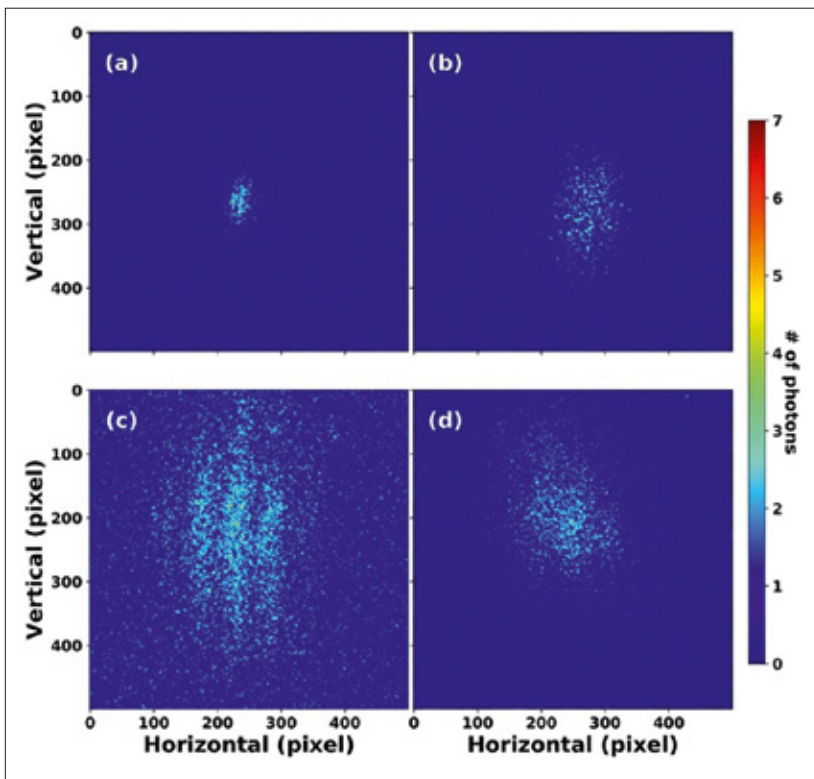
Für die Weiterentwicklung der Technik ist daher eine Methode notwendig, um Querschnitt und Qualität der Elektronenpakete individuell präzise zu messen und zu kontrollieren. Der Speicherring der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt (PTB), die Metrology Light Source (MLS), erlaubt in flexiblem Forschungsbetrieb die Erzeugung von kleinen Elektronenpaketen, die denen der Laser-Wakefield-Beschleuniger sehr ähnlich sind. Ihre Eigenschaften können jedoch leicht reproduziert und genau eingestellt und variiert werden. Ein Team am HZB und an der PTB hat nun

eine Methode entwickelt, um die laterale Ausdehnung des Elektronenstrahls eines Laserplasma-Beschleunigers mit einer Auflösung im Mikrometerbereich zu messen.

Test unter realistischen Bedingungen

„Dabei nutzen wir eine Technik, die erfolgreich am Speicherring BESSY II eingesetzt wird“, erklärt Thorsten Kamps, Co-Autor der Studie. Erstautor Ji-Gwang Hwang hatte die Idee, im sichtbaren Bereich die kohärente Strahlung der Elektronenpulse über das Phänomen der Interferenz (Doppelspalt) zu nutzen und den Strahlquerschnitt als Abweichung von einer perfekt punktförmigen Quelle zu ermitteln. Mithilfe einer hochempfindlichen Kamera und komplexen Algorithmen gelang es dem Team, die laterale Strahlgröße im Bereich von wenigen Mikrometern zu messen. Die Messungen selbst hat Katharina Albrecht im Rahmen ihrer Bachelorarbeit in Physik durchgeführt. „Wir haben für dieses Projekt sehr eng mit unseren Kollegen von der MLS an der PTB zusammengearbeitet“, betont Kamps. „Dort ist es an einer Beamline möglich, den Elektronenstrahl aus einem Plasma-Beschleuniger zu imitieren, und so die Methode unter realistischen Bedingungen zu testen“, sagt Kamps.

arö 



Aus den Interferenzmustern bei unterschiedlichen Brennweiten und Photonintensitäten lassen sich Aussagen über die Qualität des Strahls gewinnen.

© DOI: 10.1038/s42005-021-00717-x

Communications Physics (2021): Monitoring the size of low-intensity beams at plasma-wakefield accelerators using high-resolution interferometry. Ji-Gwang Hwang, Katharina Albrecht, Arne Hoehl, Beñat Alberdi Esuain, and Thorsten Kamps. DOI: 10.1038/s42005-021-00717-x

WASSER ALS METALL AN BESSY II NACHGEWIESEN

Reines, destilliertes Wasser ist ein nahezu perfekter Isolator. Es besteht aus H_2O -Molekülen, die über Wasserstoffbrückenbindungen miteinander locker vernetzt sind. Dabei bleiben die Valenzelektronen gebunden und sind nicht mobil. Um ein Leitungsband mit frei beweglichen Elektronen zu erzeugen, müsste man Wasser so stark unter Druck setzen, dass sich die Orbitale der Außenelektronen überlappen. Eine Berechnung zeigt jedoch, dass dieser Druck allenfalls im Inneren von großen Planeten wie Jupiter vorhanden ist.

Eine internationale Kooperation aus 15 Wissenschaftler*innen an elf Forschungseinrichtungen hat nun mit einem völlig anderen Ansatz erstmals eine Wasserlösung mit metallischen Eigenschaften erzeugt und diesen Phasenübergang an BESSY II dokumentiert. Sie experimentierten dafür mit Alkalimetallen, die ihr äußeres Elektron sehr leicht abgeben. Dafür gaben sie ein klein wenig Wasser auf einen Tropfen Natrium-Kalium-Legierung, die bei Raumtemperatur flüssig ist. Am Strahlrohr U49/2 am BESSY II bauten sie das Experiment in der Hochvakuum-Probenkammer SOL³PES auf.

In der Probenkammer sitzt eine sehr feine Düse, aus der die flüssige Na-K-Legierung tropft. Der silberne Tropfen wächst dabei etwa zehn Sekunden, bis er sich von der Düse löst. Während der Tropfen wächst, strömt etwas Wasserdampf in die Probenkammer und bildet an der Oberflä-



Nach etwa fünf Sekunden hat sich ein dünner Film aus metallischem Wasser um den Natrium-Kalium-Tropfen gebildet, erkennbar am goldenen Schimmer. © HZB

che des Tropfens eine extrem dünne Schicht aus wenigen Lagen Wassermolekülen. Dabei wandern fast sofort Elektronen und Metall-Ionen von der Alkali-Legierung ins Wasser ein. Diese eingewanderten Elektronen verhalten sich dabei wie freie Elektronen in einem Leitungsband.

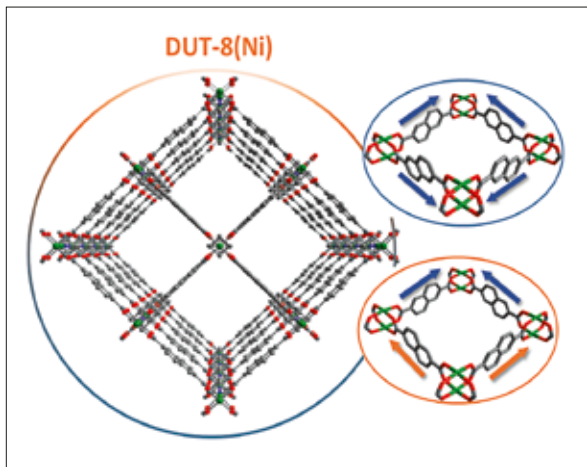
Von Silber zu Gold

„Man sieht den Phasenübergang zum metallischen Wasser mit bloßem Auge. Der silbrige Natrium-Kalium-Tropfen überzieht sich mit einem goldenen Schimmer, das ist sehr eindrucksvoll“, berichtet Robert Seidel, der die Experimente an BESSY II betreut hat. Die dünne Schicht aus goldfarbenem metallischem Wasser bleibt für einige Sekunden sichtbar. Dadurch konnte das Team um Pavel Jungwirth von der Tschechischen Akademie der Wissenschaften in Prag nachweisen, dass es sich tatsächlich um Wasser in einem metallischen Zustand handelt.

Die beiden entscheidenden Fingerabdrücke einer metallischen Phase sind die Plasmonenfrequenz und das Leitungsband. Diese beiden Größen konnten die Gruppen mit optischer Reflektionsspektroskopie und Röntgen-Photoelektronenspektroskopie exakt ermitteln. „Unsere Studie zeigt nicht nur, dass metallisches Wasser tatsächlich auf der Erde hergestellt werden kann, sondern charakterisiert auch die spektroskopischen Eigenschaften, die mit seinem schönen goldenen Metallglanz verbunden sind“, fasst Seidel die Erkenntnisse zusammen. arö ↻

Nature (2021): Spectroscopic Evidence for a Gold-Coloured Metallic Water Solution. P. E. Mason, H. C. Schewe, T. Buttersack, V. Kostal, M. Vitek, R. S. McMullen, H. Ali, F. Trinter, C. Lee, D. M. Neumark, S. Thürmer, R. Seidel, B. Winter, S. E. Bradforth, and P. Jungwirth.
DOI: 10.1038/s41586-021-03646-5

NEUE EINBLICKE IN SCHALTBARE MOF-STRUKTUREN AN DEN MX-BEAMLINES



Blick in einen MOF-Kristall am Beispiel von DUT-8. Die riesigen Poren sind klar erkennbar. © TU Dresden

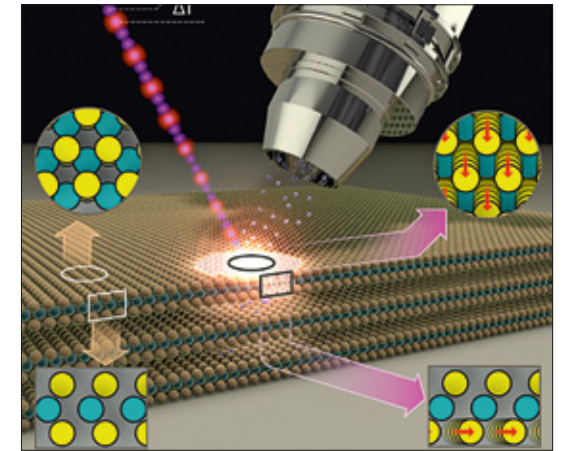
Metallorganische Gerüstverbindungen (engl.: metal-organic framework compounds – MOFs) bestehen aus anorganischen und organischen Gruppen und zeichnen sich durch eine Vielzahl an Poren aus, in die sich andere Moleküle einlagern können. Daher sind MOFs für viele Anwendungen interessant, beispielsweise für die Speicherung von Gasen, aber auch für die Stofftrennung, Sensorik oder Katalyse. Einige dieser MOF-Strukturen reagieren auf unterschiedliche Gastmoleküle, indem sie ihre Strukturen verändern. Sie gelten damit als schaltbar. Dazu gehört auch „DUT-8“, ein Material, das ein Team um Stefan Kaskel von der TU Dresden an den MX-Beamlines von BESSY II untersucht hat. „MOF-Kristalle lassen sich an den MX-Beamlines sehr gut analysieren, denn MOF-Kristalle weisen viele Gemeinsamkeiten mit Proteinkristallen auf“, sagt Manfred Weiss, der das MX-Team leitet. „Die Beugungsdiagramme, die DUT-8 an den HZB-MX-Strahlrohren zeigte, waren äußerst komplex. Wir konnten dies nun auf diverse Übergänge zwischen geordneten und weniger geordneten Phasen zurückführen“, erläutert Kaskel. Die Ergebnisse tragen dazu bei, Schaltprozesse und Gasaustauschreaktionen in solchen MOF-Strukturen besser zu verstehen, sodass künftige funktionale MOF-Materialien zielgerichtet entwickelt werden können.

red. ➔

Nature Chemistry (2021): Adaptive response of a metal-organic framework through reversible disorder-disorder transitions. S. Ehrling, E. M. Reynolds, V. Bon, I. Senkowska, T. E. Gorelik, J. D. Evans, M. Rauche, M. Mendt, Manfred S. Weiss, A. Pöpl, E. Brunner, U. Kaiser, A. L. Goodwin and S. Kaskel. DOI: 10.1038/s41557-021-00684-4

WIE LICHT MoS₂-DÜNNSCHICHTEN KATALYTISCH AKTIVIERT

MoS₂-Dünnschichten sind aus abwechselnden Schichten von Molybdän-Atomen und Schwefel-Atomen aufgebaut, die sich zu zweidimensionalen Schichten übereinanderlegen. Das Material ist ein Halbleiter. Aber schon ein blauer Lichtpuls mit überraschend geringer Intensität genügt, um die Eigenschaften der Oberfläche zu verändern und sie metallisch zu machen. Das Spannende daran: In dieser metallischen Phase sind die MoS₂-Schichten auch katalytisch besonders aktiv und könnten damit die preiswerte Produktion von Wasserstoff ermöglichen. Die Physikerin Nomi Sorgenfrei und ihr Team haben an BESSY II ein neues Instrument aufgebaut, um die Veränderungen an den Proben durch Bestrahlung mit ultrakurzen, schwachen Lichtpulsen mithilfe von zeitaufgelöster Elektronenspektroskopie für die chemische Analytik (trESCA) exakt zu vermessen. Das neue Instrument SurfaceDynamics@FemtoSpeX gewinnt in kurzer Zeit aussagekräftige Messdaten von Elektronenenergien, Oberflächenchemie und zeitlichen Veränderungen. Die Analyse der experimentellen Daten zeigte, dass der Lichtpuls zu einer vorübergehenden Ladungsakkumulation an der Oberfläche der Probe führt, was den Phasenübergang von einem halbleitenden Zustand in einen metallischen Zustand auslöst. Damit ließe sich die katalytische Aktivität gezielt beeinflussen.



Ein Lichtpuls löst in Molybdän-Sulfid-Dünnschichten einen Phasenübergang von der halbleitenden in die metallische Phase aus und verstärkt so die katalytische Aktivität.

© M. Künsting/HZB

arö ➔

Advanced Materials (2021): Photo-driven transient picosecond top-layer semiconductor to metallic phase transition in p-doped MoS₂. N. L. A. N. Sorgenfrei, S. Nepll, R. M. Jay, D. Kühn, E. Giangrisostomi, H. Sezen, R. Ovsyannikov, S. Svensson, and A. Föhlisch. DOI: 10.1002/adma.202006957

„GRÜNE“ CHEMIE: EINBLICKE IN DIE MECHANOCHEMISCHE SYNTHESE N

Chemische Reaktionen basieren oft auf dem Einsatz von Lösungsmitteln, die die Umwelt belasten. Doch viele Reaktionen können auch ohne Lösungsmittel ablaufen. Dies ist der Ansatz der Mechanochemie, bei dem Reagenzien sehr fein gemahlen und miteinander vermischt werden, sodass sie miteinander reagieren und das gewünschte Produkt bilden. Der mechanochemische Ansatz ist nicht nur umweltfreundlicher, sondern möglicherweise auch billiger als klassische Synthesemethoden. Die International Union of



Fein vermahlene Pulver können auch ohne Lösungsmittel zum gewünschten Produkt reagieren. Das ist der Ansatz der Mechanochemie.

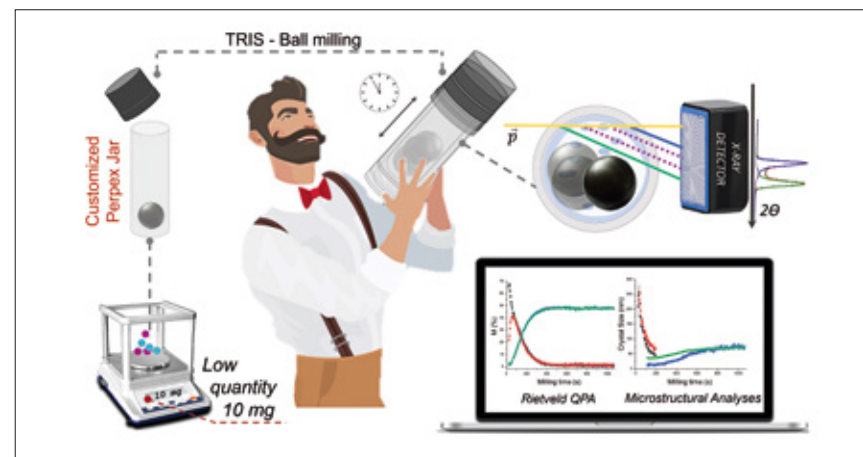
© F. Emmerling/BAM

Doch was genau bei der mechanischen Behandlung passiert und wie die Reaktionen ablaufen, ist schwierig herauszufinden. Traditionell wird dazu die Reaktion gestoppt

und das Material zur Analyse „ex situ“ aus dem Reaktor entnommen. Viele Systeme setzen ihre Umwandlung jedoch auch nach dem Stoppen des Mahlvorgangs fort. Solche Reaktionen können nur durch direkte Untersuchung der Reaktion „in situ“, also während der mechanischen Behandlung, untersucht werden.

Zeitaufgelöstes In-situ-Monitoring

Ein internationales Team mit Adam Michalchuk und Franziska Emmerling von der Bundesanstalt für Materialforschung (BAM) sowie Teams der Universität Cambridge und der Universität Parma haben an der μ Spot-Beamline von BESSY II eine Methode entwickelt, um in situ und während der mechanischen Behandlung Einblicke zu gewinnen. Dazu nutzte das Team eine Kombination aus miniaturisierten Mahlbechern in Verbindung mit Innovationen in der Röntgenpulverdiffraktometrie und modernsten Analysestrategien, um die Qualität der Daten aus dem zeitaufgelösten In-situ-Monitoring (Time Resolved In Situ = TRIS) deutlich zu erhöhen. „Selbst mit außergewöhnlich kleinen Probenmengen erhalten wir eine genaue Zusammensetzung und Struktur jeder Phase im Verlauf der Reaktion“, sagt Adam Michalchuk. Sogar mit nur wenigen Milligramm waren gute Ergebnisse möglich.



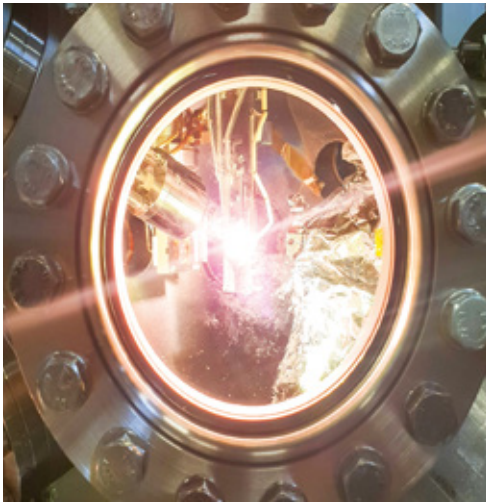
In einer Kugelmühle werden die Reagenzien vermahlen. Dabei kann die Bildung von neuen Produkten und Phasen über die Röntgenstrukturanalyse an BESSY II verfolgt werden. © F. Emmerling/BAM

Darüber hinaus konnte das Team die Kristallgröße und andere wichtige Parameter bestimmen. Diese Strategie lässt sich auf alle chemischen Spezies anwenden, ist einfach zu implementieren und liefert selbst mit einer Synchrotronquelle niedriger Energie hochwertige Beugungsdaten. „Dies bietet einen direkten Weg zur mechanochemischen Untersuchung von Reaktionen mit knappen, teuren oder toxischen Verbindungen“, fasst Emmerling zusammen.

arö

Nature communications (2021): Changing the game of time resolved X-ray diffraction on the mechanochemistry playground by downsizing. Giulio I. Lampronti, Adam A. L. Michalchuk, Paolo P. Mazzeo, Ana M. Belenguier, Jeremy K. M. Sanders, Alessia Bacchi and Franziska Emmerling. DOI: [10.1038/s41467-021-26264-1](https://doi.org/10.1038/s41467-021-26264-1)

ULTRASCHNELLER MAGNETISMUS: SCHNAPPSCHUSS VON GITTERSCHWINGUNGEN



Mithilfe eines Glühfadens wird die Probe während der Messung auf konstante Temperatur geheizt. © HZB

Magnetische Festkörper können mit einem kurzen Laserpuls schnell entmagnetisiert werden. Nach diesem Prinzip funktionieren die sogenannten HAMR-Speicher (Heat Assisted Magnetic Recording), die bereits auf dem Markt sind. Die mikroskopischen Mechanismen der ultraschnellen Entmagnetisierung sind allerdings noch nicht vollständig geklärt. Ein HZB-Team hat an BESSY II eine Methode entwickelt, um einen dieser mikroskopischen Mechanismen quantitativ zu erfassen. Damit konnten sie nun das Element Gadolinium untersuchen. Gadolinium besitzt 4f- und 5d-Elektronenorbitale, die beide zu seinen ferromagnetischen Eigenschaften beitragen. Je höher die Temperatur, desto mehr schwingt das kristalline Gitter – in der Physik sagt man: die Anzahl der Phononen steigt – und desto wahrscheinlicher sind Spin-Flips durch Streuung von Elektronen an Phononen. Mit der Methode der inelastischen Röntgenstreuung (RIXS) konnte das Team die Anzahl der Phononen bei einer bestimmten Temperatur bestimmen und die Wechselwirkungen zwischen Phononen und 4f- und 5d-Elektronen unterscheiden. Diese Studie vervollständigt eine Reihe von Experimenten, die das Team an Nickel und Eisen-Nickel-Legierungen durchgeführt hat, und verbessert das Verständnis dieser Mechanismen für die Entwicklung ultraschneller Datenspeicher. arö →

Applied Physics Letters (2021): Spin-lattice angular momentum transfer of localized and valence electrons in the demagnetization transient state of gadolinium. R. Decker, A. Born, K. Ruotsalainen, K. Bauer, R. Haverkamp, R. Büchner, A. Pietzsch, and A. Föhlisch. DOI: 10.1063/5.0063404

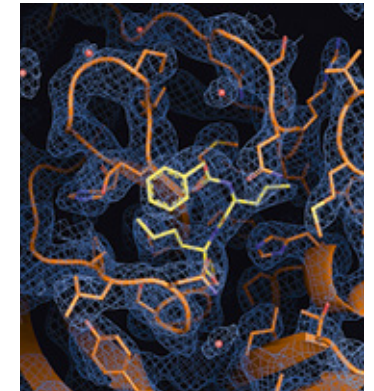
Magnetische Festkörper können mit einem kurzen Laserpuls schnell entmagnetisiert werden. Nach diesem Prinzip funktionieren die sogenannten HAMR-Speicher (Heat Assisted Magnetic Recording), die bereits auf dem Markt sind. Die mikroskopischen Mechanismen der ultraschnellen Entmagnetisierung sind allerdings noch nicht vollständig geklärt. Ein HZB-Team hat an BESSY II eine Methode entwickelt, um einen dieser mikroskopischen Mechanismen quantitativ zu erfassen. Damit konnten sie nun das Element Gadolinium untersuchen. Gadolinium besitzt 4f- und 5d-Elektronenorbitale, die beide zu seinen ferromagnetischen Eigenschaften beitragen. Je höher die Temperatur, desto mehr schwingt das kristalline Gitter – in der Physik sagt man: die Anzahl der Phononen steigt – und desto wahrscheinlicher sind Spin-Flips durch Streuung von Elektronen an Phononen. Mit der Methode der inelastischen Röntgenstreuung (RIXS) konnte das Team die Anzahl der Phononen bei einer bestimmten Temperatur bestimmen und die Wechselwirkungen zwischen Phononen und 4f- und 5d-Elektronen unterscheiden. Diese Studie vervollständigt eine Reihe von Experimenten, die das Team an Nickel und Eisen-Nickel-Legierungen durchgeführt hat, und verbessert das Verständnis dieser Mechanismen für die Entwicklung ultraschneller Datenspeicher. arö →

KANDIDATEN FÜR CORONA-MEDIKAMENTE IDENTIFIZIERT N

An der hochbrillanten Röntgenlichtquelle PETRA III von DESY hat ein Team von mehr als 30 Forschungseinrichtungen mehrere Kandidaten für Wirkstoffe gegen das Coronavirus SARS-CoV-2 identifiziert. Sie docken an einem wichtigen Protein des Virus an und könnten damit die Basis für ein Medikament gegen Covid-19 sein. Das MX-Team aus dem HZB hat dabei einen Teil der Messdaten mit speziellen Analyseprogrammen untersucht, um passende Wirkstoffe zu identifizieren.

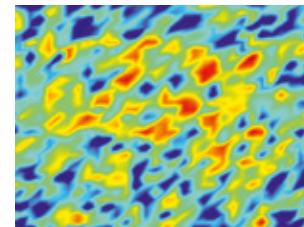
DESY/red. →

Science (2021): X-ray screening identifies active site and allosteric inhibitors of SARS-CoV-2 main protease. Sebastian Günther, Patrick Y. A. Reinke, et al. DOI: 10.1126/science.abf7945



Elektronendichtkarte des antiviral aktivsten Wirkstoffs Calpeptin (gelb), der an die Hauptprotease bindet.

© S. Günther/DESY



Die Entwicklung dieses Fleckmusters zeigt im Verlauf der Zeit mikroskopische Fluktuationen in der Probe. © DOI: 10.1103/Phys.Rev.Lett.127.057001

ANTI-FRIEREN: WENN BEIM ABKÜHLEN DIE VIBRATIONEN ZUNEHMEN

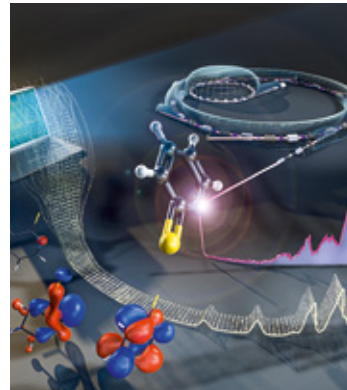
Ein internationales Team hat in einem Nickel-Oxid-Material beim Abkühlen einen erstaunlichen Effekt beobachtet: Statt aufzuhören, nehmen bestimmte Fluktuationen mit sinkender Temperatur sogar zu. Nickel-Oxid ist ein Modellsystem, das strukturell den Hochtemperatur-Supraleitern ähnelt. Das Experiment zeigt einmal mehr, dass das Verhalten dieser Materialklasse immer Überraschungen bereithält. red. →

Phys. Rev. Lett. (2021): Measurement of Spin Dynamics in a Layered Nickelate Using X-Ray Photon Correlation Spectroscopy: Evidence for Intrinsic Destabilization of Incommensurate Stripes at Low Temperatures. A. Ricci, N. Poccia, G. Campi, C. Schüßler-Langeheine, et. al. DOI: 10.1103/PhysRevLett.127.057001

BLACKBOX-VERFAHREN FÜR SUPERSCHNELLE ERGEBNISSE

Die elektronische Struktur von komplexen Molekülen und ihre chemische Reaktivität können mit resonanter inelastischer Röntgenstreuung (RIXS) an BESSY II untersucht werden. Allerdings erfordert die Auswertung von RIXS-Daten bisher sehr lange Rechenzeiten. Ein Team an BESSY II hat nun ein neues Simulationsverfahren entwickelt, das diese Auswertung während des Experiments ermöglicht. Messgäste können das Verfahren wie eine Blackbox nutzen.

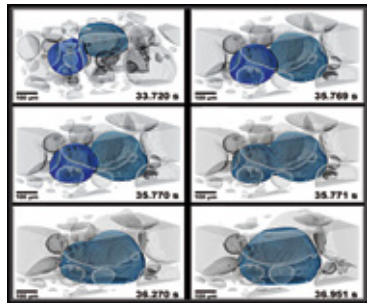
arö →



Die elektronische Struktur komplexer Moleküle kann aus RIXS-Daten an BESSY II errechnet werden.

© M. Künsting/HZB

Physical Chemistry Chemical Physics, issue 3 (2021): TD-DFT simulations of K-edge resonant inelastic X-ray scattering within the restricted subspace approximation. Vinicius Vaz da Cruz, Sebastian Eckert and Alexander Föhlisch. DOI: 10.1039/D0CP04726K



Tomographische Untersuchung von Morphologie und Vernetzung der Bläschen in Metallschäumen.

© DOI: 10.1002/adma.202104659

NEUER WELTREKORD IN DER RÖNTGEN-MIKROSKOPIE

Tomoskopie heißt die bildgebende Methode, in der in rascher Abfolge dreidimensionale Bilder aus dem Inneren von Materialien errechnet werden. Ein Team um den HZB-Physiker Francisco García Moreno hat an der Synchrotron-Lichtquelle Schweiz am Paul-Scherrer-Institut einen neuen Weltrekord erreicht: Mit 1000 Tomogrammen pro Sekunde können sehr schnelle Prozesse in Materialien auf der Mikrometerskala zerstörungsfrei dokumentiert werden.

arö →

Advanced Materials (2021): Tomoscopy: Time-resolved tomography for dynamic processes in materials.

F. García-Moreno, P. Hans Kamm, T. R. Neu, F. Bülk, M. A. Noack, M. Wegener, N. von der Eltz, C. M. Schlepütz, M. Stampanoni, J. Banhart. DOI: 10.1002/adma.202104659

TOMOGRAPHIE BRINGT EINBLICKE IN DIE FRÜHE EVOLUTION DER KNOCHEN N

Fast alle Wirbeltiere besitzen Knochen mit eingebetteten Knochenzellen, die über unzählige Nano-Kanälchen miteinander verbunden sind. Doch wann im Lauf der Evolution ist dieses komplexe Netzwerk entstanden? Und warum hat es sich weitgehend durchgesetzt? Ein Team von Paläontologen am Museum für Naturkunde Berlin um Dr. Florian Witzmann hat nun erstmals in rund 400 Millionen Jahre alten Fossilien von Meereslebewesen solche Strukturen in beispiellos hoher Auflösung analysiert. Eine Probe stammte von *Tremataspis mammillata*, einem kieferlosen gepanzerten Fisch. Die zweite Probe war ein Stück Knochen aus dem kiefertragenden Panzerfisch *Bothriolepis trautscholdi*. Um die Strukturen sichtbar zu machen, schlug der HZB-Experte Ingo Manke ein Verfahren vor, das am HZB-Campus in Wannsee im Labor für Elektronenmikroskopie zur Verfügung steht: Die FIB-SEM-Tomographie am ZEISS Crossbeam 340. Dabei trägt ein fokussierter Gallium-Ionenstrahl kontinuierlich Material von der Probenoberfläche ab und gräbt sich nach und nach weiter in die Probe hinein – zeitgleich tastet ein Elektronenstrahl den frisch abgetragenen Teil der Probe ab und liefert Daten für die Erstellung von 3D-Abbildungen mit einer Auflösung, die mehr als hundertmal genauer ist als bei der Computertomographie.

arö →



So könnte der Panzerfisch ausgesehen haben, der vor 380 Millionen Jahren lebte. Der Aufbau seiner Knochenzellen wurden nun eingehend analysiert.

© B. Engh/dontmesswithdinosaurs.com

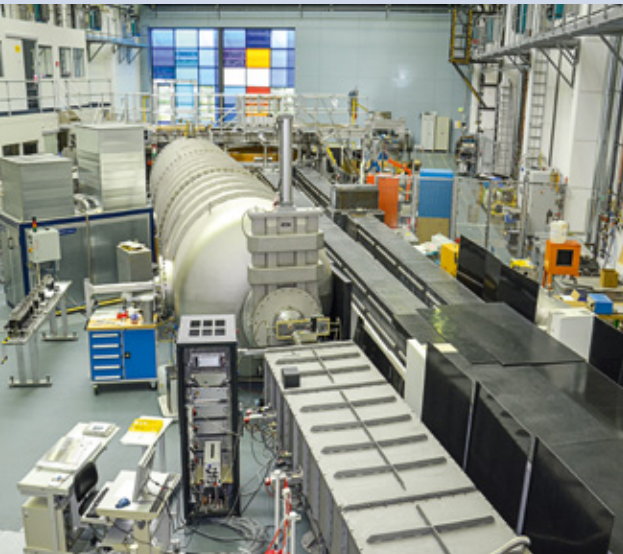
Science Advances (2021): Bone Metabolism and Evolutionary Origin of Osteocytes. Y. Haridy, M. Osenberg, A. Hilger, I. Manke, D. Davesne, F. Witzmann. DOI: 10.1126/sciadv.abb9113

ZAHLEN UND FAKTEN AUS DEM HZB

Stichtag: 31.12.2021



Klimaneutral: Das HZB strebt eine klimaneutrale Gesellschaft durch Wissenschaft und Innovation an. Aus diesem Grund treibt es die Materialforschung voran, schafft neue, nachhaltige Technologien und unterstützt die Forschungsgemeinschaft, dieses Ziel zu erreichen. © HZB



Hochwertig: Die Instrumente der Ende 2019 abgeschalteten Berliner Neutronenquelle BER II werden im In- und Ausland weitergenutzt. 2021 wurde das Instrument für Kleinwinkelstreuung (VSANS) an den Breazeale-Forschungsreaktor der Penn State University, USA, vermittelt. © A. Kubatzki/HZB

633

WoS-, SCOPUS- oder Open Research Europe-indexierte Publikationen wurden 2021 von Wissenschaftler*innen am HZB veröffentlicht.

23,5

Prozent Frauenanteil hatte das HZB beim 718 Mitarbeitende umfassenden wissenschaftlichen Personal zum Jahresende 2021. Gemessen an der Gesamtzahl der 1.133 Beschäftigten lag der Frauenanteil bei 31,2 Prozent.

182

Doktorand*innen betreute das HZB im Jahr 2021. Dabei wurden 26 Dissertationen am HZB abgeschlossen.

79

Prozent betrug 2021 die HZB-externe Nutzung der Strahlzeit an BESSY II.

314

Tage wurde die Speicherringanlage BESSY II im Jahr 2021 einschließlich Testbetrieb für die Wartung insgesamt betrieben. An 247 Tagen stand sie Nutzer*innen zur Verfügung. Das entspricht einer Verfügbarkeit von 78,7 Prozent. Infolge der Pandemie-bedingten Reise- und Arbeitsbeschränkungen sowie Sicherheitsauflagen in der Experimentierhalle BESSY II blieben 10,5 Prozent der verfügbaren Betriebszeit ungenutzt.

247

Kooperationen unterhielt das HZB Ende 2021 mit anderen wissenschaftlichen Einrichtungen – ein leichter Rückgang gegenüber dem Vorjahr (270).

36

Jugendliche und junge Erwachsene befanden sich Ende 2021 am HZB in acht verschiedenen Ausbildungsberufen. Der Frauenanteil bei den Auszubildenden betrug 36,1 Prozent.

33,58

Millionen Euro Drittmittelträge konnte das HZB im Jahr 2021 verbuchen. Darin enthalten sind circa 3,29 Millionen Euro aus Auftragsforschung, 7,37 Millionen Euro aus Leistungen an Dritte (im Rahmen des steuerpflichtigen wirtschaftlichen Geschäftsbetriebes), rund 13,87 Millionen Euro Projektförderung des Bundes und etwa 2,15 Millionen Euro von der EU.

11

Nachwuchsgruppen forschten 2021 am HZB, eine Gruppe mehr als in den beiden Jahren zuvor. Von diesen Nachwuchsgruppen sind neun im Programmanteil „Materialien und Technologien für die Energiewende“ angesiedelt. Eine ist dem Programmanteil „Natürliche, künstliche und kognitive Informationsverarbeitung“, die anderem dem Programmanteil „Von Materie zu Materialien und Leben“ zugeordnet.

89

Kooperationen ist das HZB allein im Jahr 2021 mit Unternehmen neu eingegangen.

Damit hat sich die Gesamtzahl der laufenden Partnerschaften mit der Industrie von 149 im Vorjahr auf nun 205 deutlich erhöht. Davon entfielen fast 29 Prozent auf Kooperationen mit internationalen Partnern und fast 18 Prozent auf gemeinsame Projekte mit kleinen und mittleren Unternehmen.

4,19

Millionen Euro nahm das HZB 2021 aus dem Technologietransfer ein. Davon stammten 1,05 Million Euro aus Forschungs- und Entwicklungs-Kooperationen und FuE-Aufträgen mit Wirtschaftsunternehmen aus dem In- und Ausland, etwas mehr als eine Million Euro aus anderen FuE-Kooperationen. Infrastrukturverträge erbrachten weitere rund 2,13 Millionen Euro.

8

Patente wurden dem HZB 2021 erteilt. Zum Jahresende 2021 umfasste der Patentbestand des HZB 171 Patente. 25 Patente sind Gegenstand laufender Lizenzverträge. Bei 23 Erfindungsmeldungen aus dem Jahr 2021 evaluieren das HZB und andere Technologieexperten derzeit, ob sie patentiert werden können und/oder wirtschaftlich verwertbar sind.

466

Schüler*innen experimentierten nach der Wiederaufnahme des Präsenzbetriebs im Schülerlabor „Blick in die Materie“ von September bis Dezember 2021 – selbstverständlich unter Beachtung eines entsprechenden Hygienekonzepts.



Familienfreundlich: Das HZB wurde 2021 zum vierten Mal für seine erfolgreiche familien- und lebensphasenbewusste Personalpolitik mit dem Zertifikat zum Audit „berufundfamilie“ ausgezeichnet.

© berufundfamilie Service GmbH



Olympiareif: Felicia Laberer, die am HZB eine Lehre als Kauffrau für Büromanagement absolviert, gewann 2021 bei den Paralympics in Tokio die Bronzemedaille im Para-Kajak-Einer über 200 Meter.

© www.kanu.de

HZB Graduate Center für Promovierende

Seit 2021 stellt das HZB Graduate Center alle Angebote und Leistungen der früheren „Promovierendenkoordination“ bereit. Dafür wurden bereits seit Anfang 2018 die Angebote und Standards am HZB für Promovierende und deren Betreuerinnen und Betreuer schrittweise ausgebaut. Wegweisend dabei sind die Ideen und Anregungen, die in Gesprächen mit zahlreichen Stakeholdern und in verschiedenen HZB-Gremien zu diesem Thema gesammelt



© dragonstock/Adobe Stock

werden konnten. Übergeordnetes Ziel ist dabei, bestmögliche Bedingungen für die erfolgreiche Durchführung einer Promotionsarbeit zu schaffen und dabei den Doktoranden gleichzeitig Raum für individuelle Entwicklungs- und Entfaltungsmöglichkeiten zu bieten. Bereits Anfang 2020 wurde mit der Einführung der überarbeiteten Promotionsleitlinien und einer HZB-Betreuungsvereinbarung ein wichtiger Meilenstein beim Aufbau der Dachstruktur erreicht. Einheitliche, transparente und verlässliche Standards für alle Promovierenden am HZB sind etabliert, Unterstützungs- und Qualifizierungsangebote für sie sowie ihre Betreuer werden kontinuierlich erweitert und weiterentwickelt.

4000. Augentumor-Patient am HZB behandelt

Seit mehr als 20 Jahren bieten die Charité – Universitätsmedizin Berlin und das HZB gemeinsam die Bestrahlung von Augentumoren mit Protonen an. Dafür betreibt das HZB einen Protonenbeschleuniger. Die medizinische Betreuung der Patienten erfolgt durch die Charité. Am 19. Februar

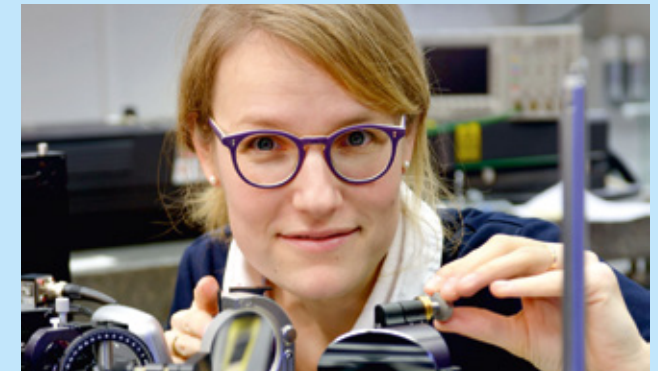


Übersicht: Anzahl der mit Protonen am HZB behandelten Patienten von 1998 bis 2020. © S. Kodalle/HZB

2021 erhielt der 4000. Augentumor-Patient eine Bestrahlung mit Protonen. Die Anzahl der behandelten Patienten blieb während der Corona-Pandemie trotz der erschwerten Bedingungen fast unverändert. Die Behandlung in Berlin-Wannsee ist auf Aderhautmelanome des Auges spezialisiert. Der Protonenbeschleuniger am HZB ist die einzige Therapiestätte für diese Erkrankung in Deutschland. „Wir beglückwünschen das gemeinsame Team zu diesem tollen Erfolg und bedanken uns, dass es unter den erschwerten Pandemie-Bedingungen alles dafür getan hat, den Betrieb der lebensrettenden Augentumortherapie aufrechtzuerhalten“, sagt Bernd Rech, der Sprecher der wissenschaftlichen Geschäftsführung des HZB.

Neue Forschungsgruppe im Aufbau

Seit Juni 2021 baut Renske van der Veen am HZB die neue Forschungsgruppe „Atomare Dynamik in Licht-Energie Umwandlung“ auf. Die Chemikerin ist Expertin für zeitaufgelöste Röntgenspektroskopie und Elektronenmikroskopie und untersucht katalytische Prozesse, die die Umwandlung von Solarenergie in chemische Energie ermöglichen. Renske van der Veen hat



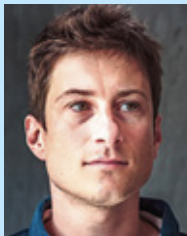
Dr. Renske van der Veen arbeitet seit vielen Jahren mit ultraschnellen Röntgenmethoden. © I. Böttcher-Gajweski/MPIBC

erfolgreich eine Helmholtz-Förderung für die Erstberufung exzellenter Wissenschaftlerinnen eingeworben, woraufhin das HZB bereits ein S-W2-Berufungsverfahren an der TU Berlin angestoßen hat. Als Forscherin hat sie seit 14 Jahren Erfahrung im Bereich von ultraschnellen Röntgenmethoden. „Diese Erfahrungen kann ich in meinem Forschungsvorhaben an BESSY II optimal einbringen und erweitern“, sagt van der Veen.

AUSZEICHNUNGEN, PREISE UND BERUFUNGEN



Prof. Dr. Olga Kasian hat einen Ruf der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU) angenommen. Die W2-Professur trägt den Titel „Materialien für die elektrochemische Energieumwandlung“ und ist an der Fakultät für Ingenieurwesen angesiedelt.



Prof. Dr. Antonio Abate hat eine W2-Professur im Fachbereich Chemie an der Universität Bielefeld erhalten. Abate untersucht Perowskit-Halbleiter für preisgünstige und hocheffiziente Solarzellen und leitet am HZB die Abteilung „Neuartige Materialien und Grenzflächen für photovoltaische Solarzellen“.



Dr. Felix Büttner wurde von der Deutschen Physikalischen Gesellschaft für seine bahnbrechenden Leistungen auf dem Gebiet magnetischer Skyrmionen mit dem Walter-Schottky-Preis für das Jahr 2022 ausgezeichnet. Büttner leitet seit 2020 eine unabhängige Forschergruppe am HZB.



Tobias Henschel hat mit seinem Team den HZB-Technologie-transferpreis 2021 gewonnen. Zusammen mit Industriepartnern entwickelten die Sieger eine transparente Photovoltaik, die in eine Kollektion digitaler Armbanduhren integriert wurde.



Dr. Fredrik Johansson vom französischen Institut des Nano-Sciences de Paris, CNRS, Sorbonne, erhielt den Ernst-Eckhard-Koch-Preis 2021 für seine herausragende Dissertation an der Universität Uppsala zu „Core-hole Clock Spectroscopy Using Hard X-rays – Exciting States in Condensed Matter“.



Dr. Roland Müller hat auf einer Fachkonferenz den ICALEPCS Lifetime Achievement Award erhalten. In den mehr als dreißig Jahren seiner Karriere an der Synchrotronlicht-Quelle BESSY hat der Physiker viele Projekte zu Kontrollsystemen an Beschleunigern voran gebracht und sich ganz besonders für den internationalen Wissensaustausch engagiert.



Prof. Dr. Susan Schorr und ihrem Team wurde anlässlich des zehnten Geburtstags der Fachzeitschrift RSC Advances der Royal Society of Chemistry eine besondere Ehre zuteil: Ihre Publikation über hybride Perowskit-Strukturen (DOI: 10.1039/C8RA09398A) wurde für eine Jubiläumsszusammenstellung ausgewählt. Die Arbeit aus dem HZB gilt in dieser Zeitschrift als einer der wichtigsten Beiträge zu Solarenergie der letzten Jahre.



Prof. Dr. Marianne Liebi und **Dr. Manuel Guizar-Sicairos** vom Paul-Scherrer-Institut (PSI), Schweiz, erhielten den Innovationspreis Synchrotronstrahlung 2021, der vom Freundeskreis des HZB e.V. gestiftet wird. Sie haben mit ihren Teams eine Methode entwickelt, um aus Daten der Kleinwinkelstreuung mit mathematischen Verfahren Informationen über nanoskalige Texturen im Material zu gewinnen (Small Angle Scattering Tensor Tomography). Diese Methode wird inzwischen an vielen Synchrotronquellen genutzt.



BATTERIEFORSCHUNGSPROJEKT SKALIS WIRD VOM BMBF GEFÖRDERT



Die HZB-Abteilung „Elektrochemische Energiespeicherung“ hat für SkaLiS bereits die passende Infrastruktur aufgebaut: Die sogenannte „Pouch-Cell-Line“, an der sich aus den Ausgangsmaterialien Lithium und Schwefel in mehreren einfachen Schritten Versuchs-Batterien in einem flachen „Taschenformat“ herstellen lassen. © HZB

Für die Energiewende werden leistungsstarke, kompakte und günstige Batterien benötigt. Dafür forschen am HZB Gruppen um Yan Lu, Ingo Manke und Sebastian Risse. Sie untersuchen und entwickeln neuartige Elektroden-Materialien, die auf Schwefel oder Silizium basieren. Nun koordiniert Risse auch noch ein großes Projekt, an dem neben Teams des HZB auch die Universität Potsdam, die Technische Universität Berlin, die Technische Universität Dresden sowie das Fraunhofer Institut für Werkstoff- und Strahltechnik IWS Dresden beteiligt sind. Das Projekt SkaLiS startete im Juli 2021 und wird bis 2024 mit insgesamt 2,2 Millionen Euro durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung gefördert. SkaLiS steht für „Operando-Analyse-gestütztes, skalenübergreifendes und skalierbares Elektroden-Design zur Leistungserhöhung von Lithium-Schwefel-Pouchzellen“. Damit wollen die beteiligten Forschungsgruppen einen Lithium-Schwefel-Demonstrator auf Pouchzellenebene herstellen, dessen Kathode gleich auf mehreren Skalen strukturiert ist. Mit diesem Ansatz soll die Lithium-Schwefel-Batterie deutlich stabiler und leistungstärker als bisherige Batteriezellen sein. Für die Bewertung der industriellen Relevanz steht dem Konsortium ein Industriebeirat zur Seite. arö →

HZB KOORDINIERT ENTWICKLUNG VON CORONA-WIRKSTOFFEN



Das MX-Team an BESSY II ist auf die Entschlüsselung von Proteinstrukturen spezialisiert. Damit lässt sich auch die Entwicklung von Medikamenten gegen COVID-19 beschleunigen. © HZB

An der Synchrotronlicht-Quelle BESSY II des HZB steht mit der Strukturanalyse von Makromolekülen ein fantastisches Werkzeug zur Verfügung, um die Entwicklung von wirksamen Substanzen gegen das SARS-CoV2-Virus zu beschleunigen. Bereits Anfang 2020 wurde dort erstmals die dreidimensionale Struktur der sogenannten Hauptprotease des Coronavirus entschlüsselt. Dieses Enzym ist für die Virusreproduktion unverzichtbar. Die Kenntnis dieser Struktur grenzt das Spektrum an möglichen Substanzen entscheidend ein. Denn solche Substanzen müssen wie ein Schlüssel ins Schloss passen, damit sie die Funktion des Enzyms blockieren können. Es reicht jedoch nicht, nur dieses eine Ziel zu untersuchen. Deshalb wurden im Rahmen des Projekts NECESSITY, das der HZB-Forscher Christian Feiler initiiert hat, mehrere virale Zielproteine ins Visier genommen. Gemeinsam mit Partnern der Medizinischen Universität Innsbruck und der tschechischen Universität Olomouc hat das MX-Team an BESSY II die Entwicklung von Medikamenten systematisch vorangetrieben: Im Hochdurchsatzverfahren werden sie mehr als 8000 Verbindungen an den MX-Beamlines untersuchen und daraus Substanzen identifizieren, die an die Hauptprotease des SARS-CoV-2-Virus oder an weitere Zielproteine andocken könnten. arö →

EIN WIKI FÜR DIE PEROWSKIT-SOLARZELLEN-FORSCHUNG

Halogenid-Perowskite haben riesiges Potenzial für Solarzellen und andere optoelektronische Anwendungen. Solarzellen auf Basis von metallorganischen Perowskiten erreichen Wirkungsgrade von mehr als 25 Prozent, sie lassen sich preisgünstig und mit minimalem Energieaufwand herstellen, aber haben noch Entwicklungsbedarf in Bezug auf Stabilität und Zuverlässigkeit. In den vergangenen Jahren boomt die Forschung an dieser spannenden Materialklasse und produziert eine Flut an Ergebnissen, die auf

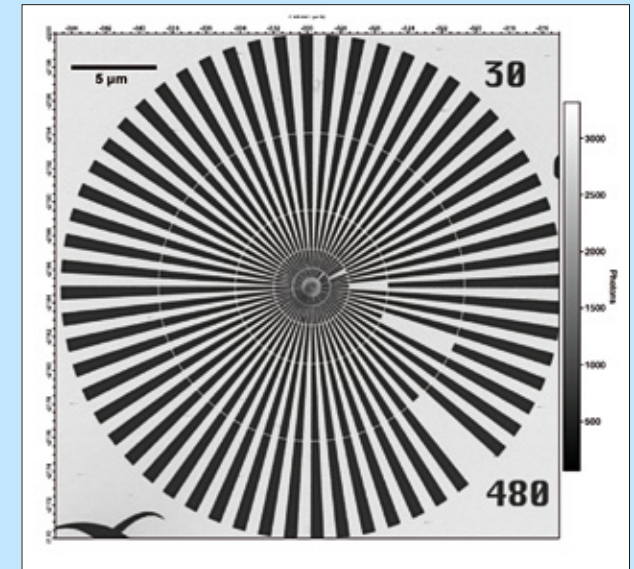
traditionellem Weg kaum noch zu überblicken ist. Unter dem Stichwort „perovskite solar“ waren im Frühjahr 2021 im Web of Science bereits mehr als 19.000 Veröffentlichungen eingetragen. Nun haben 95 Expertinnen und Experten aus mehr als 30 internationalen Forschungseinrichtungen eine Datenbank konzipiert, um Erkenntnisse zu Perowskit-Halbleitern systematisch zu erfassen. Die Daten sind nach den vier FAIR-Prinzipien aufbereitet, sind also Findable (leicht auffindbar), Accessible (zugänglich),

Interoperable (interoperabel) und Reusable (wiederverwendbar). Nach Prüfung der einschlägigen Literatur haben sie mehr als 42.000 individuelle Datensätze zusammengeführt, in denen sich die Daten nach verschiedenen Kriterien wie Materialkompositionen oder Bauteiltyp filtern und darstellen lassen. Die Datenbank mit ihren Visualisierungsoptionen und Analysetools ist als Open Source gestaltet und soll den Überblick über den rasch anwachsenden Wissensstand sowie die offenen Fragen in dieser Materialklasse ermöglichen. Die Studie wurde von der HZB-Wissenschaftlerin Eva Unger initiiert und von Ihrem Postdoc Jesper Jacobsson umgesetzt und koordiniert. arö →

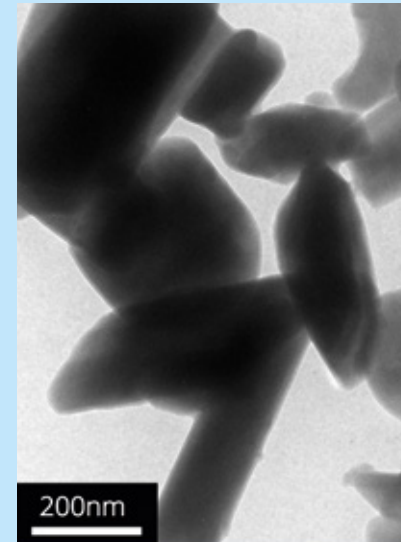
Nature Energy (2021): An open-access database and analysis tool for perovskite solar cells based on the FAIR data principles. T. J. Jacobsson, A. Hultqvist, A. García-Fernández et al. DOI: 10.1038/s41560-021-00941-3

MYSTIIC AN BESSY II: NEUES RÖNTGENMIKROSKOP IN BETRIEB GENOMMEN

Am Energy Materials in situ Lab (EMIL) hat ein neues Raster-Transmissions-Röntgenmikroskop den Betrieb aufgenommen. Getauft wurde es auf den Namen MYSTIIC – Microscope for x-ray Scanning Transmission In-situ Imaging of Catalysts. Mit dem weichen Röntgenlicht von BESSY II lassen sich mit ihm sogar einzelne Elemente und chemische Verbindungen lokalisieren, die



Die erste Aufnahme von MYSTIIC: ein Standardbild, das zur Kalibrierung und Messung der Auflösung des neuen STXM benutzt wurde. © HZB



Sehr detaillierte Mikroskopieaufnahme einer Probenstelle innerhalb des Transmissions-Elektronenmikroskops (TEM).

© K. Dembélé/FHI

räumliche Auflösung liegt unterhalb von 20 Nanometern. Im Vergleich zu anderen Röntgenmikroskopen bietet MYSTIIC an EMIL eine noch höhere Präzision und mehr Optionen beim Abtasten von Oberflächen und beim Durchleuchten (Transmission) von Probenvolumina. Insbesondere wird MYSTIIC künftig auch ermöglichen, chemische Prozesse in Gas- oder Flüssigkeitszellen zu beobachten. „Man könnte sagen: Wir filmen während der Katalyse, welche Prozesse ablaufen“, sagt HZB-Experte Markus Weigand, der das neue Instrument betreut. arö →

VIPERLAB SOLL PEROWSKIT-SOLARINDUSTRIE IN EUROPA BEFLÜGELN



Das HZB besitzt modernste Laboratorien (hier HySPRINT), um die Forschung an Perowskit-Solarzellen voranzutreiben.

© P. Dera/HZB

Perowskit-Halbleiter ermöglichen extrem günstige und leistungsstarke Solarzellen. Viele Forschungsergebnisse zu dieser Materialklasse werden in europäischen Laboren gewonnen. So haben Arbeitsgruppen am HZB bereits mehrere Weltrekorde mit Perowskit-Solarzellen erzielt (siehe Seite 11 in dieser Ausgabe der Highlights). Nun koordiniert das HZB das große Verbundprojekt VIPERLAB, um neue Chancen für die europäische Solarindustrie zu erschließen. An dem Projekt VIPERLAB beteiligen sich 15 renommierte Forschungseinrichtungen aus der EU, der Schweiz und Großbritannien. Es wird im Rahmen des EU-Programms Horizont 2020 seit dem vergangenen Jahr bis einschließlich 2024 mit insgesamt 5,5 Millionen Euro gefördert, das HZB erhält daraus knapp 840.000 Euro. VIPERLAB steht für „Fully connected virtual and physical perovskite photovoltaics Lab“. Mit VIPERLAB wollen die beteiligten Forschungseinrichtungen die Entwicklung der Perowskit-Photovoltaik-Technologie in Europa beschleunigen und den Technologietransfer in die Industrie vorantreiben. Dafür wollen sie einen engen Dialog mit der aufstrebenden Perowskit-Industrie in Europa aufbauen, sowohl mithilfe neuer Initiativen als auch mit etablierteren Akteuren wie dem europäischen Solarindustrieverband Solar Power Europe. arö →

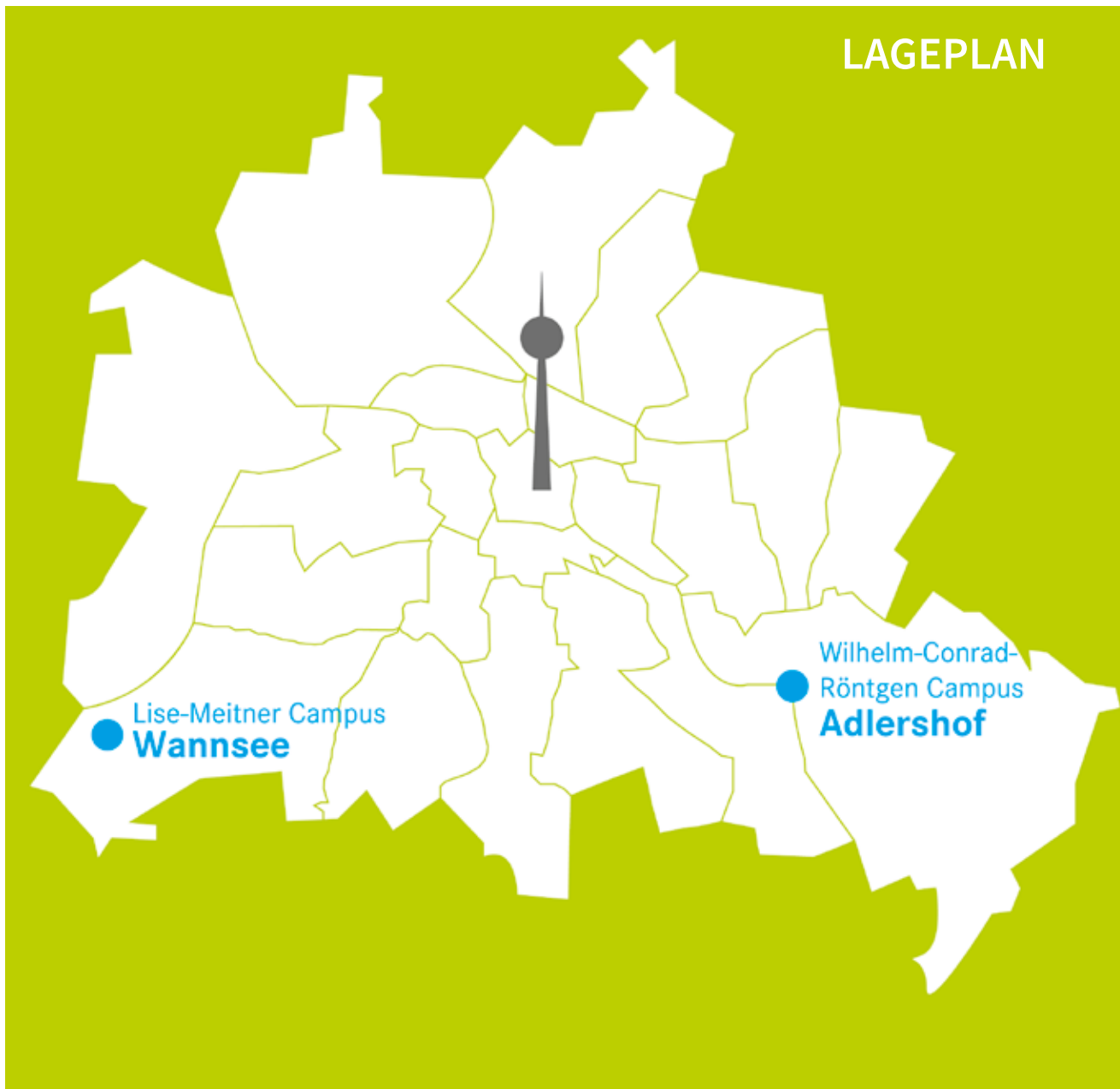
DAPHNE MACHT DATEN AUS EXPERIMENTEN NACHHALTIG VERFÜGBAR



© Grafik: DFG

Allein an Großgeräten werden jährlich bei Photonen- und Neutronenexperimenten mehr als 28 Petabyte an Daten produziert (1 Petabyte = 1 Million Gigabyte). Diese Forschungsdaten müssen mindestens zehn Jahre aufbewahrt werden. Nun wollen 19 wissenschaftliche Einrichtungen in Deutschland gemeinsame Standards für Software, Austausch und Repositorien solcher Forschungsdaten entwickeln, um sie dauerhaft für die weitere Forschung verfügbar zu machen. Daran beteiligt sich auch das HZB. Das Projekt DAPHNE4NFDI wird die nächsten fünf Jahre im Rahmen der Nationalen Forschungsdateninfrastruktur gefördert und von DESY in Hamburg koordiniert. Grundlegend für das Forschungsdatenmanagement sind die FAIR-Kriterien: Findable (auffindbar), Accessible (zugänglich), Interoperable (interoperabel) und Reusable (wiederverwendbar). Auch Methoden der Künstlichen Intelligenz oder Maschinenlernen gehören zum Aufgabenbereich. Das HZB bringt seine Erfahrung im Forschungsdatenmanagement in das Projekt ein. Diese Expertise hat das HZB bereits aufgebaut, zum Beispiel im europäischen Projekt PaNDATA, aus dem das HZB-Datenrepositorium ICAT hervorgegangen ist. Außerdem in verschiedenen Helmholtz-Initiativen, wodurch der Helmholtz Metadata Collaboration Hub matter am HZB angesiedelt wurde. arö →

LAGEPLAN



IMPRESSUM

HZB Highlights 2021 des Helmholtz-Zentrums Berlin für Materialien und Energie GmbH. Nachdruck nur mit ausdrücklicher Genehmigung des Herausgebers.

Redaktionsschluss: August 2022

Herausgeber und Redaktion:

Helmholtz-Zentrum Berlin, Hahn-Meitner-Platz 1, 14109 Berlin, Tel.: +49 (0)30 80 62-420 34

Dr. Ina Helms (ih, V.i.S.d.P.), Antonia Rötger (arö, Gesamtkoordination), Silvia Zerbe (sz), E-Mail: ina.helms@helmholtz-berlin.de, Mitarbeit: Ralf Butscher (rb)

Verlagsbetreuung:

n.k mediaconcept GbR, Obere Lagerstraße 38b, 82178 Puchheim bei München, Telefon: (089) 80 90 83 33
Geschäftsführer: Klaus Dieter Krön, Christoph Neuschäffer

Realisierung und Bildredaktion:

Christoph Neuschäffer (cn)

Gestaltung und Layout:

Klaus Dieter Krön

Druck:

Elbe Druckerei Wittenberg GmbH, Breitscheidstraße 17a, 06886 Lutherstadt Wittenberg

Tel.: +49 (0)3491 41 02 42, Fax: +49 (0)3491 41 02 40

E-mail: info@elbedruckerei.de, www.elbedruckerei.de



HIGHLIGHTS AUS DER FORSCHUNG

www.helmholtz-berlin.de/news



HZB NEWSLETTER ABONNIEREN

www.helmholtz-berlin.de/newsletter

KONTAKT

Lise-Meitner-Campus

Hahn-Meitner-Platz 1
14109 Berlin
Tel.: +49 (0)30 8062 - 0
Fax: +49 (0)30 8062 - 42181
wannsee@helmholtz-berlin.de

Wilhelm-Conrad-Röntgen-Campus

Albert-Einstein-Str. 15
12489 Berlin
Tel.: +49 (0)30 8062 - 0
Fax: +49 (0)30 8062 - 12990
adlershof@helmholtz-berlin.de

Institute Silicon Photovoltaics

Kekuléstr. 5
12489 Berlin
Tel.: +49 (0)30 8062 - 0
Fax: +49 (0)30 8062 - 41333
SE-IS-office@helmholtz-berlin.de

PVcomB

Schwarzschildstr. 3
12489 Berlin
Tel.: +49 (0)30 8062 - 0
Fax: +49 (0)30 8062 - 15677
info@pvcomb.de